

Od samoga početka, ljudi su imali razne ideje, filozofije, vjerovanja, provodili su pokuse i istraživanja kako bi mitove približili stvarnosti. Ljudi su kroz znanost proučili kavkog ga znamo, postoji zbog uspijeva koja je privukla njihovu pozornost u svoj posao, pomogli su im različitim izumima, učinjući Aristotel je bio genijalno se biologijom, zoologijom, znanje u različitim tekstova sačuvani normu za daljnji teku u zajednici znanstvenika koji su se probili u teoriji i u praksi. Bavio se običnim, praktičnim problemima, koji su bili primjenjivani na mnogim

## KAKO DJELUJE SMRTONOSNA INJEKCIJA?

STR. 18

## NOBELOVA NAGRADA ZA KEMIJU 2021.

STR. 1



## STUDENTI NA TERENU (ZOV)

STR. 21



ISSN 2584-6884  
e-ISSN 2459-9247  
Zagreb



[https://www.hdki.hr/hdki/casopisi/reaktor\\_ideja](https://www.hdki.hr/hdki/casopisi/reaktor_ideja)

**Želite li svaki mjesec znati što se događa  
na području kemijskog inženjerstva i općenito STEM području?**

**I uz to učiniti našu struku sjajnom?**

To i mi želimo, ali smo tek studenti i zato to ne možemo učiniti sami.

**Da bismo Vam svaki mjesec približili svježe informacije,  
treba nam velika pomoć!**

**Podržite rad Studentske sekcije donacijom**

Hrvatsko društvo kemijskih inženjera i tehnologa,  
Berislavićeva 6/I, 10000 Zagreb.  
OIB: 22189855239  
IBAN: HR5323600001101367680,  
Zagrebačka banka

Molimo da u opisu plaćanja navedete da je donacija namijenjena Studentskoj sekciji.  
Hvala!

***Reaktor ideja – više od studentskog časopisa.***



MINISTARSTVO ZNANOSTI I OBRAZOVANJA

[www.mzo.hr](http://www.mzo.hr)





Urednici *Reaktora ideja*

Dragi čitatelji,

Ponosno Vam predstavljamo prvi broj *Reaktora ideja* u akademskoj godini 2021./22.

Prije svega željela bih zahvaliti dosadašnjim urednicama Ani Vukovinski (rubrika *Znanstvenik*) i Aleksandri Brenko (rubrika *Boje inženjerstva*) na uloženom trudu i radu proteklih godina. Želimo im sreću u dalnjem nastavku školovanja i rada.

Nove urednice navedenih rubrika od ove ak. god. su Lucija Volf i Dora Ljubičić.

Lucija je studentica 2. godine diplomskog studija Primijenjena kemija te preuzima rubriku *Znanstvenik*. Dora je studentica 2. godine preddiplomskog studija Kemijsko inženjerstvo te preuzima *Boje inženjerstva*. Do sad su se iskazale kao inovativne, vrijedne i odgovorne u pisanju članaka za Reaktor te im želimo puno strpljenja, ali i kreativnosti u ulogama urednica. "Stari" urednici rubrika ostaju Samanta Tomičić (rubrika *Kemijska posla*) i Hrvoje Tašner (rubrika *ScInfluencer*).

U ovom broju donosimo mnoštvo izvještaja i članaka. Sve što se dogodilo proteklih par mjeseci, tijekom ljeta pa nadalje prenosimo Vam u našim rubrikama.

Izdvojila bih novi serijal članaka koji će izlaziti pod nazivom "Studenti na terenu", gdje će autori *Reaktora ideja* svaki mjesec posjećivati industrijske pogone, laboratorije i sl. te pisati svoje doživljaje o viđenom. Na taj način želimo potaknuti upoznavanje i povezivanje studenata sa strukom na djelu.

Za kraj se zahvaljujem kolegici Ivani Petrić na fotografiranju i uređenju fotografija novo – izmijenjenog uredništva *Reaktora ideja*.

S poštovanjem,

Dubravka Tavra  
glavna urednica

## IMPRESSUM

### Reaktor ideja

#### Uredništvo:

Berislavićevo ul. 6/I,  
10 001 Zagreb  
Tel: +385 95 827 9310  
Faks: +385 1 487 2490  
e-pošta: studenti@hdki.hr

#### Glavna urednica:

Dubravka Tavra  
(dtavra@fkit.hr)

#### Urednici rubrika:

Samanta Tomičić  
Lucija Volf  
Dora Ljubičić  
Hrvoje Tašner

#### Grafička priprema:

Dubravka Tavra  
Samanta Tomičić  
Lucija Volf  
Dora Ljubičić  
Hrvoje Tašner

#### Lektorice:

Helena Bach-Rojecky  
Sofija Kresić



ISSN 2584-6884

e-ISSN 2459-9247

Vol. 6 Br. 1, Str. 1–28

Izlazi mjesečno (kroz akademsku godinu)

Časopis sufinancira Ministarstvo znanosti i obrazovanja Republike Hrvatske, Zagreb

Zagreb,  
studeni, 2021.

#### SADRŽAJ

Kemijska posla.....	1
Znanstvenik.....	10
Boje inženjerstva.....	19
Scinfluencer.....	23



# KEMIJSKA POSLA

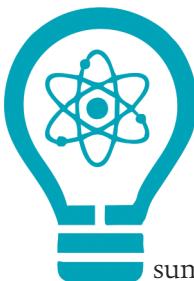
## Nobelova nagrada za kemiju 2021.

Petra Vukovinski(FKIT)

Svake se godine, u čast Alfredu Nobelu, dodjeljuje Nobelova nagrada za iznimna postignuća u znanosti, književnosti te za mir. Ove godine, nagrada za kemiju dodijeljena je Benjaminu Listu i Davidu MacMillanu za razvoj asimetrične organokatalize. Novo otkriće zasigurno proširuje vidike mnogim znanstvenicima u tek nadolazećim istraživanjima.

Mnoga polja istraživanja te razne industrije ovise o tome da sintetiziraju molekule koje mogu tvoriti elastične i izdržljive materijale, skladištiti određenu energiju ili spriječiti napredovanje bolesti. Za to su zaslužni upravo katalizatori. Katalizatori su tvari koje kontroliraju kemijsku reakciju tako što snizuju energiju aktivacije, pronalaze alternativni put reakcije te samim time ubrzavaju reakciju i izlaze iz nje nepromijenjeni. Naše tijelo je „skladište“ tisuće katalizatora neophodnih za rad organizma i obavljanje osnovnih funkcija potrebnih za život.

Dugo se vjerovalo da postoje dvije vrste katalizatora: metali i enzimi. Benjamin List i David MacMillan, neovisno jedan o drugom i o postojećim znanjima o katalizi, otkrivaju treću vrstu katalize.



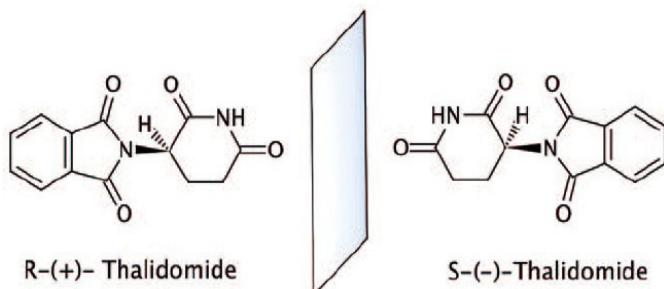
Nazvali su je „asimetrična organokataliza“ i nadograđuje se na male i jednostavne organske molekule. Organski se katalizatori, kao organske molekule, sastoje od ugljika i vodika kao glavnih atoma te mogu sadržavati kisik, dušik, sumpor. To ih čini ekološki i ekonomski prihvatljivima, a samim time i lako dostupnima.



Slika 1 – Dobitnici Nobelove nagrade za kemiju (2021.), Benjamin List (lijevo) i David MacMillan (desno)

Velike probleme kemičarima zna predstavljati upravo asimetrična kataliza, gdje umjesto jednog, željenog, produkta dobijemo dvije molekule. Te se molekule nazivaju enantiomerima i ponašaju se kao predmet i njegova zrcalna slika. Minimalna razlika u strukturi može značiti veliku razliku u primjeni same molekule. Primjer racemične smjese predstavlja par

(S) i (R)-talidomida, gdje je (S) enantiomer teratogen, dok (R) enantiomer sedativ. Šezdesetih godina prošloga stoljeća je to izazvalo ozbiljan problem u farmaceutskoj industriji, gdje su se na ljudskim embrijima uočile deformacije.



Slika 2 – Apsolutne konfiguracije talidomida

Potaknut znanjima o katalizatorima, Lista je zanimalo moraju li aminokiseline biti dio enzima kako bi katalizirale kemijsku reakciju ili bi taj posao mogla obaviti aminokiselina tj. neka manje složenija molekula. Testirao je može li prolin, kao jednostavna ciklička aminokiselina, potaknuti aldolnu reakciju. Tim je istraživanjem došao do saznanja da aminokiselina može potaknuti asimetričnu katalizu.

Paralelu povlači David MacMillan, koji je svoje istraživanje preusmjerio u istom pogledu. Svoju istraživačku karijeru posvetio je asimetričnoj katalizi pomoću metala. MacMillan je primijetio kako se takvi metalni katalizatori gotovo i ne koriste u industriji jer su preskupi i prekomplikirani za upotrebu. Počeo je razmišljati čime bi mogao zamijeniti metale i dosjetio se jednostavnih organskih molekula. Rezultati novih istraživanja su ga impresionirali jer je od dva novonastala produkta jedan prevladavao gotovo 90 %. Svoju reakciju odlučio nazvati „organokataliza“..

List i MacMillan otkrili su potpuno novi koncept katalize koristeći jednostavne, lako dostupne i ekološki prihvatljive supstance. Potvrđili su da se rješenja ne nalaze uvek u komplikiranim molekulama, već u vrlo jednostavnim.

### Literatura

1. <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2021/popular-information/> (pristup 27.10.2021.)
2. <https://www.reuters.com/lifestyle/science/list-macmillan-wins-2021-nobel-prize-chemistry-2021-10-06/> (pristup 1.11.2021.)

## Principi i primjena tekućinske kromatografije

Luka Vučemilović Šimunović (FKIT)

Studentska sekcija organizirala je predavanje i radionicu „Principi i primjena tekućinske kromatografije“ pod vodstvom našeg bivšeg asistenta sa Zavoda za analitičku kemiju, dr. sc. Daria Dabića. Zbog prevelikog broja prijava, predavanje je održano u dva termina, 12. i 26. listopada na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije

Predavanje je bilo organizirano tako da nas je dr. sc. Dario Dabić kroz prezentaciju uveo u osnove tekućinske kromatografije, točnije tekućinsku kromatografiju visoke djelotvornosti (engl. *high performance liquid chromatography*, HPLC). Objasnio je kako pripremiti uzorke za analizu na HPLC-u te kako provoditi samu analizu. Vrlo je slikovito pokazao kako uređaj funkcioniра i kako naš analit dolazi od injektor-a, preko kolone do detektora. Pokazao je u kakvoj su korelaciji pokretna i neprekretna faza, odnosno koji sve kromatografski parametri (vrijednost pH, polarnost otapala, veličina čestica unutar neprekretne faze, duljina i unutarnji promjer kolone, veličina pora čestica kolone, odabir volumena injektiranja, provedba pripreme instrumenta poput ispiranja, i kondicioniranja, degaziranje) utječu na krajnje rezultate. Svi ti parametri odlučujuće o uspješnosti razlučivanja pa i osjetljivosti metode, tj.

granici detekcije. Naučili smo kvalitativne i kvantitativne parametre kromatografije te kako prepoznati i ocijeniti zadovoljava li kromatogram, odnosno metoda sve potrebne značajke kako bismo ju mogli uspješno validirati. Ako nam rezultati nisu zadovoljavajući, naučili smo kako razvijati i optimizirati kromatografsku metodu i izravno utjecati na širinu pika, vrijeme zadržavanja, u konačnici na razlučivanje na temelju Purnellove jednadžbe. Isto tako smo obradili i upotrebu različitih detektora koje i kada koristimo (RID, DAD, FL, MS). Na samom kraju bilo je i govora o servisiranju i održavanju skupocjenih dijelova HPLC-uredaja i kako se to odražava na naše rezultate.

U drugom dijelu predavanja provedena je i interaktivna radionica za sudionike, gdje smo sami isprobavali postupke kromatografije na različitim uzorcima s različitim otapalima kao što su voda i organska otapala (MeCN, MeOH, IPA, THF, DMSO, DMF). Kroz cijelo predavanje provlačili su se kratki zadaci i pitanja kako bi nam što jasnije bilo dočarano gradivo i kako bi što više bili uključeni u izlaganje.

Sa sigurnošću mogu reći kako svaki polaznik nakon odslušanog predavanja može:

- a) razumjeti i primijeniti temeljne pojmove i parametre tekućinske kromatografije,
- b) pripremiti HPLC-instrument za analizu,
- c) kreirati prijedloge razvoja ili optimizacije kromatografske metode i
- d) analizirati osnovne poteškoće i probleme u tekućinskoj kromatografiji.



# I Koracima inženjera

Marko Sejdic (FKIT)

Projektom Koracima inženjera zakoračuje se u nužnu suradnju znanosti i industrije te se prikazuje velika doza informacija o stvarnosti kemijsko-inženjerske struke. Studentima se na ovaj način daje poseban vid dodatne motivacije kako bi se bolje pripremili za uvijek prisutne izazove studiranja te kako bi svojim trudom i angažmanom doprinijeli razvojku i konkurentnosti hrvatske industrije, ali i znanosti.

Korak prema toj modernoj budućnosti, Studentski zbor Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije osigurao je intervjuiranjem alumnija Fakulteta. Opuštenim razgovorom onjihovim trenutnim poslovnim, kao i studentskim životima, te samim iskustvima koje su stekli do ovog trenutka, dobiven je uvid u njihove „Korake inženjera“. Intervjui alumnija primarno su namijenjeni trenutnim i budućim studentima Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije radi bolje pripremljenosti i informiranosti, kako o samoj struci, tako i o životu koji ih čeka ako odaberu hodati koracima kemijskih inženjera



Projekt je također namijenjen i široj znanstvenoj zajednici te drugim tvrtkama kako bismo ih motivirali da nam se pridruže u ovom projektu i podignu ga na jednu višu, državnu razinu, a kasnije i na međunarodnu. Sam projekt financiran je od strane Studentskog centra Sveučilišta u Zagrebu koji s ponosom sufinancira brojne studentske projekte i tako omogućavaju studentima da sami doprinose stvaranju svjetlijie akademske sredine

U sklopu projekta posjećeni su i intervjuirani alumniji u Plivi i INI, a putem video poziva kontaktirani su i cijenjeni znanstvenici u inozemstvu koji su također studirali na našem Fakultetu; prof. dr. sc. Mira Petrović s Katalonskog instituta za istraživanje voda, prof. dr. sc. Saša Omanović s kanadskog sveučilišta McGill te dr. sc. Mario Lovrić iz Know centra u Austriji. Svi intervjuji nalaze se na novoj YouTube stranici Studentskog zabora pod nazivom SZ FKIT, a informacije o samom projektu mogu se naći na TikTok, Instagram i Facebook platformama te na službenoj stranici Studentskog zabora Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije.

*Zakorači u zonu dodatnih informacija o obrazovanju i karijeri omogućenu na FKIT-u*

Ovo je tek prvi korak popularizacije Fakulteta i svih studija, koji će zasigurno pomoći u tome da studenti, kao i zainteresirani poslodavci, uvide značaj svih struka koje se dobiju završetkom našeg Fakulteta.



Slika 1 – univ. spec. pol. Amalija Koren Cavaleiro (FOI)

najviše zanimalo kako koristiti sve popularniju aplikaciju LinkedIn u svrhu lakšeg pronašlaska novog posla.



## KEMIJSKA POSLA

Zatim se uslijedila panel-rasprava „Trebam iskustvo da bih dobio posao, ali trebam posao da bih dobio iskustvo!“ gdje je moderatorica mag. ing. cheming. Ines Topalović Piteša uvela u razgovor goste (dr. sc. Franjo Jović (PLIVA), dr. sc. Dijana Vrsaljko (Končar), mag. sc. oecc. Vladimira Senčar Perkov, EMBA (INA), dr. sc. Marin Ganjto (ZOV)) u problematiku teme. Troje od četvero panelista završilo je Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije pa je studentima iznimno bilo važno čuti njihove priče. Bilo je tu raznih iskustva; od traženja posla godinu dana, mijenjanje posla više puta, upuštanje u profesorske vode... Zaključak je bio isti: ne treba odustati, treba raditi na sebi, svojim mogućnostima i uložiti mnogo truda!



**Slika 2** – Panel-rasprava „Trebam iskustvo da bih dobio posao, ali trebam posao da bih dobio iskustvo!“

Nakon kratke pauze za kavu, s veseljem smo dočekali mr. sc. Srećka Grossa, dipl. ing. (Magdis d.o.o.). Gospodin Gross nam se predstavio kao „Slavonac koji se bavi maslinama“. Naslov predavanja je bio „Kako naći hobи u svom poslu?“, a kako je on to i postigao, s opravdanjem nas je mogao savjetovati da nam posao ne bude samo obaveza, već i zadovoljstvo.



**Slika 3** – Mr. sc. Srećko Gross

Druga panel-rasprava bila je „Uvjeti rada u Hrvatskoj i Europi“, a gosti koji su sudjelovali su i sami imali priliku iskusiti rad u drugim država Europe (dr. sc. Dunja Potočnik, dr. sc. Ivana Čustić, mag. ing. cheming. Dominik Varga, mag. ing. oeckoing. Filip Car), a moderatorica ove

panel rasprave bila je mag. ing. oeckoing. Josipa Papac. Njihova iskustva su bila poučna i svima su preporučili da iskoriste priliku Erasmus+ program, projekt Europske unije za mobilnost mladih.



**Slika 4** – Panel-rasprava „Uvjeti rada u Hrvatskoj i Europi“

Nakon predavanja i pauze za osvježenje, studenti su imali priliku upoznati se s poslodavcima na Speed datingu. Firme koje su sudjelovale su: INA d.d., Xellia Pharmaceutical, Fidelta d.o.o., Kelteks Ltd. i AlphaChrom d.o.o. Jedno lijepo iskustvo za sve koji su sudjelovali, od ljudi u organizaciji i prisutnih studenata do predavača. Jedva čekamo drugi Dan karijera, a do tada sretno svima koji su u potrazi za posлом!



**Slika 5** – Studenti FKIT-a, publika



**Slika 6** – Dio organizacijskog tima Dana karijera 2021.

# Tamara Kopunić – nova predsjednica Studentske sekcije HDKI-ja

Opiši nam ukratko iskustvo u Sekciji.

Moje iskustvo u Studentskoj Sekciji HDKI-ja započelo je 2019. godine, kada sam se odvažila postati članicom iste. Od tada sam uz druženje i rad s ostalim članovima stekla mnoge vještine i spoznala svoje mogućnosti. Kada se nalaziš u grupi s mladim i ambicioznim ljudima, jednostavno sam sebe guraš da budeš što bolji. Članstvo u Sekciji uljepšalo je i obogatilo moje dosadašnje fakultetsko razdoblje te ga učinilo zanimljivijim i zabavnijim.

Ove je godine bilo malo zahtjevnije postati članom Sekcije, što očekuješ od novih, ali i starih članova?

Ove godine postojao je eliminacijski intervju kojem su svi zainteresirani studenti morali pristupiti kako bi postali članom Sekcije. Od trenutnih članova očekujem da budu originalni, proaktivni, da se razvijaju u svakom pogledu, iskoriste sve prilike koje im članstvo u Sekciji nudi i naravno uživaju u svemu što rade.

Imaš li uzora?

Uzor su mi moji roditelji koji su me svojim primjerom naučili da moram biti snažna, uporna, marljiva i stalno raditi na sebi jer ne napredovati znači nazadovati.

Što misliš da je najbitnije imati na umu kada si vođa nešto više od 60 ljudi?

Smatram da je najvažnije imati viziju i jasno definirane ciljeve te usmjeravati sve članove prema njihovom ostvarenju. Potrebno je komunicirati i povezati se s članovima, saslušati njihove ideje i mišljenja te biti uvijek na raspolaganju kada im bilo što zatreba. Također, kada se grupa sastoji od tako velikog broja članova, vrlo je važna organizacija odnosno da svaki pojedinac zna svoju ulogu.

Koje ćeš metode i savjete ukrasti od bivših predsjednika, a po čemu misliš da ćeš se razlikovati?

Od bivših predsjednika dobila sam mnogobrojne savjete nakon što sam stupila na mjesto predsjednice Studentske sekcije HDKI-ja. Od danih savjeta istaknula bih one vezane uz način organizacije Sekcije te načine vođenja grupe ljudi. Svakako ću se kao individua razlikovati od prijašnjih predsjednika svojim pristupom, ali ću kao i svi prijašnji predsjednici imati isti cilj, a to je pokrenuti pozitivne promjene kako na FKIT-u tako i u široj inženjerskoj zajednici.





Ove godine, od 5. do 8. listopada 2021. održan je 27. hrvatski skup kemičara i kemijskih inženjera u Velom Lošinju. Zanimljivo je otici u povijest i proučiti početak održavanja ovog Skupa.

Naime, još 1952. godine održan je Sastanak kemičara FNRJ i I. kongres za čistu i primijenjenu kemiju, a počasni gost je bio Lavoslav Ružička, hrvatski nobelovac. Skup se počeo kontinuirano održavati svake dvije godine od 1969., a službeni naziv Skup hrvatskih kemičara primjenjuje se od 1992.

I tako se godinama na ovom skupu okupljaju znanstvenici i stručnjaci iz svijeta kemije, kemijskog inženjerstva i srodnih znanosti te promiču znanost i primjenu znanosti u Hrvatskoj, a i šire.

Ništa manje vrijedno nije bilo ni ove godine. Unatoč izazovnim vremenima pandemije koronavirusa, Skup je uspješno održan. Nakon nekoliko mjeseci ograničenog društvenog života, uključujući i smanjeni broj znanstvenih i stručnih skupova, ovaj događaj bio je vrlo značajan.

Okupili su se znanstvenici i stručnjaci sa sveučilišta, istraživačkih instituta, škola i industrije kako iz Hrvatske, tako i iz inozemstva. Plenarno predavanje održao je i nobelovac Bernard L. Feringa.

Izmjena iskustava, predstavljanje najnovijih dostignuća te predavanja koja održavaju i svjetski poznati znanstvenici najdjelotvorniji su način kako proširiti nova znanja, ideje i tehnologije te pomoći razvoju gospodarstva.

Na skupu su volontirala i tri člana Studentske sekcije HDKI-ja : Dora Mendaš, Hrvoje Tašner i Dubravka Tavra (slika 1).

Ponekad su fotografije vrjednije od riječi, stoga ostatak doživljaja prenosimo upravo u tom obliku.







# KEMIJSKA POSLA

## Ljetna škola kemije za studente

### Hrvoje Tašner (FKIT)

Ove godine u razdoblju od 25. do 29. kolovoza održana je prva Ljetna škola kemije za studente. Domaćin Ljetne škole bio je Odjel za biotehnologiju Sveučilišta u Rijeci. Ljetnu školu organizirao je doc. dr. sc. Tomislav Portada kemičar zaposlen na Institutu Ruđer Bošković. Na Ljetnoj školi sudjelovalo je dvadesetak studenata s Odjela za biotehnologiju, Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta, Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije, Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta zatim, sa Sveučilišta u Trstu te Sveučilišta u Cambridgeu. Osim studenata, na Ljetnoj školi prisustvovali su i znanstvenici i istraživači s Instituta Ruđer Bošković dr. sc. Zlatko Brkljača, dr. sc. Robert Vianello, doc. dr. sc. Đani Škalamera te Dajana Barišić, mag. chem. i dr. sc. Alen Bjelopetrović.

Pored pozvanih predavača s Instituta Ruđer Bošković, predavanja su držali i sami studenti. Teme predavanja

bile su raznolike: od stručnih tema preko povijesti kemije i znanosti do zanimljivosti iz svijeta kemije i ostalih znanosti.

Uz predavanja održana je i radionica na temu fotokiselina koju je vodio doc. dr. sc. Đani Škalamera. Također održano je i nekoliko laboratorijskih vježbi koje su vodili doc. dr. sc. Tomislav Portada te studenti kemije s PMF-a Antonio Magnabosco, Luka List i Mislav Barić. Osim aktivnosti na Odjelu za biotehnologiju bio je organiziran posjet Ininoj rafineriji u Rijeci gdje su se studenti upoznali s procesnim pogonom i laboratorijima za kontrolu kvalitete.

Tijekom pet dana Ljetne škole sudionici su imali su priliku predstaviti vlastiti rad ili obraditi temu koja ih posebno zanima. Također mnogo su toga naučili što jedni od drugih što od iskusnijih kolega. Nova znanja nisu jedino što su svi sudionici ovog projekta stekli već su i izgradili nove profesionalne i privatne kontakte.

Prva ljetna škola kemije bila je veliki uspjeh zahvaljujući svim sudionicima, posebno organizatoru i začetniku dr. Portadi. Svaka sljedeća Škola kemije za studente gradit će se na odličnim temeljima.



Slika 1 – Sudionici Ljetne škole kemije s dr. Portadom



Slika 2 – Studenti u laboratoriju



# ZNANSTVENIK

## Kemijsko inženjerstvo, kauzalnost i umjetna inteligencija

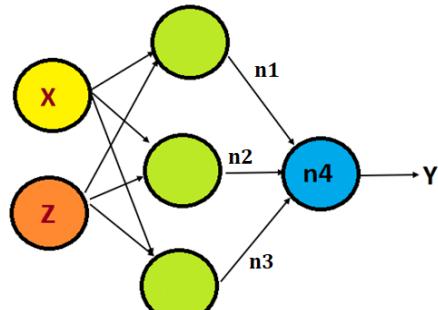
prof. dr. sc. Želimir Kurtanek

Kemijsko inženjerstvo pripada tehničkom znanstvenom području i zasniva se na temeljnim zakonima fizike i kemije izraženim egzaktnim matematičkim relacijama (jednadžbama). Matematičko modeliranje je osnovna metodologija kojom kemijski inženjer analizira podatke, projektira i upravlja proizvodnim procesima.<sup>1</sup> Razvojem molekularnih znanosti kemijski inženjeri su uključeni u istraživanja izvan klasičnog industrijskog inženjerstva i bave se istraživanjima u biotehničkom području, eko-inženjerstvu, nanotehnologijama, znanosti o materijalima, itd. U ovim novim područjima kemijski inženjeri koriste temeljna znanja ali se oslanjaju na baze velikih podataka („big data“) i metodologijama umjetne inteligencije iz područja računalnih znanosti.<sup>2,3</sup> Dostupnost velikih podatkovnih baza je posljedica digitalizacije i automatizacije eksperimentalnih uređaja i računalnog nadzora procesa. Brojni su primjeri



uspješne primjene umjetne inteligencije u kemijskom inženjerstvu, najčešće za klasifikaciju i neposrednu („on-line“) procjenu stanja za upravljanje procesa.

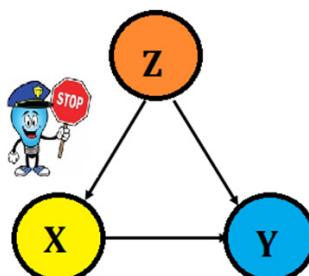
$$Y = f(\beta_1 * n_1 + \beta_2 * n_2 + \beta_3 * n_3)$$



Slika 1 – Prikaz umjetne neuronske mreže s jednim unutarnjim slojem. X je ulazna veličina koja je uzrok promjene izlazne veličine Y, a Z je interferirajuća ulazna varijabla. Model funkcije aktivacije neurona je  $f$ ,  $n$  su izlazni signali neurona, a  $\beta$  su parametri određeni u procesu učenja s podacima.<sup>4</sup>

Na slici 1 prikazan je jednostavni primjer umjetne neuronske mreže s jednim unutarnjim slojem neurona. X je ulazna veličina koja je uzrok promjene izlazne veličine Y, a Z je interferirajuća ulazna varijabla. Model funkcije aktivacije neurona je  $f$ ,  $n$  su izlazni signali neurona, a  $\beta$  su parametri određeni u procesu učenja s podacima. Umjetna neuronska mreža može se smatrati agnostičkim modelom, jer ne

uključuje temeljne zakonitosti kemijskog inženjerstva. To je različito od empirijskih modela kemijskog inženjerstva, kao što je empirijski kinetički model gdje se procjena energije aktivacije, koeficijenta brzine, i reda reakcije određuje iz samih podataka. Agnostički modeli mogu biti vrlo učinkoviti i precizni za predikciju, ali mogu dovesti i do pogrešnog zaključivanja izvan područja predikcije, npr. za određivanje kauzalnosti.<sup>4</sup> Od primarnog znanstvenog interesa i praktične vrijednosti za kemijskog inženjera je određivanje kauzalnosti između nezavisne varijable X i zavisne varijable Y. Kauzalnost je definirana kao funkcija  $Y=f(X)$  promjene izlazne veličine promjenom ulazne veličine X kada se eliminiraju svi utjecaji interferirajućih varijabli Z.



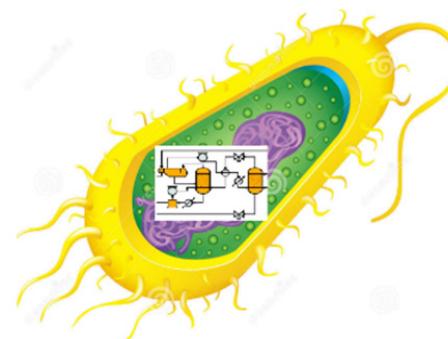
$$P(Y, X, Z) = P(Y|X, Z)P(Z)P(X)$$

**Slika 2** – Prikaz kauzalne Bayes-ove mreže s ulaznom X, izlaznom Y, i Z interferirajućom veličinom. D-separacija utjecaja Z veličine naznačeno je znakom stop. Model je razdioba vjerojatnosti  $P(X,Y,Z)$ . Strelicama su naznačene statističke asocijacije među varijablama, a ravnom crtom  $X|Z$  naznačena je uvjetna vjerojatnost među varijablama.<sup>5</sup>

Koncept Bayesove kauzalne mreže umjetne inteligencije prikazan je na Slici 2. D-separacija utjecaja Z veličine naznačeno je znakom stop. Model je razdioba vjerojatnosti  $P(X,Y,Z)$ . Strelicama su naznačene statističke asocijacije među varijablama, a ravnom crtom  $X|Z$  naznačena je uvjetna vjerojatnost među varijablama.<sup>5</sup>

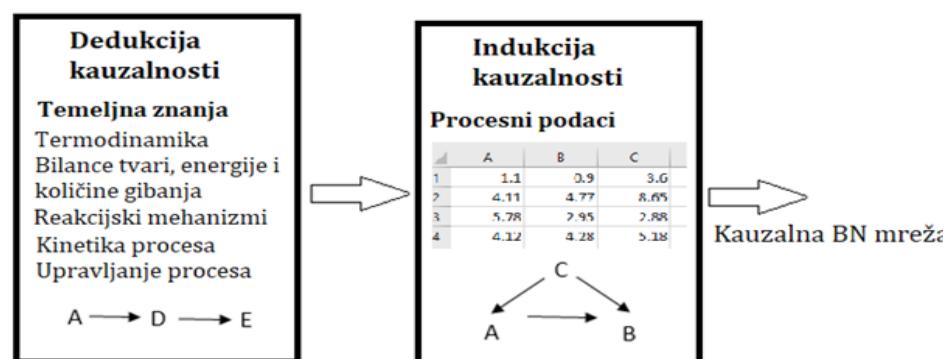
Mreža se zasniva na varijablama modela koje su su slučajne veličine i naziva se kauzalnom Bayesovom mrežom (BN). Prikazuje se slikom kao usmjereni graf (engl. *Directed Acyclic Graph*, DAG) gdje su varijable čvorovi povezani strelicama (bitno različito od grafičkog prikaza kemijskih mehanizma) koje označuju kauzalnu povezanost varijabli.

Struktura mreže kauzalnih povezanosti određuje se dedukcijom temeljnih znanja kemijskog inženjerstva i statističkom indukcijom iz eksperimentalnih podataka. Na taj način stvara se sinergizam temeljnih zakonitosti i novih spoznaja iz podataka. Model je zajednička razdioba vjerojatnosti varijabli  $P(X, Y, Z)$ . Za određivanje učinka varijable X na Y potrebno je primijeniti d-separaciju, odnosno zaustaviti povratni nekauzalni utjecaj.<sup>5</sup> Grafički prikaz modela BN mreže daje transparentni prikaz hipoteze modela i omogućuje validaciju novih spoznaja. Brojni su primjeri vrhunskih rezultata primjene umjetne inteligencije. Tako je F.H. Arnold, profesorica kemijskog inženjerstva sa sveučilišta CALTECH 2018. godine, dobila Nobelovu nagradu za rezultate primjene usmjerene (engl. *directed*) evolucije za proizvodnju biogoriva (kerozina).<sup>6</sup> Primijenjene su zakonitosti kemijskog inženjerstva za analizu metabolizma stanice i primjenjuje se umjetna inteligencija za selektivni evolucijski pritisak za dobivanje produkta. Slika 4 prikazuje koncept kemijsko inženjerskog pogleda (tvornica u stanici) na metabolizam stanice i mogućnosti upravljanja procesom.



**Slika 4** – Ilustracija „kemijske tvornice“ unutar bakterijske stanice. Dizajn metabolizma usmjereno evolucijom omogućuje selektivnu proizvodnju biogoriva iz celuloze<sup>6</sup>

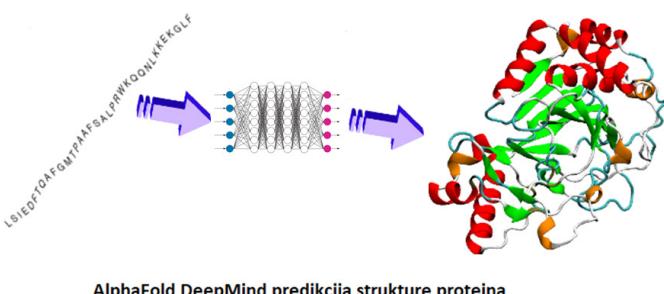
Nedavno je u firmi Google umjetnom inteligencijom riješen do sada neriješivi problem predikcije detaljne strukture proteina na osnovu sekvencijskih podataka.<sup>7</sup> Primijenjen je model duboke neuronske mreže (engl. *deep learning network*) koji omogućuje predikciju strukture iz naučenih pravila asocijacije iz baze poznatih struktura. Program je u otvorenom pristupu i besplatno je dostupan istraživačima u svijetu. U tijeku je projekt za dokumentiranje



**Slika 3** – Prikaz povezivanja kauzalnosti određene dedukcijom iz kemijsko inženjerskih načela i statističkom dedukcijom iz procesnih podataka<sup>5</sup>

dokumentiranje detaljnih struktura humanog proteoma. Ove godine je dodijeljena Nobelova nagrada iz ekonomije za razvoj metodologije kauzalne analize iz „prirodnih pokusa“, odnosno analiza velikih podatkovnih baza temeljem zapažanja (engl. *observational big data*).<sup>8</sup>

Iako područje umjetne inteligencije ima složenu matematičku i računalnu pozadinu, danas su na raspolaganju računalni paketi dostupni korisnicima u otvorenom pristupu. Tako je od firme Microsoft na raspolaganju paket programa DoWhy u Pythonu



AlphaFold DeepMind predikcija strukture proteina

Slika 5 – Ilustracija primjene umjetne inteligencije, duboke neuronske mreže (AlphaFold Deep Mind), za predikciju detaljne strukture proteina iz sekvencije amino kiselina<sup>7</sup>

na platformi Github.<sup>9</sup> Paket sadrži veći broj tipičnih primjera kako odrediti kauzalnost i validaciju modela i time omogućuje studentima brzo učenje i primjenu za vlastita istraživanja.

## Literatura

1. Z. Gomzi, Ž. Kurtanjek, *Modeliranje u kemijskom inženjerstvu*, HDKI, Zagreb, 2019.
2. N. Bolf, *Strojno učenje*, Kem. Ind. 70 (9-10) (2021) 591–593
3. Ž. Kurtanjek, *Važnost kauzalnosti za studije kemije i kemijskog inženjerstva*, Kem. Ind. 70 (7-8) (2021) 467–471.
4. Ž. Kurtanjek, *Kada zaključivanje matematičkim modelom može biti pogrešno: Primjer protočnog kemijskog reaktora PKR*, Kem. Ind. 70 (11-12), u tisku
5. J. Pearl, D. Mackenzie, *The Book of Why*, Penguin Books, Oxford, UK, 2018.
6. F.H. Arnold, "Directed Evolution: Bring New Chemistry to Life", Angew. Chem. Int. Ed., 57 (16) (2018) 4143–4148.
7. <https://deepmind.com/research/case-studies/alphafold> (pristup 5. studeni 2021.)
8. <https://statmodeling.stat.columbia.edu/2021/10/11/comments-on-a-nobel-prize-in-economics-for-causal-inference/> (pristup 5. studeni 2021.)
9. A. Sharma, E. Kiciman, *DoWhy: A Python package for causal inference*, 2021., URL: <https://microsoft.github.io/dowhy> (pristup 5. studeni 2021.)

## Razvoj i značaj računalne kemije

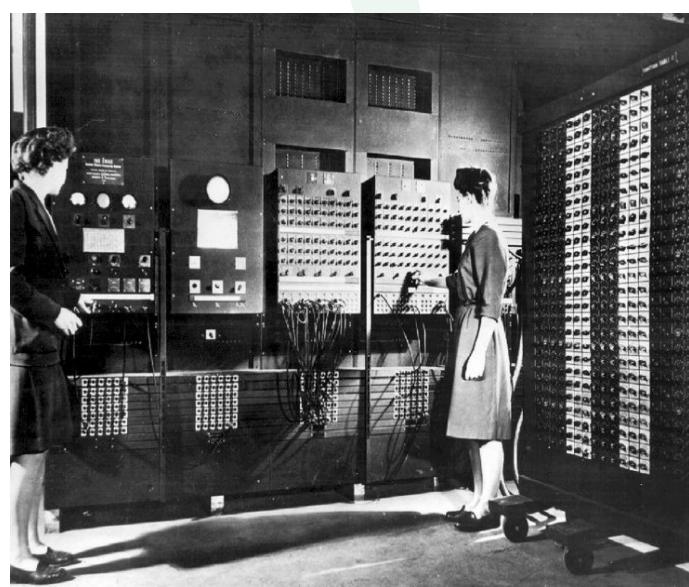
Lucija Vrban (Biotech)

Računalna kemija relativno je nova grana kemije koja u posljednje vrijeme privlači sve više pozornosti, no što taj termin točno predstavlja i u čemu je važnost računalne kemije?

Računalna kemija ili molekularno modeliranje uključuje *ab initio*, poluempirijske i empirijske pristupe pomoću kojih se istražuju strukture i svojstva molekula te materijala. Zasniva se na zakonima kvantne i klasične fizike čija su načela implementirana u računalne programe koji se potom koriste za provođenje računalnih simulacija s ciljem rješavanja realnih kemijskih problema.

Korjeni računalne kemije sežu još u daleku 1928. godinu. Tada je pokazano da rješenje Schrödingerove jednadžbe kvalitativno reproducira eksperimentalne rezultate dobivene na vrlo jednostavnim sustavima poput atoma helija i molekule vodika. Polet razvijetu računalne kemije je dao i Drugi svjetski rat zbog naglog razvijeta elektroničkih računala koja su tijekom idućih desetljeća postala dostupna znanstvenoj zajednici poglavito zbog smanjenja cijene i povećanja brzine proizvodnje. Metode računalne kemije su, u svojim počecima 30-ih godina, mogle istražiti svojstva sistema od 1-2 atoma, 1970-ih 2-5 atoma, dok se danas provode izračuni, ovisno

o tipu problema i željenoj točnosti, do nekoliko stotina atoma. Dakle, računalna kemija je područje koje se izuzetno brzo razvija čemu uvelike pridonosi brz razvoj informatičkih znanosti.<sup>1</sup>



Slika 1 – ENIAC, prvo elektroničko računalo (1946).<sup>1</sup>

Iako danas postoji više grana računalne kemije, začetak računalne kemije bio je u znaku razvitka kvantne kemije. Uspjeh kvante računalne kemije temeljio se na nekoliko sretnih okolnosti:

1. Atomi i molekule mogu se opisati koristeći samo dva tipa čestica; jezgre i elektrona.

2. Veličina jezgre je toliko malena da ne utječe na kemijsku točnost te se tretira kao 'točkasti' naboј, dok su korekcije kvantne elektrodinamike zanemarivo male.
3. Jezgra je tisuću puta teža od elektrona te se njezina brzina zanemaruje (tj. jezgra je fiksirana) što omogućuje rješavanje Schrödingerove jednadžbe samo za elektrone uz fiksni položaj jezgara, kako bi se opisala svojstva sustava.

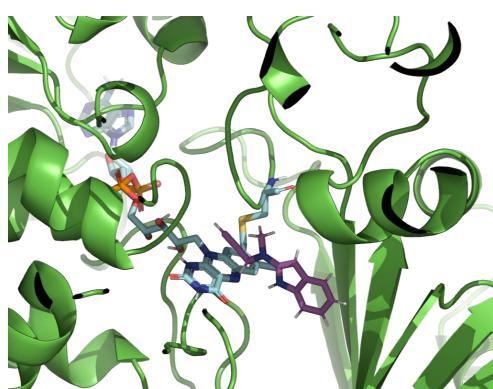
Kao što je vidljivo, kvantna računalna kemija ne bi bila ostvariva bez aproksimacija pomoću kojih je moguć opis velikih molekularnih sistema. Najpoznatija takva aproksimacija je Born-Oppenheimer aproksimacija koja govori da se, zbog velike razlike u težini jezgre i elektrona, njihovo gibanje može odvojeno opisati pomoću čega se dobiva elektronska valna funkcija sustava, neophodna za rješavanje Schrödingerove jednadžbe.<sup>2</sup>

$$H(t)|\psi(t)\rangle = ih \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle$$

Slika 2 – Schrödingerova jednadžba valne funkcije<sup>2</sup>

Danas se pod terminom 'računalna kemija' najčešće misli na, ugrubo, tri metodologije; metode molekulskog pristajanja (engl. *docking*), metode molekularne dinamike i metode kvantne mehanike.

Molekulsko pristajanje bavi se opisom načina kako dvije molekularne strukture međusobno pristaju (najčešće se istražuje pristajanje malih molekula poput lijekova na vezno mjesto proteina od interesa ili pristajanje dvaju proteina). Metode molekulskog pristajanja temelje se na izračunavanju Gibbsove energije vezanja i algoritma pretraživanja potencijalnog veznog mjesta. Ova metodologija koristi se najčešće kao početna točka za otkrivanje potencijalnih lijekova jer omogućuje razumijevanje interakcija između lijekova i receptora. Nakon što je vezno mjesto definirano, ili literaturnim pregledom ili algoritmima pronalaska potencijalnih veznih mjesta, cilj je pronaći optimalnu konformaciju potencijalnog lijeka što uvelike ovisi o broju i tipu interakcija koje održavaju novonastali kompleks lijeka i proteina stabilnim, odnosno totalnoj energiji sustava. S obzirom na to da je vezno mjesto većine proteina hidrofobnog karaktera, najpoželjnije interakcije na veznom mestu između potencijalnog lijeka i proteina također su hidrofobnog karaktera, poput  $\pi-\pi$  slagajućih interakcija.



Slika 3– Smještaj inhibitora u aktivno mjesto MAO B proteina<sup>3</sup>

Molekulsko pristajanje metodologija je koja obuhvaća više pristupa koji se dijele na temelju fleksibilnosti kompleksa uključujući simulacije pristajanja s nefleksibilnim ligandom i receptorom, s fleksibilnim ligandom i fleksibilnim ligandom i receptorom.

Molekularna dinamika bazirana je na klasičnoj, Newtonovoj fizici koja se bavi rješavanjem jednadžbi gibanja s ciljem opisivanja gibanja molekula u fiziološkim uvjetima te često predstavlja korak koji slijedi nakon molekulskog pristajanja. Obzirom na to da simulacija molekularne dinamike nastoji opisati fizičko gibanje atoma i molekula, njezina pouzdanost nadilazi pouzdanost molekulskog pristajanja. Simulacija daje uvid u dinamičku evoluciju sistema tako da se numerički rješava Newtonova jednadžba gibanja što daje informaciju o trajektorijama atoma, dok su sile i energije između njih opisane koristeći se molekularno mehaničkim poljima sila koja računski procjenjuju sile između atoma i molekula te unutar molekula. Atomi su aproksimirani kao točke naboja, dok su veze između njih okarakterizirane poput opruga koje se mogu savijati, vibrirati i rotirati.<sup>3</sup>

Ova metodologija obuhvaća više tipova simulacija, poput simulacija svih atoma (engl. *all-atom*) i krupno-čestične simulacije (engl. *coarse grained*). Simulacije svih atoma preciznije su od krupno-čestičnih, te se koriste kod detaljnijih opisa sustava što zahtijeva CADD (engl. *computer aided drug design*) pristup, dok se krupno-čestične simulacije koriste za opis smatanja proteina ili većih konformacijskih promjena.

Konačno, metode kvantne mehanike bazirane su na numeričkom rješavanju Schrödingerove jednadžbe. Ova metodologija najpouzdanija je od dosad spomenutih, ali računalno i vremenski najzahtjevnija. Zbog zahtjevnosti, najčešće korištena metodologija za istraživanje bioloških sustava je hibridna QM/MM metoda koja kombinira metode kvantne mehanike i molekularne mehanike. Ovaj pristup obuhvaća opis sustava tako da je dio sustava od interesa (poput dijela veznog mesta proteina gdje se odvija kemijska reakcija od interesa) opisan koristeći odgovarajuću teoriju kvantne mehanike, dok je ostatak opisan molekularno-mehaničkim poljem sila. Ovakav hibridni pristup omogućuje istraživanje kemijske reaktivnosti u velikim sistemima poput enzima.

Trenutno najpouzdanija i najčešće korištena metoda kvantno mehaničkog modeliranja je teorija funkcionala gustoće (engl. *density functional theory*; DFT) gdje se svojstva atoma i molekula opisuju funkcijama funkcija, odnosno funkcionalima. U slučaju DFT-a prostorno ovisnu elektronsku gustoću. Uspon DFT-a ne bi bio moguć bez Kohn-Shamove aproksimacije zbog koje je Walter Kohn 1998. godine dobio Nobelovu nagradu. Kohn-Sham aproksimacija predstavlja Schrödingerovu jednadžbu koja definira fiktivan sustav čestica koje nisu u interakciji, ali sustavu daju istu gustoću kao interagirajući sustav, omogućujući rješavanje Schrödingerove jednadžbe koristeći samo jednu elektronsku valnu funkciju.

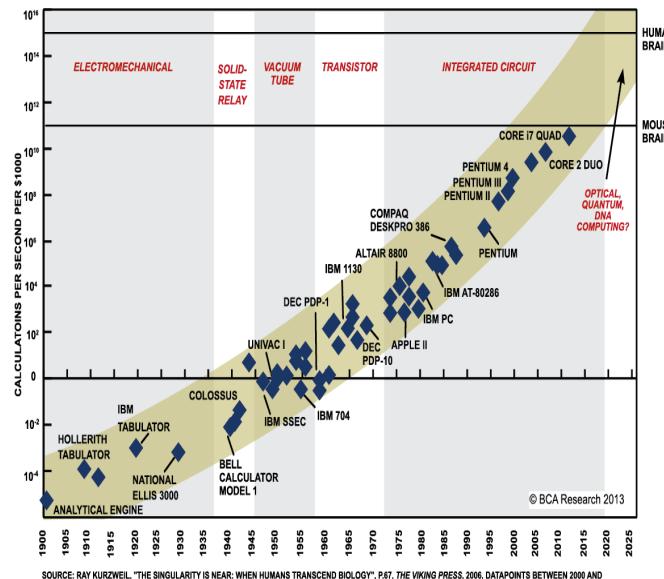
Metode kvantne mehanike koriste se za određivanja preciznih mehanizma reakcija, računanje elektronskih stanja atoma i molekula, određivanja različitih spektara poput IR i UV-VIS spektara i sl.

Upravo zbog svoje pristupačnosti, metode računalne kemije najčešće se primjenjuju u području sinteze i karakterizacije novih materijala i računalno potpomognutom dizajnu lijekova. Osim nadopunjavanja eksperimentalno dobivenih rezultata, računalna kemija dovodi do predikcije svojstava i potpunijih opisa kemijskih sustava, omogućuje previđanje mehanizama reakcija, pronalaženje molekula s odgovarajućim farmakološkim svojstvima naspram mете od interesa (pr. protein čija funkcija dovodi do patoloških stanja) i sl.

U dobu eksponencijalnog napretka računalnih sustava čije mnoge komponentne prate Mooreov zakon, računalna kemija izrazito je moćan alat rješavanja kemijskih problema čiji će potencijal i važnost idućih desetljeća jačati dok ne postane (ako već i nije) neizostavan i nezaobilazan dio znanstvenih istraživanja.<sup>4,5</sup>

## Literatura

1. L. Piela, "From Quantum Theory to Computational Chemistry: A Brief Account of Developments" in *Handbook of Computational Chemistry*, (2012), pp. 1–12.
2. J. Leszczynski, et al., Eds., *Handbook of Computational Chemistry*, 2nd ed. 2017 edition (Springer, 2017).
3. Computational Insight into the Mechanism of the Irreversible Inhibition of Monoamine Oxidase Enzymes by the Antiparkinsonian Propargylamine Inhibitors Rasagiline and Selegiline | ACS Chemical Neuroscience (November 15, 2021).
4. G. Groenhof, *Introduction to QM/MM simulations*. Methods Mol Biol 924, 43–66 (2013).
5. T. van Mourik, M. Bühl, M.-P. Gaigeot, *Density functional theory across chemistry, physics and biology*. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 372, 20120488 (2014).



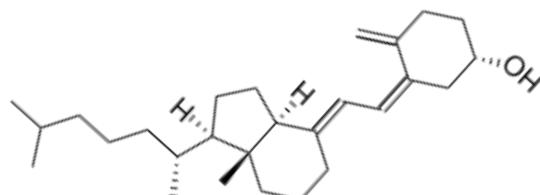
Slika 4 – Mooreov zakon koji predviđa da se brzina računalnih procesora udvostručuje svake 2 godine<sup>5</sup>

## Kreme za sunčanje i u zimskim mjesecima

*Antonia Škarica (FKIT)*

Sunce, more, sol – prve asocijacije kada pomislimo na mnogima najdraže godišnje doba – ljeto. Iako je ono iza nas te smo boravak na otvorenom zamijenili boravkom u zatvorenom prostoru, nije na odmet podsjetiti se koliko je i dalje vrlo važno čuvati se sunčevih zraka te da uz kapu, šal i rukavice koje čine zimski „outfit“, ne zaboravimo nanijeti i kremu za sunčanje koja štiti našu kožu od štetnih sunčevih zraka. Da, dobro ste pročitali – i zimi je potrebno nanositi kreme za sunčanje. Dobar svakodnevni podsjetnik na mirise ljeta, zar ne?

Svima je dobro poznato da na psihofizičkoj razini postoje brojne blagodati boravka na suncu. Sunce nam jača imunitet, povećava količinu kalcija u krvi i kostima jer pretvara 7-dehidrocolesterol u koži u kolekalciferol1 poznatiji kao vitamin D3<sup>2</sup>, prikazan na Slici 1, koji je važan za mineralizaciju kostiju<sup>1</sup> i često spominjan u aktualnoj pandemiji koronavirusa.<sup>3</sup> Osim navedenoga, odgovorno je za bolje raspoloženje tijekom sunčanih dana jer sunčeva svjetlost u očima stimulira dijelove mrežnice koje potiču mozak da proizvodi serotonin, odnosno „hormon sreće“<sup>4</sup>. Međutim, kako bismo uživali u blagodatima sunca, potrebno je odgovorno se ponašati.



Slika 1 – Struktura molekule kolekalciferola (vitamina D3)<sup>2</sup>

Najprije se prisjetimo činjenice da se sunčeva svjetlost sastoji od paketa energije, fotona, te da je za ljudsku kožu štetno ultraljubičasto svjetlo koje se dijeli na UVA, UVB<sup>5</sup> i UVC svjetlo<sup>6</sup>. UVA svjetlo je valnih duljina od 320 nm do 400 nm, 5 UVB od 290 nm do 320 nm te UVC valnih duljina u rasponu od 290 nm do 100 nm. UVA čini 95 % ultraljubičastog zračenja koja dolazi do Zemljine površine, a UVB svjetlost 5 %. Oba navedena zračenja uzrokuju promjene u ljudskoj deksiribonukleinskoj kiselini (DNA) te mogu uzrokovati karcinom kože. Za razliku od njih, atmosferski ozon filtrira UVC zračenje, stoga ono ne dolazi na površinu Zemlje i ne oštećuje ljudsku kožu.<sup>6</sup> Naša koža sadrži određene molekule koje apsorbiraju energiju UVA i UVB zračenja. Potom, kako bi se vratile na niže energetske stanje, te molekule oslobadaju energiju pri čemu prolaze određene kemijske reakcije koje uzrokuju štete u našim stanicama.<sup>5</sup> Za razliku od UVB, UVA svjetlost prodire dublje u naše stanice

uništavajući protein kolagen pri čemu naša koža gubi glatkoću, elastičnost te dobiva bore. UVB svjetlo uzrokuje opeklne na koži.<sup>5</sup> Naša DNA može apsorbirati obje vrste navedenog zračenja pri čemu dolazi do mutacija koje, ukoliko se ne isprave, mogu dovesti do nemelanomskog ili melanomskog raka kože. Druge molekule naše kože prenose apsorbiranu energiju na slobodne radikale i visoko reaktivne kisikove čestice (engl. *reactive oxygen species*, ROS) pri čemu nastaje oksidativni stres koji može preopteretiti antioksidativnu mrežu kože što dovodi do oštećenja stanica. Reaktivne oksidativne čestice mogu reagirati s kolagenom pri čemu nastaju bore, mogu prekinuti ekspresiju gena te reagirati s DNA stvarajući mutacije. Kao rezultat navedenih fotoreakcija je foto opterećenje koje se akumulira tijekom cijelog života uslijed ponovnog izlaganja suncu.<sup>5</sup>

Iako smo zakoračili u jesen i svjedoci smo oblačnih, kišovitih i hladnjih dana, nemojmo zaboraviti na jedan sastojak torbe za plažu – kremu za sunčanje. Naime, čak i u danima kada ne vidimo sunce, UV zrake ostavljaju posljedice na našoj koži. Istina je da su UVB zrake najjače ljeti, no one mogu stvoriti opeklne na našoj koži tijekom cijele godine, osobito ako se nalazimo na velikim nadmorskim visinama i u blizini reflektirajućih površina kao što su snijeg ili led. Naime, snijeg reflektira do osamdeset posto sunčevog ultraljubičastog svjetla pa nas zrake dodatno pogadaju povećavajući rizik od karcinoma kože i prerenog starenja. UVA zrake su konstantne tijekom cijele godine i mogu prodrijeti kroz oblake, maglu, staklo,... Dakle, ne postoji razlog da u zimskim danima zanemarimo sve preporučene mjere zaštite od sunčevog zračenja.<sup>7</sup>

Zbog svega navedenog, kod biranja proizvoda za zaštitu od sunca treba paziti da imaju zaštitu od UVA i UVB zraka. No treba imati na umu da ni jedan proizvod ne štiti u potpunosti te je i dalje potrebno držati se danih upozorenja.<sup>1</sup> Prva linija obrane od sunčevih zraka je odjeća. Zimi se tog upozorenja možemo lako držati, no uglavnom nepokriveno ostane lice, oči, ponekad vrat, vrhovi usiju te blizina linije kose, stoga je preporuka nanijeti kremu s minimalnom SPF vrijednosti 15 i sastojcima poput lanolina i glicerina kako bismo sprječili suhoću kože. Također, preporučeno je izbjegavati sunčev zračenje od 10 h do 16 h te nositi sunčane naočale.<sup>7</sup> Prilikom odabira kreme za sunčanje važno je paziti na SPF, a kod kupnje odjeće na UPF vrijednost.

UPF (engl. *Ultraviolet protection factor*) označuje ultraljubičasti zaštitni faktor i nalazi se na naljepnicama za odjeću te na kapama. Broj pokazuje koji dio sunčevih UV zraka može prodrijeti u tkulinu. Primjerice, košulja s oznakom UPF 50 dopušta da samo 1/50 ultraljubičastog zračenja dopre do naše kože.<sup>8</sup>

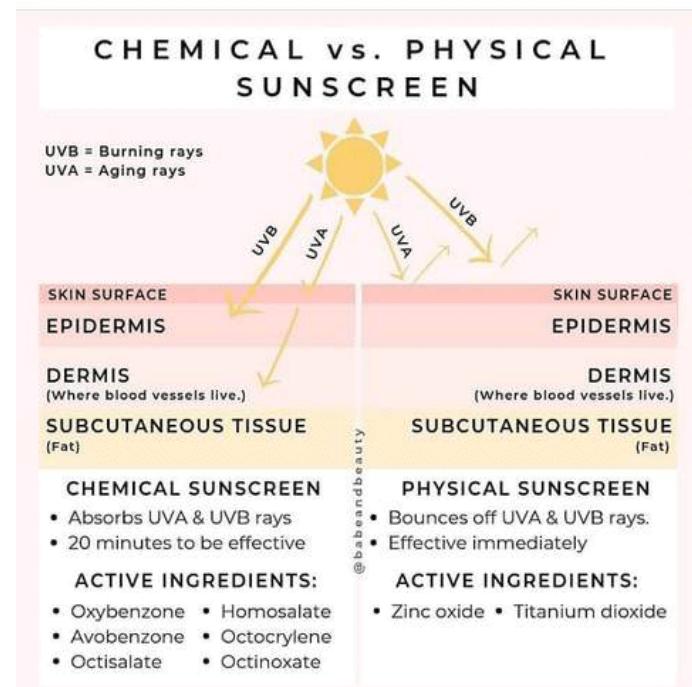
SPF (engl. *Sun protection factor*) je vrijednost koja govori koliko dugo bi trebalo sunčevim UVB zrakama da naša koža pocrveni u usporedbi s količinom vremena bez kreme za sunčanje. Dakle, ako koristimo SPF 15 prema uputama trebalo bi nam petnaest puta duže da izgorimo nego u slučaju da nemamo nanesenu kremu za sunčanje.<sup>8</sup>

U Tablici 1. prikazana je vrijednost SPF-a i razina zaštite pri čemu SPF 15 blokira 93 % UVB zraka, SPF 30 97 %, SPF 50 98 % te SPF 100 blokira 98 % UVB zraka. Budući da SPF prikazuje jačinu zaštite protiv UVB zraka, potrebno je prilikom kupnje sredstava za sunčanje uzimati pripravke s oznakom širokog spektra (engl. *broad spectrum*) što označava da štiti od UVA i UVB zraka.<sup>9</sup>

**Tablica 1** – Razina zaštite proizvoda za sunčanje obzirom na SPF<sup>1</sup>

Razina zaštite	Faktor zaštite od sunca (SPF)
Niska zaštita	6
Srednja zaštita	15
Visoka zaštita	30
Vrlo visoka zaštita	50+

Način rada pripravaka za sunčanje je poprilično jednostavan. Svi pripravci za sunčanje sadrže filtre UV zraka. Filtri su, u ovom slučaju, molekule koje smanjuju količinu UV zraka koje prodiru do ljudske kože. Film ovakvih molekula čini zaštitnu barijeru. Zaštitna barijera može apsorbirati molekule filtra pa će činiti kemijski filter i takve formulacije krema se nazivaju kemijske kreme. Za razliku od njih, fizičke kreme će reflektirati fotone UV svjetlosti prije nego što se apsorbiraju dublje u kožu te će činiti fizičke blokatore.<sup>5</sup> Shematski prikaz djelovanja i aktivni sastojci krema zasluženih za njihovo djelovanje prikazan je na Slici 2.



**Slika 2** – Način djelovanja i sastojci fizikalnih blokatora i kemijskih filtera<sup>10</sup>

Budući da i fizičke i kemijske kreme imaju prednosti i mane, jedna od preporuka za odabir kreme je odabir prema tipu kože.<sup>11</sup>

Određeni sastojci pripravaka štetni su za ljude. Primjerice, oksibenzon štetno djeluje na hormonski sustav, alergen je te je štetan za floru i faunu mora.<sup>9</sup> Stoga, znanstvenici pronalaze formulacije krema bazirane na prirodnim sastojcima koje će blokirati ili apsorbirati UV

zrake iz sunčeve svjetlosti. Prirodne kreme za sunčanje ne sadrže štetne kemijske spojeve te imaju malen rizik od štetnog djelovanja. Primjerice, anorganski cinkov oksid kojeg pronalazimo u kremama za sunčanje u velikim količinama može stvoriti slobodne radikale kad je izložen UVA zračenju i može oštetiti DNA stanice kože te uzrokovati alergijske reakcije. Svjedoci smo globalnog zatopljenja te je u cilju pronaći sastav kreme koji će biti djelotvoran ne čineći štetu ljudskoj koži.<sup>12</sup>

Sharif i sur. su u istraživanju provedenom ove godine otkrili da ekstrakt ulja sjemenki maline može smanjiti količinu cinkova oksida u kremi za sunčanje jer je djelotvoran u blokiraju UVA i UVB zraka, osobito ako se nalazi u kombinaciji s kokosovim uljem kao sredstvom protiv starenja, maslinovim uljem koje prevenira nastanak raka kože te aloe verom kao hidratantnom komponentom. Zaključeno je da malina pruža zaštitu sličnu titanijevu dioksidu koji ima SPF veći od 30 te da pomiješan s malom količinom cinkova oksida dobro apsorbira UV zračenje.<sup>12</sup> Neke prirodne zamjene krema za sunčanje su ulje sjemenki čileanske maline kojemu je SPF u intervalu od 28 do 50 te ulje čileanskog lješnjaka koji, prema procjeni, ima SPF vrijednost u intervalu od 10 do 30.<sup>13</sup>

Odabir između kreme ili ulja za sunčanje ovisi o tipu kože, no postoji razlika u vrijednosti SPF-a jer ulje rijetko prelazi SPF20.<sup>13</sup>

Budući da je broj oboljelih od melanoma u porastu s godišnjim povećanjem broja oboljelih od 7 %, učinimo sve što možemo kako bismo spriječili njegov nastanak.<sup>14</sup>

Stoga, krenimo s promjenama već danas i namažimo izložene dijelove kože kremom sa zaštitnim faktorom. Budimo osviješteni i čuvajmo zdravlje svoje kože jer ona će nam biti zahvalna.

### Literatura

1. <https://www.hzjz.hr/sluzba-zdravstvena-ekologija/sredstva-za-zastitu-od-sunca/> (pristup 29.10.2021.)
2. <https://www.learnskin.com/articles/vitamin-d-from-the-sun-versus-the-diet> (pristup 29.10.2021.)
3. <https://www.hzjz.hr/sluzba-zdravstvena-ekologija/vitamin-d-i-preporuke-za-nadomjesnu-prmjenu-vitamina-d-od-jesen/> (pristup 29.10.2021.)
4. <https://www.pbsnc.org/blogs/science/sunlight-happiness-link/> (pristup 29.10.2021.)
5. <https://www.pbs.org/newshour/science/column-chemistry-sunscreen-protecting-skin-memorial-day> (pristup 29.10.2021.)
6. <https://www.compoundchem.com/2014/06/05/sunscreenchemicals/> (pristup 29.10.2021.)
7. <https://www.skincancer.org/press/2018-winter-sun-safety/> (pristup 29.10.2021.)
8. <https://www.skincancer.org/skin-cancer-prevention/sun-protection/> (pristup 29.10.2021.)
9. <https://www.madesafe.org/whats-in-that/sunscreen/> (pristup 29.10.2021.)
10. <https://www.simpleasthat.com.au/blog/the-facts-about-physical-sunscreens-vs-chemical-sunscreens/> (pristup 29.10.2021.)
11. <https://www.dermessential.com/blogs/sun-care/what-are-physical-and-chemical-sunscreens> (pristup 29.10.2021.)
12. Sharif N. i sur., „Effectiveness of Raspberry Seed Oil in Natural Sunscreen Formulation Using Different Percentage of Zinc Oxide“, Multidisciplinary Applied Research and Innovation 3 (2021) str. 234-242
13. <https://ljekarnik.hr/2015/06/29/zdravi-pod-suncem-sto-rade-prepati-za-suncanje/> (pristup 29.10.2021.)
14. <https://www.onkologija.hr/melanom/melanom-statistika/> (pristup 29.10.2021.)

## I Umjetna fotosinteza Lea Raos (FKIT)

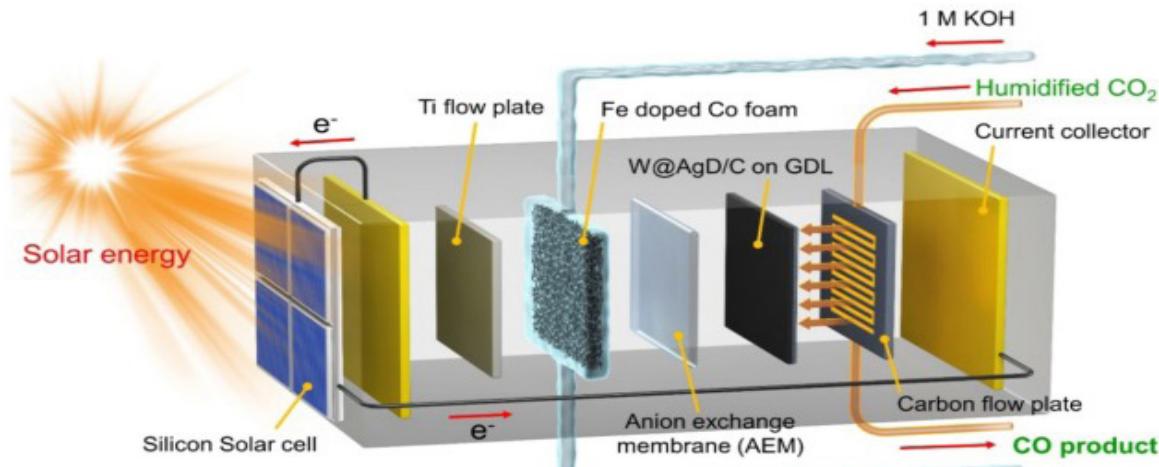
Početkom 1900-ih talijanski kemičar Giacomo Ciamician prepoznao je neodrživost upotrebe fosilnih goriva te se okrenuo prirodi i tragao za rješenjima koja uključuju obnovljive izvore energije. Na tom putu, pri proučavanju kemije biljaka i solarne energije koju one koriste naišao je na proces fotosinteze. Inspiriran "malim uspjesima" u kemijskoj manipulaciji biljaka zapitao se možemo li uz dobro prilagođene sustave i pravovremene intervencije uspjeti uzrokovati da biljke proizvode nama korisne tvari u mnogo većim količinama?

Ciamician je 1912. godine oglasio uzbunu zbog neodržive uporabe fosilnih goriva i potaknuo znanstvenu zajednicu da istraži umjetno rekreiranje fotosinteze. Ali malo toga je učinjeno. Stoljeće kasnije, usred klimatske krize eksponencijalno poboljšane tehnologijom i uz pomoć rastućeg znanstvenog znanja, njegova vizija dosegla je veliki napredak.<sup>1</sup>

Danas su u znanstveno-istraživačkom svijetu poznati oblici umjetne fotosinteze, odnosno kemijski procesi koji

oponašaju prirodan proces pretvorbe sunčeve energije, CO<sub>2</sub>, i vode u ugljikohidrate i kisik. Usporedno tomu, razvijeni su učinkoviti sustavi u kojima se nanočestice mogu sintetizirati pristupom od gore prema dolje (engl. *top-down*) i obrnuto (engl. *bottom-up*) što daje jedinstvena svojstva materijalima. Takav pristup se može upotrijebiti i za energetsko opornašanje procesa fotosinteze. Funkcionalna složenost bioloških sustava čini ih energetski zahtjevnim, a nanomaterijali su bitan segment jer se mogu sustavno modelirati u svrhu postizanja boljih optičkih i električnih karakteristika.<sup>2</sup>

Nakon više od deset godina istraživanja i eksperimentiranja, Peidong Yang, kemičar na UC Berkeley, uspješno je stvorio prvi fotosintetski biohbridni sustav (PBS) u travnju 2015. Ovaj PBS prve generacije koristi poluvodiče i žive bakterije za fotosintetski posao. Yangov PBS se može smatrati sintetičkim listom, a uspješno je proizveo butanol, acetat, polimere i farmaceutske prekursore. Nedostatak je vrlo mala konverzija sunčeve energije od 0,38 % što je usporedivo s učinkovitošću pretvorbe u prirodnom, zelenom listu. Ako se Yangov sustav može uspješno povećati, tvrtke bi mogle izgraditi umjetne šume koje proizvode gorivo za naše automobile, zrakoplove i elektrane slijedeći iste zakone i procese kao prirodne šume. No, naša potreba za



Slika 1 –  $\text{CO}_2\text{RR}$  uređaj na solarnu energiju<sup>3</sup>

obnovljivom energijom je hitna, a Yangov model mora biti u stanju osigurati energiju na globalnoj razini ako želi na kraju zamijeniti fosilna goriva. Kako bi poboljšali ovaj sustav, Yang i njegov tim rade na tome kako zamijeniti bakterije sintetičkim katalizatorima. Do sada su se bakterije pokazale kao najučinkovitiji katalizatori, a imaju i visoku selektivnost – to jest, mogu stvoriti različite korisne spojeve kao što su butanol, acetat, polimeri i metan. No, budući da bakterije žive i umiru, manje su izdržljive od sintetičkog katalizatora i manje pouzdane ako se ova tehnologija upotrijebi na većim dimenzijama.

Također, jedan od primjera umjetne fotosinteze je i elektrokemijska pretvorba ugljikova(IV) oksida u ugljikov(II) oksid. Solarne ćelije mogu elektrokemijskim putem pretvarati  $\text{CO}_2$  u različite kemijske proekte bez zagadenja. U usporedbi s drugim elektrokemijskim reakcijama, reakcija redukcije ugljičnog dioksida ( $\text{CO}_2\text{RR}$ ) je ekološki prihvatljiv pristup koji proizvodi korisne ugljikove proekte (ugljikov monoksid, formate, etilen itd.) i etanol te uklanja  $\text{CO}_2$ . Za ovu vrstu umjetne pretvorbe znanstvenici su u svom istraživanju koristili H-stanice u tekućoj fazi i elektrolit zasićen s  $\text{CO}_2$ . No, niska topljivost  $\text{CO}_2$  u tekućem elektrolitu rezultira niskom gustoćom struje. Kako bi se osigurala dovoljna gustoća struje, predložena su dva oblika elektrolizatora:  $\text{CO}_2\text{RR}$  s plinskim napajanjem koji uključuje elektrode s difuzijskim slojem plina (GDL) i  $\text{CO}_2\text{RR}$  elektrolizatori bez razmaka (engl. *zero-gap*). Prvi oblik koristi tekući elektrolit s GDL-om koji kontrolira katodne uvjete, kao što su pH vrijednost i koncentracija aniona što dovodi do visoke učinkovitosti redukcije  $\text{CO}_2$ . Drugi oblik  $\text{CO}_2\text{RR}$  uređaja su  $\text{CO}_2$  elektrolizatori bez razmaka koji koriste membranu za izmjenu aniona (AEM) i plin  $\text{CO}_2$ . AEM provodi hidroksid i karbonatni ion, stvarajući optimalno okruženje za  $\text{CO}_2$ . Takvi elektrolizatori koji nemaju razmak su obećavajući sustavi uslijed nekoliko prednosti, kao što su nizak omski otpor, lako skaliranje i strukturiranje te komercijalno korištenje. Nanočestice srebra, cinka, paladija i nikal jednoatomski katalizatori pokazuju dobre performanse za proizvodnju CO u

$\text{CO}_2$  elektrolizatoru bez razmaka. Janáky i sur. razvili su višeslojni  $\text{CO}_2$  elektrolizer koristeći nanočestice Ag koji pokazuju visoki potencijal pretvorbe  $\text{CO}_2$  u CO. Također su koristili poliaril piperidinij kao materijal za anionsko izmjenjivačku membranu koja pokazuje izvanredne gustoće struje za  $\text{CO}_2\text{RR}$  ( $1 \text{ A/cm}^2$ ) sa visokom konverzijom (20 – 45 %) i selektivnošću do 90 %.

W. Hee Lee i sur. sintetizirali su ugljik-volfram-srebro dendrit katalizator (W@AgD/C) sa 3D strukturu za poboljšanje prijenosa plinske faze  $\text{CO}_2$  i povećane kristalinične granice nanozrna. Dakle, razvijen je solarni sustav CO konfiguiriranjem  $\text{CO}_2$  elektrolizatora bez razmaka korištenjem katalizatora W@AgD/C i komercijalne solarne ćelije na bazi silicija (Slika 1). U ovom samostalnom fotonaponskom – elektrokemijskom sustavu postignuta je učinkovita konverzija  $\text{CO}_2$  u CO od 32,3 % i stabilan rad tijekom 100 sati korištenjem jedne ćelije za elektrolizator  $\text{CO}_2$  bez razmaka.<sup>3</sup>

Kada je Giacomo Ciamician razmišljao o budućnosti umjetne fotosinteze, zamislio je budućnost obilne energije u kojoj bi ljudi mogli ovladati fotokemijskim procesima. Yang dijeli tu nadu za budućnost. On objašnjava: "Naša vizija cyborgian evolucije – biologije proširene anorganskim materijalima", može u potpunosti ostvariti koncept umjetne fotosinteze, selektivno kombinirajući najbolje od oba svijeta i pružajući društvu obnovljivo rješenje za energetske probleme i ublažavanje klimatskih promjena.<sup>1</sup>

### Literatura

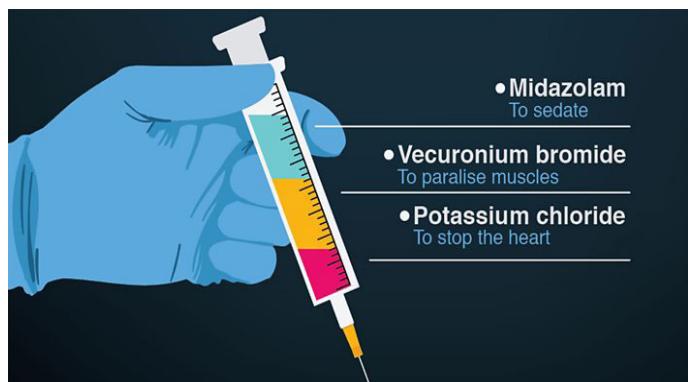
1. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2214785321022434> (pristup 16.11.2021.)
2. R. Kathpalia, A. K. Vermab, *Bio-inspired nanoparticles for artificial photosynthesis*, MaterialsToday: Proceedings, Vol. 45. Num. 3. (2021.) 10.1016/j.matpr.2021.03.214
3. W. Hee Lee C. Lim, E. Ban, S. Bae, J. Koe, *W@Ag dendrites as efficient and durable electrocatalyst for solar-to-CO conversion using scalable photovoltaic-electrochemical system*, Applied Catalysis B : Environmental, Vol. 297, (2021.),10.1016/j.apcatb.2021.120427

# Kako djeluje smrtonosna injekcija?

Jelena Barać (FKIT)

Kaznu smrtonosnom injekcijom prva je usvojila savezna država Oklahoma 1977. godine jer se smatrala jeftinijom i humanijom od strujnog udara ili smrtonosnog plina. Prvo izvršenje smrtne kazne injekcijom izvedeno je u Texasu pogubljenjem Charlesa Brooksa Jr. 2. prosinca 1982. godine. Od 1976. do drugog desetljeća 21. stoljeća, smrtonosna injekcija primijenjena je u oko 1100 pogubljenja. Osim Sjedinjenih Američkih Država, pogubljenje smrtonosnom injekcijom dopušteno je i u Narodnoj Republici Kini, Guatimali, Filipinima i Tajvanu.<sup>1</sup>

Prema Informacijskom centru za smrtnu kaznu u Washingtonu D.C., protokol za smrtonosnu injekciju u većini država uključuje slijed od tri injekcije koje se daju intravenozno u svaku ruku.

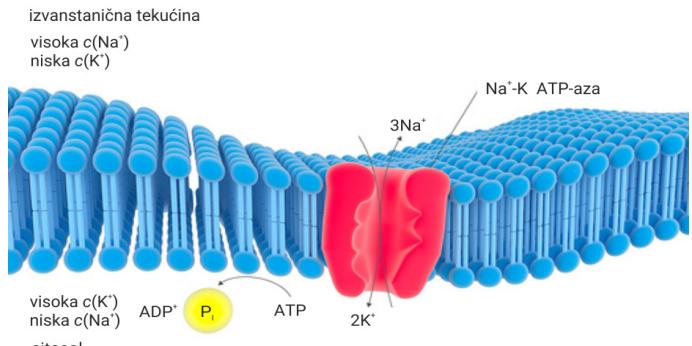


Slika 1 – Shematski prikaz sastava smrtonosne injekcije<sup>4</sup>

Prva od tri injekcije je anestetik, natrijev tiopental, brzodjelujući barbiturat (psihofarmakološko sredstvo, hipnotik) koji smanjuje aktivnost središnjeg živčanog sustava. Početna injekcija ne služi kao analgetik, nego umjesto toga brzo dovodi osobu u stanje nesvijesti koje je teoretski dovoljno duboko da se bol učini neprimjetnom. Ovaj lijek pojačava učinak  $\gamma$ -aminomaslačne kiseline (GABA-e), neurotransmitera koji smanjuje moždanu aktivnost te dovodi do nesvjesnog stanja kroz 30 sekundi.

Nakon početne injekcije, u krvotok se ubrizgava fiziološka otopina čija je zadaća brže guranje lijeka u krvotok. Zatim se primjenjuje druga injekcija koja sadrži pankuronij bromid. On je neuromišićni blokator koji potpuno paralizira mišiće te uzrokuje zastoj disanja jer zaustavlja rad dijafragme (mišićno tetivne opne zadužene za uvlačenje zraka u pluća).<sup>2</sup>

Nakon drugog ispiranja fiziološkom otopinom slijedi posljednja injekcija kalij-klorida. Da bismo razumjeli njezino djelovanje, potrebno je prisjetiti se mehanizma odgovornog za održavanje koncentracijskih gradijenata izvan i unutar stanice – natrij-kalij pumpe.



Slika 2 – Natrij-kalij pumpa

Postoji velika razlika u ionskom sastavu između izvanstanične i unutarstanične tekućine. U izvanstaničnoj tekućini najbrojniji je kation natrija, a u stanici kation kalija. Natrij-kalijeva pumpa ima tri mesta vezanja za ione natrija,  $\text{Na}^+$  i dva mesta za ione kalija,  $\text{K}^+$ . Aktivni prijenos protiv koncentracijskog gradijenta zahtjeva utrošak energije u obliku adenozin-trifosfata (ATP-a). Prvo dolazi do cijepanja energijski bogate veze u ATP-u pri čemu se oslobađa energija i mijenja oblik proteina koji sada može vezati natrijeve ione. Otpuštanjem natrijevih iona izvan stanice ponovo se mijenja oblik proteina i dolazi do vezanja dva kalijeva iona na protein. Nakon izbacivanja kalijevih iona u citoplazmu, molekula proteina dobiva prvobitni oblik. Na takav se način održava visoka koncentracija natrijevih iona izvan i kalijevih iona unutar stanice, a time i odgovarajući membranski potencijal. Injekcija kalijevog klorida preplavljuje srce nabijenim česticama koje prekidaju njegovu električnu signalizaciju, zaustavljajući njegovo kucanje.<sup>2,3</sup>

Prema studiji iz 2002. (Journal of Forensic Science) prosječno vrijeme od prve injekcije do smrti je 8,4 minute. Količina svakog lijeka koji sadrži smrtonosna injekcija trebala bi biti prekomjerna, što znači da je količina kemikalije sadržana u svakoj injekciji smrtonosna. Na primjer, tijekom operacija pacijentima se obično daje 100 do 150 miligrama natrijeva tiopentala, početnog anestetika koji se koristi u smrtnoj kazni, u razdoblju od 10 do 15 minuta – dok se tijekom pogubljenja daje do 5000 mg. Za pankuronij bromid, 40 do 100 mikrograma po kilogramu tjelesne težine obično se daje prije operacije (za pomoć intubaciji), dok se tisuću puta veća količina koristi za izvršenje smrtne kazne. Korištenjem svih triju injekcija osoba se dovodi u stanje potpune nesvijesti prije nego što umre od mješavine respiratornog i srčanog zastoja. Zdravstveni radnici nisu prisutni tijekom postupka.

## Literatura

1. <https://www.britannica.com/topic/lethal-injection> (pristup 10.11.2021)
2. <https://scieloline.org/2007/11/ask-sergo-deathpenalty/> (pristup 10.11.2021.)
3. <https://edutorij.e-skole.hr/share/proxy/alfresco-noauth/edutorij/api/proxy-guest/15cf791a-4c97-4f29-84d9-17c1b47ceccc/kemija-2/m03/j03/istrizi/index.html> (pristup 10.11.2021)
4. <https://theorion.com/80093/opinion/death-penalty-inhumane-but-necessary/> (pristup 17.11.2021.)



# BOJE INŽENJERSTVA

Smanjenje šećera u hrani kao prevencija bolesti

*Antonija Bikić*

Dolaskom koronavirusa došle su i promjene u velikog broja ljudi. Neki su počeli raditi od doma i tako smanjili kretanje, šetnju do posla su zamijenili izležavanjem kraj televizora uz grickalice, što je nerijetko uzrokovalo povećanje tjelesne težine pojedinaca.<sup>1</sup>

Na broj kilograma zasigurno utječe hrana koju konzumiramo. Grickalice su primjer hrane koja je bogata tzv. praznim kalorijama. Znači da takva hrana tijelu daje energiju, ali nije nutritivno kvalitetna. Višak kalorija koje se lako unese takvom hranom pretvara se u salo.<sup>2</sup>

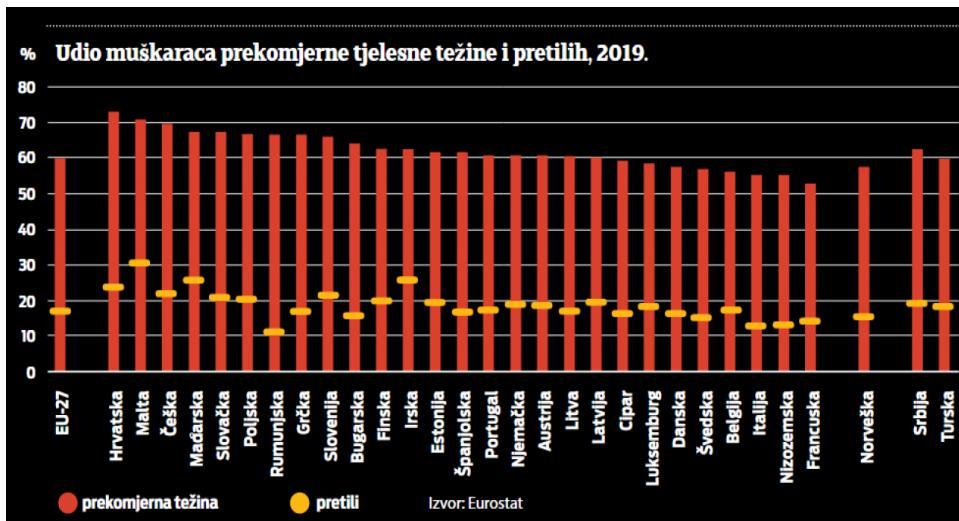
Znanstvenici zagovaraju ideju o smanjenju udjela šećera u prerađenoj hrani i pićima. Prema procjeni u SAD-u, smanjenje 20 % šećera iz pakirane hrane i 40 % iz pića moglo bi spriječiti 2,48 milijuna kardiovaskularnih bolesti (kao što su moždani udari, srčani udari, srčani zastoji) tijekom života odrasle populacije.



**Slika 1 – Šećer**

Deset godina nakon što bi politika o smanjenju šećera stupila na snagu, SAD bi prema modelu mogao očekivati da će uštedjeti 4,28 milijardi dolara u ukupnim neto troškovima zdravstvene zaštite i 118,04 milijarde dolara tijekom života sadašnje odrasle populacije (u dobi od 35 do 79 godina).

Prekomjerna tjelesna težina dovodi do razvoja drugih bolesti, a od svih prepoznatih rizika, samo ona predstavlja značajan rizik za razvoj svih pet bolesti. Uz to, prekomjerna tjelesna težina predstavlja značajan rizik i za druga dva biomedicinska rizika, hipertenziju i dislipidemiju.



Slika 2 – Udio muškaraca prekomjerne tjelesne težine i pretilih, 2019.

Prekomjerna tjelesna težina, i bolest, i rizik za razvoj danas pet vodećih kroničnih nezaraznih bolesti u stalnom je porastu u Hrvatskoj. I dok je u razvijenim zemljama zaustavljen trend porasta vodećih kardiovaskularnih bolesti, u Hrvatskoj za sada nije.

Muškarci u Hrvatskoj su u europskom vrhu po prekomjernoj tjelesnoj težini te ih manje od trećine ima normalan indeks tjelesne mase.

Posljednja ispitivanja pokazuju da je kod žena situacija u poboljšanju te da ih oko 50 posto ima normalnu tjelesnu težinu. Kod djece je situacija u pogoršanju i više od trećine ih je prekomjerne tjelesne težine, pa uvezvi u obzir da su

pretila djeca poslije gotovo uvijek pretili odrasli, problem bi u sljedećim godinama mogao eskalirati. Stoga dok čekamo da se stručnjaci usuglase i smanje količinu šećera u zapakiranoj hrani nama ostaje izbor da se okrenemo prema zdravijim alternativama.

### Izvori

1. <https://www.hzjz.hr/sluzba-promicanje-zdravlja/odjel-za-prevenciju-debljine/> (pristup 25.10.2021.)
2. <https://www.lifelinescreening.com/health-education/diabetes/4-ways-sugar-makes-you-fat?sourcecd=WNAT003>
3. <https://www.sciencedaily.com/releases/2021/08/210827082431.htm>



Slika 1 – Upcycling

## Plastika i upcycling

Dora Ljubičić (FKIT)

Jeste li ikad razmišljali napraviti naušnice od starih traperica, luster od vinskih boca, tegle za cvijeće od starih nogometnih lopti ili pak koristiti staklenke od zimnice kao čaše? Sve je to upcycling, a može li se primijeniti i upotrijebiti za nešto izvan kućanstva?

Znanstvenici s Kraljevskog melburnškog tehnološkog instituta (RMIT) dokazali su da može, jer su pronašli način kako proizvesti visoko kvalitetne proizvode od plastike-ugljikove nanocjevčice te čisto tekuće gorivo. Motiv za korištenje plastike u ovom procesu recikliranje je dva velika toka otpada koji može imati velike ekološke i finansijske koristi.

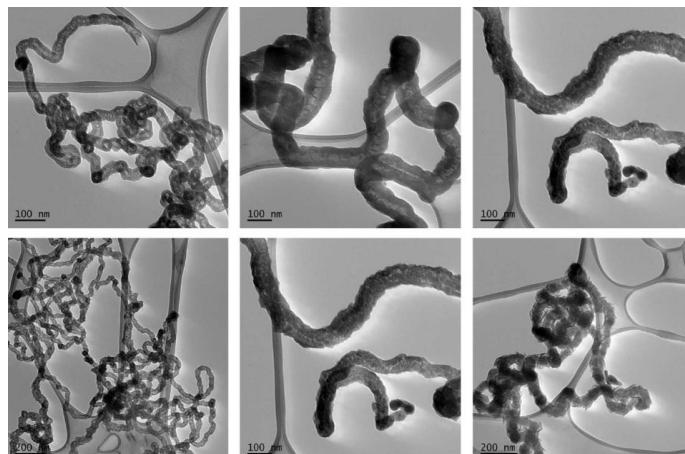
Naime, izvoz neprerađenih jednokratnih polimera plastike bit će zabranjen od srpnja 2022. godine prema novom australskom zakonu koji je osmišljen u svrhu ukidanja izvoza otpadne plastike, papira, stakla i guma. Njihov nacionalni cilj je da se 70 % plastične ambalaže u zemlji reciklira do 2025. godine, ali im zasad ne ide sve po planu.

Unatoč tome, znanstvenici s RMIT-a kažu da bi im recikliranje plastike s domaćom tehnologijom omogućilo izvlačenje najveće moguće vrijednosti iz njihovih ograničenih resursa te približavanje istinskom kružnom gospodarstvu.<sup>1</sup>

Tijekom ovog procesa istovremeno iskorištavaju poljoprivredni i organski otpad, a on se sastoji od dva koraka. Pretvara organski otpad u ugljikom bogat i vrijedan oblik biougljenja zvan drveni ugljen koji se često izravno koristi za poboljšanje zdravlja tla te sanaciju okoliša. On se zatim koristi za razgradnju otpadne plastike u njene pravotne komponente- naftu i plin.

Procesom se uklanjanju policiklički aromatski ugljikovodici (PAH), a plastika se pretvara u visoko kvalitetno tekuće gorivo. Istovremeno se ugljik u plastici pretvara u ugljikove nanocjevčice, koje oblažu biougljen.

Studija je prva koja koristi jeftin i široko dostupan biougljen kao katalizator za proizvodnju goriva koji ne sadrži onečišćiva i ugljikovih nanomaterijala od plastike. U središtu zbivanja im je polipropilen (PP) zbog široke primjene u industriji pakiranja, ali će provesti daljnja istraživanja s drugim oblicima plastike. Kvaliteta proizvedenog goriva varirat će, unatoč tome razvijena metoda prikladna je za preradu svih polimera – osnovnih sastojaka svake plastike.



Slika 2 – Ugljikove nanocjevčice

Novi pristup recikliranja plastike nudi održivu alternativu za proizvodnju ugljikovih nanocjevčica. Njihova šuplj cilindrična struktura nudi mnogo prednosti, poput iznimnih električnih i mehaničkih svojstava te primjenu u širokom rasponu sektora uključujući skladištenje vodika, elektroniku, gorive ćelije i biomedicinske tehnologije. Sve je veća potražnja za ugljikovim nanocjevčicama, posebice u zrakoplovstvu i obrani, gdje mogu olakšati dizajn lakih dijelova.<sup>2</sup>

Sveučilišni tim nije gotov s razvojem ove tehnologije, dapače počinju koristiti računalno modeliranje za optimizaciju procesa i provođenje ispitivanja u novom reaktoru koji su oni razvili i patentirali. Nadaju se da će suradivati s otpadnom industrijom kako bi unaprijedili istraživanje i istražili druge potencijalne primjene.

Unatoč tome što se globalno samo 20 % plastike reciklira zbog visoke cijene i niske kvalitete krajnjeg proizvoda, što recikliranje čini financijski neodrživim, ova studija nam je ipak pokazala da je moguće napraviti kvalitetne proizvode koji su nam od velike koristi u svakodnevnom životu.

### Izvori

1. <https://www.rmit.edu.au/news/all-news/2021/sep/upcycling-plastic> (pristup 15.11.2021.)
2. Zhuo, C., & Levendis, Y. A. (2013). Upcycling waste plastics into carbon nanomaterials: A review. *Journal of Applied Polymer Science*, 131(4)

## Studenti na terenu: ZOV

Aleksandra Brenko (FKIT)

U srijedu 3. studenoga 2021 skupila su se tri ekoinženjera i uputila u razgledavanje pogona za pročišćavanje otpadnih voda Zagrebačke otpadne vode d.o.o. (ZOV). U tmurno jutro dočekala nas je nasmijana i vedra glasnogovornica kompanije Astrid Werbolle. Ušli smo u auto i počeli turu po ogromnom području pogona u njenom vodstvu. Astrid nas je vodila svuda gdje je mogla (s obzirom na mjeru) i strpljivo odgovarala na sva naša pitanja.

Ispričala nam je o kanalu koji su trebali sagraditi kako bi uopće doveli sve otpadne vode do lokacije. Rekla nam je kako je prije izgradnje kanala postojao samo sustav prirodnih otvorenih kanala kroz koje je prolazila kanalizacijska voda i slijevala se direktno u Savu. S obzirom da dno kanala nije bilo ničime zaštićeno, otpadna voda bi u određenoj mjeri curila kroz zemlju u podzemlje i predstavljala veliku opasnost od zagađenja podzemnih voda. Navodno neki od Zagrebačkih odvodnih kanala,

iako pokriveni s gornje strane, još uvijek nemaju nepropusno dno.

Prošli smo grabilice koje izvlače velike komade otpada s rešetki na ulazu, promatrali separatore ulja i masti koji su ujedno i separatori pijeska i šljunka i došli do najbitnijeg dijela cijelog pogona – bazena s mikroorganizmima. Inače, biološka obrada vode zahtjeva dodavanje dodatnih kemikalija kako bi dobro odradila posao. Potrebno je podesiti pH vrijednost da "mikrićima" bude ugodno, dodati flokulante ili koagulantne kako bi ih lakše separirali, ili ponekad dodati još hrane za "mikriće" kao na primjer fosfor ili glicerol. Međutim Astrid nam je rekla da oni uglavnom ne moraju dodavati ništa jer njihovi mikroorganizmi rade super posao bez ikakve pomoći. Jedini slučaj u kojem moraju dodavati tvari je da se, zbog otapanja snijega ili dugih kišnih perioda, ulazna struja vode previše razrijedi i padne koncentracija hranjive organske tvari ispod razine na kojoj mikroorganizmi mogu živjeti. Osim toga, problem su im nekoliko puta znale stvoriti nitaste bakterije koje tvore guste zapetljane strukture nepovoljne za rad bioreaktora.

Poslije bazena, vidjeli smo spremnik gdje otpadni mulj ide na ugušćivanje, a dobivena masa nas je neodoljivo

podsjeca na Nutellu. Moguće da je to bila optička varka zbog toga što nismo doručkovali. Nakon toga prošli smo pored gigantskih digestora naizgled inspiriranih Kubrićkova Odisejom u svemiru. U digestorima se odvija anaerobna razgradnja otpadnog biološkog mulja koja za produkt daje biopljin. Odmah do digestora postavljen je elektrogenerator koji taj biopljin na mjestu pretvara u električnu energiju koja se koristi za rad pogona.

Na kraju, došli smo do finalnog djela pogona gdje prozirna pročišćena voda teče kao u fontanama. Barem vizualno, izgleda kao da pogon stvarno dobro obavlja svoj posao i da tu vodu nije nikakav problem ispustiti nazad u rijeku.



**Slika 1** – Pogled na ZOV

Kao budući inženjeri uvidjeli smo puno prilika i mogućnosti za budućnost. Ovakvim posjetima cilj nam je proširiti znanja i vidjeti teoriju na djelu, u praksi. Studentima je posebno zanimljivo vidjeti industriju uživo. Shvatiti kako radi pogon i s kojim izazovima se susreću naši budući kolege, a s kojima ćemo se i mi suočavati.

Veselimo se i drugim posjetima te upoznavanju interdisciplinarnosti naše struke u praksi!



**Slika 2** – Studenti u ZOV-u



# SCINFLUENCER

## Iperit – od bojnog otrova do lijekova za rak

Matija Krvavica (FKIT)

Kemijsko oružje zabranjeno je Ženevskim protokolom još 1925. godine. Protokol je potpisala velika većina zemalja svijeta što i nije začudujuće, uzeći u obzir da su tijekom Prvog svjetskog rata imale napretek prilika doživjeti, vidjeti i čuti o stravičnim posljedicama koje je takav, relativno nov način ratovanja imao na ljudе i okoliš. No, je li ipak moguće da iz nečeg posebno napravljenog s jedinstvenim ciljem da širi smrt i razaranje proizade nešto toliko dobro da će pomoći revolucionarizirati medicinu kakvu poznajemo?

Bojni plin, iperit, službenog imena diklordietil-sulfid, zapravo i nije plin. Koristio se u raznim projektilima, nagaznim minama i raketama u obliku žućkaste, uljevitе kapljевine koja bi zbog svojih svojstava brzo ishlaplila u zrak te bi se vjetrom zračnim putem širila kroz neprijateljske redove. Iperit je dobio ime po belgijskom gradu Ypresu, gdje je 1917. godine prvi put korišten od strane njemačke vojske protiv britanskih i kanadskih trupa. Zbog specifičnog i prepoznatljivog mirisa sličnom senfu, češnjaku i hrenu poznat je još pod nazivima Gorušičji plin, Senfni plin ili samo Senf.



Prava moć ovog kemijskog oružja ležala je u činjenici da su vojnici mogli biti pogodeni, osim udisanjem i izravnim kontaktom. Za razliku od prethodno korištenih bojnih plinova, klora i fozgena, od kojih se moglo obraniti korištenjem obične gas maske, nije postojao praktičan način da se vojnik učinkovito i adekvatno prekrije od glave do pete. Upravo zbog toga žrtava iperita bilo je u desetcima tisuća.

No, srećа u nesreći je bila ta što iperit nije imao svrhu masovnog ubijanja, već onesposobljavanja.

Iako je smrtnost ovog oružja bila tek 1–5 %, površine vojnika na koje bi raspršene kapljice iperita dospjele zahvatile bi bolne opeklime i plikovi. Neizdrživa bol primorala bi ranjenika da se povuče s borilišta u najbližu medicinsku ustanovu.<sup>2</sup> Sve navedeno rezultiralo je mnoštvom podataka od liječenja i testiranja pogodenih što je pogodovalo jednom vrlo zanimljivom otkriću: bijele krvne stanice pogodenih diklordietil-sulfidom usporeno i otežano su se stvarale, a uništavalo se limfnو tkivo i koštana srž.<sup>3,4</sup>

Upravo ta činjenica dala je ideju znanstvenicima da iskoriste kemikalije za terapiju, da pokušaju ovu pojavu iskoristiti za uništavanje kancerogenih stanica u limfnim čvorovima.



Slika 1 – Palete artiljerijskih granata koje sadrže destilirani iperit<sup>1</sup>

Nažalost, istraživanja su stala sve dok 1942. godine SAD nisu ulazile u Drugi svjetski rat. Od straha da će, unatoč zabrani, kemijska oružja ponovno biti korištena, zatražile su od institucija diljem zemlje da se vrate proučavanju i istraživanju bojnih kemijskih sredstava.

Među tim institucijama bilo je i Sveučilište Yale, gdje su dva mlada znanstvenika, Louis S. Goodman i Alfred Gilman, počeli proučavati učinke dušikovog senfa (jednog od derivata Senfnog plina) na limfome.

Rana istraživanja na miševima i zečevima bila su iznenađujuće uspješna jer je zabilježena drastična regresija tumora. Obećavajući rezultati dali su povod daljnjem kliničkom testiranju.

Prvi pacijent na svijetu liječen kemoterapijom bio je 48-godišnjak u terminalnoj fazi limfosarkoma. S obzirom da zračenje više nije imalo utjecaja na njegove tumore ponestajalo mu je opcija. Tako mu je dano deset doza

dušikovog senfa, što je dva i pol puta više od današnjeg standarda. Kroz nekoliko dana doktori su primjetili kako mu tumori omekšavaju, da bi po završetku liječenja potpuno nestali.<sup>3</sup>

Tim revolucionarnim otkrićem započinje doba kemoterapije jer su znanstvenici imali čvrste dokaze da se kemičkim sredstvima mogu liječiti tumori. I tako je jednostavan derivat kemijskog spoja sintetiziranog za razaranje, drastično unaprijedio medicinu i spasio već nebrojene živote.

#### Literatura

1. <https://undark.org/2016/09/16/abstracts-chemical-weapons-researcher-pseudonyms-and-more/> (pristup 11.11.2021.)
2. <https://emergency.cdc.gov/agent/sulfurmustard/basics/facts.asp> pristup (14.11.2021.)
3. <https://medicine.yale.edu/ycci/clinicaltrials/learnmore/tradition/chemotherapy/> pristup (14.11.2021.)
4. <https://montrealgazette.com/technology/science/watch-dr-joe-on-mustard-gas-and-chemotherapy> pristup (14.11.2021.)

# I Kinetički pjesak

Jurja Vukovinski (FKIT)

Kinetički pjesak nova je zanimacija među djecom, adolescentima, pa čak i odraslima! Njegova grada, teksturom nalik pjesku oblikuje se i lomi pod utjecajem pritiska. Svojom lakoćom čišćenja i svilenom teksturom igračka je koja ima mnogo upotreba i zadovoljavajući učinak na osobe svih uzrasta.

Kinetički pjesak je vrsta pjeska koja je premazana silikonskim uljem. Posebno ulje koje se koristi također uključuje mješavinu komponenata izrađenih od silicija i kisika. Ta se mješavina koristi u nekoliko maziva, kao i u drugim proizvodima, poput šampona i raznim losionima za čišćenje. Ova prevlaka od silikonskog ulja omogućuje kinetičkom pjesku da pokaže svojstva polučvrste i glatke krutine pod pritiskom. Zbog visokog sadržaja kvarca, proizvod ima pješčanu boju i poroznu, viskoznu konzistenciju, različitu od prirodnog pjeska. Još jedna značajka koju ovaj premaz pruža pjesku je da se čestice samo lijepe jedna za drugu. Za razliku od mokrog pjeska, koji nam se lijepi za ruke, kinetički pjesak se samo lijepi za sebe, pa ne stvara nered kada dolazi vrijeme za čišćenje. Jednostavan manevr prikupljanja čestica kinetičkog pjeska pomoću komada kinetičkog pjeska učinkovito će prikupiti sve male odvojene komade. Zna se kako se pjesak u mokrim i suhim uvjetima ne vlasti jednako. Čestice suhog pjeska zadržavaju svoj oblik, pa se prilikom izrade dvorca od pjeska ljudi koriste suhim pjeskom. Kada bi se umjesto toga koristio mokri pjesak, dvorac ne bi mogao zadržati svoj strukturalni integritet. Kinetički pjesak po tim se karakteristikama svrstava negdje između suhog i mokrog pjeska.

Najočitija upotreba kinetičkog pjeska je igračka za malu djecu. Tvar je pogodna za dodir i igru čak i u vrlo ranoj dobi te može pomoći u razvoju motoričkih sposobnosti djece. Zbog svoje fleksibilne prirode, može se stisnuti, povući i spljoštiti u različite oblike. Ovi pokreti u mladoj dobi potiču razvoj fine motorike, senzorni razvoj, potiču kreativnost, opuštaju i poboljšavaju koncentraciju. Štoviše, kinetički pjesak koristi se za smirivanje nemirne energije u djeci pružajući smirujući taktilni osjećaj.

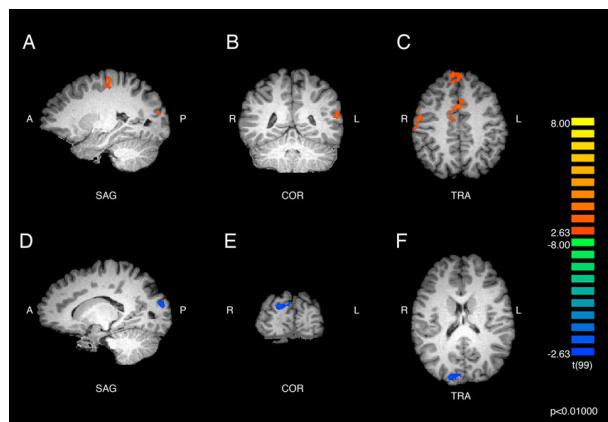


Slika 1 – Ilustracija kinetičkog pjeska

Odnedavno se na društvenim mrežama počeo širiti ASMR sadržaj s ciljem opuštanja, tj. terapije. ASMR označava "autoimuni osjetilni senzorni meridijanski odgovor" i identificiran je kao osjećaj bockanja koji se javlja kod ljudi. Pokreću ga određeni zvukovi i utječe na tjeme, vrat i ramena. Mnogi takvi zvukovi, poput šaputanja ili kuckanja, pokreću upravo taj doživljaj. Ova je pojava zavladala internetom u posljednjih nekoliko godina, a videozapisi na YouTubeu prikupili su nekoliko milijuna pregleda. Zvukovi koji se stvaraju igranjem i korištenjem kinetičkog pjeska općenito su zvukovi koji pokreću ASMR.

Jeste li ikada doživjeli zadovoljavajući učinak ASMR-a do sada? Neki ljudi uopće ne osjećaju takav učinak, bez obzira koliko zvukova okidača čuli. To ima smisla, budući da još uvjek ne postoji znanost iza učinka ASMR-a, zbog nedostataka istraživanja na tu temu.

Međutim, njegovo ogromno praćenje na platformama društvenih medija, posebno na YouTubeu, sugerira da bi ASMR zapravo mogao biti stvaran i izazvati osjećaj poput transa među ljudima.



Slika 2 – Aktivnost mozga tijekom gledanja tzv. ASMR videa (A,B,C) u usporedbi s kontrolnim slikama (D,E,F)



Slika 3 – Ilustracija ASMR okidača

## Literatura

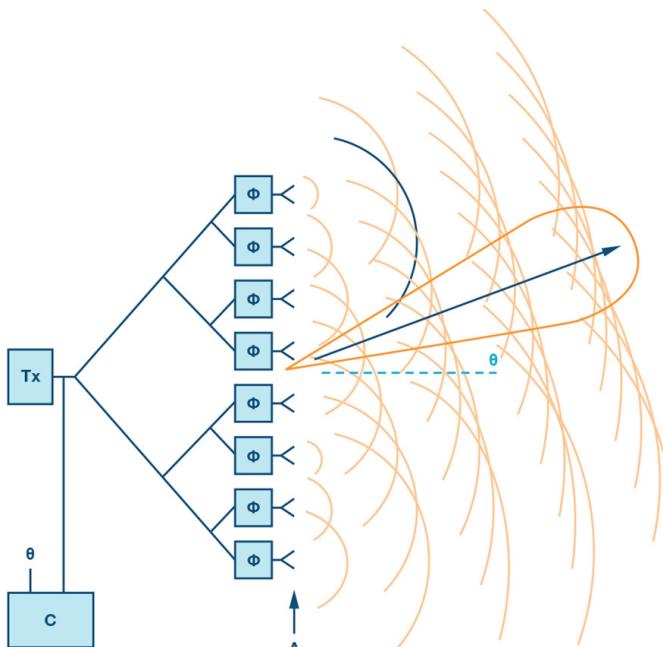
1. <https://www.scienceabc.com/pure-sciences/what-is-kinetic-sand.html> (pristup 17.10.2021.)
2. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5415598/> (pristup 17.10.2021.)
3. <https://hrv.thehouseofchronic.com/3966621-kinetic-sand-what-is-it-can-i-do-it-at-home> (pristup 17.10.2021.)

# I Kako rade 5G antene?

Monika Petanjko (FKIT)

Što je 5G tehnologija i kako funkcioniра? Proširele su se razne teorije zavjere kako je razvoj 5G antena povezan s pandemijom korona virusa, no radi se samo o novoj generaciji mobilnih mreža, tehnološkom napretku u odnosu na dosadašnje 4G mreže.

5G bazne stanice i uređaji mogu koristiti napredne antene za odašiljanje radio signala u smjeru prijemnika. Ta se tehnologija naziva oblikovanje zračenja i omogućava veće performanse, primjerice brzinu prijenosa podataka, a pritom zadržavajući razinu izloženosti radio valovima ispod propisanih granica. Oblikovanje zračenja je tehnika kojom se niz antena može usmjeriti za prijenos radio signala u određenom smjeru. Umjesto da jednostavno emitiraju energiju/signale u svim smjerovima, antenski nizovi koji koriste oblikovanje snopa određuju interesni smjer i šalju/primaju jači snop signala u tom određenom smjeru.<sup>1</sup>



Slika 1 – Shema rada 5G antene

U usporedbi s dosadašnjom 4G tehnologijom, kod 5G je većina frekvencija prikladna za kratki domet zbog fizičkih uvjeta širenja radio signala, no takve frekvencije imaju veliki potencijal širine pojasa. Bazne stanice male snage, zvane femtoćelije, mogu se koristiti za rad mobilnih radio žarišnih točaka s vrlo visokim brzinama podataka. To znači da je potrebno više baznih stanica. Dakle, može se dogoditi da će u nekom trenutku ulične svjetiljke pružiti ne samo svjetlo nego i pristup mobilnom gigabitnom internetu tako što će ugostiti bazne stanice za femto stanice. Više frekvencije za 5G su odlične iz više razloga, a jedan od najvažnijih je taj što podržavaju ogroman kapacitet za brze podatke.

Jako dobro su usmjerene i lako se koriste uz druge bežične signale bez izazivanja smetnji. 5G koristi kraće valne duljine, što znači da antene mogu biti puno manje od postojećih antena, a istovremeno pružaju preciznu kontrolu smjera. Budući da jedna bazna stanica može primiti mnogo usmjerjenih antena, to znači da 5G može podržati više od 1000 uređaja po metru od onoga što 4G može primiti. 5G mreže mogu slati ultrabrzne podatke puno većem broju korisnika, s velikom preciznošću i malim kašnjenjem.<sup>2</sup>



Slika 2 – Usporedba 4G i 5G antena

Međutim, većina ovih supervisokih frekvencija radi samo ako postoji jasna i izravna linija vidljivosti između antene i uređaja koji prima signal pa im često smetaju kiša, vlaga i neki drugi objekti.

Na temelju svih ovih činjenica dolazi se do zaključka da je 5G tehnologija potrebna jer društvo želi napredovati i održati korak s drugim državama. Tehnologija 5G bit će osnova za razvoj gospodarstva i novih tehnoloških rješenja koja će donijeti bolju kvalitetu života.



Slika 3 – 5G antena postavljena na baznu stanicu

## Literatura

1. <https://smart-ri.hr/5g-pitanja-i-odgovori/> (pristup 31.10.2021.)
2. <https://www.altair.com/newsroom/articles/what-is-5g-and-why-are-there-so-many-new-antennas/> (pristup 31.10.2021.)

# Najava projekta Studentske sekcije HDKI-ja



## INNOVATION FOR YOU

18.12.2021.



Krećemo s prvim projektom akademске godine 2021./2022. u organizaciji Studentske sekcije HDKI pod nazivom Innovation for you koji će se održati 18.12.2021. na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije.

Jedna poznata izjava Alberta Einsteina glasi: „We cannot solve a problem by using the same kind of thinking we used when we created them.“, koja je velika motivacija za mlade inovatore, razmišljajući istražuju kako doći do novih tehnologija, hrabro idu naprijed korak po korak do krajnjeg rezultata. Upravo takve ćemo imati prilike upoznati!

Svi zainteresirani moći će pristupiti uživo, zanimljivim i motivirajućim predavanjima i izlaganjima, uz valjanu covid potvrdu, a oni koji su sprječeni i nisu u mogućnosti doći moći će pratiti online putem zoom aplikacije. Program predavanja održat će se u MKV19 s početkom u 10 sati. Radujemo se vašem dolasku!

## INNOVATION FOR YOU

18.12.2021.



# Uredništvo Reaktora ideja 2021./'22.



S lijeva na desno: Samanta Tomičić, Lucija Volf, Dubravka Tavra, Dora Ljubičić i Hrvoje Tašner

SADRŽAJ  
vol. 6, br. 1

KEMIJSKA POSLA

Nobelova nagrada za kemiju 2021. ....	1
Principi i primjena tekućinske kromatografije .....	2
Koracima inženjera .....	4
Dan karijera 2021. ....	4
Tamara Kopunić – nova predsjednica Studentske sekcije HDKI-ja .....	6
27. HSKIKI .....	7
Ljetna škola kemije za studente .....	9

ZNANSTVENIK

Kemijsko inženjerstvo, kauzalnost i umjetna inteligencija .....	10
Razvoj i značaj računalne kemije .....	12
Kreme za sunčanje i u zimskim mjesecima .....	14
Umjetna fotosinteza .....	16
Kako djeluje smrtonosna injekcija? .....	18

BOJE INŽENJERSTVA

Smanjenje šećera u hrani kao prevencija bolesti .....	19
Plastika i <i>upcycling</i> .....	20
Studenti na terenu: ZOV .....	21

SCINFLUENCER

Iperit – od bojnog otrova do lijekova za rak .....	23
Kinetički pijesak .....	25
Kako rade 5G antene? .....	26

