

INSTITUT "RUĐER BOŠKOVIĆ"
GODIŠNJI IZVJEŠTAJ
ZA 2002.

GODIŠNJI IZVJEŠTAJ INSTITUTA
"RUĐER BOŠKOVIĆ"
2002.

ANNUAL REPORT OF THE RUĐER
BOŠKOVIĆ INSTITUTE
2002.

Institut "Ruđer Bošković"
Zagreb, 2003.

GLAVNI UREDNIK:

Dr. sc. Mislav Jurin

UREDNIŠTVO:

Dr. sc. Velimir Bardek (do 6. lipnja 2003.)

Dr. sc. Dunja Čukman

Dr. sc. Koraljka Gall-Trošelj

Dr. sc. Kata Majerski

Iva Melinščak Zlodi, dipl. prof.

Dr. sc. Karolj Skala

Dr. sc. Tvrtko Smital

Mr. sc. Jadranka Stojanovski

OBRADA PODATAKA NA RAČUNALU:

Vesna Borić, dipl. bibl.

Danijela Erman, dipl. prof.

Sofija Konjević, dipl. bibl.

Marina Mayer, dipl. bibl.

Iva Melinščak Zlodi, dipl. prof.

Mirjana Mihalić, dipl. bibl.

Ivana Pažur, dipl. bibl.

Mr. sc. Dunja Šafar-Cvitaš

PRIJELOM I PRIPREMA ZA TISAK:

Grafički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Ovaj izvještaj sastavljen je na temelju podataka dobivenih od predstojnika zavoda, direktora programa trajne istraživačke djelatnosti i voditelja tema izvan programa, koji su ujedno odgovorni za točnost, potpunost i konzistentnost podataka. Dobiveni su podaci prikupljeni i obrađeni u Knjižnici Instituta.

Napomena: pri korištenju podataka iz Godišnjeg izvještaja obavezno navedite izvornik.

Tisak: Grafički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Izdano: 250 primjeraka

Zagreb, kolovoz 2003.

ISBN 953-6690-45-4

SADRŽAJ

PREDGOVOR.....	1
TIJELA I USTROJ INSTITUTA "RUĐER BOŠKOVIĆ"	4
TIJELA INSTITUTA.....	6
USTROJ INSTITUTA.....	7
PROGRAMI I TEME TRAJNE ISTRAŽIVAČKE DJELATNOSTI.....	11
ZNANSTVENOISTRAŽIVAČKI PROJEKTI.....	13
OSTALI PROJEKTI MINISTARSTVA ZNANOSTI I TEHNOLOGIJE.....	16
POPIS UGOVORA ZAKLJUČENIH U 2002. GODINI.....	17
POSLIJEDIPLOMSKA I DODIPLOMSKA NASTAVA.....	20
KOLOKVIJI INSTITUTA.....	38
ODLIČJA I NAGRADE.....	46
IZBORI U ZVANJA.....	47
GRAFIČKI POKAZATELJI DJELATNOSTI INSTITUTA.....	50
IZVJEŠTAJI ZAVODA (<i>REPORTS OF THE DIVISIONS</i>).....	57
ZAVOD ZA TEORIJSKU FIZIKU (<i>THEORETICAL PHYSICS DIVISION</i>).....	57
ZAVOD ZA EKSPERIMENTALNU FIZIKU (<i>DIVISION OF EXPERIMENTAL PHYSICS</i>).....	77
ZAVOD ZA FIZIKU MATERIJALA (<i>DIVISION OF MATERIALS PHYSICS</i>).....	132
ZAVOD ZA ELEKTRONIKU (<i>DIVISION OF ELECTRONICS</i>).....	161
ZAVOD ZA FIZIČKU KEMIJU (<i>DIVISION OF PHYSICAL CHEMISTRY</i>).....	179
ZAVOD ZA ORGANSKU KEMIJU I BIOKEMIJU (<i>DIVISION OF ORGANIC CHEMISTRY AND BIOCHEMISTRY</i>).....	235
ZAVOD ZA KEMIJU MATERIJALA (<i>DIVISION OF MATERIALS CHEMISTRY</i>).....	271
ZAVOD ZA MOLEKULARNU GENETIKU (<i>DIVISION OF MOLECULAR GENETICS</i>).....	312
ZAVOD ZA MOLEKULARNU MEDICINU (<i>DIVISION OF MOLECULAR MEDICINE</i>).....	355
ZAVOD ZA ISTRAŽIVANJE MORA (<i>CENTER FOR MARINE RESEARCH</i>).....	419
ZAVOD ZA ISTRAŽIVANJE MORA I OKOLIŠA (<i>CENTER FOR MARINE AND ENVIRONMENTAL RESEARCH</i>).....	440
ZAVOD ZA LASERSKA I ATOMSKA ISTRAŽIVANJA I RAZVOJ (<i>DIVISION OF LASER AND ATOMIC RESEARCH AND DEVELOPMENT</i>).....	501
SERVISI.....	505
CENTAR ZA NUKLEARNU MAGNETSKU REZONANCIJU (<i>CENTER FOR NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE</i>).....	506
KNJIŽNICA (LIBRARY).....	510
RAČUNSKI CENTAR (COMPUTING CENTER).....	518
FLUKTUACIJA ZAPOSLENIH U INSTITUTU.....	523
ABECEDNO KAZALO.....	528

PREDGOVOR

Za znanost i visoko obrazovanje, 2002. godina je u Republici Hrvatskoj bila razdoblje priprema za neophodne reforme. Od znanstvenih se instituta u skladu s promjenama u drugim razvijenim zemljama očekivalo da definiraju svoju misiju u odnosu na zajednicu, pogledaju što doprinose i kako se to može poboljšati. Tijekom cijele godine mnoge grupe u zemlji radile su na nacrtu novog *Zakona o znanstvenoj djelatnosti i visokom obrazovanju*.

Struktura i problematika rada na Institutu Ruđer Bošković izabrane su povijesnim razvojem u prošlim desetljećima i iako su nas dobro služile uvijek je s vremena na vrijeme potrebno pogledati kako dosadašnji način rada možemo poboljšati da bismo postigli što više uspjeha u novim uvjetima. Moramo identificirati naše prednosti i raditi na usklađenom planiranju budućnosti. Sadašnje vrijeme zahtijeva više planiranja i koordinacije nego što je bio slučaj u prošlosti i uspjeh institucija kao što je naša ocjenjivat će se u budućnosti kritičnije nego ranije.

IRB je počeo godinu s nekoliko novosti. Ravnatelj je imenovan s mandatom da provede modernizaciju Instituta, a Svjetska Banka je slijedeći zahtjev Vlade ponudila Institutu pomoć u restrukturiranju tako da se potakne transfer tehnologije i komercijalni razvoj. Institut je već godinu ranije, 8. siječnja 2001., na sastanku Znanstvenog vijeća prihvatio dokument *Strategije razvoja* (http://www.irb.hr/50_obljentnica/2/2-3_sutra/2-3-1.htm) ali od strategije razvoja do provedbe je dalek put.

Misija IRB-a proizlazi iz *Strategije razvoja* i u skladu je s vizijom budućnosti Hrvatske utemeljene na znanju:

1. Izvrsna fundamentalna istraživanja u širokom spektru znanstvenih disciplina s posebnim naglaskom na interdisciplinarnom radu i na onoj tematici u kojoj možemo ostvariti vodeću ulogu u svijetu.
2. Razvoj ili podrška razvoju novih tehnologija, komercijalizacija znanstvenih rezultata i transfer najnovijih tehnologija u gospodarstvo, koje treba biti u što većoj mjeri temeljeno na suvremenim dostignućima. Institut također pomaže zajednici kroz izradu ekspertnih studija i izvršavanje zadataka RH vezanih uz znanost, posebno unutar problematike očuvanja okoliša.
3. Mnogobrojni i važni doprinosi obrazovanju i to prvenstveno poslijediplomskom obrazovanju, pomoć i suradnja sa svim sveučilištima u RH, prisutstvo na međunarodnom tržištu obrazovanja, studiji osnovani zajedno s međunarodnim partnerima i cijeloživotno obrazovanje.

Primjene koje su pomenute u drugom i trećem odlomku temelje se na znanju stečenom u istraživačkom radu. Da bi što bolje ispunio svoju misiju, Institut treba provesti mnoge promjene, od kojih su prvi važni koraci učinjeni tijekom 2002. g.

Rad na unutarnjoj strukturi IRB-a

Jedan od najvažnijih pravilnika Instituta odnosi se na kriterije napredovanja i imenovanja znanstvenih djelatnika Instituta. Tu smo vidjeli dva problema:

(a) Specificiranjem minimalnih numeričkih uvjeta republički kriteriji često štetno utječu na kvalitetu rada. Te bi kriterije trebalo podvrgnuti preispitivanju i reviziji ali to nije u nadležnosti Instituta.

(b) Nezavisno od republičkih kriterija, dodatne kriterije IRB-a promijenili smo nakon dugog rada povjerenstva Upravnog vijeća koje je vrlo uspješno vodila Mirjana Eckert Maksić. Ukratko, novi pravilnik baziran je na slijedećem tekstu u Čl. 1: *Osnovni princip po kojem se vrednuje rad na Institutu je doprinos znanstvenika i istraživača ostvarenju misije Instituta: vrhunskom znanstvenom radu i primjeni znanja na dobrobit i razvoj društva.*

Učinkoviti rad Instituta ovisi o dobroj organizaciji na svim razinama, i tu smo vidjeli nužnost povećanja prava, ovlasti i odgovornosti predstojnika zavoda. Zavodi moraju igrati bitnu ulogu u dugoročnom planiranju razvoja, izboru tematike na kojoj ćemo udruženim radom imati mnogo više uspjeha i suradnji s drugim zavodima i institucijama.

Zbog neujednačenog stanja u zavodima jedan od važnih zadataka na Institutu bio je redefinirati prava, dužnosti i odgovornosti predstojnika zavoda. To je učinjeno u jesen, i Ustroj Instituta revidiran je u dijelu koji se odnosi na ovlasti i dužnosti predstojnika zavoda. Prestankom rada na programima stalne istraživačke djelatnosti istekao je mandat dosadašnjih predstojnika, i postupak izbora novih predstojnika s proširenim ovlastima i odgovornošću započeo je krajem godine.

Svjetska banka na IRB-u

Misiju Instituta koju smo opisali na početku prihvatila je i Svjetska Banka (SB) te je mnogo nade i truda uloženo u program reforme koji je SB predlagala. U samom početku nadali smo se da će taj program biti instrument s kojim će se moći provesti mnoge neophodne reforme. Međutim sve do svibnja 2002, usprkos nekoliko posjeta konzultanata, SB još uvijek nije znala kako bi započela s radom. Tad je na zahtjev ravnatelja SB organizirala posjet stručnjaka i evaluaciju rada na Institutu, jer to mora biti polazna točka za reforme.

Evaluacija je organizirana na brzinu, sa samo jednim stručnjakom za svako područje i samo jednim danom za razgovore, najčešće unutar više zavoda. Zbog brzine koju je SB zahtijevala nismo mogli dobiti neke od predloženih eksperata. Međutim treba istaknuti da smo među četiri eksperta imali vrhunskog stručnjaka za kemiju (dr R. A. Mashelkar, FRS, generalni direktor CSIR, India) i za upravljanje u znanosti (dr G. Malainer, Austrian Research Centres Seibersdorf).

Evaluacija je većim dijelom gledala na mogućnosti komercijalizacije ali je ipak dala i vrijednu ocjenu znanstvene razine Instituta. Institut je ocijenjen kao znanstveno vrijedan i mogućnosti za komercijalne projekte ocijenjene su kao značajne. Izvješća se mogu vidjeti na internet stranicama Instituta (pod «Svjetska banka» na stranicama ravnatelja, <http://www.director.irb.hr/>)

Izvješća su navela mnoge naše zaposlenike da pomisle kako će se preporuke brzo provoditi. Međutim zatraženi su mnogi drugi koraci, najviše vezani uz detaljni poslovni plan ili uz posjete mnogih konzultanata. Na kraju 2002 godine program SB bio je još uvijek vrlo blizu početka, te je legitimno upitati da li bismo bez programa SB u reformi bili napredovali brže. To bi pogotovo bio slučaj da smo na raspolaganju imali sredstva koja je na taj projekt SB dosad utrošila.

Rad u nastavi

Vrlo značajni zadatak kojim IRB može značajno doprinijeti razvoju u RH je poboljšanje i jačanje nastavnih aktivnosti Instituta. Znanstvenici IRB tradicionalno predaju oko stotinu kolegija na svim hrvatskim sveučilištima, i tu aktivnost želimo i dalje podržavati i razvijati.

Veseli me što mogu izvijestiti o dva nova značajna poslijediplomska studija u zajednici sa Sveučilištem u Zagrebu. Prijedlog studija *Environmental Management*, koji će se održavati u Dubrovniku pripremili su zajednički prof. Natalija Koprivanac sa Sveučilišta u Zagrebu i dr Tarzan Legović s IRB-a.

Drugi prijedlog studija na engleskom jeziku, *Molekularna medicina*, u zajednici s Medicinskim fakultetom Sveučilišta u Zagrebu pripremili su prof. Lacković s Medicinskog fakulteta i dr Neven Žarković s IRB-a.

Nakon uspješno uvedenog poslijediplomskog studija *Zaštita prirode i okoliša* u zajednici sa Sveučilištem u Osijeku u stupnju planiranja je još jedan studij u zajednici sa Sveučilištem u Osijeku. Radi se o temi ekonomije okoliša, u zajednici s Ekonomskim fakultetom iz Osijeka, a studij se predviđa u Poreču.

Znanstveni i tehnološki projekti, oprema

Novi znanstveni projekti započeli su 1. kolovoza 2002 i na razini Instituta podrška zajednice znanstvenom radu je značajno povećana. Znanstveni rad se i dalje uspješno odvija, što pokazuje nešto veći broj publikacija u radovima citiranim u CC publikacijama. Broj radova u manje značajnim ostalim publikacijama pada, što je odraz pravila prema kojima se u postupcima promocije nagrađuju samo CC radovi.

U 2002. g. Institut je dobio novu vrhunsku opremu za nuklearnu magnetsku rezonanciju koja u 2003. godini ulazi u korištenje kao nacionalni centar otvoren svim korisnicima. Istovremeno, u vezanoj kupovini povoljno je nabavljena moderna oprema za elektronsku paramagnetsku rezonanciju.

U okviru programa HITRA i RAZUM mnogi projekti dobro napreduju i obećavaju vrijedna dostignuća.

Zadatci za 2003. godinu

U ovom uvodu na razini cijelog Instituta navedeni su neki zajednički elementi rada. Individualni programi koji su u mnogim slučajevima bili izvanredno uspješni opisani su u slijedećim stranicama.

U 2003. g. Institut će provesti daljnje korake na putu olakšanja komercijalizacije otkrića i transfera tehnologije, poboljšati promidžbu usluga koje pružamo ili možemo pružiti, izraditi nove internet stranice, podići brigu za znanstvene novake na višu razinu i nastaviti s drugim koracima u cilju ostvarenja misije. Veće promjene očekuju se u 2004. godini sa stupanjem na snagu novog zakona koji će Institutu donijeti mnogo više slobode i odgovornosti.

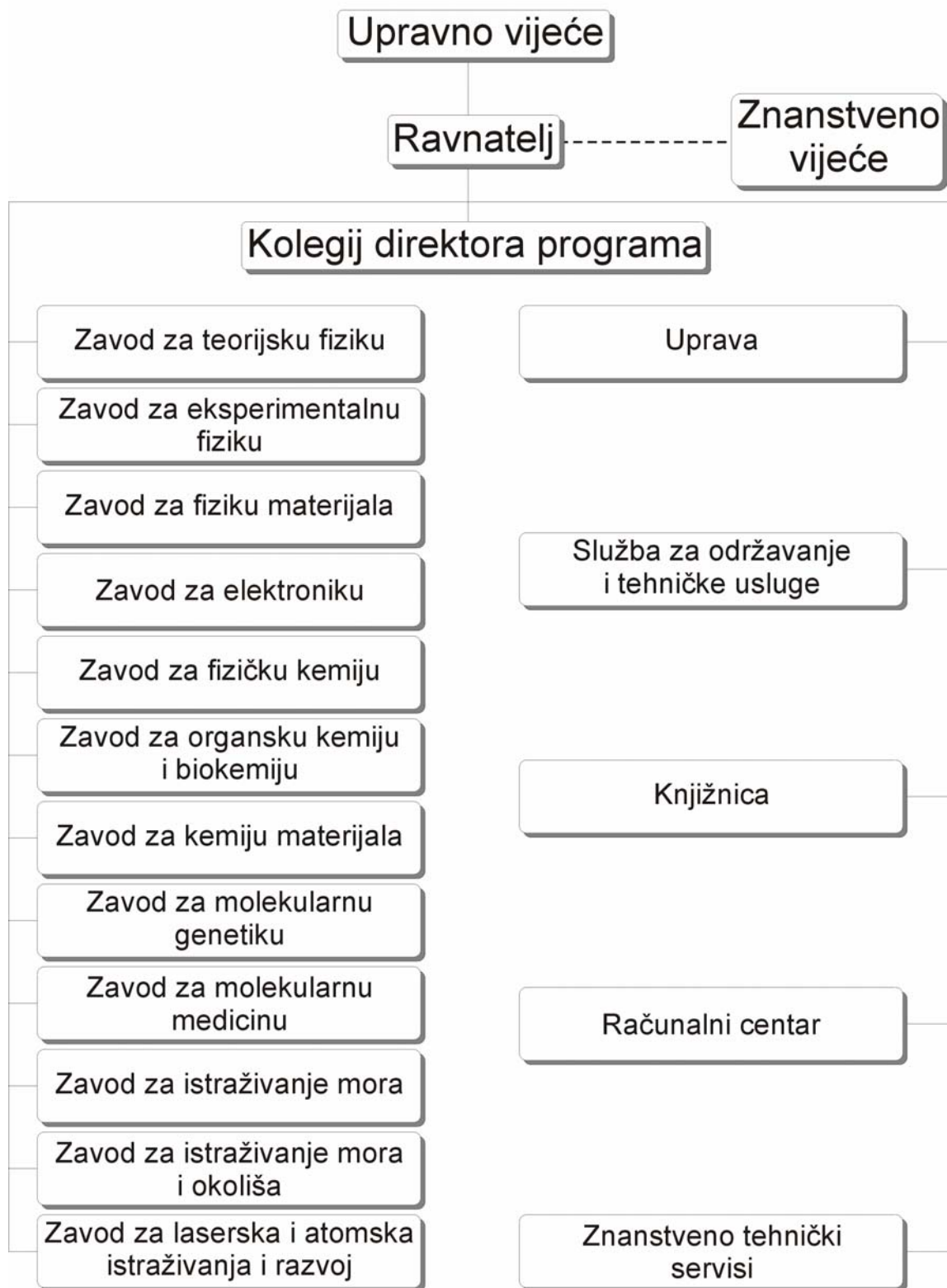
Zagreb, srpanj 2003.

Ravnatelj Instituta
Dr.sc. Stjepan Marčelja

TIJELA I USTROJ INSTITUTA "RUĐER BOŠKOVIĆ"

ORGANISATION AND CONSTITUTION OF THE RUĐER BOŠKOVIĆ INSTITUTE

Tijela i ustroj Instituta



TIJELA INSTITUTA

UPRAVNO VIJEĆE

- akademik Ivo Šlaus, Hrvatski državni sabor, predsjednik
- dr.sc. Nikola Ljubešić, Institut "Ruđer Bošković", zamjenik
- dr.sc. Milivoj Boranić, Institut "Ruđer Bošković", član do 20.1.2002.
- dr.sc. Tatjana Marotti, Institut "Ruđer Bošković", članica od 21.1.2002.
- dr.sc. Antun Carić, "Ericsson Nikola Tesla", član
- prof.dr.sc. Tomislav Cvitaš, Prirodoslovno-matematički fakultet, član
- dr.sc. Zvonimir Marić, Ministarstvo znanosti i tehnologije, član
- dr.sc. Dario Matika, Ministarstvo obrane RH, član
- dr.sc. Đuro Miljanić, Institut "Ruđer Bošković", član
- dr.sc. Radan Spaventi, "Pliva", član

Ravnatelj

dr.sc. Stjepan MARČELJA

Pomoćnica ravnatelja za znanost

dr.sc. Božena ČOSOVIĆ

Pomoćnik ravnatelja za suradnju s gospodarstvom

dr.sc. Svetozar MUSIĆ

Pomoćnik ravnatelja za financije

dr.sc. Dubravko RENDIĆ

Znanstveno vijeća Instituta

- dr.sc. Krunoslav Pisk, predsjednik
- dr.sc. Mirjana Maksić, zamjenica predsjednika

Znanstveno vijeće Instituta broji ukupno 121 člana.

USTROJ INSTITUTA

URED RAVNATELJA

ZAVOD ZA TEORIJSKU FIZIKU

Grupa za fiziku čvrstog stanja
 Grupa za fiziku čestica
 Grupa za teorijsku i matematičku fiziku
 Grupa za linearnu i nelinearnu dinamiku
 Tajništvo

dr.sc. Branko Guberina, predstojnik Zavoda
 dr.sc. Radovan Brako, voditelj laboratorija
 dr.sc. Branko Guberina, voditelj laboratorija
 dr.sc. Stjepan Meljanac, voditelj laboratorija
 dr.sc. Mladen Martinis, voditelj laboratorija

ZAVOD ZA EKSPERIMENTALNU FIZIKU

Laboratorij za nuklearne reakcije
 Laboratorij za teškoionsku fiziku
 Laboratorij za elektromagnetske i slabe interakcije
 Laboratorij za nuklearnu mikroanalizu
 Laboratorij za mjerenje niskih aktivnosti
 Laboratorij za fiziku visokih energija
 Tajništvo

dr.sc. Ante Ljubičić, predstojnik Zavoda
 dr.sc. Đuro Miljanić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Roman Čaplar, voditelj laboratorija
 dr.sc. Ante Ljubičić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Milko Jakšić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Bogomil Obelić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Krešo Kadija, voditelj laboratorija

ZAVOD ZA FIZIKU MATERIJALA

Laboratorij za poluvodiče i srodne materijale
 Laboratorij za tanke filmove
 Laboratorij za molekulsku fiziku
 Tajništvo

dr.sc. Branko Pivac, predstojnik Zavoda
 dr.sc. Branko Pivac, voditelj laboratorija
 dr.sc. Nikola Radić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Krešimir Furić, voditelj laboratorija

ZAVOD ZA ELEKTRONIKU

Laboratorij za informacijske sustave

 Laboratorij za istraživanje slučajnih signala i procesa

dr.sc. Božidar Vojnović, predstojnik Zavoda
 dr.sc. Dragan Gamberger, voditelj laboratorija
 dr.sc. Božidar Vojnović, voditelj laboratorija

ZAVOD ZA FIZIČKU KEMIJU

Laboratorij za kemijsku kinetiku i atmosfersku kemiju
 Laboratorij za radiokemiju

 Grupa za teorijsku kemiju

 Laboratorij za kemijsku i biološku kristalografiju

 Laboratorij za magnetske rezonancije
 Laboratorij za analitičku kemiju

 Tajništvo

dr.sc. Leo Klasinc, predstojnik Zavoda
 dr.sc. Dunja Srzić, voditeljica laboratorija
 dr.sc. Nada Filipović-Vinceković, voditeljica laboratorija
 dr.sc. Aleksandar Sabljčić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Biserka Kojić-Prodić, voditeljica laboratorija
 dr.sc. Boris Rakvin, voditelj laboratorija
 dr.sc. Ivan Habuš, voditelj laboratorija od 13.6.2002. godine

ZAVOD ZA ORGANSKU KEMIJU I BIOKEMIJU

Laboratorij za stereoselektivnu katalizu i biokatalizu
 Laboratorij za sintetsku organsku kemiju
 Laboratorij za supramolekularnu i nukleozidnu kemiju
 Laboratorij za kemiju ugljikohidrata, peptida i

dr.sc. Vitomir Šunjić, predstojnik Zavoda
 dr.sc. Vitomir Šunjić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Kata Majerski, voditeljica laboratorija
 dr.sc. Mladen Žinić, voditelj laboratorija

glikopeptida	dr.sc. Štefica Horvat, voditeljica laboratorija
Laboratorij za celularnu biokemiju	dr.sc. Marija Abramić, v.d. voditeljica laboratorija
Laboratorij za fizikalno-organsku kemiju	dr.sc. Mirjana Maksić, voditeljica laboratorija
Laboratorij za molekulsku spektroskopiju	dr.sc. Goran Baranović, voditelj laboratorija
Grupa za kvantnu organsku kemiju	dr.sc. Zvonimir Maksić, voditelj laboratorija
Tajništvo	

ZAVOD ZA KEMIJU MATERIJALA

Laboratorij za sintezu novih materijala	dr.sc. Svetozar Musić, predstojnik Zavoda
Laboratorij za procese taloženja	dr.sc. Boris Subotić, voditelj laboratorija
Laboratorij za radijacijsku kemiju i dozimetriju	dr.sc. Ljerka Brečević, voditeljica laboratorija
Laboratorij za kemiju čvrstog stanja	dr.sc. Dušan Ražem, voditelj laboratorija
Laboratorij za kemiju kompleksnih spojeva	dr.sc. Želimir Blažina, voditelj laboratorija
Tajništvo	dr.sc. Nevenka Brničević, voditeljica laboratorija

ZAVOD ZA MOLEKULARNU GENETIKU

Laboratorij za mikrobnu genetiku	dr.sc. Đurđica Ugarković, predstojnica Zavoda
Laboratorij za molekularnu mikrobiologiju	dr.sc. Erika Salaj-Šmic, voditeljica laboratorija
Laboratorij za molekularnu genetiku	dr.sc. Mirjana Petranović, voditeljica laboratorija
Laboratorij za elektronsku mikroskopiju	dr.sc. Vera Gamulin, voditeljica laboratorija
Laboratorij za molekularnu genetiku eukariota	dr.sc. Nikola Ljubešić, voditelj laboratorija
Laboratorij za eksperimentalnu kancerologiju	dr.sc. Đurđica Ugarković, voditeljica laboratorija
Laboratorij za genotoksične agense	dr.sc. Ivica Rubelj, v.d. voditelj laboratorija
Laboratorij za neurokemiju i molekularnu neurobiologiju	dr.sc. Maja Osmak, voditeljica laboratorija
Laboratorij za biocenotska istraživanja	dr.sc. Branimir Jernej, voditelj laboratorija
Tajništvo	dr.sc. Želimir Andrija Lovrić, voditelj laboratorija

ZAVOD ZA MOLEKULARNU MEDICINU

Laboratorij za staničnu i molekularnu imunologiju	dr.sc. Krešimir Pavelić, predstojnik Zavoda
Laboratorij za molekularnu onkologiju	dr.sc. Mariastefania Antica, voditeljica laboratorija
Laboratorij za molekularnu patologiju	dr.sc. Jasminka Pavelić, voditeljica laboratorija
Laboratorij za eksperimentalnu hematologiju, imunologiju i onkologiju	dr.sc. Koraljka Gall-Trošelj, v. d. voditelja laboratorija
Laboratorij za modifikatore biološkog odgovora	dr.sc. Jelka Gabrilovac, voditeljica laboratorija
Laboratorij za imunokemiju	dr.sc. Tatjana Marotti, v.d. voditelja laboratorija
Laboratorij za molekularnu endokrinologiju i transplantaciju	dr.sc. Biserka Pokrić, voditeljica laboratorija
	dr.sc. Mirko Hadžija, voditelj laboratorija

Laboratorij za diferencijaciju stanica i tkiva
 Laboratorij za molekularnu neurofarmakologiju
 Pogon laboratorijskih životinja
 Tajništvo

dr.sc. Neven Žarković, voditelj laboratorija
 dr.sc. Danka Peričić, voditeljica laboratorija
 dr.sc. Marko Radačić, voditelj

ZAVOD ZA ISTRAŽIVANJE MORA

Laboratorij za ekologiju i sistematiku
 Laboratorij za procese u ekosustavu mora
 Laboratorij za morsku molekularnu toksikologiju
 Laboratorij za ekotoksikologiju
 Laboratorij za ekofiziologiju i toksikologiju
 Tajništvo
 Plovne jedinice
 Akvarij
 Služba održavanja

dr.sc. Nenad Smodlaka, predstojnik Zavoda
 dr.sc. Ana Travizi, v.d. voditelja laboratorija
 dr.sc. Danilo Degobbis, voditelj laboratorija
 dr.sc. Renato Batel, voditelj laboratorija
 dr.sc. Bartolo Ozretić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Čedomil Lucu, voditelj laboratorija

ZAVOD ZA ISTRAŽIVANJE MORA I OKOLIŠA

Laboratorij za biogeokemiju organskih spojeva
 Laboratorij za fizičku kemiju tragova

Laboratorij za fizičko-kemijske separacije

Laboratorij za istraživanje i razvoj akvakulture
 Laboratorij za elektrokemiju i površinsku kemiju
 Laboratorij za ekološko modeliranje
 Laboratorij za radioekologiju
 Laboratorij za molekularnu ekotoksikologiju

Laboratorij za biološke učinke metala

Grupa za satelitsku oceanografiju
 Tajništvo

dr.sc. Božena Čosović, predstojnica Zavoda

dr.sc. Marijan Ahel, voditelj laboratorija
 dr.sc. Goran Kniewald, v.d. voditelja laboratorija

dr.sc. Božena Čosović, voditeljica laboratorija

dr.sc. Emin Teskeredžić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Marijan Vuković, voditelj laboratorija
 dr.sc. Vera Žutić, voditeljica laboratorija
 dr.sc. Stipe Lulić, voditelj laboratorija
 dr.sc. Smiljana Britvić-Budicin, voditeljica laboratorija

dr.sc. Biserka Raspor, voditeljica laboratorija

dr.sc. Milivoj Kuzmić, voditelj laboratorija

ZAVOD ZA LASERSKA I ATOMSKA ISTRAŽIVANJA I RAZVOJ

Laboratorij za optiku i tanke slojeve
 Višenamjenske radionice
 Tajništvo

dr. sc. Hrvoje Zorc, predstojnik Zavoda

dr.sc. Hrvoje Zorc, voditelj laboratorija
 Eduard Švegel, voditelj radionice

ZNANSTVENOTEHNIČKI SERVISI

NMR servis

dr.sc. Dražen Vikić-Topić, voditelj Servisa

UPRAVA

Odsjek za pravne i opće poslove
 Odsjek za financije i računovodstvo

Mirna Benat, dipl.iur., predstojnica Uprave

Zdenka Šujster, dipl.oec. voditeljica Odsjeka od 10.9.2002.

Odsjek za komercijalne poslove

Renata Slovinić, dipl.oec. voditeljica Odsjeka od 1.5.2002.

Odsjek zaštite na radu

Mr.sc. Branko Vekić, voditelj Odsjeka

Tajništvo

KNJIŽNICA

*Mr.sc. Jadranka Stojanovski, voditeljica
Knjižnice*

RAČUNALNI CENTAR

Dr.sc. Karolj Skala, voditelj Centra

SLUŽBA ZA ODRŽAVANJE I TEHNIČKE USLUGE *Branko Borić, dipl. inž. voditelj Službe*

PROGRAMI I TEME TRAJNE ISTRAŽIVAČKE DJELATNOSTI (DO 30.6.2002. GODINE)

Broj	Nazivi programa/teme	Direktor programa/voditelj teme
<i>P009801</i>	<i>Teorijska istraživanja strukture materije</i>	<i>dr.sc. Branko Guberina</i>
T00980101	Niskodimenzionalni sustavi, slojevi i površine	dr.sc. Radovan Brako
T00980102	Teorijska istraživanja osobina fundamentalnih čestica	dr.sc. Branko Guberina
T00980103	Kvantna teorija polja, statistike i simetrije	dr.sc. Stjepan Meljanac
T00980104	Višečestične korelacije i fluktuacije	dr.sc. Mladen Martinis
<i>P009802</i>	<i>Istraživanja iz subatomske fizike</i>	<i>dr.sc. Ante Ljubičić</i>
T00980201	Reakcije među lakim jezgrama	dr.sc. Đuro Miljanić
T00980202	Simetrije i međudjelovanja	dr.sc. Alfred Švarc
T00980203	Fizika teških iona	dr.sc. Roman Čaplar
T00980204	Fizika elementarnih čestica izvan standardnog modela	dr.sc. Ante Ljubičić
T00980205	Foton atom raspršenje	dr.sc. Krunoslav Pisk
T00980206	Međudjelovanja iona MeVskih energija i materije	dr.sc. Milko Jakšić
T00980207	Prirodni radioizotopi i procesi u plinovima	dr.sc. Bogomil Obelić
T00980208	Eksperimentalna fizika visokih energija	dr.sc. Krešo Kadija
T00980210	Razvoj i primjena nuklearnih metoda	dr.sc. Vladivoj Valković
<i>P009803</i>	<i>Istraživanje defekata neuređene/uređene materije i molekula; interakcije i dinamika</i>	<i>dr.sc. Branko Pivac</i>
T00980301	Istraživanje defekata u poluvodičima i izolatorima	dr.sc. Branko Pivac
T00980302	Amorfni tanki filmovi	dr.sc. Nikola Radić
T00980303	Raspršenje svjetla, interakcije i dinamika materije	dr.sc. Krešimir Furić
<i>P009805</i>	<i>Modeliranje procesa inteligentnim računalskim sustavima</i>	<i>dr.sc. Nikola Bogunović</i>
T00980501	Automatizirano rasuđivanje	dr.sc. Nikola Bogunović
T00980502	Optimizacija obrade signala i podataka	dr.sc. Božidar Vojnović
T00980503	Vizualna sučelja i tehnologija prijenosa znanja	dr.sc. Karolj Skala
<i>P009806</i>	<i>Struktura i dinamika sintetičkih i bioloških tvari</i>	<i>dr.sc. Nenad Trinajstić</i>
T00980601	Sastav, svojstva i dinamika plinskih sustava	dr.sc. Tomislav Cvitaš
T00980602	Istraživanja homogenih i heterogenih sustava	dr.sc. Nada Filipović-Vinceković
T00980604	Reaktivnost i reakcijski mehanizmi	dr.sc. Leo Klasinc
T00980605	Istraživanja statičkih i dinamičkih svojstava molekula	dr.sc. Aleksandar Sabljčić
T00980606	Razvoj i primjena modela u kemiji	dr.sc. Nenad Trinajstić
T00980607	Struktura i bioaktivnost organskih i organometalnih spojeva	dr.sc. Ljerka Tušek-Božić
T00980608	Struktura i svojstva (bio)molekula	dr.sc. Biserka Kojić-Prodić
T00980609	Spektroskopska istraživanja lipoproteina	dr.sc. Greta Pifat-Mrzljak
T00980610	Relaksacijski procesi feroelektrika i supravodiča	dr.sc. Boris Rakvin
T00980611	Istraživanje polimera metodama magnetskih rezonancija	dr.sc. Zorica Vekšli
T00980612	Međudjelovanje biomembrana s aminokiselinama i peptidima	dr.sc. Vesna Nöthig-Laslo
<i>P009807</i>	<i>Selektivni procesi na molekularnoj i supramolekularnoj razini</i>	<i>dr.sc. Vitomir Šunjić</i>
T00980701	Stereoselektivni katalitički i biokatalitički procesi	dr.sc. Vitomir Šunjić
T00980702	Molekularni receptori s policikličkim jedinicama	dr.sc. Kata Majerski
T00980703	Projektiranje i sinteza supramolekularnih sustava	dr.sc. Mladen Žinić
T00980704	Razvoj receptor-selektivnih analoga bioaktivnih peptida	dr.sc. Štefica Horvat
T00980705	Hidrolitički enzimi: izolacija, svojstva, struktura, funkcija	dr.sc. Ljubinka Vitale
<i>P009808</i>	<i>Elektronska struktura i dinamika organskih molekula</i>	<i>dr.sc. Mirjana Maksić</i>
T00980801	Elektronska struktura i kemijska reaktivnost	dr.sc. Mirjana Maksić
T00980802	Izotopno obilježavanje i molekulske spektroskopije	dr.sc. Goran Baranović
T00980803	Elektronska struktura molekula i atomskih grozdova	dr.sc. Zvonimir Maksić

<i>P009809</i>	<i>Znanost i tehnologija materijala</i>	<i>dr.sc. Svetozar Musić</i>
T00980901	Istraživanje procesa kristalizacije i ionske zamjene zeolita	dr.sc. Boris Subotić
T00980902	Procesi taloženja u sustavima čvrsto/tekuće	dr.sc. Ljerka Brečević
T00980903	Sinteza i mikrostruktura metalnih oksida i oksidnih stakala	dr.sc. Svetozar Musić
T00980904	Fizičko-kemijski učinci ionizirajućih zračenja	dr.sc. Dušan Ražem
T00980905	Sinteza, karakterizacija i modifikiranje polimera zračenjem	dr.sc. Franjo Ranogajec
T00980906	Intermetalni spojevi i metalni hidridi	dr.sc. Želimir Blažina
T00980908	Supravodljivi oksidi	dr.sc. Nevenka Brničević
<i>P009810</i>	<i>Struktura, funkcija i evolucija staničnog genoma</i>	<i>dr.sc. Đurđica Ugarković</i>
T00981001	Uloga rekombinacije u popravku DNA i stabilnosti plazmida	dr.sc. Erika Salaj – Šmic
T00981002	Regulacija rekombinacije i rekombinacijskog popravka DNA	dr. sc. Mirjana Petranović
T00981003	Studij filogenetski sačuvanih i industrijski važnih gena	dr.sc. Vera Gamulin
T00981005	Struktura i funkcija fotosintetskog aparata	dr.sc. Nikola Ljubešić
T00981006	Organizacija i evolucija eukariotskog genoma	dr.sc. Đurđica Ugarković
T00981007	Molekularni mehanizmi karcinogeneze	dr.sc. Branko Brdar
T00981008	Stanični odgovor na genotoksične agense	dr.sc. Maja Osmak
T00981009	Inicijacija transkripcije kod eukariota	dr.sc. Marija Sopta
T00981010	Strukturni i funkcionalni aspekti biološke selektivnosti	dr.sc. Volker Magnus
<i>P009811</i>	<i>Istraživanje raka</i>	<i>dr.sc. Krešimir Pavelić</i>
T00981101	Aktivacija gena u leukemijama	dr.sc. Mariastefania Antica
T00981102	Genetička istraživanja Gorlinova sindroma	dr.sc. Sonja Levanat
T00981103	Gensko liječenje tumora	dr.sc. Jasminka Pavelić
T00981104	Molekulska genetička osnova metastaziranja	dr.sc. Krešimir Pavelić
T00981105	Patogeneza kronične limfocitne leukemije	dr.sc. Jelka Gabrilovac
T00981106	Opioidni peptidi i hematopoeza	dr.sc. Milivoj Boranić
T00981107	Mehanizmi djelovanja enkefalina i peptidoglikana	dr.sc. Ivo Hršak
T00981108	Cijepljenje virusnim podjedinicama	dr.sc. Biserka Pokrić
T00981109	Uzroci i posljedice presađivanja endokrinog tkiva pankreasa	dr.sc. Mirko Hadžija
T00981113	Oksidativni stres i zloćudne bolesti	dr.sc. Neven Žarković
T00981114	Komparativna molekularna imunologija	dr.sc. Renata Novak
<i>P009813</i>	<i>Istraživanje procesa i ekoloških odnosa u Jadranu</i>	<i>dr.sc. Renato Batel</i>
T00981302	Biološka raznolikost odabranih područja Jadranskog mora	dr.sc. Nevenka Zavodnik
T00981303	Mehanizam dugoročnih promjena u sjevernom Jadranu	dr.sc. Danilo Degobbis
T00981305	Satelitska detekcija i matematičko modeliranje Jadrana	dr.sc. Milivoj Kuzmić
T00981306	Programirane biosinteze i genotoksični rizik	dr.sc. Renato Batel
T00981307	Toksičnost i biokemijski odgovor organizama na zagađenje	dr.sc. Bartolo Ozretić
T00981308	Ekofiziološka istraživanja i transportni mehanizmi metala	dr.sc. Čedomil Lucu
<i>P009815</i>	<i>Istraživanje okolišnog rizika u jadranskom i kopnenom dijelu Hrvatske</i>	<i>dr.sc. Božena Čosović</i>
T00981501	Biogeokemija organskih spojeva u prirodnim vodama	dr.sc. Marijan Ahel
T00981502	Fizikalna i biogeokemija tragova metala u vodenim sustavima	dr.sc. Marko Branica
T00981503	Priroda i reaktivnost organskih tvari u moru i kopnenim vodama	dr.sc. Božena Čosović
T00981504	Elektroanalitička kemija	dr.sc. Milivoj Lovrić
T00981505	Modeliranje procesa u vodi i na granicama faza	dr.sc. Ivica Ružić
T00981506	Organizmi, bioindikatori kvalitete vode u kojoj žive	dr.sc. Emin Teskeredžić
T00981507	Granica faza čvrsto/tekuće	dr.sc. Marijan Vuković
T00981508	Eutrofikacija i procesi na međupovršinama	dr.sc. Vera Žutić
T00981509	Kretanje i sudbina radionuklida i mikro elemenata	dr.sc. Stipe Lulić

T00981510	Multiksenobiotska rezistencija u procjeni okolišnog rizika	dr.sc. Smiljana Britvić-Budicin
T00981511	Istraživanje učinka metala na organizme putem biomarkera	dr.sc. Biserka Raspor
T00981512	Ugroženost voda ratnim otpadom na području krša	dr.sc. Mladen Picer
P009816	Optronička instrumentacija obrambenih sustava	dr.sc. Antun Peršin
T00981601	Optronička instrumentacija obrambenih sustava	dr.sc. Antun Peršin

Broj	Naziv tema izvan programa	Voditelj
T00980001	Neurofarmakologija GABA i 5-HT sustava	dr.sc. Danka Peričić
T00980002	Neurokemija sinaptičke transmisije	dr.sc. Branimir Jernej
T00980004	Obalni i morski fitoindikatorji jadranskih otoka	dr.sc. Andrija Željko Lovrić

ZNANSTVENOISTRAŽIVAČKI PROJEKTI

Odlukom Ministarstva znanosti i tehnologije od 24. srpnja 2002. godine, klasa: 641-01/02/06/2, ur.broj: 533-02/211-02-0098 odobreni su znanstvenoistraživački projekti od 1.7.2002. godine.

Broj (oznaka)	Naziv projekta	Voditelj projekta
0098001	Fizika površina, mikrostrukura i jako koreliranih sistema	dr.sc. Radovan Brako
0098002	Temeljne interakcije u fizici elementarnih čestica i kozmologiji	dr.sc. Branko Guberina
0098003	Kvantna teorija polja, nekomutativni prostori i simetrije	dr.sc. Stjepan Meljanec
0098004	Struktura dinamičkih fluktuacija u nelinearnim sustavima	dr.sc. Mladen Martinis
0098007	Hadronska fizika i QCD	dr.sc. Ivan Supek
0098008	Lake atomske jezgre: klasteri, nuklearne molekule, reakcije	dr.sc. Đuro Miljanić
0098009	Međudjelovanja u subatomske i medicinske fizici	dr.sc. Alfred Švarc
0098010	Fizika teških iona	dr.sc. Zoran Basrak
0098011	Masivni neutriini i astročestice	dr.sc. Ante Ljubičić
0098012	Foto-atom međudjelovanje i korelacije	dr.sc. Tihomir Surić
0098013	Procesi međudjelovanja brzih iona i tvari	dr.sc. Milko Jakšić
0098014	Prirodni izotopi niskih aktivnosti i razvoj instrumentacije	dr.sc. Bogomil Obelić
0098015	Eksperimentalna fizika visokih energija	dr.sc. Krešo Kadija
0098016	Metode detekcije eksploziva, kemijskog i nuklearnog materijala	dr.sc. Vladivoj Valković
0098017	Invarijantna specijalna relativnost i elektrodinamika	dr.sc. Tomislav Ivezić
0098018	Tankoslojne multikomponentne legure amornog silicija	dr.sc. Davor Gracin
0098019	Dinamika hidratacije šećera	dr.sc. Vlasta Mohaček-Grošev
0098020	Utjecaj defekata i nanostruktura na svojstva poluvodiča	dr.sc. Branko Pivac
0098021	Magnetronska depozicija tankih filmova	dr.sc. Nikola Radić
0098022	Fizika i primjena nanostruktura	dr.sc. Krešimir Furić
0098026	Istraživanja nanofaznih slojeva i nanokompozitnih čvrstih elektrolita	dr.sc. Aleksandra Turković
0098027	Struktura i električna relaksacija u staklima i staklo-keramici	dr.sc. Andrea Moguš-Milanković
0098028	Statika i dinamika molekulskih kristala	dr.sc. Davor Kirin
0098029	Optičke interakcije i organizacijski procesi u materiji	dr.sc. Stjepan Lugomer
0098045	Poluvodički materijali za optoelektroniku	dr.sc. Branko Šantić
0098023	Automatizirano otkrivanje znanja i rasuđivanje	dr.sc. Nikola Bogunović
0098024	Analiza stohastičkih signala, vremenskih i podatkovnih nizova	dr.sc. Božidar Vojnović
0098025	Detekcija nestacionarnih izvora i distribuirana obrada informacija	dr.sc. Karolj Skala
0098030	Svojstva i ponašanja atmosferskih mikrokonstituenata	dr.sc. Tomislav Cvitaš
0098031	Površinski aktivne tvari, procesi u otopinama i na međupovršinama	dr.sc. Nada Filipović-Vinceković
0098032	Reaktivnost i reakcijski mehanizmi	dr.sc. Leo Klasinc
0098033	Istraživanja kemijske reaktivnosti i femtosekundnih procesa	dr.sc. Aleksandar Sabljčić
0098034	Razvoj i primjena modela u kemiji i bioinformatici	dr.sc. Nenad Trinajstić
0098035	Strukturalna i biološka istraživanja novih kompleksnih spojeva	dr.sc. Ljerka Božić Tušek

0098036	Struktura i dinamika (bio) molekula	dr.sc. Biserka Kojić Prodić
0098037	Biofizika međudjelovanja lipoproteina i aktivnih tvari	dr.sc. Greta Pifat Mrzljak
0098038	Elektronska spinska rezonancija u sustavima s paramagnetskim česticama	dr.sc. Boris Rakvin
0098039	Modeliranje novih ugljikovih materijala	dr.sc. Ante Graovac
0098040	Međudjelovanje biomembrana s aminokiselinama i peptidima	dr.sc. Vesna Nöthig-Laslo
0098041	Multidisciplinarna sedimentološka istraživanja	dr.sc. Halka Bilinski
0098042	Materija u ekstremnim uvjetima	dr.sc. Slobodan Bosanac
0098043	Opis i ponašanje kvantnih sistema u interakciji	dr.sc. Tomislav Živković
0098050	Stereoselektivna sinteza i kataliza	dr.sc. Vitomir Šunjić
0098051	Novi optički aktivni materijali	dr.sc. Vladimir Vinković
0098052	Sinteza, molekulska struktura i funkcija policikličkih molekula	dr.sc. Kata Majerski
0098053	Supramolekularna organizacija u gelovima, molekulske prepoznavanje i kataliza	dr.sc. Mladen Žinić
0098054	Dizajn i sinteza bioaktivnih peptida, glikopeptida i biomarkera	dr.sc. Štefica Horvat
0098055	Hidrolaze-od izolacije do funkcije	dr.sc. Marija Abramić
0098056	Reaktivni međuproducti u osnovnom i pobuđenom stanju	dr.sc. Mirjana Maksić
0098057	Prošireni PI - sistemi i molekularne spektroskopije	dr.sc. Goran Baranović
0098058	Protonski afiniteti i reakcije prijenosa protona u kemiji	dr.sc. Zvonimir Maksić
0098059	Nuklearna magnetska rezonancija i proračuni bioorganskih molekula	dr.sc. Dražen Vikić-Topić
0098060	Istraživanje procesa kristalizacije i primjena zeolita	dr.sc. Boris Subotić
0098061	Procesi i interakcije u heterogenim sustavima čvrsto/tekuće	dr.sc. Ljerka Brečević
0098062	Sinteza i mikrostruktura metalnih oksida i oksidnih stakala	dr.sc. Svetozar Musić
0098063	Fizičko-kemijski učinci ionizirajućih zračenja	dr.sc. Dušan Ražem
0098064	Sinteza, karakterizacija i modificiranje polimera zračenjem	dr.sc. Franjo Ranogajec
0098065	Intermetalni spojevi i metalni hidridi	dr.sc. Želimir Blažina
0098066	Supravodljivi oksidi i višenuklearni metalni kompleksi	dr.sc. Nevenka Brničević
0098067	Utjecaj dopanada na strukturu i svojstva materijala za tehničke primjene	dr.sc. Biserka Gržeta
0098069	Hidrodinamika cerebrosposinalnog likvora	dr.sc. Darko Orešković
0098070	Uloga rekombinacije u popravku DNA i stabilnosti genoma	dr.sc. Erika Salaj Šmic
0098071	Regulacija rekombinacije i rekombinacijskog popravka	dr.sc. Mirjana Petranović
0098072	Studij gena i genoma evolucijski sačuvanih i gospodarski važnih organizama	dr.sc. Vera Gamulin
0098073	Struktura i funkcija plastida i citoskeleta	dr.sc. Nikola Ljubešić
0098074	Evolucijska dinamika satelitskih DNA	dr.sc. Đurđica Ugarković
0098075	Organizacija heterokromatinskih sekvenci DNA u genomima beskralješnjaka	dr.sc. Miroslav Plohl
0098076	Stanični odgovor na fizikalne, kemijske i biološke nokse	dr.sc. Maja Osmak
0098077	Molekularni mehanizmi imortalizacije i staničnog starenja	dr.sc. Ivica Rubelj
0098078	Struktura, funkcija i regulacija plazminogenih serinskih proteaza	dr.sc. Branko Brdar
0098079	Regulacija transkripcije u eukariota	dr.sc. Mary Marija Sopta
0098080	Dinamika i genetika bioaktivnih molekula	dr.sc. Volker Magnus
0098081	Molekularna patofiziologija serotonergičnog prijenosa	dr.sc. Branimir Jernej
0098082	Endemske i reliktno fitocenoze Hrvatske i njihova mikroflora	dr.sc. Željko Andrija Lovrić
0098086	Istraživanje uloga ponavljajućeg slijeda (Heat repeat) u proteinu Huntingtin	dr.sc. Oliver Vugrek
0098088	Neurofarmakologija serotoninskog sustava	dr.sc. Doroteja Muck Šeler
0098089	Geni familije u razvoju i nastanku raka pluća	dr.sc. Ljubomir Pavelić
0098090	Transkripcijska kontrola razvoja limfocita-uloga u genezi limfoma	dr.sc. Marija Stefanija Antica
0098091	Signalni put SHH/PTCH/SMO u tumorima i malformacijama	dr.sc. Sonja Levanat
0098092	Genetsko liječenje tumora korekcijom tumor-supresorskih gena	dr.sc. Jasminka Pavelić
0098093	Utjecaj transdukcije gene/proteina na signalne puteve transformiranih stanica	dr.sc. Krešimir Pavelić
0098094	Regulacija ekspresije ektopeptidaza i opioidnih receptora	dr.sc. Jelka Gabrilovac
0098095	Molekularni mehanizmi nastanka neuroendokrinih tumora	dr.sc. Koraljka Gall Trošelj
0098096	Oksidativni/antioksidativni status nakon primjene opioida i opijata	dr.sc. Tatjana Marotti
0098097	Moduliranje imunološkog odgovora bioaktivnim peptidima	dr.sc. Biserka Pokrić
0098098	Kloniranje stanica embrija u strukture slične otočićima	dr.sc. Mirko Hadžija
0098099	Antitumorski učinci virusa i onkolitička virusna cjepiva	dr.sc. Mislav Jurin
0098101	Oksidativni stres i zloćudne bolesti	dr.sc. Neven Žarković
0098102	Molekularni mehanizmi imunosupresije	dr.sc. Renata Novak
0098103	Neurotransmitori u stresu i regulacija GABA receptora in vitro	dr.sc. Danka Peričić

0098104	Molekularno-genetički i prognostički čimbenici u nastanku raka vrata maternice	dr.sc. Magdalena Grce
0098106	Uloga gena FHIT u nastanku neuroendokrinih tumora	dr.sc. Šimun Križanac
0098107	Nove mogućnosti liječenja tumora dojke	dr.sc. Josip Unušić
0098108	Molekularna genetika tumora gastrointestinalnog sustava	dr.sc. Sanja Kapitanović
0098109	Ciklooksigenaza -2: nova meta u kemoprevenciji i liječenju tumora debelog crijeva	dr.sc. Radan Spaventi
0098111	Mehanizam dugoročnih promjena u ekosustavu Jadranskog mora	dr.sc. Danilo Degobbis
0098113	Istraživanje plimne i duže priodične dinamike sjevernog Jadrana	dr.sc. Milivoj Kuzmić
0098114	Programirane biosinteze i genotoksični rizik	dr.sc. Renato Batel
0098115	Fiziološki i biokemijski indikatori toksikološkog stresa u morskih organizama	dr.sc. Bartolo Ozretić
0098116	Ekofiziološka istraživanja i odgovor na stres u morskih organizama	dr.sc. Čedomil Lucu
0098120	Analitika i biogeokemija organskih spojeva u vodenom okolišu	dr.sc. Marijan Ahel
0098121	Fizikalna i biogeo-kemija tragova metala u vodenim sustavima	dr.sc. Marko Branica
0098122	Priroda i reaktivnost tvari u moru i okolišu	dr.sc. Božena Čosović
0098123	Elektroanalitička istraživanja u tekućim i krutim elektrolitima	dr.sc. Milivoj Lovrić
0098124	Modeli i informacijski sustavi u zaštiti voda i nadzoru plovnih putova	dr.sc. Ivica Ružić
0098125	Akvakultura i očuvanje ekološke osobitosti akvatorija	dr.sc. Emin Teskeredžić
0098126	Priprava i svojstva površina metala od značaja u zaštiti okoliša	dr.sc. Marijan Vuković
0098127	Međupovršinski procesi i eutrofikacija	dr.sc. Vera Žutić
0098128	Radionuklidi u prirodnim sustavima	dr.sc. Delko Barišić
0098129	Biokemijska i molekularna reakcija riba na stanje ekosustava	dr.sc. Rozalinda Čož-Rakovac
0098130	Metali i stanični biomarkeri	dr. sc. Biserka Raspor
0098131	Perzistentna organohalogeno zagađivala u nekim obalnim područjima Dalmacije	dr.sc. Mladen Picer
0098132	Geokemija recentnih i starih sedimentacijskih sustava Jadranske platforme	dr.sc. Goran Kniewald
0098133	Ekološki modeli akvatičkih ekosustava	dr.sc. Tarzan Legović
0098134	Mikrobne zajednice katalizatori bioloških transformacija	dr.sc. Dubravka Hršak
0098135	Mehanizam multiksenobiotičke otpornosti kao pokazatelj kvalitete vodenog okoliša	dr.sc. Tvrtko Smital
0098140	Fotonika slikovnih i neslikovnih optičkih sustava	dr.sc. Antun Peršin

OSTALI PROJEKTI MINISTARSTVA ZNANOSTI I TEHNOLOGIJE

Naziv projekta

Voditelj

POSEBNI PROJEKTI

- | | |
|---|-----------------------------|
| - Sustavno istraživanje Jadranskog mora kao osnova održivog razvitka RH – projekt "JADRAN" | dr.sc. Nenad Smodlaka |
| - Uspostavljanje modela toksikoloških i antitumorskih istraživanja potencijalnih agensa protiv tumora | dr.sc. Krešimir Pavelić |
| - Sustav znanstvenih informacija - podsustav Prirodoslovlje | mr.sc. Jadranka Stojanovski |
| - Hrvatska znanstvena bibliografija - CROSB | mr.sc. Jadranka Stojanovski |
| - Centar za on-line baze podataka | mr.sc. Jadranka Stojanovski |
| - Nelinearnost i deterministički kaos u kardiologiji | dr.sc. Mladen Martinis |

PROJEKTI PRIMJENE INFORMATIČKE TEHNOLOGIJE

- | | |
|--|-----------------------------|
| - Računalno podržana kontrola, automatizacija i udaljeno upravljanje elektrostatskog tandem Van de Graaff akceleratora EN-6 MV | dr.sc. Milko Jakšić |
| - Tko je tko u znanosti u Hrvatskoj | mr.sc. Jadranka Stojanovski |
| - Electronic Journals Online Library | Ivana Pažur |
| - Računalno podržana automatizacija, udaljeno upravljanje i monitoriranje sistema za mjerenje temperaturne ovisnosti vodljivosti i Hall efekta | dr.sc. Branko Pivac |
| - Informacijski portal epidemiološke studije arterijske hipertenzije u Hrvatskoj EH-UH | dr.sc. Tomislav Šmuc |
| - Međunarodni standardi za mjerenje protoka-aktivni mrežni objekti | dr.sc. Ivan Marić |
| - Daljinsko upravljanje procesom i praćenje mjerenja znanstvenog eksperimenta putem mobilne telefonije i-ili Interneta | dr.sc. Mario Stipčević |
| - Mrežni nadzor i IC upravljanje klaster računalom | dr.sc. Karolj Skala |

HITRA

- | | |
|--|------------------------|
| - Izvori svjetlosti za fotodinamičku terapiju tumora | dr.sc. Antun Peršin |
| - Laserski prijenos podataka kroz atmosferu | dr.sc. Karolj Skala |
| - Hrvatska solarna kuća | dr.sc. Natko Urli |
| - Razvoj malih solarnih tehnologija | dr.sc. Natko Urli |
| - Usvajanje i razvoj LPCVD procesa | dr.sc. Mile Ivanda |
| - Razvoj novog tipa elektrokemijskog senzora | dr.sc. Vera Žutić |
| - Potencijalni antitumorski lijekovi | dr.sc. Štefica Horvat |
| - Proizvodnja kožnih presadaka in vitro | dr.sc. Milivoj Boranić |
| - Priprava oligonukleotida | dr.sc. Ivan Habuš |
| - Uspostava servisa za određivanje primarne strukture gena | dr.sc. Vera Gamulin |
| - Razvoj novih analgetskih, antireumatskih i antioksidativnih tvari iz smole ličkog bora | dr.sc. Neven Žarković |
| - Idejno rješenje biotehnološkog postupka za obradu otpadnih voda iz proizvodnje atrazina | dr.sc. Dubravka Hršak |
| - Razvoj adaptivnog tehnološkog postupka priprave taložnog kalcijevog karbonata | dr.sc. Damir Kralj |
| - Grozd/alijansa laboratorija u svrhu pružanja servisnih usluga u zdravlju/studija izvodljivosti | dr.sc. Ivan Habuš |

POPIS UGOVORA ZAKLJUČENIH U 2002. GODINI**KOMERCIJALNI UGOVORI**

Abramić, Marija: Separacija i kvantifikacija biološki aktivnih peptida i njihovih fragmenata nastalih enzimskom hidrolizom, Pliva farmaceutska industrija d.d., Zagreb

Ćosović, Božena: Izrada poglavlja "More" drugog izvješća o stanju okoliša u RH, Ministarstvo zaštite okoliša i prostornog uređenja, Zagreb

Ćosović, Božena: Usluge ovlaštenog referentnog laboratorija u 2002.g., Državna uprava za vode, Zagreb

Horvatinčić, Nada: Raspodijela tricija i stabilnih izotopa u atmosferi na obalnom dijelu Hrvatske, IAEA, Beč, Austrija

Jakšić, Milko: Modularni dizajn komore za analizu ionskim snopovima, IAEA, Beč, Austrija

Klasinc, Leo: Znanstveno stručna suradnja na području masene spektrometrije, Pliva farmaceutska industrija d.d., Zagreb

Lulić, Stipe: Ispitivanje kakvoće voda u svrhu radioloških ispitivanja na pograničnoj rijeci Dunav za 2002.g., Državna uprava za vode, Zagreb

Lulić, Stipe: Mjerenje radioaktivnosti rijeke Dunav i sustavno ispitivanje kakvoće voda rijeke Save u 2002.g., Hrvatske vode, Zagreb

Lulić, Stipe: Radiološki monitoring u okolici NE Krško, Nuklearna elektrana Krško, Krško, Slovenija

Moguš-Milanković, Andrea: Kemijski stabilna željezna fosfatna stakla za vitrifikaciju simuliranog nuklearnog otpada, IAEA, Beč, Austrija

Picer, Mladen: Određivanje odabranih stabilnih organskih zagađivala (PCB, PCDD/P, POCP) u atmosferi i akvatičkim ekosustavima nastalih kao posljedica ratnih razaranja na području bivše Jugoslavije, Europska zajednica

Precali, Robert: Analiza stanja kakvoće priobalnog mora na području od Savudrije do Zadra, Hrvatske vode, Zagreb

Ružić, Ivica: Izrada informacijskog sustava nadzora plovnog puta i objekata sigurnosti plovidbe na rijekama Dunavu i Dravi – Fairway Information System (FIS), Ministarstvo pomorstva, prometa i veza, Zagreb

Subotić, Boris: Izrada materijala za doradu pjeskarenog stakla, Vetropack straža d.d., Hum na Sutli

Šunjić, Vitimir: Metaboliti klortalonila, Vischim S.R.L., Cesano Maderno, Italija

Teskeredžić, Emin: Izvođenje istraživanja zdravstvenog stanja ribljih populacija u izradi stručne studije i procjene stanja (monitoring) ribljeg fonda područja rijeke Save u 2002.g., Ministarstvo poljoprivrede i šumarstva, Zagreb

Teskeredžić, Emin: Bolesti organizama iz voda i njihov utjecaj na ljudsko zdravlje, Grad Zagreb, Gradski ured za poljoprivredu i šumarstvo, Zagreb

Valković, Vladivoj: Detekcija antipješačkih kopnenih mina neutronskim raspršivanjem 14MeV, University of Padova, Department of Physics, Padova, Italija

Vekić, Branko: Provođenje zaštite od ionizirajućih zračenja, Bechtel International, INC., Podružnica u Hrvatskoj, Ogulin

Vekić, Branko: Provođenje zaštite od ionizirajućih zračenja, Sladorana d.d., Županja, Županja

Vekić, Branko: Zaštita od ionizirajućih zračenja u "KB Dubrava" Zagreb, Klinička bolnica "Dubrava", Zagreb

Vekić, Branko: Zaštita od ionizirajućih zračenja, Klinika za infektivne bolesti "dr. Fran Mihaljević", Zagreb

Vikić-Topić, Dražen: Snimanje NMR spektara R0203, Pliva farmaceutska industrija d.d., Zagreb

Zorc, Hrvoje: Osposobljavanje ročnih vojnika za održavanje optičkih instrumenata i ciljanih naprava, Ministarstvo obrane, glavni stožer OS RH, Zagreb

UGOVORI O ZNANSTVENOJ SURADNJI

Andreis, Mladen: Struktura i dinamika interpretiranih polimernih mreža, Inštitut Jožef Stefan, Ljubljana, Slovenija

Kniewald, Goran: Metodološka i kemijska istraživanja okoliša, Nacionalni centar za znanstvena istraživanja CNRS, Francuska

Kniewald, Goran: Razvoj i primjena analitičkih metoda u istraživanju okoliša, Sveučilište Toulon i Var La Garde, Francuska

Kojić-Prodić, Biserka: Funkcionalna organizacija nekovalentnih kompleksa bakterijskih lipaza, Beč, Austrija

Kozarac, Zlatica: Elektrokemijska ispitivanja površinskih mikroslojeva mora, ALIS, Velika Britanija

Kozarac, Zlatica: Istraživanje površinskog mikrosloja mora spektroskopskim metodama, Max-Planck Institute, Göttingen, Njemačka

Maksić, Mirjana: Fotoinducirani prijenos protona u biološki aktivnim molekulama - teorijski studij, Beč, Austrija

Medaković, Davorin: Mineralni sastav i stabilni izotopi u ljušturama školjkaša kao pokazatelj zagađenja, Naravoslovnotehniška fakulteta, Oddelek za geologiju, Ljubljana, Slovenija

Miljanić, Saveta: Unapređenje kvalitete dozimetrije fonskog zračenja u području nGy do kGy, Inštitut Jožef Stefan, Ljubljana, Slovenija

Nöthig-Laslo, Vesna: Studij međudjelovanja biomembrana s amino kiselinama i peptidima, Inštitut Jožef Stefan, Ljubljana, Slovenija

Pifat, Greta: Lipoproteinske interakcije s aktivnim substancama, Institut für Medicinische Chemie und Pregl Laboratorium, Karl-Franzens Universität, Graz, Austrija

Radić, Nikola: Naprezanje u tankim filmovima, Inštitut Jožef Stefan, Ljubljana, Slovenija

Ružić, Ivica: Osnivanje Data GRID centra u SRCE u Zagrebu, FESB – Split, SRCE-Zagreb, PMF-Split, PMF-Zagreb

Ružić, Ivica: Uspostava centra za koordinaciju CRORIS projekta (CPC) na IRB-razvoj informatičkih usluga za riječni promet RIS, Ministarstvo pomorstva, prometa i veza, Zagreb

Salaj-Šmic, Erika: Uloga enzima RecBCD u vijabilnosti bakterija, Institut of Genetics, University of Nottingham, Nottingham, Engleska

Skala, Karolj: Izgradnja eksperimentalne lan/GRID mreže s ciljem razvoja i primjene nove računalno-komunikacijske grid tehnologije fiber optičkih Grid mreža, Elka tvornica električnih kabela d.d., Zagreb

Smrečki, Vilko: Multidimenzijaska spektroskopija nuklearne magnetske rezonancije biomolekula, Institute of Chemistry, Johannes Kepler University. Linz, Austrija

Srzić, Dunja: Istraživanje strukture i prirodnih polimera i kompleksa spektrometrijom mase, Inštitut Jožef Stefan, Ljubljana, Slovenija

Tomić, Sanja: Kombinirani ab initio, molekulska mehanički i molekulska dinamički QSAR pristup biljnim hormonima auksina, Institut za fizikalnu i teorijsku kemiju Tehničkog sveučilišta u Grazu, Austrija

Tomić, Sanja: Uvjeti za odabir, reguliranje i inhibiciju enzima preko kombiniranih analiza, European Media laboratory, Njemačka

UGOVORI O DONACIJAMA I OSTALI UGOVORI

Ćosović, Božena: Ugovor o donaciji, Norweigan College of Fishery from Tomso, Norveška

Desnica, Uroš: Osnivanje multidisciplinarnog centra za izobrazbu kadrova, Sincotrone Trieste Societa Consortile per Azioni-Elletra synchrotron light Laboratory, Trst, Italija

Raspor, Biserka: Ugovor o donaciji, Norwegian Institute for water Research (NIVA), Oslo, Norveška

POS LIJEDIPLOMSKA I DODIPLOMSKA NASTAVA

Akad. god. 2001/02. i 2002/03.

NAVEDEN JE NAZIV KOLEGIJA TE PREDAVAČ, odnosno VODITELJ. Voditelj, odnosno predavač koji nije iz Instituta *napisan je italic SLOVIMA*.

POS LIJEDIPLOMSKA NASTAVA**SVEUČILIŠTE U ZAGREBU****PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET****POS LIJEDIPLOMSKI ZNANSTVENI STUDIJ IZ POLJA FIZIKE*****Smjer: Fizika elementarnih čestica***

EKSPERIMENTALNA FIZIKA VISOKIH ENERGIJA

Predavač: Kadija, K.

ELEMENTARNE ČESTICE II

Predavač: Guberina, B.

GRUPE

Predavač: Meljanac, S.

NUKLEARNA FIZIKA NA SREDNjim ENERGIJAMA

Predavač: Švarc, A.

ODABRANA POGLAVLJA

Predavači: Bilić, N.; Dadić, I.; *Pallua, S.; Tadić, D.*

TEORIJA POLJA

Predavač: Nižić, B.

UVOD U ISTRAŽIVANJA SA SEMINAROM

Predavač: Zovko, N.

Smjer: Nuklearna fizika

DOKTORSKI SEMINAR

Predavač: Miljanić, Đ.

EKSPERIMENTALNE METODE SUBATOMSKE FIZIKE

Predavači: *Furić, M.*; Miljanić, Đ.

NUKLEARNA ENERGIJA

Predavač: Miljanić, Đ.

NUKLEARNE ANALITIČKE METODE

Predavač: Valković, V.

NUKLEARNE REAKCIJE

Predavač: Čaplar, R.

PROCESI I RASPRŠENJA FOTONA S ATOMOM

Predavač: Pisk, K.

RELATIVISTIČKI SUDARI JEZGARA

Predavači: Kadija, K.; Martinis, M.

SEMINAR IZ NUKLEARNE FIZIKE

Predavač: Čaplar, R.

Smjer: Atomska i molekulska fizika**KVANTNA TEORIJA ATOMA I MOLEKULA**

Predavač: Maksić, Z.

MOLEKULSKA FIZIKA II

Predavač: Kirin, D.

Smjer: Geofizika - fizika atmosfere i mora**FIZIKALNA I KEMIJSKA SVOJSTVA MORSKE VODE**

Predavač: Degobbis, D.

Smjer: Biofizika**SPINSKO OZNAČAVANJE U BIOFIZICI**

Predavačica: Ilakovac-Kveder, M.

POSLIJEDIPLOMSKI ZNANSTVENI STUDIJ IZ POLJA KEMIJE**Smjer: Anorganska i strukturna kemija****EKSPERIMENTALNE METODE U KRISTALNOJ STRUKTURNOJ ANALIZI**

Predavači: Gržeta, B.; Nagl, A.

ISTRAŽIVANJE I PRIMJENA ANORGANSKIH MATERIJALA

Predavačica: Moguš-Milanković, A.

KEMIJA ČVRSTOG STANJA

Predavači: Topić, M.; Blažina, Ž.

KRISTALOGRAFIJA

Predavači: Luić, M.; Bermanec, V.

ODABRANA POGLAVLJA U KRISTALNOJ STRUKTURNOJ ANALIZI

Predavačice: Kojić-Prodić, B.; Luić, M.

ODREĐIVANJE KRISTALNE I MOLEKULSKE STRUKTURE DIFRAKCIJSKIM METODAMA

Predavači: Kamenar, B.; Kojić-Prodić, B.; Vicković, I.

TEORIJA GRUPA U KRISTALOGRAFIJI

Predavač: Meljanac, S.

Smjer: Organska kemija**KEMIJA UGLJIKOHIDRATA I GLIKOPROTEINA**

Predavačica: Horvat, Š.

METODE ORGANSKE SINTEZE

Predavačica: Majerski, K.

NUKLEOZIDI I NUKLEINSKE KISELINE

Voditelj: Čaplar, V.

Predavači: Čaplar, V.; Jokić, M.; Katalenić, D.; Žinić, B.

ODNOSI KEMIJSKE STRUKTURE I SVOJSTAVA

Predavač: Sablijić, A.

ORGANSKA STEREOKEMIJA

Predavač: Žinić, M.

PRIMJENA SPEKTROSKOPIJE NMR U ODREĐIVANJU STRUKTURE I DINAMIKE ORGANSKIH I BIOORGANSKIH MOLEKULA

Predavač: Vikić-Topić, D.

REAKCIJSKI MEHANIZMI U ORGANSKOJ KEMIJI

Predavači: Eckert-Maksić, M.; Vančik H.

REAKTIVNI INTERMEDIJARI U ORGANSKOJ KEMIJI

Predavačica: Majerski, K.

STEREOSELEKTIVNA SINTEZA I KATALIZA U ORGANSKOJ KEMIJI

Predavač: Šunjić, V.

SUPRAMOLEKULARNA KEMIJA

Predavač: Žinić, M.

Smjer: Biokemija**MAKROMOLEKULARNA KRISTALOGRAFIJA I MODELIRANJE BIOMOLEKULA**

Predavačice: Kojić-Prodić, B.; Luić, M.; Tomić, S.

METODE SEPARACIJE I KARAKTERIZACIJE BIOMOLEKULA

Predavači: Vitale, Lj.; Mrša, V.

PROTEINI: STRUKTURA I FUNKCIJA – PROTEOLITIČKI ENZIMI

Predavačica: Vitale, Lj.

Smjer: Fizikalna kemija**ELEKTROKEMIJA**

Predavači: Metikoš-Huković, M.; Vuković, M.

FIZIKALNA KEMIJA MAKROMOLEKULA

Predavačica: Vekslj, Z.

KOLOIDNA I POVRŠINSKA KEMIJA

Predavači: Kallay, N.; Musić, S.

KVANTNA KEMIJA

Predavači: Maksić Z., T. Živković

MAGNETSKE REZONANCIJE

Predavač: Andreis, M.

MATEMATIČKA KEMIJA

Predavači: Graovac, A.; Trinajstić, N.

MOLEKULSKA SPEKTROSKOPIJA

Predavači: Cvitaš, T.; Baranović, G.

ODABRANA POGLAVLJA KVANTNE KEMIJE

Voditelj: Cvitaš, T.

Predavači: Cvitaš, T.; Živković, T.

RADIJACIJSKA KEMIJA

Voditelj: Cvitaš, T.

Predavači: Cvitaš, T.; Ražem, D.

RAVNOTEŽA I KINETIKA PROCESA U HETEROGENIM SUSTAVIMA

Predavačica: Brečević, Lj.

Smjer: Analitička kemija**ELEKTROANALITIČKE METODE**

Predavačica: Kozarac, Z.

SPEKTROSKOPSKE METODE STRUKTURNE ANALIZEVoditelj: *Drevenkar, V.*

Predavači: Srzić D., Vikić-Topić D.

UPRAVLJANJE KAKVOĆOM ANALITIČKIH POSTUPAKA

Predavačica: Raspor, B.

VOLTAMETRIJSKA I POLAROGRAFSKA ANALIZA TRAGOVA

Predavači: Branica, M., Čosović, B.

POSLIJEDIPLOMSKI ZNANSTVENI STUDIJ IZ POLJA BIOLOGIJE***Smjer: Molekularna i stanična biologija*****BIOFIZIČKE METODE**

Predavačica: Pifat-Mrzljak, G.

BIOLOGIJA I BIOKEMIJA TUMORSKIH STANICAVoditeljice: *Ban, J.; Sorić, J.*

Predavači: Rubelj, I.; Matulić, M.

BIOLOŠKI UČINCI ZRAČENJA

Predavačica: Ferle-Vidović, A.

GENETIČKA REKOMBINACIJA

Voditeljica: Petranović, M.

Predavači: Petranović, M.; Džidić, S.; Đermić, D.; Zahradka, D.; Zahradka, K.

GENETIKA I EVOLUCIJA MITOHONDRIJA I KLOROPLASTA

Predavač: Fulgosi, H.

KARCINOGENEZA

Predavačica: Osmak, M.

KULTURA ANIMALNIH STANICA

Predavač: Brdar, B.

METODE MIKROSKOPIJE

Predavači: Ljubešić, N.; Weber, I.

MOLEKULARNA BIOLOGIJA ANIMALNIH VIRUSA

Predavač: Brdar, B.

MOLEKULARNA EVOLUCIJA

Predavačica: Gamulin, V.

MOLEKULARNA GENETIKA PROKARIOTA

Voditeljica: Salaj-Šmic, E.

Predavačice: Salaj-Šmic, E.; Lerš, N.

ORGANIZACIJA EUKARIOTSKOG GENOMA

Predavači: Plohl, M.; Ugarković, Đ.

ORGANIZACIJA I FUNKCIJA STANIČNIH STRUKTURA

Predavači: Ljubešić, N.; Krsnik-Rasol, M.

REGULACIJSKI MEHANIZMI BILJNOG RAZVOJAPredavači: *Jelaska, S., Magnus, V.****Smjer: Ekologija*****EKOTOKSIKOLOGIJA**Predavači: *Springer, O.; Lucu, Č.***MODELIRANJE U EKOLOGIJI**

Predavač: Legović, T.

STATISTIČKE METODE U EKOLOGIJI

Predavač: Legović, T.

Smjer: Fiziologija i imunobiologija**BIOLOŠKE METODE U GENETIČKOJ TOKSIKOLOGIJI**Predavačice: *Garaj-Vrhovac, V.*; *Levanat S.***EKSPERIMENTALNA ONKOLOGIJA**Predavač: *Jurin, M.***FOTOBIOLOGIJA**Predavačica: *Poljak-Blaži, M.***NEUROBIOLOŠKI MODELI U ISTRAŽIVANJU MOZGA**Voditelj: *Jernej, B.*; *Čičin-Šain, L.*Predavači: *Jernej, B.*; *Čičin-Šain, L.*; *Mück-Šeler, Đ.***NEUROIMUNOLOGIJA**Voditelj: *Boranić, M.*Predavači: *Balog, T.*; *Boranić, M.*, *Gregurek, R.*; *Koršić, M.*; *Lauc, G.*; *Marotti, T.*; *Mück-Šeler, D.*; *Pivac, N.*; *Sabioncello, A.*; *Stojević, Z.*; *Trkulja, V.***OKSIDATIVNI STRES - FIZIOLOŠKE I PATOFIZIOLOŠKE ZNAČAJKE**Voditelji: *Tatzber, F.*; *Žarković, N.*Predavači: *Borović, S.*; *Čipak, A.*; *Tatzber, F.*; *Žarković, N.***RAZVOJ I DIFERENCIJALIJA LIMFOCITA T**Voditeljica: *Antica, M.*Predavačice: *Antica, M.*; *Kušić, B.*; *Sopta, M.***Smjer : Toksikologija****EKOTOKSIKOLOŠKI UČINCI NA VODENE I KOPNENE ORGANIZME**Predavači: *Britvić, S.*; *Smital, T.***KANCEROGENEZA, MUTAGENEZA, TERATOGENEZA**Predavači: *Osmak, M.*; *Franekić, J.***POSLIJEDIPLOMSKI INTERDISCIPLINARNI ZNANSTVENI STUDIJ IZ OCEANOLOGIJE****ANALITIKA ORGANSKIH ZAGAĐIVALA**Predavač: *Ahel, M.***ATMOSFERA I MORE**Voditelj: *Branica, M.*Predavači: *Cvitaš, T.*; *Klasinc, L.***BIOLOŠKA RAZGRADNJA ORGANSKIH TVARI U MORU**Predavačica: *Hršak, D.***BIOLOŠKI POKAZATELJI IZLOŽENOSTI ZAGAĐIVALIMA**Predavač: *Britvić, S.***BOLESTI RIBA, RAKOVA I ŠKOLJAKA**Predavači: *Teskeredžić, E.*; *Teskeredžić, Z.***DALJINSKA DETEKCIJA PROCESA U MORU**Predavač: *Kuzmić, M.***DALJINSKA DETEKCIJA PROCESA U MORU**Predavač: *Kuzmić, M.***FIZIKALNA KEMIJA MORA I MORSKE VODE**Predavač: *Branica, M.*; *Ćosović, B.*

GEOKEMIJSKE RAVNOTEŽE I PROCESI U MORU

Predavač: Kniewald, G.

IMUNOKEMIJSKE I GENESKE PROBE U AKVATIČKIM ISTRAŽIVANJIMA

Voditelj: Branica, M.

Predavačica: Pokrić, B.

ISHRANA RIBA, RAKOVA I ŠKOLJAKA

Predavačica: Teskeredžić, Z.

ISTRAŽIVANJE PODMORJA RONJENJEM

Predavač: Teskeredžić, E.

KEMIJA MORA

Predavač: Branica, M.

KEMIJSKI OBLICI TRAGOVA METALA U MORU

Predavač: Branica, M.

LASERSKA OPTIKA MORA

Predavač: Risović, D.

METABOLIČKI TRANSPORTNI PROCESI U STANICI

Predavač: Lucu, Č.

METODIKA I TEHNIKA ZNANSTVENOG RADA

Predavač: Ružić, I.

MODELIRANJE EKOLOŠKIH SUSTAVA MORA

Predavač: Legović, T.

OBRADA PODATAKA U OCEANOLOGIJI

Predavač: Ružić, I.

OBRADA VREMENSKIH NIZOVA U OCEANOGRAFIJUPredavači: Kuzmić, M.; *Pasarić, Z.***OKSIDOREDUKCIJSKI PROCESI U MORU**

Predavačice: Žutić, V.; Svetličić, V.

ORGANOMETALNI SPOJEVI U HIDROSFERI

Predavačica: Mikac, N.

ORGANSKA TVAR U MORU

Predavačice: Čosović, B.; Žutić, V.

POVRŠINSKI AKTIVNE TVARI U VODENIM SUSTAVIMA

Predavačica: Čosović, B.

PRIMARNA PROIZVODNJA ORGANSKE TVARI I HRANJIVE SOLI U MORU

Predavač: Degobbis, D.

SUDBINA ZAGAĐENJA U PRIRODNIM VODAMA

Predavač: Ružić, I.

TALOŽENJE I ADSORPCIJSKI PROCESI U MORU

Predavač: Bilinski, H.

TEHNOLOGIJA UZGOJA - AKVAKULTURA/MARIKULTURAPredavači: Teskeredžić, E.; *Katavić, I.***TRAGOVI ELEMENATA U MORSKOJ VODI, SEDIMENTIMA I MORSKIM ORGANIZMIMA**

Predavač: Branica, M.

POSLIJEDIPLOMSKI ZNANSTVENI STUDIJ IZ POLJA GEOLOGIJE**ODREĐIVANJE KRISTALNE STRUKTURE DIFRAKCIJOM RENDGENSKIH ZRAKA**

Predavačice: Kojić-Prodić, B.; Luić, M.

RENDGENSKE I TERMIČKE METODE ANALIZEPredavači: *Tibljaš, D.*; Trojko, R.

TERMODINAMIKA U MINERALOGIJI I GEOKEMIJI

Predavač: Kniewald, G.

MEDICINSKI FAKULTET**ZNANSTVENI POSLIJEDIPLOMSKI STUDIJ****EKSPERIMENTALNA NEUROPATOLOGIJA - OKSIDATIVNI STRES SREDIŠNJEG ŽIVČANOG SUSTAVA U STANJIMA UPALE, ISHEMIJE I TRAUME**

Voditelj: Žarković, N.

Predavači: Borović, S.; Čipak A., Žarković N.

EKSPERIMENTALNA ONKOLOGIJA I ULOGA SLOBODNIH RADIKALAVoditelji: *Poli G., Schaur RJ., Žarković N.*

Predavači: Borović S., Čipak A., Žarković N.

GENETSKA OSNOVA I NOVE DIJAGNOSTIČKE METODE MONOGENSKIH MIŠIĆNIH I ŽIVČANIH BOLESTIVoditeljica: *Canki-Klain N.*

Predavači: Knežević J., Pavelić J., Pavelić K.

GENETSKA OSNOVA NOVOTVORINAVoditeljica: *Šarčević B.*

Predavačice: Gall-Trošelj K., Pavelić J.

HUMANA REPRODUKCIJA I GINEKOLOŠKA ENDOKRINOLOGIJAVoditelj: *Šimunić V.*

Predavačica: Pavelić J.

KARCINOGENEZA I PREVENCIJA TUMORA

Voditelj: Boranić M.

Predavači: Boranić M., Poljak Blaži M.

KLINIČKA ONKOLOGIJA

Voditelj: Boranić M.

Predavači: Boranić M., Poljak-Blaži M.

LIJEČENJE KARCINOMA PROBAVNE CIJEVIVoditelj: *Roth A.*

Predavači: Pavelić J., Pavelić K.

MOLEKULARNA ONKOLOGIJA

Voditelj: Pavelić K.

Predavačice: Čačev T., Gall-Trošelj K., Grce M., Herak Bosnar M., Husnjak K.,

Kapitanović S., Knežević J., Kralj, M., Kušić B., Pavelić J., Pavelić K.

PSIHONEUROIMUNOLOGIJA

Voditelj: Boranić M.

Predavači: Balog T., Boranić M., *Koršić M., Lauc G., Marotti T., Mück-Šeler D., Pivac N.,**Rabatić S., Trkulja V.***ZNANSTVENI PRISTUP HIPOGLIKEMIČNIM STANJIMA**Voditelji: *Čabrijan T., Zjačić-Rotkvić V.*

Predavač: Pavelić K.

POS LIJEDIPLOMSKI STRUČNI STUDIJ IZ KLINIČKE FARMAKOLOGIJE

KLINIČKA FARMAKOLOGIJA S TOKSIKOLOGIJOM

Voditelj: *Lacković Z.*

Predavačica: *Pavelić J.*

POS LIJEDIPLOMSKI STRUČNI STUDIJ IZ KLINIČKE KOLPOSKOPIJE

ZNAČENJE KOLPOSKOPIJE U RANOJ DIJAGNOZI PREINVAZIVNIH LEZIJA

EPITELA VRATA MATERNICE I DONJEG GENITALNOG TRAKTA

Voditelj: *Grubišić G.*

Predavačica: *Grce M.*

POS LIJEDIPLOMSKI STRUČNI STUDIJ IZ KLINIČKE ONKOLOGIJE

KARCINOGENEZA I PREVENCIJA TUMORA

Voditelj: *Boranić M.*

Predavači: *Boranić M., Brdar B., Fučić A., Garaj-Vrhovac V., Osmak M., Poljak-Blaži M., Šošić Z.*

MOLEKULSKA GENETIKA RAKA

Voditelj: *Pavelić K.*

Predavači: *Čačev T., Gall-Trošelj K., Grce M., Husnjak K., Kapitanović S., Kušić B., Pavelić J., Pavelić K.*

RADIOBIOLOGIJA TUMORA

Predavačica: *Ferle-Vidović A.*

POS LIJEDIPLOMSKI STRUČNI STUDIJ IZ KLINIČKE OFTALMOLOGIJE

KLINIČKA IMUNOLOGIJA U OFTALMOLOGIJI

Voditelj: *Šikić, J.*

Predavač: *Jurin, M.*

POS LIJEDIPLOMSKI STRUČNI STUDIJ IZ KLINIČKE CITOLOGIJE

MOLEKULSKA BIOLOGIJA U CITOLOGIJI

Voditeljice: *Audy-Jurković S., Pavelić J.*

Predavačice: *Gall-Trošelj K., Pavelić J.*

PRINCIPI MIKROSKOPSKE TEHNIKE

Predavač: *Ljubešić, N*

POS LIJEDIPLOMSKI STRUČNI STUDIJ IZ KLINIČKE PEDIJATRIJE

MOLEKULARNA MEDICINA ZA PEDIJATRE

Predavačica: *Pavelić J.*

POS LIJEDIPLOMSKI STRUČNI STUDIJ IZ DERMATOVENEROLOGIJE

AKTINOTERAPIJA U DERMATOLOGIJI

Voditelj: *Krajina Z.*

Predavač: *Pivac B.*

MEĐUNARODNI POSLIJEDIPLOMSKI TEČAJ TRAJNOG USAVRŠAVANJA LIJEČNIKA

ULTRAZVUK U GINEKOLOGIJI I FETALNOJ MEDICINI

Voditelji: *Podobnik M., Ciglar S., Ivanišević M., Škrablin S.*

Predavačica: Matovina M.

STOMATOLOŠKI FAKULTET

MOLEKULARNA GENETIČKA ISTRAŽIVANJA NASLJEDNIH POREMEĆAJA KERATINIZACIJE I MALIGNIH TUMORA SLUZNICE KOŽE

Voditeljica: *Šitum M.*

Predavačica: Levanat S.

FARMACEUTSKO-BIOKEMIJSKI FAKULTET

POSLIJEDIPLOMSKI STUDIJ MEDICINSKE BIOKEMIJE

MOLEKULSKA MEDICINA

Voditelj: *Pavelić K.*

Predavači: *Čačev T., Gall-Trošelj K., Husnjak K., Knežević J., Pavelić J., Pavelić K.*

MOLEKULSKA PATOFIZIOLOGIJA SINAPTIČKE TRANSMISIJE

Predavač: *Jernej B.*

ODABRANA POGLAVLJA KLINIČKE BIOKEMIJE

Voditeljica: *Čepelak I.*

Predavačica: *Poljak-Blaži M.*

AGRONOMSKI FAKULTET U ZAGREBU

POSLIJEDIPLOMSKI STUDIJ IZ RIBARSTVA

ANATOMIJA, FIZIOLOGIJA I EMBRIOLOGIJA RIBA

Predavačica: *Teskeredžić, Z.*

HIDROBIOLOGIJA

Predavačica: *Tomec, M.*

IHTIOHEMATOLOGIJA

Predavačica: *Čož Rakovac, R.*

POSLIJEDIPLOMSKI STUDIJ STOČARSTVA, MLJEKARSTVA I PČELARSTVA

EKOLOGIJA U POLJOPRIVREDI

Predavač: *Barišić, D.*

FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE

POSLIJEDIPLOMSKI STUDIJ INŽENJERSKE KEMIJE

ELEKTROKATALIZA I KONVERZIJA ENERGIJE-STABILNOST ELEKTRODNIH MATERIJALA

Predavač: *Vuković, M*

MORFOLOŠKA STRUKTURA POLIMERNIH MATERIJALA

Predavač: Šmit, I.

RADIJACIJSKA KEMIJA I TEHNOLOGIJA POLIMERA

Predavač: Ranogajec, F.

RELAKSACIJSKI PROCESI U POLIMERIMA

Voditeljica i predavačica: Veksli, Z.

SPEKTROSKOPSKE METODE U ISTRAŽIVANJU KOROZIJE I ZAŠTITE MATERIJALA

Predavač: Musić S.

VOLTAMETRIJSKE NANOMETODE U ISTRAŽIVANJU OKOLIŠA

Predavačica: Čosović, B.

VETERINARSKI FAKULTET**POSLIJEDIPLOMSKI ZNANSTVENI STUDIJ VETERINARSKE MEDICINE*****Smjer: Opći izborni*****MOLEKULSKA BIOLOGIJA STANICE**Voditelj: *Valpotić I.*Predavači: *Valpotić I.*, Grdiša M.**POREDBENA BIOKEMIJA**

Predavačica: Grdiša M.

Smjer: Higijena i tehnologija namirnica životinjskog podrijetla**BIOFIZIKA I INSTRUMENTALNA TEHNIKA**

Predavač: Rakvin, B.

FAKULTET ELEKTROTEHNIKE I RAČUNARSTVA**POSLIJEDIPLOMSKI STUDIJ RAČUNARSTVA****METODE PREDSTAVLJANJA ZNANJA U INFORMACIJSKIM SUSTAVIMA**

Predavač: Bogunović, N.

ODABRANA POGLAVLJA FIZIKE POLUVODIČA

Predavač: Pivac B.

OTKRIVANJE ZNANJA U SKUPOVIMA PODATAKAPredavači: Bogunović, N., *Dalbelo Bašić, B.***PROGRAMIRLJIVI LOGIČKI SKLOPOVI**Predavači: Skala, K., *Butković D.***GRAFIČKI FAKULTET****POSLIJEDIPLOMSKI STUDIJ GRAFIČKOG INŽENJERSTVA****HIPERMEDIJSKI SUSTAVI**

Predavač: Skala, K.

OPTOELEKTRONIČKI ZAPIS PODATAKA

Predavač: Skala, K.

INTERDISCIPLINARNI POSLIJEDIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ IZ VOĐENJA I UPRAVLJANJA POKRETNIM OBJEKTIMA

FIZIKALNE OSNOVE SENZORA

Predavač: Lugomer S.

SENZORI SUSTAVA UPRAVLJANJA I NAVOĐENJA

Predavač: Risović D.

SVEUČILIŠTE U RIJECI

MEDICINSKI FAKULTET

POSLIJEDIPLOMSKI ZNANSTVENI STUDIJ «BIOMEDICINA»

ELEMENTI TEORIJSKE BIOLOGIJE

Voditelj: Trinajstić N.

Predavači: Nikolić S., Štambuk N.

ETIKA ZNANSTVENOG RADA

Voditelj: Šegota I.

Predavačica: Šuman L.

HUMANA GENETIKA

Voditeljica: *Radojčić-Badovinec A.*

Predavačica: Pavelić J.

ISTRAŽIVANJA I PRIMJENA NOVIH MATERIJALA U MEDICINI

Predavačica: Mogoš-Milanković, A.

METODOLOGIJA ZNANSTVENOG RADA

Voditelj: *Simonić, A.*

Predavači: Nikolić, S., Trinajstić, N.

MOLEKULARNA ONKOLOGIJA

Predavačica: Pavelić J.

MOLEKULSKA BIOLOGIJA

Voditeljica: *Radojčić-Badovinec A.*

Predavačica: Pavelić J.

SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU I INSTITUT "RUĐER BOŠKOVIĆ"

POSLIJEDIPLOMSKI SVEUČILIŠNI INTERDISCIPLINARNI ZNANSTVENI STUDIJ IZ ZAŠTITE PRIRODE I OKOLIŠA

ANALITIKA ORGANSKIH I ANORGANSKIH ZAGAĐIVALA

Predavači: Ahel, M., Mikac, N.

BIOTEHNOLOGIJA U ZAŠTITI OKOLIŠA

Predavačica: Hršak, D.

EKOTOKSIKOLOGIJA

Predavači: Krča, S., Smital, T.

ELEKTROKEMIJSKE METODE ANALIZE OKOLIŠA

Predavači: Kozarac, Z., Šeruga, M.

FIZIČKO-KEMIJSKI PROCESI U OKOLIŠUVoditelj: *Merdić, E.*Predavač: *Filipović-Vinceković, N.***GENOM I OKOLIŠ**Predavači: *Plohl, M., Ugarković, Đ.***INTERAKCIJA BILJNE STANICE I OKOLIŠA**Predavač: *Ljubešić, N.***KEMIJA OKOLIŠA**Predavačica: *Čosović, B.***MIKROBIOLOGIJA OKOLIŠA**Predavačica: *Hršak, D.***MODELIRANJE I OPTIMALNO UPRAVLJANJE OKOLIŠEM**Predavač: *Legović, T.***OSIGURANJE KAKVOĆE ISPITNIH POSTUPAKA**Predavačica: *Raspor, B.***RADIOEKOLOGIJA**Predavač: *Lulić, S.***STATISTIKA ZA OKOLIŠ**Predavač: *Legović, T.***SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU****MEDICINSKI FAKULTET****ZNANSTVENI POSLIJEDIPLOMSKI STUDIJ BIOMEDICINE I ZDRAVSTVA****EKSPERIMENTALNA ONKOLOGIJA**Voditelj: *Jurin, M.*Predavači: *Jurin, M., Ivanković, S.***INTERAKCIJE ŽIVČANOG I IMUNOSNOG SUSTAVA**Voditelj: *Boranić M.*Predavači: *Boranić M., Koršić M., Lauc G., Mandić N., Trkulja V.***MOLEKULARNA MEDICINA**Voditeljica: *Pavelić J.*Predavačice: *Knežević J., Pavelić J.***SIGNALNE MOLEKULE KAO MJESTO DJELOVANJA LIJEKOVA**Voditelj: *Tvrdeić A.*Predavačice: *Mück-Šeler D., Poljak Lj., Tvrdeić A.***SUVREMENI PRISTUP UROLITIJAZI**Voditelj: *Tučak A.*Predavači: *Fűredi-Milhofer H., Karner I., Babić-Ivančić V., Cvijetić S., Galić J., Ugrai V., Valek M., Šerić V., Kalem T., Vagner J., Peljhan V., Cetina N., Kuveždić H., Prlić D.***UVOD U ZNANSTVENI RAD**Voditelj: *Boranić M.*Predavači: *Boranić M., Buneta Z., Barbić J., Ilakovac V., Vitale B.*

DODIPLOMSKA NASTAVA**SVEUČILIŠTE U ZAGREBU****PRIRODOSLOVNO MATEMATIČKI FAKULTET****FIZIČKI ODSJEK**

ENERGETIKA

Predavač: Miljanić Đ.

ODABRANA POGLAVLJA OPTIKE

Predavač: Furić K.

SEMINAR IZ ODABRANIH POGLAVLJA OPTIKE

Predavač: Furić K.

KEMIJSKI ODSJEK

FIZIKALNA KEMIJA

Predavač: Cvitaš, T.

KEMIJSKA KINETIKA

Predavač: Cvitaš, T.

KVANTNA KEMIJA

Voditelj: Cvitaš, T.

Predavači: Cvitaš, T.; Živković, T.

MATEMATIČKE METODE U KEMIJI

Voditelj: Klasinc, L.

Predavači: Klasinc, L., Živković, T.

METODE SINTEZE U ORGANSKOJ KEMIJI

Predavač: Šunjić, V.

MOLEKULSKA SPEKTROSKOPIJA

Predavač: Cvitaš, T.

PRAKTIKUM NA ELEKTRONIČKOM RAČUNALU

Predavačica: Pižeta, I.

SIMetriJA U KEMIJI

Predavač: Maksić Z.

STRUKTURA I SVOJSTVA POLIMERA

Predavačica: Vekslj, Z.

VJEŽBE IZ KVANTNE KEMIJE

Voditeljica: Došlić, N.

BIOLOŠKI ODSJEK

ANALITIČKA KEMIJA

Predavač: Ahel, M.

BIOLOGIJA STANICE – PRAKTIKUM

Voditelj: Ljubešić, N.

Predavačica: Prebeg, T.

BIOLOGIJA STANICE

Voditeljica: *Krsnik-Rasol, M.*

Predavači: Antica, M., Ljubešić, N., Rubelj, I.

KULTURA ANIMALNIH STANICAVoditeljica: *Ban J*

Predavačica: Matulić M

MATEMATIČKE METODE U EKOLOGIJI

Predavač: Legović, T.

MEHANIZMI STANIČNE DIFERENCIJACIJE

Predavačica: Antica M.

MEMBRANE

Predavačica: Ilakovac-Kveder, M.

METODE ISTRAŽIVANJA U MOLEKULARNOJ BIOLOGIJIVoditeljice: *Nagy B.*, *Pavelić J.*

Predavači: Brdar B.; Mikoč, A.; Čačev T., Gall-Trošelj K., Herak Bosnar M., Husnjak K., Kralj, M., Pavelić J.

MOLEKULARNA BIOFIZIKA

Predavačica: Pifat-Mrzljak, G.

MOLEKULARNA GENETIKA

Predavačica: Salaj-Šmic, E.

OSNOVE FIZIKALNE KEMIJE

Predavačica: Kovač, B.

POPULACIJSKA GENETIKAVoditeljica: *Papeš, D.*

Predavač: Brčić-Kostić, K

SOFTVER U BIOLOGIJI

Predavač: Legović, T.

UVOD U ELEKTRONSKU MIKROSKOPIJU

Voditelj: Ljubešić, N

Predavači: Ljubešić, N; Prebeg, T.

GEOLOŠKI ODSJEK**GEMOLOGIJA**Predavači: Kniewald, G., *Bermanec, V.***MEDICINSKI FAKULTET****TEMELJI NEUROZNANOSTI**Voditelj: *Kostović I.*

Predavač: Jernej B.

STOMATOLOŠKI FAKULTET**MATERIJALI U STOMATOLOGIJI**Voditelj: *Jerolimov V.*

Predavačica: Mogoš-Milanković, A.

VETERINARSKI FAKULTET**FIZIKA I BIOFIZIKA**

Predavač: Rakvin, B.

OSNOVE FIZIKE ZA DIJAGNOSTIČKE METODE

Predavač: Rakvin, B.

VJEŽBE IZ FIZIKE

Voditeljica: Žilić, D.

FAKULTET ELEKTROTEHNIKE I RAČUNARSTVA

DIGITALNI SUSTAVI

Predavač: Bogunović, N.

FORMALNI POSTUPCI U OBLIKOVANJU RAČUNALNIH SUSTAVA

Predavač: Bogunović, N.

OPTIČKE KOMUNIKACIJSKE MREŽE

Predavači: Šipuš, Z. Medved Rogina, B.

TEHNIKE EKSPERTNIH SUSTAVA

Predavač: Bogunović, N.

FARMACEUTSKO-BIOKEMIJSKI FAKULTET

FIZIOLOGIJA S OSNOVAMA ANATOMIJE

Predavač: Hršak, I.

HUMANA GENETIKA

Predavači: Petranović, M.; Zahradka, D., Zahradka, K.

MOLEKULARNA BIOLOGIJA

Voditelj: Pavelić K.

Predavači: Pavelić J., Pavelić K.

PATOLOGIJA

Predavač: Jurin, M.

BILOGIJA TUMORSKE STANICE I TUMORSKI BILJEZI

Predavač: Jurin, M.

PREHRAMBENO BIOTEHNOLOŠKI FAKULTET

EKOGENETIČKE STUDIJE

Predavačice: *Franekić, J.*; Vujaklija, D.

FIZIOLOGIJA INDUSTRIJSKIH MIKROORGANIZAMA

Voditelj: *Novak, S.*

Predavačica: Vujaklija, D.

INSTRUMENTALNA ANALIZA NAMIRNICA

Voditelji: *Rapić, V. i Grabarić, B.*

Predavač: Habuš, I.

METODE SEPARACIJE I ANALIZE PROTEINA

Voditelj: *Mrša, V.*

Predavači: *Mrša, V.*, Vitale, Lj.

MOLEKULARNI MEHANIZMI I UZROČNICI NASLIJEDNIH PROMJENA

Voditeljica: *Franekić, J.*

Predavačica: Vujaklija, D.

PRIPRAVA, ANALIZA I PRIMJENA NUKLEOTIDA

Predavač: Habuš, I.

TEKSTILNO-TEHNOLOŠKI FAKULTET

FIZIKA

Predavač: Martinis M.

GRAFIČKI FAKULTET

OPTOELEKTRONIČKI SUSTAVI

Predavač: Skala, K.

AKADEMIJA LIKOVNIH UMJETNOSTI

Odsjek za restauriranje umjetnina

INSTRUMENTALNA ANALIZA I. I II.

Predavačica: Kojić-Prodić, B.

INSTRUMENTALNE METODE

Predavač: Kirin D.

IZABRANA PODRUČJA BIOLOGIJE

Voditeljica: Poljak-Blaži M.

Predavači: Ljubešić N., Poljak-Blaži M.

VISOKA POLICIJSKA ŠKOLA U ZAGREBU.

POLICIJSKA AKADEMIJA

POLICIJSKA OPERATIVNA TEHNIKA

Predavači: Medved Rogina, B.; Posavec B.

VISOKA ZDRAVSTVENA ŠKOLA

KEMIJSKA TOKSIKOLOŠKA ANALIZA

Predavač: Vikić-Topić, D.

VARAŽDIN

VISOKA ELEKTROTEHNIČKA ŠKOLA U VARAŽDINU

DODIPLOMSKI STUDIJ ELEKTROTEHNIKE

FIZIKA

Predavač: Car T.

TEHNIČKA MEHANIKA

Predavač: Car T.

SVEUČILIŠTE U RIJECI

MEDICINSKI FAKULTET

BIOKEMIJA

Voditelj: Varljen, J.

Predavač: Valić, S.

FIZIČKA KEMIJA

Predavač: Valić, S.

FIZIKA

Predavač: Ljubičić A.

INSTRUMENTALNE METODE

Voditelj: *Varljen, J.*

Predavač: Valić, S.

KEMIJA

Voditelj: *Rupčić, J.*

Predavač: Valić, S.

ODABRANA POGLAVLJA KEMIJE POLIMERA

Predavač: Valić, S.

DODIPLOMSKI STUDIJ ZA SANITARNE INŽENJERE

KEMIJA OKOLIŠA

Predavač: Kniewald, G.

SVEUČILIŠTE U SPLITU

**FAKULTET PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKIH ZNANOSTI I ODGOJNIH
PODRUČJA**

STUDIJ BIOLOGIJE I KEMIJE

ANORGANSKA KEMIJA

Predavač: Graovac, A.

KEMIJSKO-TEHNOLOŠKI FAKULTET

STUDIJ KEMIJSKE TEHNOLOGIJE

IONIZIRAJUĆE ZRAČENJE U BIOSFERI

Predavač: Ražem, D.

SVEUČILIŠNI STUDIJ MORA I POMORSTVA

OSNOVE EKOLOŠKOG MODELIRANJA

Predavač: Legović, T.

SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU

PEDAGOŠKI FAKULTET

BIOSTATISTIKA

Predavač: Legović T.

DIGITALNE KNJIŽNICE

Predavačica: Stojanovski, J.

EVOLUCIJA GENOMA

Predavač: Fulgosi, H.

FIZIKALNA KEMIJA

Voditelj: *Šuveljak Žuljević, B.*

Predavačica: Kovač, B.

GENETIČKO INŽENJERSTVO

Predavač: Fulgosi, H.

KVANTITATIVNE BIOLOGIJA

Predavač: Legović T.

OSNOVE RADIOKEMIJE I RADIJACIJSKE KEMIJE

Voditelj: *Šuveljak Žuljević, B.*

Predavačica: Bonifačić, M.

MEDICINSKI FAKULTET

ONKOLOGIJA

Voditelj: *Krajina, Z.*

Predavač: Jurin, M.

PEDIJARIJA

Voditelj: Boranić M.

Predavači: *Aberle N., Blašković-Kokeza J., Boranić M., Konja J., Mandić Z., Milas V.*

DODIPLOMSKI STUDIJ U INOZEMSTVU

SVEUČILIŠTE U MOSTARU

MEDICINSKI FAKULTET

ONKOLOGIJA

Voditelj: *Vrdoljak, E.*

Predavač: Jurin, M.

PATOFIZIOLOGIJA

Voditelj: *Gamulin S.*

Predavači: Boranić M., *Bota M.*

PEDIJARIJA

Voditelj: Boranić M.

Predavači: *Barišić I., Boranić M., Saraga M., Marinović B., Škrabić V.*

KOLOKVIJI INSTITUTA "RUĐER BOŠKOVIĆ"

3. travanj, dr. sc. **Danijel Đurek**, AVAC, Zagreb: Hipervodljivost-nanovodljivost-supravodljivost
22. listopad, dr. sc. **Branko Tomažič**, American Dental Association at NIST, Gaithersburg, Maryland, SAD: Fizičko-kemijska načela kardiovaskularne kalcifikacije
13. studeni, prof. dr. sc. **Vladimir Muljević**, Fakultet elektrotehnike i računarstva, Sveučilište u Zagrebu: Uloga elektrotehnike u kulturi Hrvatske
26. studeni, *Kolokvij Hrvatskog kemijskog društva i Instituta "Ruđer Bošković"*, prof. **Joel F. Liebman**, Department of Physical Chemistry, University of Maryland, Baltimore, SAD: Regularities in fluorine chemistry
4. prosinac, dr. sc. **Danica Prpić-Majić**, delegat Hrvatskog toksikološkog društva u Poslovnom vijeću EUROTOX-a: EUROTOX-2006. KONGRES U HRVATSKOJ (Cavtat 20.-24.9.2006.)

KOLOKVIJI I SEMINARI GOSTUJUĆIH PREDAVAČA

16. siječanj, *Seminar Grupe ze lipoproteine*, **Martina Mijušković**, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb: Arhealna aminoacil-tRNA sintetaza
17. siječanj, *Seminar Zavoda za molekularnu medicinu*, prof. dr. **Igor Čatić**, Katedra za preradu polimera, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb: Nanotehnika - povezivanje dviju čovjekovih tehnika
23. siječanj, *Kolokvij Knjižnice*, prof. dr. sc. **Tatjana Aparac-Jelušić**, Filozofski fakultet, Katedra za biblotekarstvo, Zagreb: Prevođenje u zvanja - korak naprijed ili dva koraka natrag?
6. veljače, *Seminar Grupe ze lipoproteine*, dipl. ing. **Ivica Miloš**, Biomax-Biorad: Prezentacija Proteomix i sistema za analizu proteina tvrtke Biorad
15. veljače, dr. sc. **Helmut Weber**, Austron, Beč, Austrija: AUSTRON, the Central European Spallation Source
20. veljače, *Seminar Grupe ze lipoproteine*, dr. sc. **Dunja Muačević-Katanec**, "Vuk Vrhovec", Zagreb: Terapijski ciljevi u liječenju hiperlipiddermije
26. veljače, *Kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša*, **Ketil Hylland**; Norwegian Institute for Water Research (NIVA), Oslo, Norveška: Biological effects monitoring: past, present and future
27. veljače, *Kolokvij Knjižnice*, prof. dr. sc. **Igor Gliha**, Pravni fakultet, Zagreb: Autorsko pravo u digitalnom okružju

4. ožujak, Mr **Tony Mayer**, Head of Secretary General's Office and Scientific networks Coordination, *European Science Foundation*: European Science Foundation: Benefits and Opportunities
6. ožujak, *Seminar Grupe ze lipoproteine*, dr. sc. **Nada Vrkić**, KB "Sestre milosrdnice", Zagreb: Klinička ispitivanja povezanosti lipidnog metabolizma i kardiovaskularnih bolesti
11. ožujak, PhD Prof. **Sepp D. Kohlwein**, Department of Molecular Biology, Biochemistry and Microbiology SFB Biomembrane Research Center University Graz, Austrija: Lipid droplets in yeast: trash box or active metabolic compartment
12. ožujak, *Sastanak Hrvatskog imunološkog društva i znanstvena tribina*, dr. **Anthony A. Scalzo**, Department of Microbiology, University of Western Australia, Nedlands, Australia: How the NK gene complex (NKC) contributes to control of herpesvirus and poxvirus infections
13. ožujak, *Seminar Grupe ze lipoproteine*, **Marija Raguž**, dipl. inž., Medicinski fakultet, Mostar: Flouescencija u biološkim sustavima
15. ožujak, *Zajednički kolokvij Hrvatskog biofizičkog društva i Grupe za teorijsku kemiju povodom Tjedna mozga*, dr. sc. **Dražen Domijan**, Odjel za psihologiju, Filozofski fakultet, Sveučilište u Rijeci: Neuronske mreže za modeliranje kognitivnih i perceptivnih procesa
20. ožujak, *Seminar Grupe ze lipoproteine*, **Violeta Čalić**, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb: LDL+heparin / diskusija rezultata
20. ožujak, *Kolokvij Knjižnice*, dipl. ing. **Kristijan Zimmer**, Fakultet elektrotehnike i računarstva, Zagreb: Kako sustav upravljanja Web-om može unaprijediti djelatnosti akademske ustanove?
26. ožujak, *Seminar Zavoda za fizičku kemiju*, prof. **Detlev Möller**, Brandenburg Technical University Cottbus, Njemačka: Trends and variation in tropospheric ozone at Mt. Brocken/Germanya
8. travanj, *Seminar Laboratorija za biološku i kemijsku kristalografiju*, Prof. dr. **Michael Ramek**, head of the Quantum Chemistry Group at the Institute of Physical and Theoretical Chemistry, Graz University of Technology: Colour Blindness and Colour Perception in the Age of the Internet
- 11-12. travanj, *Dvodnevni seminar MZT-a o pisanju i vođenju Framework projekata*, (6. okvirni program europske komisije), dr. **Sean McCarthy**, Hyperion Ltd. Cork, Irska: "How to write a Competitive Proposal for the EU R&D Framework Programme" i "How to Negotiate, Manage, Administer and Finish an EU R&D Contract"

17. travanj, *Kolokvij Hrvatskog biofizičkog društva*, dr. sc. **Darko Černe**, Klinički centar Ljubljana, Slovenija: Proučavanje povezanosti količine sijalične kiseline u lipoproteinima male gustoće i razvoja ateroskleroze srčanih i karotidnih arterija
18. travanj, *12 kolokvij Hrvatskog društva za teorijsku i matematičku biologiju*, prof. dr. sc. **Zvonimir Šikić**, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb: (I)relevantnost logike za problem duha i tijela
30. travanj, *Seminar Zavoda za molekularnu medicinu*, dr. **Tatjana Tudyka** (Account Manager Croatia, Italy, Germany), Affymetrix, SAD: Introduction in the Affymetrix Technology; dr. **Fiona Brew** (Field Application Specialist Manager), Affymetrix, SAD: Affymetrix GeneChipTechnology, Applications in Cancer and Targer Discovery
14. svibanj, dr. sc. **Ivo Derado**, Max-Planck Institut fuer Physik, Muenchen: Kvantni kompjutor - status i perspektive
14. svibanj, *Zajednički kolokvij NMR centra IRB-a i Sekcije za opću i primjenjenu spektroskopiju Hrvatskog kemijskog društva*, prof. dr. sc. **Vladimir Sklenar**, National Centre for Biomolecular Research, Faculty of Science, Masaryk University, Brno: NMR in Structural Biology
15. svibanj, *Kolokvij Knjižnice*, **Miroslav Milinović**, dipl. ing., Sveučilišni računski centar, Zagreb: Što je GRID?
16. svibanj, *Kolokvij Grupe za teorijsku kemiju*, dr. sc. **Elinor Dumanić**, Institut građevinarstva, Zagreb: Bose-Einsteinov efekt
16. svibanj, Dr. sc. **R. A. Mashelkar**, F.R.S. Director General, Council of Scientific & Industrial Research, and Secretary, Department of Scientific & Industrial Research, New Delhi, India CSIR 2001: Vision & Strategy
16. svibanj, *13. kolokvij Hrvatskog društva za teorijsku i matematičku biologiju*, dr. sc. **Pavle Goldstein**, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb: Markovljevi modeli i prepoznavanje strukture proteina
17. svibanj, *Zavod za molekularnu medicinu IRB-a i Hrvatsko-austrijsko društvo, tematsko predavanje o prenosivim spongiformnim encefalopatijama (BSE i sl.)*, **Herwig E. Reichl**, Haemosan Life Science Services, Ilz, Austrija: Detection of low levels of PrP immunoreactivity in blood
23. svibanj, *Kolokvij Zavoda za fiziku materijala*, prof. dr. **Maurizio Ferrari**, CNR-Instituto di Fottonica e nanotechnologie, Consiglio Nazionale delle Ricerche - Istituto di Fottonica e Nanotechnologie, Trento, Caratterizzazione e Sviluppo di Materiali per la Fottonica e

l'Optoelettronica, Trento, Italija : Research on oxide and advanced glasses for photonics at the CNR-IFN

29. svibanj, *Kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša*, prof. dr. sc. **Fritz Scholz**, Sveučilište u Greifswaldu, Njemačka: Coupling of Ion and Electron Transfer at Three-Phase Electrodes

7. lipanj, *HDKI i Zavod za istraživanje mora i okoliša IRB, Dan elektrokemije*:

dr. sc. **Stane Pejovnik**, Kemijski Institut, Ljubljana, Slovenija: Designing of electrode properties in Li ion batteries by surface modification using polyelectrolytes

dr. sc. **Milorad Milun**, Institut za fiziku Sveučilišta u Zagrebu: Nano - znanost i nanotehnologije

11. lipanj, *Zajednički kolokvij Grupe za teorijsku kemiju IRB-a i Matematičkog odjela PMF-a*, prof. dr. sc. **Tomaž Pisanski**, IMFM, Ljubljana: The Remetinec Gothic Church and Kaleidoscope Graphs

11. lipanj, *Zajednički seminar zavoda za teorijsku fiziku, Zavoda za eksperimentalnu fiziku IRB-a i Zavoda za teorijsku fiziku PMF-a*, prof. dr. sc. **Andras Patkos**, Eotvos University, Budimpešta, Mađarska: Spectral enhancement at the sigma-2pi in strong matter

19. lipanj, *Kolokvij Računalnog centra*, dr. sc. **Syd Chapman**, Engleska: Uloga GRID-a u znanosti

19. lipanj, *Kolokvij Knjižnice*, **Ana Barbarić**, Filozofski fakultet, Katedra za bibliotekarstvo, Zagreb: Vrednovanje elemenata sučelja WebPAC-a

20. lipanj, *Kolokvij Grupe za teorijsku kemiju*, dr. sc. **Istvan Lukovits**, Chemical Research Center, Hungarian Academy of Sciences, Budimpešta, Mađarska: Enumeration of Kekule structures in nanotubes

26. lipanj, *Izvanredni kolokvij Knjižnice*, prof. **Sanda Erdelez**, Missouri University, Columbia: Tehnologije koje će (možda) promijeniti načine pronalaženja i korištenja informacija

27. lipanj, *Seminar Zavoda za molekularnu medicinu*, prof. dr. **Marijo Bagatin**, Klinika za maksilofacijalnu kirurgiju, KB Dubrava, dr. **Jadranka Handžić-Ćuk**, Medicinski fakultet Sveučilišta u Zagrebu: Rascjepi usne i nepca: od epidemiologije do genetike

3. srpanj, *Predstavljanje knjige "Znanost i javnost"*. Urednica knjige dr. sc. **Blanka Jergović**; recenzenti prof. dr. sc. **Mladen Juračić**, prof. dr. sc. **Ante Simonić**, prof. dr. sc. **Ivo Šlaus**, prof. dr. sc. **Stjepan Marčelja**, prof. dr. sc. **Krunoslav Pisk**

5. srpanj, *Svečana tribina povodom 10 godina Mladih istraživača*, gosti: prof. dr. sc. **Zvonimir Šikić**, predsjednik Sindikata znanosti; prof. dr.sc. **Hrvoje Kraljević**, ministar znanosti i tehnologije; prof. dr. sc. **Stjepan Marčelja**, ravnatelj Instituta "Ruđer Bošković"; prof. dr. sc. **Jasna Mencer**, rektorica sveučilišta; dr. sc. **Andreja Ambriović-Ristov**, znanstvena suradnica; dr. sc. **Sonja Durajlija-Žinić**, znanstvena novakinja i viša asistentica
10. srpanj, *Seminar Grupe za lipoproteine*, dr. sc. **Renata Zrinski-Topić**, KBC Rebro, Zagreb: Novosti u dijagnostici hiperlipoproteinemia
25. srpanj, *Seminar Zavoda za molekularnu medicinu*, **Krishna K. Murthy**, Ph.D., Department of Virology/Immunology, Southwest Foundation for Biomedical Research, San Antonio, Texas: Nonhuman Primate Models for AIDS Research and Vaccine Development
4. rujan, *Predavanje Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja*, Prof. dr. **Köteles, G. J.**, Frédéric Joliot-Curie National Research Institute for Radiobiology and Radiohygiene József Fodor National Public Health Center, Budimpešta, Mađarska : Biological basis of radiation protection: new aspects
9. rujan, *Kolokvij Zavoda za fizičku kemiju*, Prof. dr. **David A. Armstrong**, Department of Chemistry, University of Calgary, Kanada: The Role of Trimers in Thermal Electron Capture by HCl: an Ab Initio Study
12. rujan, *Kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša*, dr. sc. **Stephane Mounier**, Université de Toulon et du Var, Faculté des Sciences et Techniques Laboratoire des Recherches en Chimie Marine des Organometalliques (RCMO), La Garde, Francuska: Challenges of dissolved organic matter in natural waters
16. rujan, *Kolokvij Zavoda za molekularnu genetiku*, prof. dr. **Julian E. Davies**, Department for Microbiology and Immunology, University of British Columbia, Vancouver, Kanada: What are antibiotics?
18. rujan, *Kolokvij Knjižnice*, **Dijana Erceg**, Građevinski fakultet Sveučilišta u Splitu, mr. sc. **Radovan Vrana**, Filozofski fakultet Sveučilista u Zagrebu, mr. sc. **Jadranka Stojanovski**, Institut "Ruđer Bošković", Zagreb: Knjižnice SAD: trebamo li se ogledati ili ugledati u njih?
23. rujan, *Kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša*, Prof. **Paul Wassmann**, Norwegian College of Fishery Science, University of Tromso: Principles of marine eutrophication

15. listopada, *Seminar iz molekularnih znanosti*, Prof. dr. Hans Lischka, Institute for Theoretical Chemistry and Structural Biology, University of Vienna: High-level multireference theory applied to the calculation of chemical reactions and excited states
16. listopada, *Kolokvij Grupe za eksperimentalnu fiziku*, dr. sc. **Vuko Brigljević**, CERN, Ženeva, Švicarska: Recent measurements of CP asymmetries in B mesons with the BABAR experiment
17. listopada, *Predavanje Društva hrvatskih humboldtovaca*, dr. sc. **Monika Lieb**, Alexander von Humboldt-Stiftung, Njemačka: The sponsorship programmes for scientists by the Alexander von Humboldt-Foundation. Presentation and discussion
17. listopada, *Seminar Hrvatskog genetičkog društva*, dr. sc. **Jörg Heierhorst**, St. Vincent's Institute of Medical Research, Melbourne, Australija: A novel protein family with cell cycle and DNA damage response functions conserved from yeast to humans
22. listopada, *Kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša*, dr. sc. Branko Tomažič, American Dental Association at NIST, Gaithersburg, Maryland, SAD: Fizičko kemijska načela kardiovaskularne kalcifikacije
23. listopada, *Kolokvij Knjižnice*, dr. sc. **Tatjana Aparac-Jelušić**, Pedagoški fakultet Sveučilišta J.J. Strossmayer, Katedra za bibliotekarstvo, Osijek; dr. sc. **Jelka Petrak**, Središnja medicinska knjižnica, Zagreb: Amerika ponovno - po čemu se stvarno razlikujemo?!
24. listopada, *Kolokvij Grupe za teorijsku kemiju*, **Mariza Sarta Deković**, Odsjek za fiziku, Filozofski fakultet, Rijeka: Zvezdani vjetar
25. listopada, *Kolokvij Zavoda za fizičku kemiju*, dr. **Rebecca C. Wade**, European Media Laboratory, Heidelberg, Njemačka: Protein-ligand interactions *in silico*
30. listopada, *Kolokvij Grupe za teorijsku kemiju*, Dr. sc. **Karl Wunderle**, Universität Heidelberg, Fakultät für Physik: Charge in electromagnetic plane wave with radiation reaction force
6. studeni, *Seminar Grupe za lipoproteine*, dipl. inž. **Marija Raguž**, Medicinski fakultet, Zagreb: Fluorescencija prodana u ovisnosti o različitim koncentracijama HDL-a i alkohola
7. studeni, *Seminar Laboratorija za fizikalnu organsku kemiju*, dr. sc. **Howard Maskill**, University of Newcastle: Organic reaction mechanisms and reaction maps
8. studeni, *Seminar Laboratorija za fizikalnu organsku kemiju*, dr. sc. **Howard Maskill**, University of Newcastle: Molecular mechanisms and reaction rates

14. studeni, *16. kolokvij Hrvatskog društva za teorijsku i metamatičku biologiju*, dr. sc. **Lavoslav Čaklović**, Matematički odjel Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu: Decision Making i potencijal
18. studeni, *Seminar Laboratorija za molekulsku fiziku*, Prof. Dr. **Wolfgang Kiefer**, Institut fuer Physikalische Chemie, Universitaet Wuerzburg, Njemačka: Femtosecond Coherent Raman Spectroscopy
20. studeni, *Zajednički kolokvij teorijske Sekcije Hrvatskoga kemijskog društva i Grupe za molekularne znanosti IRB-a*, Prof. dr. **Henry F. Schaefer III.**, University of Georgia, Athens, Georgia, SAD: Molecular Anions: A Wealth of Important Uncharacterized Species. From Diatomics to DNA Base Pairs and Beyond
27. studeni, *Kolokvij Knjižnice*, mr. sc. **Ljiljana Kuterovac**, Državni zavod za intelektualno vlasništvo, Zagreb: Zaštita izuma patentom i patentne informacije
3. prosinac, *Neformalni elektrokemijski seminar*, dr. sc. **Jean Chevalet**, Université Pierre et Marie Curie, Pariz: Trace Analysis by Multipotential-Step Techniques
4. prosinac, *Seminar Grupe za lipoproteine*, dipl. ing. **Dejana Carić**, Agronomski fakultet, Zagreb: Indol-3-octena kiselina i fluorescentna svojstva njenih derivata
5. prosinac, *Kolokvij Računalnog centra*, **Jadranka Kurjački**, IBM, Hrvatska: Pristup informacijama i upravljanje znanjem
11. prosinac, *Zajednički seminar Zavoda za teorijsku fiziku, Zavoda za eksperimentalnu fiziku i Zavoda za teorijsku fiziku PMF-a*, dr. sc. **Anais Smailagić**, University of Trieste, Department of Theoretical Physics, Italija: Noncommutativity in Quantum Mechanics-Harmonic Oscillator example
13. prosinac, *Laboratorij za neurokemiju i molekularnu neurobiologiju (MG) i Hrvatsko društvo za neuroznanost*, dr. sc. **Dieter Wildenauer**, Molecular Genetics Laboratory, Dept. of Psychiatry, University of Bonn: Searching for molecular causes in schizophrenia: from linkage to candidate genes
20. prosinac, *Zajednički seminar Zavoda za teorijsku fiziku, Zavoda za eksperimentalnu fiziku i Zavoda za teorijsku fiziku PMF-a*, dipl. ing. **Davor Krajnović**, Leiden Observatory, Leiden, Nizozemska: HAURON studija NGC2974

IZLOŽBE

19. veljače, *Otvorenje izložbe kaligrafija "(bes)MISLI"* **Siniše Reberskog**. Izložbu otvara prof. **Enes Quien**.

22. ožujak, Otvorenje izložbe pastela **Gligora Sazdovskog**. Izložbu će otvoriti **Stanko Špoljarić**.

16. travanj, Otvorenje izložbe slika, **Zoltana Gabora**. Predgovor i uvodna riječ: **Tonko Maroević**. Recital pri otvorenju: **Eliza Gerner**.

14. studeni, Otvorenje izložbe slika **Zlatka Modrića**. Predgovor i uvodna riječ: **Dubravko Gluhinić**.

ODLIČJA I NAGRADE

GODIŠNJA NAGRADA DRUŠTVA SVEUČILIŠNIH NASTAVNIKA I DRUGIH ZNANSTVENIKA U ZAGREBU MLADIM ZNANSTVENICIMA I UMJETNICIMA U 2002. GODINI ZA PODRUČJE PRIRODNIH ZNANOSTI:

1. dr.sc. Hrvoje Fulgosi
2. mr.sc. Dalibor Merunka
3. mr.sc. Tatjana Šumanovac-Ramljak
4. mr.sc. Danijela Barić

NAGRADA «ŽELJKO TRGOVČEVIĆ» HRVATSKOG GENETIČKOG DRUŠTVA I INSTITUTA «RUĐER BOŠKOVIĆ» ZA MLADE ISTRAŽIVAČE U PODRUČJU MOLEKULARNE BIOLOGIJE

Mr.sc. Ana Traven

ORDEN "AUSTRIJSKI POČASNI KRIŽ ZA ZNANOST I UMJETNOST 1. KLASE"

Dr. sc. Greta Pifat-Mrzljak

IZBORI U ZVANJA

IZBOR U ZVANJE ZNANSTVENI SAVJETNIK

Prezime i ime	Datum izbora
Kozarac Zlatica	19.3.2002.
Vikić-Topić Dražen	29.10.2002.
Gabrilovac Jelka	17.12.2002.
Žarković Neven	17.12.2002.

IZBOR U ZVANJE VIŠI ZNANSTVENI SURADNIK

Prezime i ime	Datum izbora
Lulić Stipe	7.2.2002.
Bihari Nevenka	19.3.2002.
Čičin-Šain Lipa	19.3.2002.
Grdiša Mira	19.3.2002.
Ozrečić Bartolo	16.7.2002.
Kapitanović Sanja	17.12.2002.

IZBOR U ZVANJE ZNANSTVENI SURADNIK

Prezime i ime	Datum izbora
Jokić Milan	15.1.2002.
Kontrec Darko	15.1.2002.
Devescovi Massimo	19.3.2002.
Hranilović Dubravka	19.3.2002.
Weber Igor	19.3.2002.
Vdović Neda	9.5.2002.
Čurić Manda	28.5.2002.
Dragčević Đurđica	28.5.2002.
Dubček Pavo	28.5.2002.
Đogić Renata	28.5.2002.
Margetić Davor	28.5.2002.
Mohaček Grošev Vlasta	28.5.2002.
Tomašić Vlasta	28.5.2002.
Trojko Rudolf	28.5.2002.
Bogdanović-Radović Ivančica	16.7.2002.
Brčić-Kostić Krunoslav	16.7.2002.
Ciglencečki-Jušić Irena	16.7.2002.
Erk Marijana	16.7.2002.
Fuks Dragica	16.7.2002.
Gašparović Blaženka	16.7.2002.
Ivošević Nadica	16.7.2002.
Soić Neven	16.7.2002.
Stipčević Mario	16.7.2002.
Terzić Senka	16.7.2002.
Antonić Tatjana	29.10.2002.
Došlić Nađa	29.10.2002.
Jerić Ivanka	29.10.2002.
Katušin-Ražem Branka	29.10.2002.

Kovačević Borislav	29.10.2002.
Kragol Goran	29.10.2002.
Lučić Bono	29.10.2002.
Makarević Janja	29.10.2002.
Šorgić Božica	29.10.2002.
Grahek Željko	17.12.2002.
Kezele Nenad	17.12.2002.
Maksimović Aleksandar	17.12.2002.
Melić Blaženka	17.12.2002.
Pucić Irina	17.12.2002.
Risović Dubravko	17.12.2002.

IZBOR U ZVANJE VIŠI ASISTENT

Prezime i ime	Datum izbora
Omanović Dario	15.1.2002.
Strunjak-Perović Ivančica	19.3.2002.
Žic Vesna	19.3.2002.
Borović Suzana	9.5.2002.
Bruvo Branka	9.5.2002.
Nikolić Hrvoje	9.5.2002.
Višnjevac Aleksandar	9.5.2002.
Brozović Anamaria	28.5.2002.
Kralj Marijeta	28.5.2002.
Katić Maša	16.7.2002.
Stipčević Tamara	16.7.2002.
Štefančić Hrvoje	16.7.2002.
Vinković Marijana	16.7.2002.
Jakšić Željko	29.10.2002.
Sikirić Maja	29.10.2002.
Herak Bosnar Maja	27.11.2002.
Fafanđel Maja	17.12.2002.
Hamer Bojan	17.12.2002.

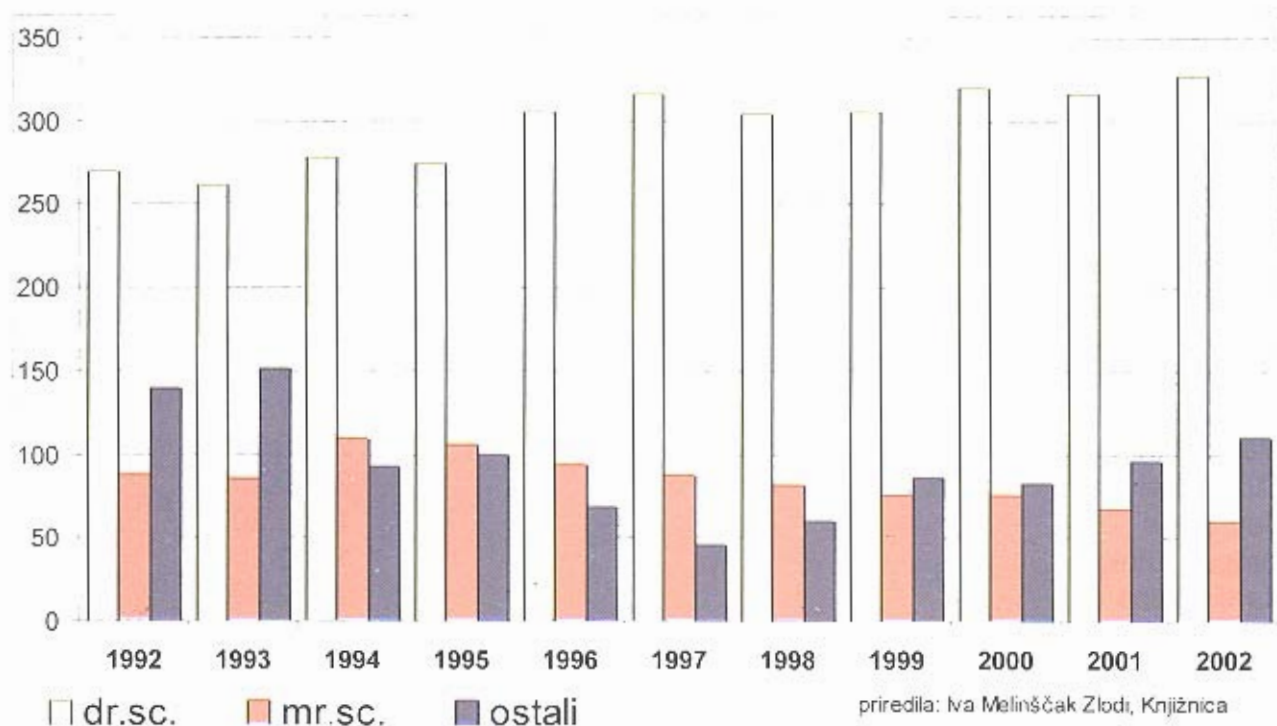
IZBOR U ZVANJE ASISTENT

Prezime i ime	Datum izbora
Cukrov Neven	15.1.2002.
Janeković Ivica	15.1.2002.
Miletić Goran	19.3.2002.
Šumanovac Ramljak Tatjana	9.5.2002.
Štifanić Mauro	16.7.2002.
Geček Sunčana	29.10.2002.
Ivanković Siniša	17.12.2002.
Matovina Mihaela	17.12.2002.

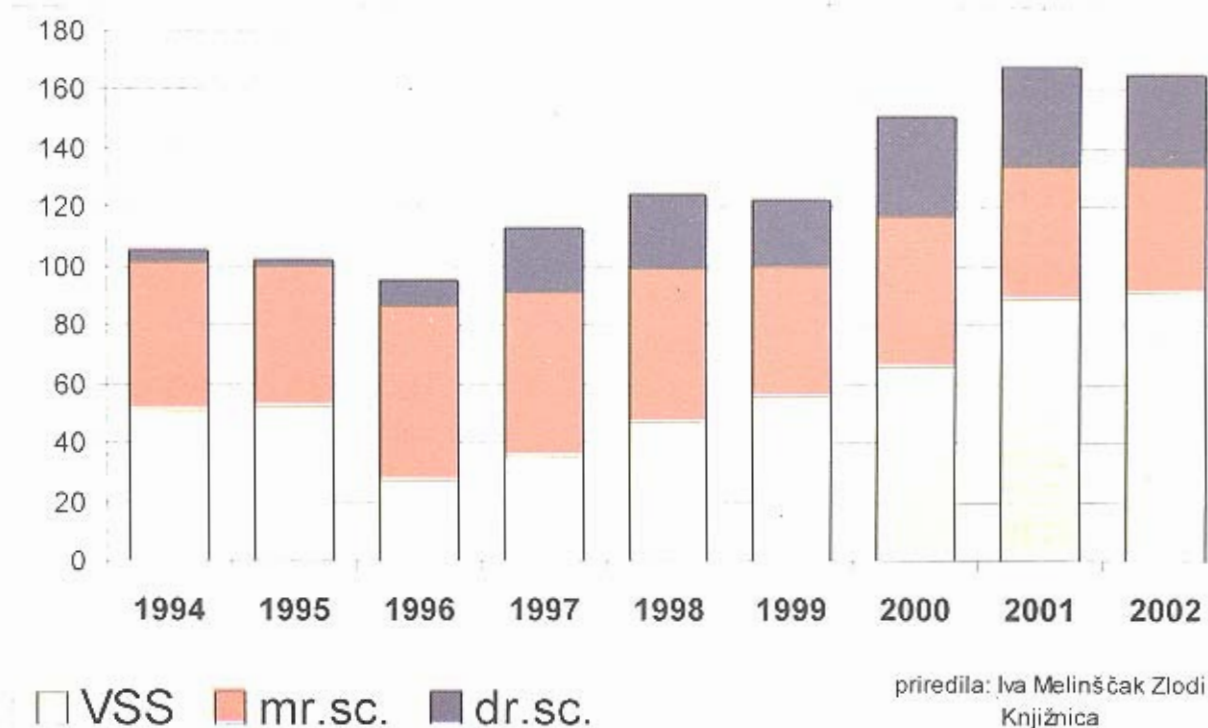
IZBOR U ZVANJE MLAĐI ASISTENT

Prezime i ime	Datum izbora
Komar Arijana	15.1.2002.
Mekterović Darko	15.1.2002.
Škrilin Ana	15.1.2002.

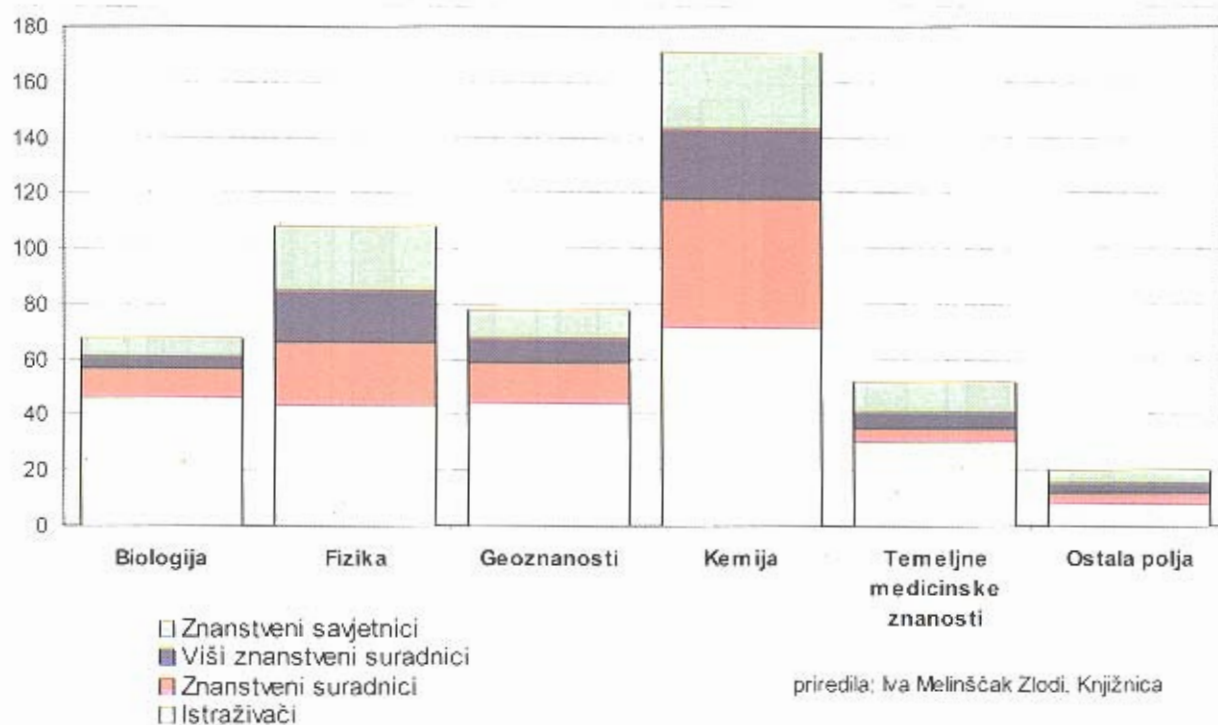
Buza-Vidas Barbara	19.3.2002.
Mirosavljević Krunoslav	19.3.2002.
Vujasinović Ines	9.5.2002.
Gadanji Gordana	28.5.2002.
Lončarić Martin	28.5.2002.
Landek Goran	16.7.2002.
Rajčan Ivana	16.7.2002.
Tomažić Igor	16.7.2002.
Žilić Dijana	16.7.2002.
Mikac Barbara	29.10.2002.
Štorek Helena	29.10.2002.
Beč Sonja	17.12.2002.
Dragun Zrinka	17.12.2002.
Kardić Irena	17.12.2002.
Kraljević Sandra	17.12.2002.



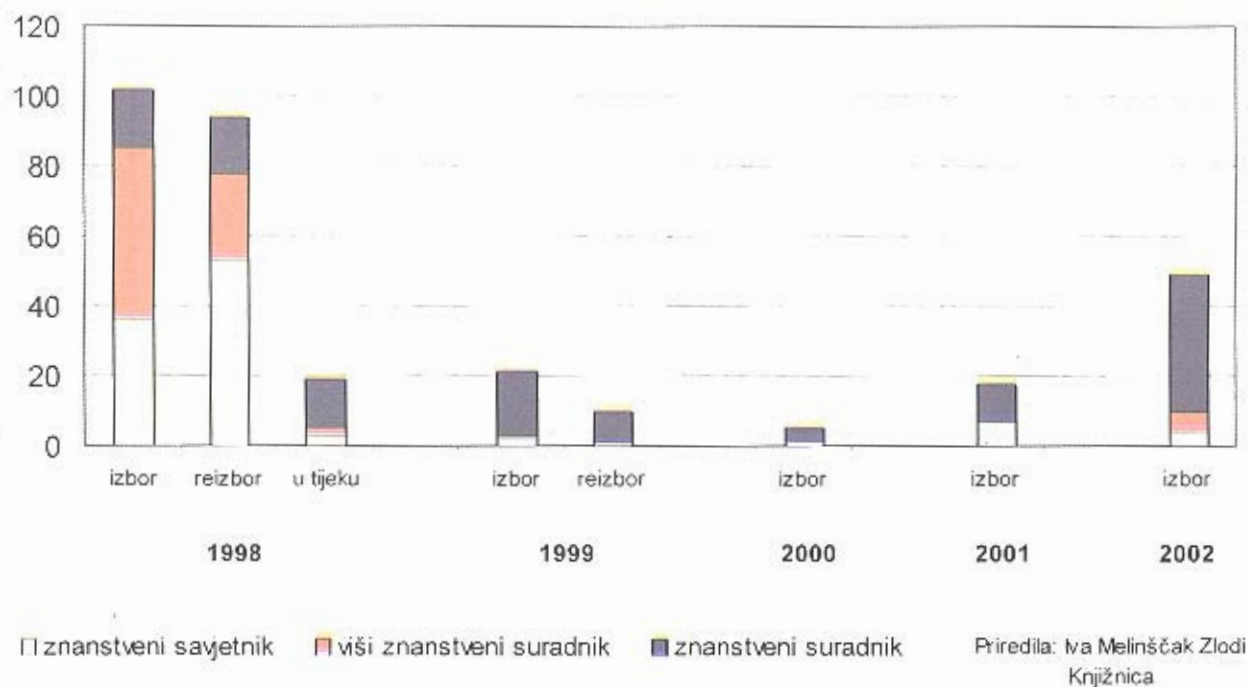
Grafički prikaz 1. Znanstveni djelatnici i istraživači.



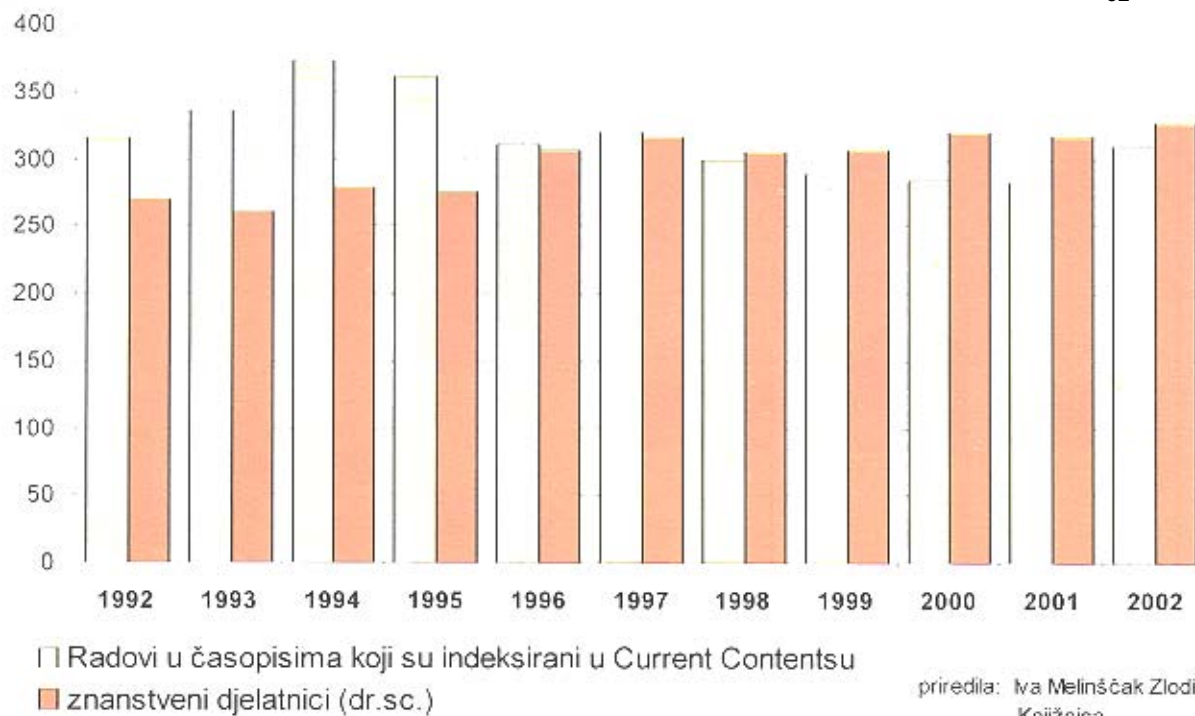
Grafički prikaz 2. Znanstveni novaci u Institutu u razdoblju od 1994. do 2002. godine.



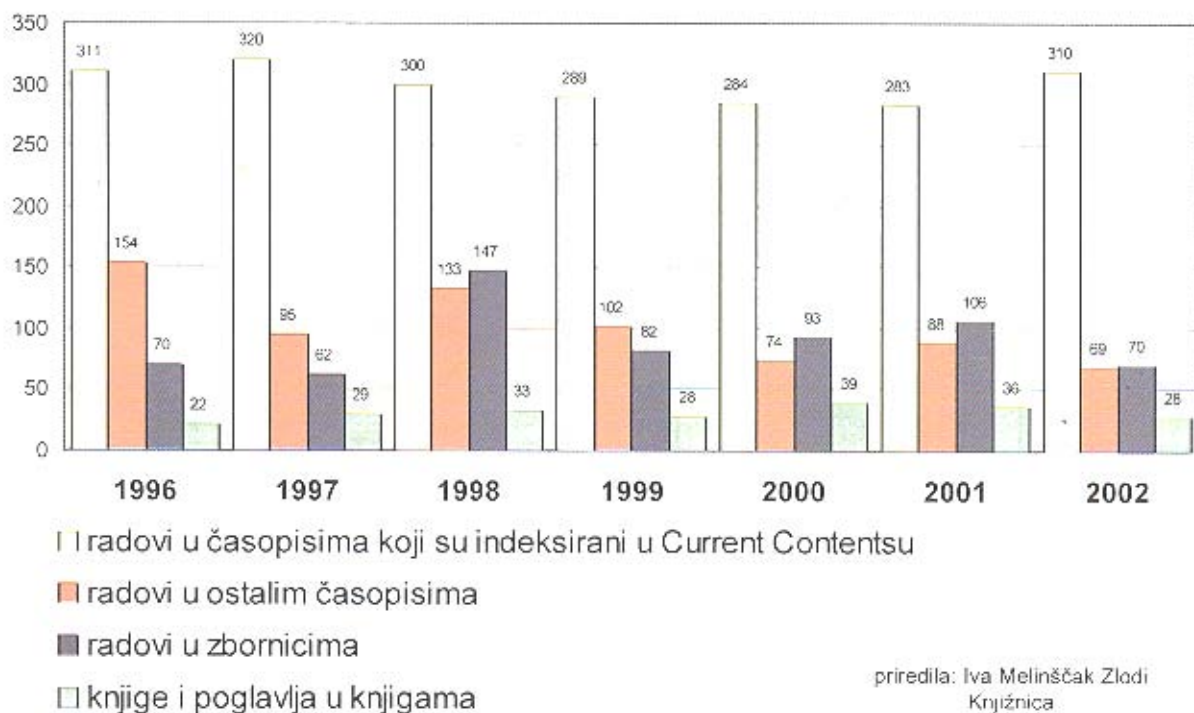
Grafički prikaz 3. Znanstveni djelatnici Instituta po poljima djelatnosti.



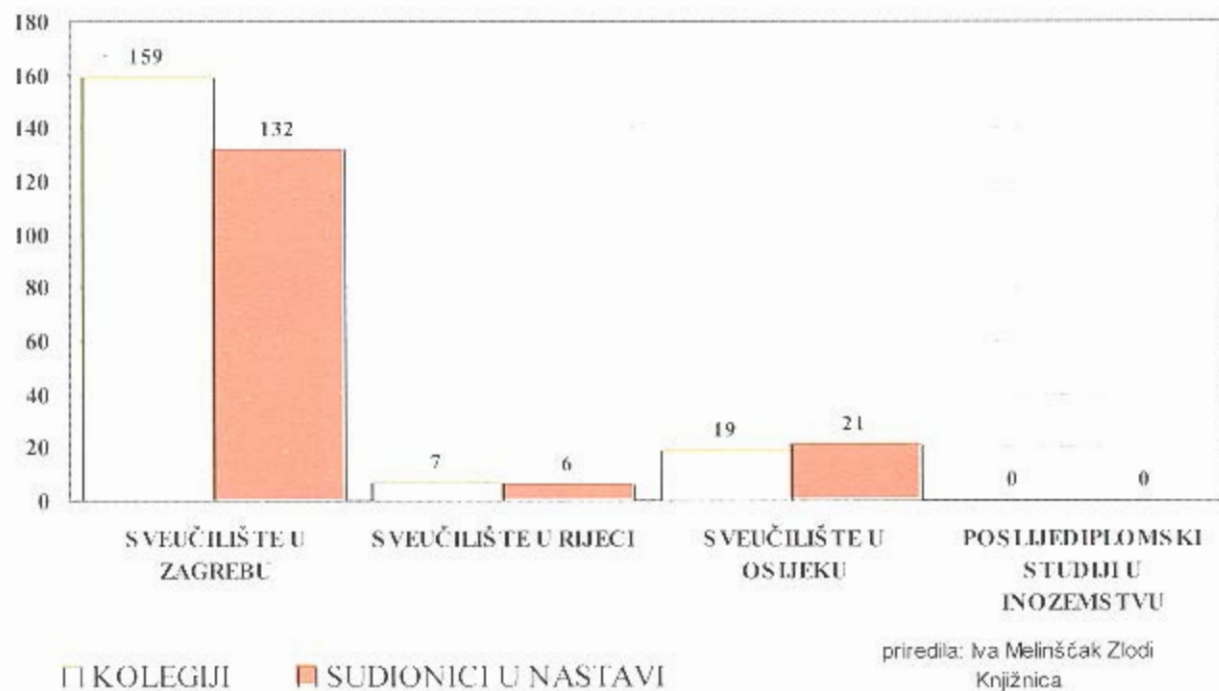
Grafički prikaz 4. Izbor i reizbor u znanstvena zvanja u razdoblju od 1998. do 2002. godine.



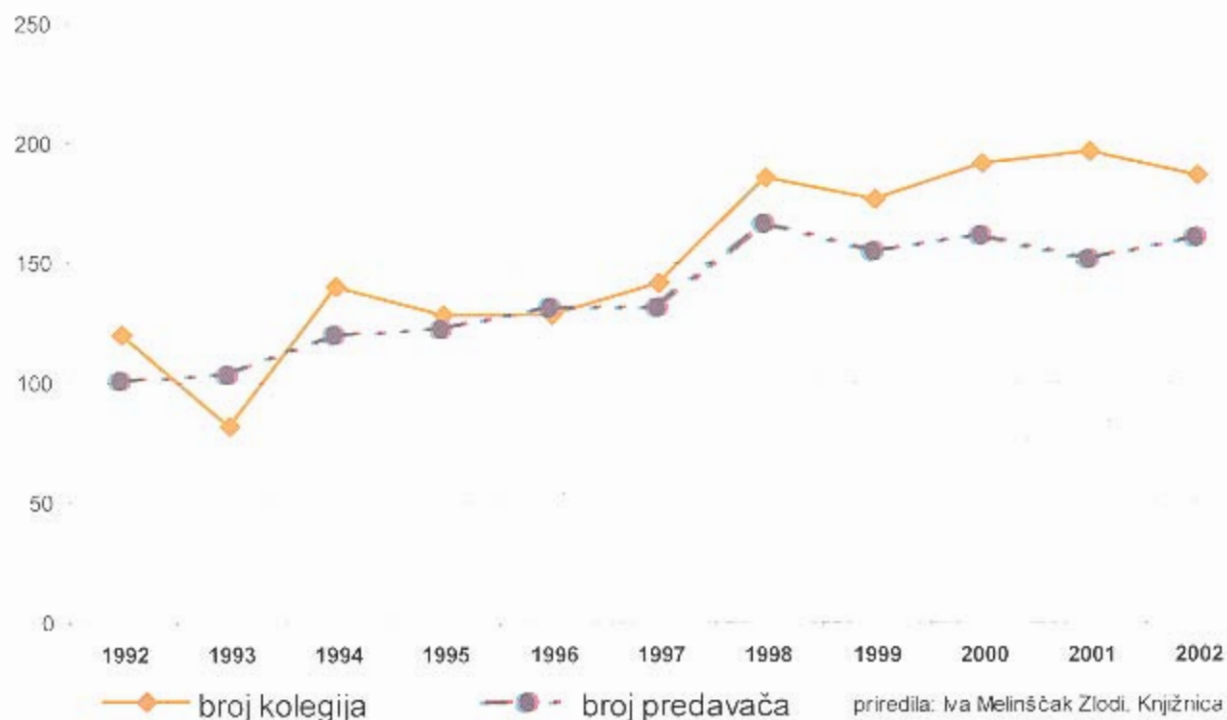
Grafički prikaz 5. Broj znanstvenih djelatnika i istraživača (dr.sc.) te radova objavljenih u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u.



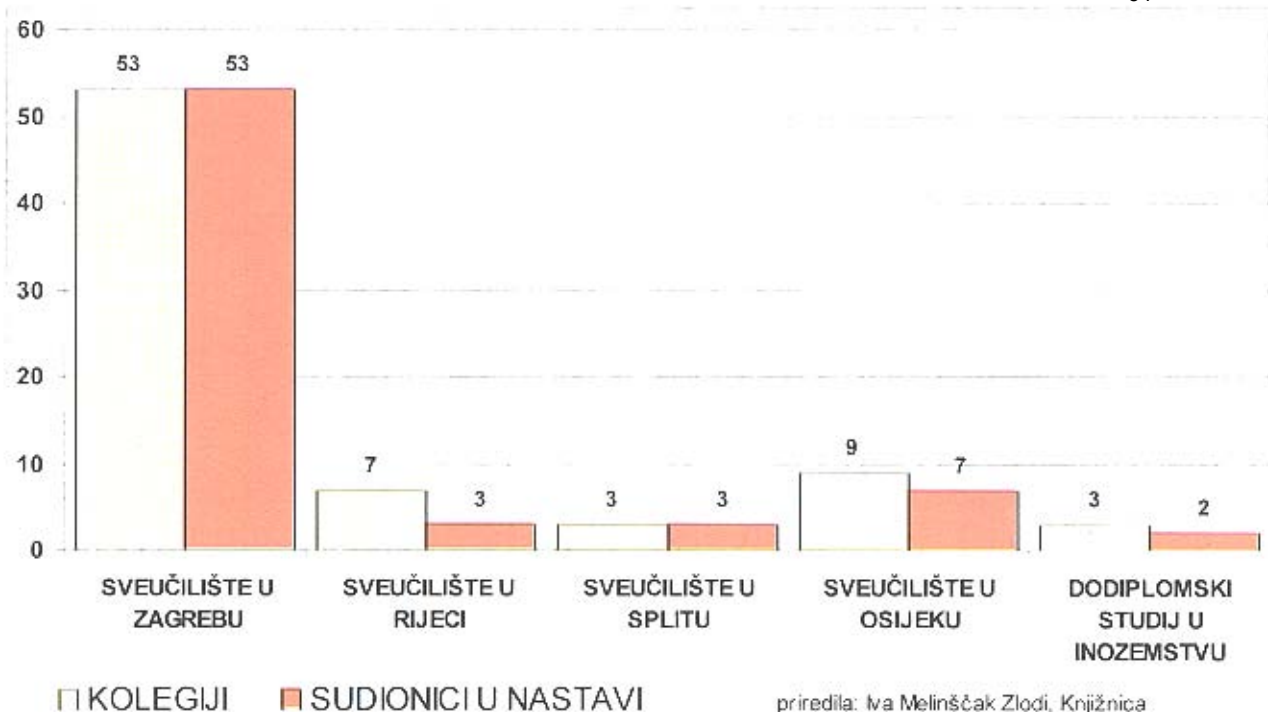
Grafički prikaz 6. Broj radova objavljenih u razdoblju od 1997. do 2002. godine.



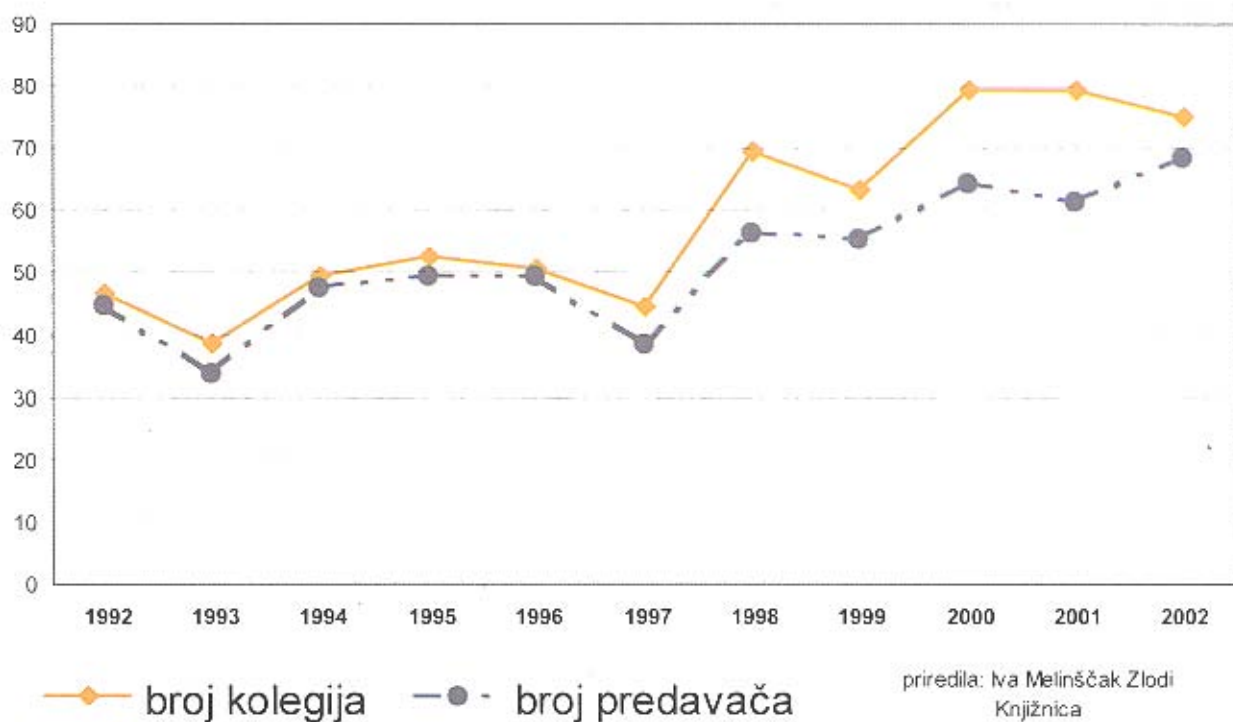
Grafički prikaz 7. Broj kolegija i predavača na postlijediplomskim studijima hrvatskih i stranih sveučilišta za 2002. godinu.



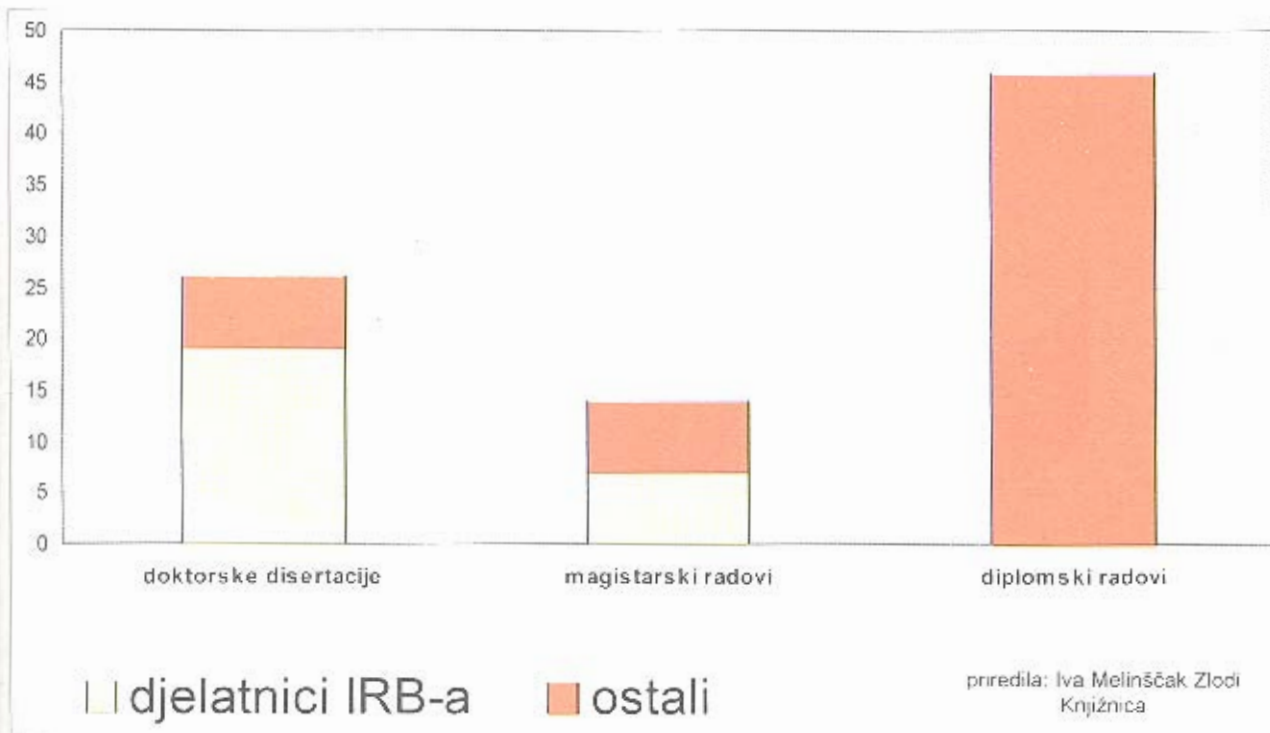
Grafički prikaz 8. Broj kolegija i predavača na postlijediplomskim studijima hrvatskih i stranih sveučilišta u razdoblju od 1993. do 2002. godine.



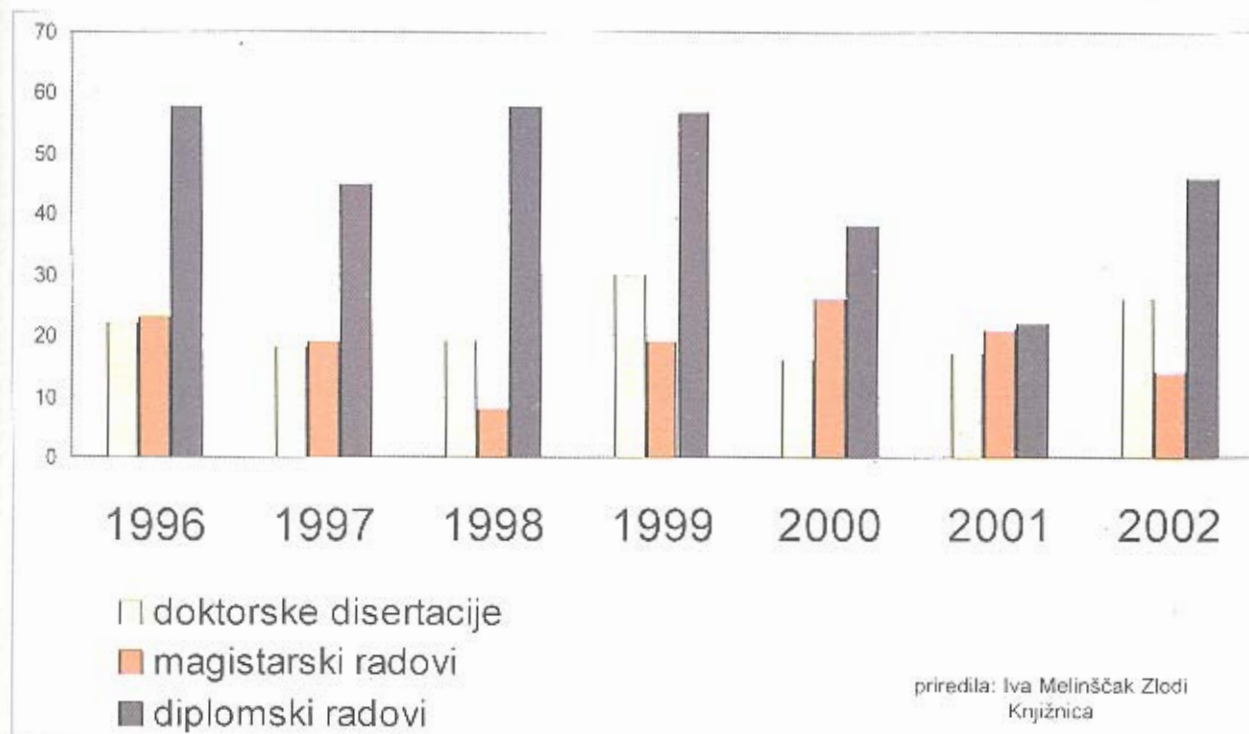
Grafički prikaz 9. Broj kolegija i predavača na dodiplomskim studijima hrvatskih i stranih sveučilišta za 2002. godinu.



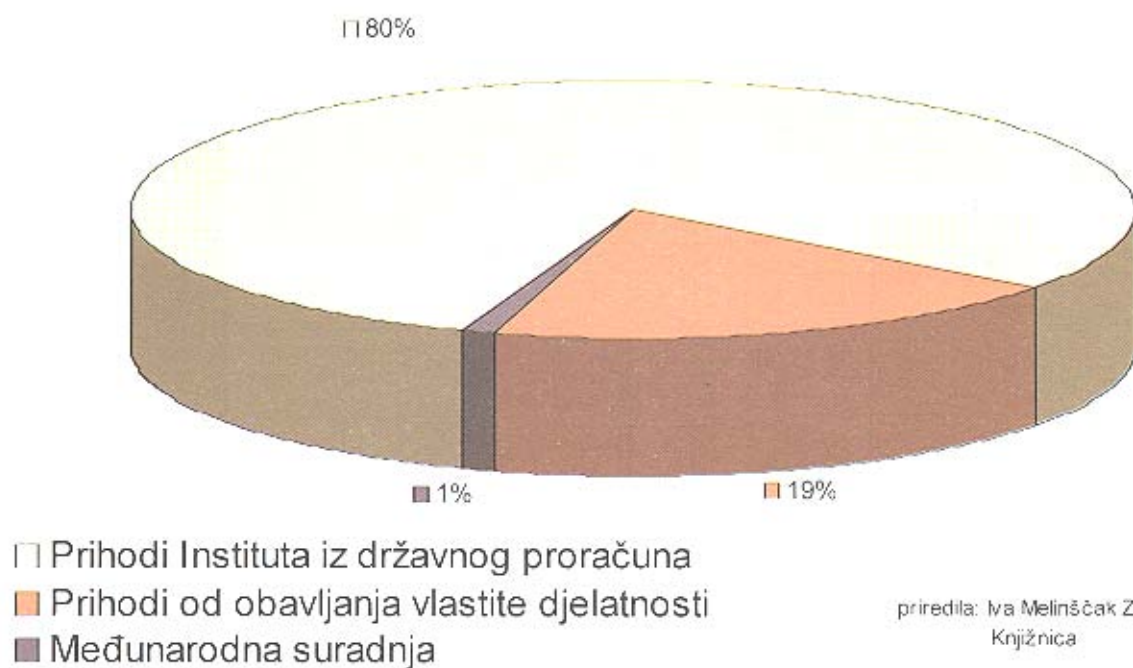
Grafički prikaz 10. Broj kolegija i predavača na dodiplomskim studijima hrvatskih i stranih sveučilišta u razdoblju od 1993. do 2002. godine.



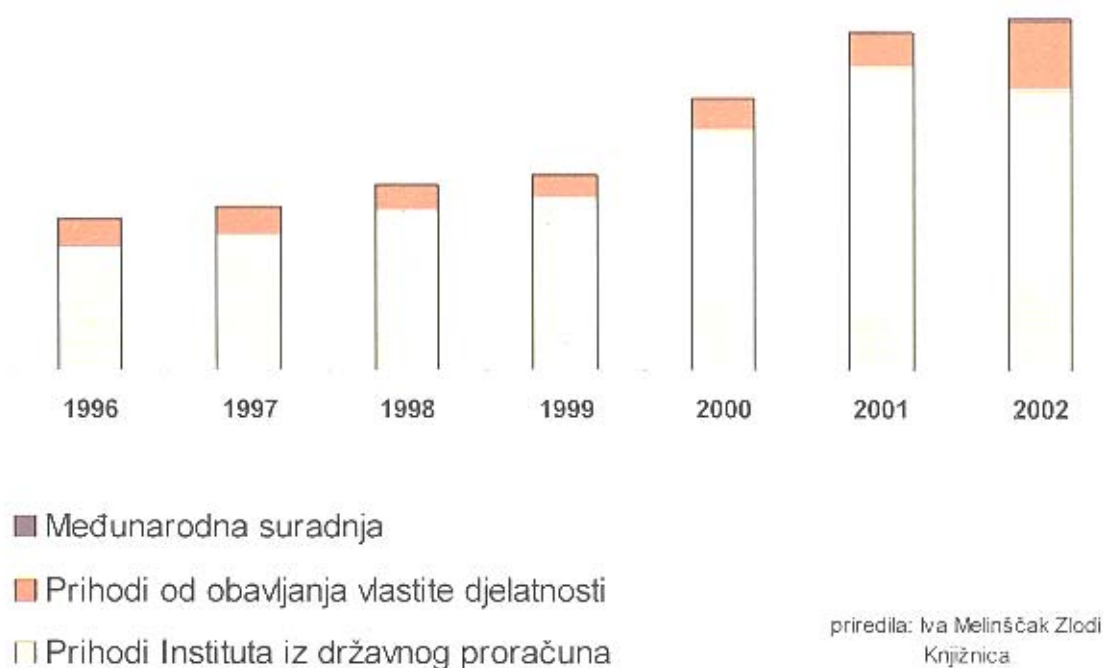
Grafički prikaz 11. Doktorske disertacije, magistarski i diplomski radovi obranjeni tijekom 2002. godine.



Grafički prikaz 12. Doktorske disertacije, magistarski i diplomski radovi obranjeni u razdoblju od 1996. do 2002. godine.



Grafički prikaz 13. Prihodi Instituta za 2002. godinu.



Grafički prikaz 14. Dinamika prihoda Instituta od 1996. do 2002. godine.

<http://thphys.irb.hr>

**ZAVOD ZA TEORIJSKU FIZIKU
THEORETICAL PHYSICS DIVISION**

Dr. sc. Branko Guberina, predstojnik zavoda
Tel. ++385 1 4680 234, fax. ++385 1 4680 223

Ustroj Zavoda:

Grupa za fiziku čvrstog stanja, dr. sc. Radovan Brako, voditelj grupe
Grupa za fiziku čestica, dr. sc. Branko Guberina, voditelj grupe
Grupa za teorijsku i matematičku fiziku, dr. sc. Stjepan Meljanac, voditelj grupe
Grupa za linearnu i nelinearnu dinamiku, dr. sc. Mladen Martinis, voditelj grupe
Tajništvo, Biserka Kečkeš, tajnica

U okviru Zavoda provode se istraživanja na znanstvenoistraživačkim projektima odobrenima 01.08.2002. Oni se nastavljaju na ranije teme istraživanja iz znanstvenoistraživačkog programa 009801: "Teorijska istraživanja strukture materije", direktor programa: dr. sc. Branko Guberina. Istraživačke su teme: 1. 00980101: "Niskodimenzionalni sustavi, slojevi i površine", voditelj teme dr. sc. Radovan Brako; 2. 00980102 "Teorijska istraživanja osobina fundamentalnih čestica", voditelj teme dr. sc. Branko Guberina; 3. 00980103 "Kvantna teorija polja, statistike i simetrije", voditelj teme dr. sc. Stjepan Meljanac; 4. 00980104 "Višečestične korelacije i fluktuacije", voditelj teme dr. sc. Mladen Martinis.

Program rada:

U Zavodu se provode većinom istraživanja u fizici visokih energija (fizika čestica, opća i matematička fizika, astročestična fizika i kozmologija) i kondenziranoj materiji. Jedna od grupa je razvila novu aktivnost primjene analize linearne i nelinearne dinamike na različite biomedicinske probleme proučavajući kaotično ponašanje i fraktalnu strukturu. Članovi Zavoda sudjeluju u nastavi na hrvatskim sveučilištima, većinom na Sveučilištu u Zagrebu. Zavod trenutačno broji 17 znanstvenika i 15 doktoranada i postdoktora.

Research programme:

Presently, the research performed in the Division is mainly theoretical high-energy physics (particle physics, general and mathematical physics, astroparticle physics and cosmology) and condensed matter. Recently, one of the groups has started a new activity by applying linear and nonlinear dynamics analysis to various biomedical problems to study the presence of chaotic behavior and fractal structure. From the very beginning, members of the Division have lectured at undergraduate and postgraduate studies at the universities in Croatia, mostly at the University of Zagreb. A number of students presently perform their B. Sc., M. Sc., and Ph. D. theses. The Division numbers presently 17 scientists and 15 students and postdocs.

Projekti u sklopu zavoda:

**FIZIKA POVRŠINA, MIKROSTRUKTURA I JAKO KORELIRANIH SISTEMA
PHYSICS OF SURFACES, MICROSTRUCTURES AND STRONGLY
CORRELATED SYSTEMS**

Voditelj projekta: dr. sc. Radovan Brako
Tel. ++385 1 4561 199 e-mail: radovan@thphys.irb.hr

Suradnici na projektu:

Radovan Brako, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Željko Crljen, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Predrag Lazić, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak
Damir Šokčević, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Marin Slobodan Tomaš, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Program rada i rezultati na projektu:

Metoda ab initio računa elektronske strukture primijenjena je na određivanje atomske strukture i transportnih svojstava površina i adsorbata, te mikro- i nanostrukture. Numerički računi su rađeni pomoću teorije funkcionala gustoće, a izvedeni su dijelom na novom grozdastom računalu na Institutu, upotrebom paralelnih algoritama. Tako su proračunata svojstva nekih gusto pakovanih površina plemenitih metala, posebno površinske energije, naponi, te potencijali interakcije među atomima. Pomoću ovih rezultata procijenjena je sklonost površina k rekonstrukciji (Ž. Crljen, P. Lazić, D. Šokčević, R. Brako, Vacuum, u tisku). Nađeno je da, npr., (111) površina zlata rekonstruira u komprimiranu strukturu, u skladu s eksperimentalnim opažanjima. Započet je rad na proračunu elektronskih svojstava metalnih slojeva debljine nekoliko atoma na raznim podlogama, i interpretaciji eksperimentalnih rezultata dobijenih fotoemisijom i slično. Istraživan je elektronski transport u nanosistemima, posebno vodljivost složenih molekula (OPVn) na metalnim kontaktima, ab initio metodama teorije funkcionala gustoće i neravnotežnih Greenovih funkcija. U okviru istraživanja elektromagnetskih procesa i efekata u nehomogenim disipativnim sistemima izvedeni su opći izrazi za Casimirovu silu i energiju u apsorbirajućim višeslojnim planarnim sistemima (M. S. Tomaš, Phys. Rev. A 66, 052103 (2002)).

Research programme and results:

The ab initio method for calculating the electronic structure has been applied to the determination of the atomic structure and transport properties of surfaces and adsorbates, and micro- and nanostructures. Numerical calculations have been done using the density functional theory (DFT), and were performed partly on a new computer cluster at the Institute, using parallel algorithms. Properties of some close-packed surfaces have been calculated, in particular the surface energy, stress, and the interatomic potential. The tendency towards reconstruction has been estimated (Ž. Crljen, P. Lazić, D. Šokčević, R. Brako, Vacuum, in press). It has been found, e.g., that the Au(111) surface reconstructs into a compressed structure, in accordance with experimental results. The work on electronic properties of few-atom thick metal adlayers on various substrates as well as the interpretation of the experimental results obtained in photoemission and similar experiments has been started. Electronic transport in nanosystems and the conductance of large molecules (OPVn) on metallic contacts were investigated using ab initio methods, in particular the density functional theory and nonequilibrium Green's functions. Within the investigation of the electromagnetic processes and effects in inhomogeneous dissipative systems, the general expressions for the Casimir force and energy in absorbing multilayered planar systems have been derived (M. S. Tomaš, Phys. Rev. A 66, 052103 (2002)).

TEMELJNE INTERAKCIJE U FIZICI ELEMENTARNIH ČESTICA I KOZMOLOGIJI FUNDAMENTAL INTERACTIONS IN ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS AND COSMOLOGY

Voditelj projekta: dr. sc. Branko Guberina
Tel. ++385 1 4680 234 e-mail: guberina@thphys.irb.hr

Suradnici na projektu:

Ana Babić, dipl. inž. fizike, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Neven Bilić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
 Ivan Dadić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
 Goran Duplančić, magistar fiz. znanosti, asistent, znanstveni novak
 Branko Guberina, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
 Raul Horvat, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik (konzultant)
 Blaženka Melić, doktorica fiz. znanosti, znanstvena suradnica (od 17.12.2002.)
 Hrvoje Nikolić, doktor fiz. znanosti, viši asistent
 Bene Nižić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik
 Kornelija Passek, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
 Hrvoje Štefančić, doktor fiz. znanosti, viši asistent, znanstveni novak
 Josip Trampetić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
 Marko Velić, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak

Suradnici iz drugih ustanova:

Julius Wess, redovni profesor, Ludwig-Maximilians-Universität, München, Njemačka (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

1. Problem vremena života Ξ_c^+ bariona razmatran je rabeći razvoj po masi teškog kvarka i okusnu SU(3) simetriju. Vrijeme života je izraženo na modelski neovisan način pomoću mjerljivih inkluzivnih veličina za dva druga šarmantna bariona koji pripadaju istom okusnom SU(3) multipletu. Analogni je pristup primjenjen na multiplet šarmantnih mezona vodeći na predikcije svojstava D_s^+ mezona (B. Guberina, H. Štefančić, Phys. Rev. D 65 (2002) 114004). Istražena je uloga Ω_c raspada na određivanje vremena života Ξ_c^+ (A. Babić, predavanje na CMS susretu, Split).
2. Proučavana je polarizacija top kvarka na budućim linearnim ubrzivačima čestica (J.G. Körner, B. Melić, S. Prelovšek, MZ-TH-02-25, WUE-ITP-2002-023). Izračunati su nefaktorizabilni doprinosi u $B \rightarrow J/\psi K$ raspadu primjenom light-cone sumacijskih pravila (B. Melić, R. Rückl, MZ-TH-02-23, WUE-ITP-2002-020; B. Melić, MZ-TH-02-20, WUE-ITP-2002-021, hep-ph/0209265, Proc. of Int. School on Heavy Quark Physics (Dubna, May-June 2002); B. Melić, R. Rückl, MZ-TH-02-022, WUE-ITP-2002-027, hep-ph/0210353, Proc. Workshop on B Physics and CP Violation (Frascati, October 2002), Frontier Science, 2002).
3. Dvogluonske komponente η i η' mezona su ispitivane do točnosti vodećeg tvista, te je istražen njihov doprinos funkciji strukture prijelaza η i η' mezona, elektroprodukciji η i η' mezona i g^*g^* η' verteksu (P. Kroll, K. Passek-Kumericki, hep-ph/0210045, prihvaćeno u Phys. Rev. D). Koristeći konformnu simetriju izračunata je funkcija strukture prijelaza piona u drugom redu iza vodećeg (D. Müller, B. Melić, K. Passek-Kumerički, hep-ph/0212346).
4. U neravnotežnim Feynmanovim dijagramima nađeno je da verteksi koji ne sadrže izlazne retardirane ili ulazne avansirane propagatore ne čuvaju energiju (I. Dadić, Nucl. Phys. A702 (2002) 356C-360C). Izračunata je emisija fotona iz neravnotežne QCD plazme (I. Dadić, pozvano predavanje na CERN Theory Workshopu "Hard Probes in Heavy Ion Collisions at the LHC", 11-15 Ožujka 2002., Ženeva, Švicarska).
5. U shemi renormalizacije koja ispravno uzima u obzir utjecaj masenih pragova razmotren je doprinos vakuumskih energija kvantnih polja vrijednosti kozmološke konstante. Nađeno je da Appelquist-Carrazone teorem ne vrijedi u računu kozmološke konstante. Iz navedenog formalizma slijedi jednadžba renormalizacijske grupe koja kozmološku konstantu prikazuje kao klizni ("running") parametar s obzirom na prikladno odabranu kozmološku energijsku skalu. Usporedbom s ograničenjima na udio tamne energije u građi svemira u bitnim epohama kozmološke evolucije (npr. nukleosinteza), te uz pretpostavku primjenjivosti Standardnog modela do Planckove skale, dobiva se jako ograničenje na vrijednost mase Higgsovog bozona (A. Babić, B. Guberina, R. Horvat, H. Štefančić, Phys. Rev. D 65 (2002)

085002). U kvantnoj teoriji polja razmatrana je uloga renormalizacijske grupe u promjenama (running) kozmološke konstante te određivanje krajnje sudbine svemira. Polazeći od današnjih vrijednosti kozmoloških parametara pokazano je da "running" lako vodi na negativnu kozmološku konstantu, mijenjajući tako sudbinu svemira, i u isto vrijeme zadržavajući kompatibilnost s kritičnom teorijom strune (B. Guberina, R. Horvat, H. Štefančić, hep-ph/021118; B. Guberina, predavanje na CMS susretu, Split; H. Štefančić, predavanje na Triangle susretu, Beč).

6. Istražena su svojstva tamne materije i tamne energije u okviru modela samointeragirajućih fermiona na konačnoj temperaturi te bozonskog polja sa samointerakcijom koja vodi na jednadžbu stanja za Chaplyginov plin (N. Bilić, Phys.Lett. B535 (2002) 17; astro-ph/0207423; astro-ph/0207424).

7. Konstruirana je lokalna struja čestica te je primjenjena na kvantnu teoriju polja u klasičnim pozadinskim poljima (H. Nikolić, Phys. Lett. B 527 (2002) 119; hep-th/0202204, prihvaćeno u Int. J. Mod. Phys. D; hep-th/0205022).

8. Iznesen je teorijski pregled rijetkih raspada B-mezona u svjetlu najnovijih mjerenja. Zabranjeni raspad koji se odvija kroz teoriju polja temeljenu na nekomutativnosti prostor-vremena diskutirani su u baždarnom, hadronskom i neutrinskom sektoru (J. Trampetić, Acta Physica Polonica B 33 (2002) 4317). Raspad $Z \rightarrow \gamma \gamma$ i $Z \rightarrow g g$, koji su zabranjeni u Standardnom modelu, predloženi su kao procesi u kojima se može otkriti moguća nekomutativnost prostor-vremena (G. Duplančić, J. Trampetić et al, hep-ph/0202121,

poslano u časopis). Foton-neutrinsko međudjelovanje u nekomutativnoj teoriji polja iskorišteno je za određivanje astrofizikalne granice na jakost nekomutativnosti (J. Trampetić et al, hep-ph/0212292, poslano u časopis). Istražena su svojstva harmoničkog oscilatora na nekomutativnom prostoru s posebnom pažnjom na probleme s relacijama neodređenosti za minimalnu duljinu i ljestvičaste operatore (I. Dadić, L. Jonke, and S. Meljanac, hep-th/0210264, prihvaćeno u Phys. Rev. D; I. Dadić, L. Jonke, and S. Meljanac, hep-th/0301066, poslano u tisak).

Research programme and results:

1. The problem of the Ξ_c^+ lifetime is considered in the framework of heavy-quark expansion and SU(3) flavor symmetry. The lifetime of Ξ_c^+ is expressed in terms of measurable inclusive quantities of the other two charmed baryons belonging to the same SU(3) flavor multiplet in a model-independent way. An analogous approach is applied to the multiplet of charmed mesons yielding the predictions on D_s^+ properties (B. Guberina, H. Štefančić, Phys. Rev. D 65 (2002) 114004). The role of the Ω_c decay in the determination of the Ξ_c^+ lifetime is explored (A. Babić, talk at the CMS Meeting, Split).

2. The top-quark polarization at linear e^+e^- colliders was studied (J.G. Körner, B. Melić, S. Prelovšek, MZ-TH-02-25, WUE-ITP-2002-023). The method of the light-cone sum rules was applied to calculate nonfactorizable contributions to the $B \rightarrow J/\psi K$ decay (B. Melić, R. Rückl, MZ-TH-02-23, WUE-ITP-2002-020; B. Melić, MZ-TH-02-20, WUE-ITP-2002-021, hep-ph/0209265, Proc. of Int. School on Heavy Quark Physics (Dubna, May-June 2002); B. Melić, R. Rückl, MZ-TH-02-022, WUE-ITP-2002-027, hep-ph/0210353, Proc. Workshop on B Physics and CP Violation (Frascati, October 2002), Frontier Science, 2002).

3. The two-gluon components of the η and η' mesons have been examined to leading-twist accuracy and their contribution to the η , η' transition form factor, to the electroproduction of η , η' mesons and to the $g^*g^*\eta'$ vertex has been investigated (P. Kroll, K. Passek-Kumerički, hep-ph/0210045, to appear in Phys. Rev. D). The next-to-next-to-leading order prediction for the photon-to-pion transition form factor has been evaluated using the conformal symmetry arguments (D. Müller, B. Melić, K. Passek-Kumerički, hep-ph/0212346). The infrared finite one-loop box scalar integral

with massless internal lines has been calculated for arbitrary values of the kinematic variables (G. Duplančić, B. Nižić; Eur. Phys. J. C 24 (2002) 385).

4. In out of equilibrium Feynman diagrams has been found that the vertices not containing either outgoing retarded or incoming advanced propagators do not conserve energy (I. Dadić, Nucl. Phys. A702 (2002) 356C-360C). The emission of photons from out of equilibrium QCD plasma has been calculated (I. Dadić, invited talk at CERN Theory Workshop "Hard Probes in Heavy Ion Collisions at the LHC", Mar. 11–15, 2002., Geneve, Switzerland).

5. The contribution of the vacuum energy of quantum fields to the cosmological constant has been calculated in the renormalization scheme with a correct treatment of mass thresholds. The renormalization group equation leads to the running of the cosmological constant. The strong constraint on the value of the Higgs boson mass is obtained by comparison with limits on the dark energy part in the universe during the epochs of cosmological evolution (e. g., nucleosynthesis), and assuming the validity of the standard model up to the Planck scale (A. Babić, B. Guberina, R. Horvat, H. Štefančić, Phys. Rev. D 65 (2002) 085002). For a generic quantum field theory, the role played by the renormalization group (RG) running of the cosmological constant (CC) in determining the ultimate fate of the universe was studied. Starting from the present-era values for cosmological parameters it is demonstrated how the running can easily provide a negative cosmological constant, thereby changing the fate of the universe, at the same time rendering compatibility with critical string theory (B. Guberina, R. Horvat, H. Štefančić, hep-ph/021118; B. Guberina, talk at the CMS meeting, Split; H. Štefančić, talk at the Triangle Meeting, Vienna).

6. Properties of dark matter and dark energy are investigated in the framework of a model based on self-gravitating fermions at finite temperature and a bosonic field with a self-interaction that yields the Chaplygin gas equation of state (N. Bilić, Phys. Lett. B 535 (2002) 17; astro-ph/0207423; astro-ph/0207424).

7. The local particle current is constructed and applied to quantum field theory in classical

background fields (H. Nikolić, Phys. Lett. B 527 (2002) 119; hep-th/0202204, to appear in Int. J. Mod. Phys. D; hep-th/0205022).

8. Review of rare B-meson decays is given in the light of recent experimental results. Forbidden decays, in gauge, hadronic and neutrino sectors were described through field theory developed on noncommutative space-time (J. Trampetić, Acta Physica Polonica B 33 (2002) 4317). The standard model strictly forbidden $Z \rightarrow \gamma \gamma$ and $Z \rightarrow g g$.

decay modes have been proposed as a place where noncommutativity of space-time could be experimentally discovered (G. Duplančić, J. Trampetić et al, hep-ph/0202121, submitted).

The photon-neutrino interaction in noncommutative gauge field theory was used to determine the astrophysical bound on the scale of noncommutativity (J. Trampetić et al. hep-ph/0212292, submitted). The properties of the harmonic oscillator on noncommutative spaces are studied, with special attention to the problems with minimal length uncertainty relations and ladder operators (I. Dadić, L. Jonke, and S. Meljanac, hep-th/0210264, to appear in Phys. Rev. D; I. Dadić, L. Jonke, and S. Meljanac, hep-th/0301066, submitted).

KVANTNA TEORIJA POLJA, NEKOMUTATIVNI PROSTORI I SIMETRIJE QUANTUM FIELD THEORY, NONCOMMUTATIVE SPACES, AND SYMMETRIES

Voditelj projekta: dr. sc. Stjepan Meljanac

Tel. ++385 1 4561 121

e-mail: meljanac@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Anđelka Andraši, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica

Ivan Andrić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
 Igor Baković, dipl. inž. matematike, mlađi asistent, znanstveni novak
 Velimir Bardek, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik
 Larisa Jonke, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
 Danijel Jurman, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak
 Stjepan Meljanac, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
 Davor Palle, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Tristan Hübsch, redovni profesor, Howard University, Washington, SAD (konzultant)
 Marko Stojić, doktor fiz. znanosti, Gimnazija "Lucijana Vranjanina", Zagreb
 Dragutin Svrtn, doktor matem. znanosti, redovni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultant)
 John Clayton Taylor, , emeritus professor, Fellow of the Royal Society, University of Cambridge, Cambridge, Velika Britanija (konzultant)

Miroslav Dorešić, dipl. inž. fizike, stručni suradnik, Grupa za teorijsku i matematičku fiziku (izvan projekta)

Program rada i rezultati na projektu:

Razmatran je model od N dvodimenzionalnih bozona u harmoničkom potencijalu s translacijski i rotacijski invarijantnim, slabim dvočestičnim međudjelovanjem. Predložena je sistematska rekurzivna metoda konstruiranja svih valnih funkcija. Pronađeno rješenje iščezavajuće energije signalizira ekskluzivnu statistiku (V. Bardek, S. Meljanac, Phys. Rev. A (2002) 65). Analizirano je ponašanje Calogerovog modela i srodnih modela od N deformiranih oscilatora za specijalnu vrijednost statističkog parametra. U limesu velikog N , sistem se reducira na velik broj kolapsirajućih slobodnih čestica (V. Bardek, L. Jonke, S. Meljanac, M. Mileković, Phys. Lett. B531 (2002)).

Studirane su permutaciono invarijantne algebre i njihove realizacije u Fockovom prostoru. Posebice je analizirana struktura, svojstvene vrijednosti i svojstvena stanja Gramovih matrica za Calogero model (S. Meljanac, M. Mileković, M. Stojić, Eur. Phys. J. C 24 (2002)). Konstruirana je permutaciono simetrična algebra reprezentirana na simetričnom Fockovom prostoru. Nađena je bozonska realizacija nelinearne dinamičke simetrije koja opisuje strukturu degeneriranih nivoa u Calogero modelu (L. Jonke, S. Meljanac, Phys. Lett. B526 (2002)). Analiziran je konačni Chern-Simonsov matrični model u algebarskom pristupu, posebice algebra opservabli i fizikalni Fockov prostor. Uspostavljena je identifikacija stanja u Fockovom prostoru Chern-Simonsovog matričnog modela i Calogerovog modela. Opisana su stanja kvazi-čestica i kvazi-rupa u oba modela pomoću Schur-ovih funkcija (L. Jonke, S. Meljanac, J. High Energy Phys. 01 (2002)), a naglašene su i algebarske sličnosti razlike tih dvaju modela (L. Jonke, S. Meljanac, Phys. Rev B66 (2002)).

Istraženo je i dokazano postojanje simetrije dualnosti u višedimenzionalnim sistemima s konformnom simetrijom (I. Andrić, L. Jonke, Phys. Rev. A 65 (2002)). Pomoću generatora $SU(1,1)$ grupe i dualne simetrije riješen je problem interakcije među česticama iz dvije ili više familija. Pokazano je postojanje dualnosti u formulaciji teorije polja (I. Andrić, D. Jurman, Fortschr. Phys. 50 (2002)). Izvrjednjene su sve tri komponente gluonskog propagatora u Coulombovom baždarnom uvjetu.

Studirani su nehomogeni kozmološki modeli izvodom i rješenjima Dyer-Roeder jednadžbe za udaljenosti angularnog dijametra te njihove implikacije na gravitacijske leće i statistiku galaksije. Prezentirano je rješenje problema kozmičkih zraka jako velikih energija bazirano na fizici teških Majorana neutrina. Studiran je alternativni

mehanizam "povratne reakcije zakrivljenosti prostor-vremena" u objašnjenju smanjivanja kinetičke energije binarnih pulsara (D. Palle, Nuovo Cim. B 117 (2002)).

Research programme and results:

We considered a model of N two-dimensional bosons in a harmonic trap with the translational and rotational invariant, weak two-particle interaction. We presented a systematic recursive method for constructing all wave functions. We found a vanishing energy solution signaling exclusive statistics (V. Bardek, S. Meljanac, Phys. Rev. A 65 (2002)). We analyzed the behavior of the Calogero model and the related model of N deformed oscillators for a special value of the statistical parameter. In the large- N limit, the system reduces to a large number of collapsing free particles (V. Bardek, L. Jonke, S. Meljanac, M. Mileković, Phys. Lett. B531 (2002)).

Permutation invariant algebras and their Fock space realizations were studied. Especially, the structure, the eigenvalues and eigenstates of Gram matrices for the Calogero model were analyzed. Permutation symmetric algebra of operators represented on symmetric Fock space was constructed (S. Meljanac, M. Mileković, M. Stojić, Eur. Phys. J. C 24 (2002)). The bosonic realization of nonlinear dynamical symmetry algebra describing the structure of degenerate levels of the Calogero model was found (L. Jonke, S. Meljanac, Phys. Lett. B526 (2002)). The algebra of observables and the physical Fock space of the finite Chern-Simons matrix model were analyzed in the algebraic approach. The identification of the states in the Fock space of the Chern-Simons matrix model and the Calogero model was established. Quasiparticle and quasihole states in both models were described in terms of Schur functions (L. Jonke, S. Meljanac, J. High Energy Phys. 01 (2002)). Algebraic similarities and distinctions between these two models were pointed out (L. Jonke, S. Meljanac, Phys. Rev. B66 (2002)).

Based on conformal invariance, the Calogero-Moser-Sutherland models were analyzed using generators of the $SU(1,1)$ group. Solutions can be represented as coherent states (I. Andrić, L. Jonke, Phys. Rev. A 65 (2002)). Using duality properties the solutions for the interaction of particles in different families were found in low-dimensional collective field theory (I. Andrić, D. Jurman, Fortschr. Phys. 50 (2002)). Three components of the gluon propagator were evaluated in the Coulomb gauge. We performed a study of inhomogeneous cosmic models deriving and solving the Dyer Roeder equation for the angular diameter distance and studying the implications for gravitational lensing and galaxy statistics. We presented a solution of the problem of ultra-high energy cosmic rays based on the physics of heavy Majorana neutrinos. The alternative 'curvature backreaction' mechanism was studied to explain the kinetic energy loss in binary pulsar systems (D. Palle, Nuovo Cim. B 117 (2002)).

STRUKTURA DINAMIČKIH FLUKTUACIJA U NELINEARNIM SUSTAVIMA STRUCTURE OF DYNAMICAL FLUCTUATIONS IN NONLINEAR SYSTEMS

Voditelj projekta: dr. sc. Mladen Martinis

Tel. ++385 1 4561 032 e-mail: martinis@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Andrea Knežević, magistrica fiz. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Davor Krajnović, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak

Mladen Martinis, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Stjepan Marčelja, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Vesna Mikuta-Martinis, doktorica fiz. znanosti, znanstvena suradnica

Krešimir Pavelić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Marina Skender, dipl. inž. fizike, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Alfred Švarc, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)
Vinko Zlatić, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak

Suradnici iz drugih ustanova:

Marko Robnik, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Center for Applied Mathematics and Theoretical Physics, Sveučilište u Mariboru, Maribor, Slovenija (konzultant)
Anton Ruffing, doktor matem. znanosti, redovni profesor, Tehničko sveučilište, München, Njemačka (konzultant)
Anton Šmalcelj, doktor med. znanosti, redovni profesor, KBC Rebro, Medicinski fakultet u Zagrebu (konzultant)
Đurđica Težak, doktorica kem. znanosti, izvanredna profesorica, Kemijski odsjek Prirodoslovno-matematičkog fakulteta, Zagreb
Emil Vargović, inž. elektrotehnike i računarstva, CDV info d.o.o. (konzultant)
Branko Vitale, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik u mirovini
Bojan Vršnak, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik, Geodetski fakultet, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj predloženog projekta je teorijsko-eksperimentalno i numeričko ispitivanje strukture dinamičkih fluktuacija kod sustava koji posjeduju složenu dinamiku, nestabilnosti, komponente u režimu determinističkog kaosa kao i one koji imaju neravnotežne fazne prijelaze popraćene stvaranjem novih prostorno-vremenskih struktura. U ovom projektu posebno će se ispitivati formiranje i evolucija MHD udarnih valova u uvjetima zvijezdane atmosfere (M. Skender: 10th SPM Proceedings 2002, 757-761); dinamičke analize manjeg skupa (5-10) eliptičkih galaksija po radiusu od jezgre do periferije stelarne populacije s ciljem određivanja mase crnih rupa u danim galaksijama i njihove evolucije (K. Krajnović and W. Jaffe, Astronomy and Astrophysics, 390 (2002) 423-430); prostorno vremenska struktura nelinearnog sigma modela u ovisnosti od početnih i rubnih uvjeta blizu točke kiralnog prijelaza; konformna kvantna mehanika i problem vremenskog operatora (quant-ph/0211118); dinamičko formiranje prostorno vremenskih struktura vezikula kod liotropno tekućih kristala; multidisciplinarni pristup srcu i organima kao skupu vezanih nelinearnih oscilatora te problem njihove sinhronizacije i kontrole; dinamičke fluktuacije u vremenskim serijama EKG-a i drugih biosignala te njihova međusobna povezanost; promjene u strukturi i razini složenosti srčane varijabilnosti (HRV) kod bolesnika; stvaranje cilijane baze podataka (M. Martinis et al: physical/0212029, nlin. CD/0211046), te matematičko modeliranje kronične limfatične leukemije.

Research programme and results:

The aim of the proposed project is to study theoretically, experimentally and numerically the structure of dynamical fluctuations in complex systems near the points of instabilities, when parts of the system are in the chaotic regime, as well as those which have nonequilibrium phase transitions with the spontaneous space-time pattern formation. The following specific problems will be studied: the formation and evolution of MHD shock waves in stellar atmosphere (M. Skender: 10th SPM Proceedings 2002, 757-761); dynamical analysis of a smaller group (5-10) of elliptical galaxies from the core to the peripheral population of stars with the aim to determine their evolution and the black hole masses in the center (K. Krajnović and W. Jaffe, Astronomy and Astrophysics, 390 (2002) 423-430); the space-time structure of the nonlinear sigma-model near the point of the chiral phase transition as a function of initial and boundary conditions and the problem of time operator for conformal quantum mechanics (quant-ph/0211118); dynamical formation of space-time structures vesicles in lyotropic liquid crystals; a multidisciplinary approach to the heart and the human organs regarded as a collection of coupled nonlinear oscillators and the problem of their synchronization, connectivity and control during illness;

dynamical fluctuations in time series of ECG and other human organs; changes in the structure and the level of complexity of the heart rate variability during illness (M. Martinis et al: physical/0212029, nlin. CD/0211046); data-forming base, and the mathematical modelling of CLL.

NELINEARNOST I DETERMINISTIČKI KAOS U KARDIOLOGIJI NONLINEARITY AND DETERMINISTIC CHAOS IN CARDIOLOGY

Voditelj projekta: dr. sc. Mladen Martinis

Tel. ++385 1 4561 032 e-mail: martinis@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Josip Črnugelj, doktor fiz. znanosti, stručni suradnik (od 21.10.2002.)

Andrea Knežević, magistrica fiz. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Mladen Martinis, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Vesna Mikuta-Martinis, doktorica fiz. znanosti, znanstvena suradnica

Suradnici iz drugih ustanova:

Antonija Krstačić, dr. med., mlađa asistentica, Sveučilišna klinika za dijabetes, endokrinologiju i bolesti metabolizma, Zagreb

Goran Krstačić, doktor med. znanosti, Poliklinika za prevenciju kardiovaskularnih bolesti i rehabilitaciju, Zagreb

Anton Šmalcelj, doktor med. znanosti, redovni profesor, Medicinski fakultet Sveučilišta u Zagrebu, KBC Rebro (konzultant)

Emil Vargović, dipl. inž. elektrotehnike, CDV info d.o.o.

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj ovog projekta bio je ispitati metodama linearne i nelinearne dinamike i teorije kaosa promjene u strukturi fluktuacija srčanog ritma kod stabilne angine pektoris kao jedne od čestih oblika ishemijske bolesti srca.

Svrha istraživanja je bila povezati promjene u strukturi fluktuacija srčanog ritma sa pojavom i prognozom ishemijske bolesti srca.

Predloženo istraživanje ima direktnu primjenu u zdravstvu kao dopuna postojećim dijagnostičkim metodama.

Neposredni rezultati ovih jednogodišnjih istraživanja pokazali su da: 1. dinamička analiza varijabilnosti srčanog ritma može otkriti abnormalne promijene R-R intervala koji se ne mogu otkriti konvencionalnim linearnim statističkim metodama; 2. postoje značajne statističke razlike u vrijednosti Hurstovog eksponenta i fraktalne dimenzije kod vremenskih serija R-R intervala tijekom svakog pojedinog programa testa opterećenja i tijekom cijelog testa skupno; 3. neke od metoda nelinearne dinamike imaju vjerodostojnost i prediktabilnost u otkrivanju ispitanika sa stabilnom anginom pektoris. To su prvenstveno Hurstov eksponent i fraktalna dimenzija koji su potpuno razdvajali skupine zdravih od bolesnih ispitanika tijekom testa opterećenja na pomičnoj traci.

Jedan od značajnijih rezultata ovih istraživanja je opažanje sustavnog porasta Hurstova eksponenta, koji kvantificira dugodosežnost korelacije u vremenskoj seriji R-R intervala, kod zdravih osoba pri progresivnoj fizičkoj aktivnosti za razliku od bolesnih od angine pektoris gdje se smanjuje.

Na temelju tih rezultata izrađena je i obranjena u 2002. g. na Medicinskom fakultetu u Zagrebu doktorska disertacija jednog od suradnika na projektu Mr. Sc. Gorana Krstačića "Ispitivanje nelinearne dinamike kratkih vremenskih serija kod bolesnika sa stabilnom anginom pektoris" (mentori Prof. dr. M. Martinis i Prof. dr. A. Šmalcelj), te prijavljena na PMF-u u Zagrebu tema doktorske disertacije suradnice na projektu Mr. Sc. Andree Knežević "Multifraktalnost srčanog ritma" (mentor Prof. dr. M. Martinis).

Četiri znanstvena rada poslana su u tisak, podaci se mogu naći na <http://www.arXiv.org/physics/> (physics/0110010 (objavljeno), physics/0212029, physics/0301011, nlin.CD/0211046).

Research programme and results:

The aim of this project is to study using the methods of nonlinear dynamics and chaos theory the changes in the structure of fluctuations of the heart beats at stable angina pectoris.

The purpose of these investigations is to relate the changes in the structure of fluctuations of the heart rate with the appearance and prognosis of the ischemic heart disease.

The proposed investigation can be directly applied in health service as an addition to existing diagnostic methods.

The results of one-year investigations have shown the following: 1. dynamical analysis of heart rate variability can indicate abnormal changes in R-R intervals that cannot be determined using conventional linear statistic methods; 2. there are significant statistical differences in the value of the Hurst exponent and fractal dimension in time series of R-R intervals during each single exercise test programme as well as during the entire exercise test; 3. that some of the methods of nonlinear dynamics are reliable and predictable in detecting stable angina pectoris. These are the methods of the Hurst exponent and fractal dimension, which can completely separate the healthy persons from the diseased ones during the progressive physical activity on the moving belt.

One of the most significant results of these investigations was the observation of a systematic increase of the Hurst exponent in healthy persons during progressive physical activities, in contrast to diseased persons with angina pectoris, in which case the Hurst exponent decreases. The Hurst exponent qualifies long-range correlations in a time series of R-R intervals.

Based on these results, M. Sc. Goran Krstačić submitted and defended his Ph. D. thesis entitled "Investigation of nonlinear dynamics of short time series in patients with stable angina pectoris" at the Medical Faculty in Zagreb in 2002 (supervisors Prof. Dr. M. Martinis and Prof. Dr. A. Šmalcelj). M. Sc. Andrea Knežević submitted an application for a Ph. D. thesis entitled "Multifractality in heart rate" to the Faculty of Science, Zagreb, (supervised by Prof. Dr. M. Martinis). Four scientific publications have been submitted for publication, and relevant data can be found at <http://www.arXiv.org/physics/> (physics/0110010, physics/0212029, physics/0301011, nlin.CD/0211046).

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contentsu:

1. Andrić, Ivan; Jonke, Larisa. Duality and quasiparticles in the Calogero-Sutherland model : some exact results. // *Physical review A*. 65 (2002), 3; 034707.
2. Andrić, Ivan; Jurman, Danijel. Duality in the low dimensional field theory. // *Fortschritte der Physik*. 50 (2002), 5-7; 675-679.
3. Babić, Ana; Guberina, Branko; Horvat, Raul; Štefančić, Hrvoje. Renormalization-group running of the cosmological constant and its

- implication for the Higgs boson mass in the Standard Model. // *Physical review D*. 65 (2002); 085002.
4. Bardek, Velimir; Jonke, Larisa; Meljanac, Stjepan; Mileković, Marijan. Calogero model, deformed oscillators and the collapse. // *Physics letters B*. 531 (2002), 3-4; 311-315.
 5. Bardek, Velimir; Meljanac, Stjepan. Analytical results for trapped weakly interacting bosons in two dimensions. // *Physical review A*. 65 (2002), 1; 013602.
 6. Bilić, Neven; Tupper, G.B.; Viollier, R.D. Unification of dark matter and dark energy : the inhomogeneous Chaplygin gas. // *Physics letters B*. 535 (2002); 17-21.
 7. Dadić, Ivan. Out of equilibrium TFT-energy nonconservation at vertices. // *Nuclear physics A*. 702 (2002); 356c-360c.
 8. Duplančić, Goran; Nižić, Bene. IR finite one-loop box scalar integral with massless internal lines. // *The European physical journal C*. 24 (2002); 385-391.
 9. Duplančić, Goran; Pašagić, Husein; Praszalowicz, Michal; Trampetić, Josip. Nonleptonic $\Omega^{\{-}}$ decays and the Skyrme model. // *Physical review D*. 65 (2002); 054001-054005.
 10. Guberina, Branko; Štefančić, Hrvoje. Cabibbo suppressed decays and the X_{ic}^+ lifetime. // *Physical review D*. 65 (2002); 114004.
 11. Jonke, Larisa; Meljanac, Stjepan. Algebra of the observables in the Calogero model and in the Chern-Simons matrix model. // *Physical review B*. 66 (2002), 20; 205313.
 12. Jonke, Larisa; Meljanac, Stjepan. Bosonic realisation of algebras in the Calogero model. // *Physics letters B*. 526 (2002), 1-2; 149-156.
 13. Jonke, Larisa; Meljanac, Stjepan. Finite Chern-Simons matrix model - algebraic approach. // *Journal of high energy physics*. 01 (2002), 1; 008.
 14. Krajnović, Davor; Jaffe, Walter. Relation between dust and radio luminosity in optically selected early type galaxies. // *Astronomy and astrophysics*. 390 (2002); 423-430.
 15. Melić, Blaženka; Nižić, Bene; Passek, Kornelija. Brodsky-Lepage-Mackenzie scale for the pion transition form factor. // *Physical review D*. 65 (2002), 5; 053020.
 16. Meljanac, Stjepan; Mileković, Marijan; Stojić, Marko. Permutation invariant algebras, a Fock space realization and the Calogero model. // *European physical journal C*. 24 (2002), 2; 331-343.
 17. Nikolić, Hrvoje. A general-covariant concept of particles in curved background. // *Physics letters B*. 527 (2002), 2; 119-124.

18. Palle, Davor. On the large-scale inhomogeneous Universe and the cosmological constant. // *Nuovo cimento della Societa Italiana di fisica B : general physics relativity astronomy and mathematical physics and methods*. 117 (2002), 6; 687-693.
19. Tomaš, Marin-Slobodan. Casimir force in absorbing multilayers. // *Physical review A*. 66 (2002), 5; 052103;1-7.
20. Trampetić, Josip. Rare and forbidden decays. // *Acta physica Polonica B*. 33 (2002); 4317-4372.

Ostali radovi u časopisima:

1. Dadić, Ivan. Erratum: Out of equilibrium thermal field theories - finite time after switching on the interaction - Wigner transforms of projected functions. / *Physical review D* (0556-2821) 66 (2002); 069903(E)

Radovi u preprint arhivama:

1. Aschieri, P.; Baković, Igor; Jurčo, B.; Schupp, P.: Noncommutative gerbes and deformation quantization, hep-th/0206101
2. Behr, W.; Deshpande, N.G.; Duplancić, Goran; Schupp, P.; Trampetić, Josip; Wess, J.: The $Z \rightarrow \gamma \gamma$, gg decays in the noncommutative standard model, hep-ph/0202121
3. Bilić, Neven; Tupper, G.B.; Viollier, R.D.: Dark matter, dark energy and the Chaplygin gas, astro-ph/0207423
4. Bilić, Neven; Munyaneza, F.; Tupper, G.B.; Viollier, R.D.: Comparison of the black hole and fermion ball scenarios of the galactic center, astro-ph/0207424
5. Dadić, Ivan; Jonke, Larisa; Meljanac, Stjepan: Harmonic oscillator with minimal length uncertainty relations and ladder operators, hep-th/0210264
6. Dadić, Ivan; Jonke, Larisa; Meljanac, Stjepan: Harmonic oscillator on noncommutative spaces, hep-th/0301066
7. Guberina, Branko; Horvat, Raul; Štefančić, Hrvoje: Renormalization-group running of the cosmological constant and the fate of the universe, hep-ph/0211184
8. Jonke, Larisa; Meljanac, Stjepan: Representations of noncommutative quantum mechanics and symmetries, hep-th/0210042
9. Körner, J.G.; Melić, Blaženka; Prelovsek, S.: A survey of the top polarization at a linear e^+e^- collider, MZ-TH-02-25, WUE-ITP-2002-023
10. Krajnović, Davor; Jaffe, W.: Relation between dust and radio luminosity in optically selected early type galaxies, astro-ph/0205226
11. Kroll, P.; Passek-Kumerički, Kornelija: The two-gluon components of the η and η' mesons to leading-twist accuracy, hep-ph/0210045
12. Kunstelj, D.; Martinis, Mladen; Knežević, Andrea.: Is there chaos in the electron microscope?, nlin. CD/0211046
13. Martinis, Mladen; Vikuta, Vesna: Time operator for a quantum singular oscillator, quant-ph/0211118
14. Martinis, Mladen; Knežević, Andrea; Krstačić, Goran; Vargović, Emil: Changes in the Hurst exponent of heartbeat intervals during physical activities, physics/0212029
15. Melić, Blaženka: Exclusive nonleptonic B decays from QCD light cone sum rules, MZ-TH-02-20, WUE-ITP-2002-021, hep-ph/0209265
16. Melić, Blaženka; Müller, D.; Passek-Kumerički, Kornelija: Next-to-next-to-leading prediction for the photon-to-pion transition form factor, hep-ph/0212346

17. Melić, Blaženka; Rückl, R.: Soft nonfactorizable contributions to $B \rightarrow J/\psi K$, MZ-TH-02-23, WUE-ITP-2002-020
18. Melić, Blaženka; Rückl, R.: Nonfactorizable effects in $B \rightarrow J/\psi K$, MZ-TH-02-022, WUE-ITP-2002-027, hep-ph/0210353
19. Nikolić, Hrvoje: Generalizations of normal ordering and their applications to quantum field theory in gravitational and electromagnetic backgrounds, hep-th/0205022
20. Nikolić, Hrvoje: Bohmian particle trajectories in relativistic quantum field theory, quant-ph/0208185
21. Nikolić, Hrvoje: The general-covariant and gauge-invariant theory of quantum particles in classical backgrounds, hep-th/0202204
22. Schupp, P.; Trampetić, Josip; Wess, J.; Raffelt, G.: The photon-neutrino interaction in non-commutative gauge field theory and astrophysical bounds, hep-ph/0212292
23. Palle, Davor: On binary pulsars and the force of gravity, astro-ph/0211481
24. Palle, Davor: On heavy Majorana neutrinos as a source of the highest energy cosmic rays, hep-ph/0207075

Radovi objavljeni u zbornicima skupova:

1. Bilić, Neven; Munyaneza, Faustin; Tupper, Gary B.; Viollier, Raoul D. The dynamics of stars near Sgr A* and dark matter at the center and in the halo of the galaxy // *Progress in particle and nuclear physics, Vol. 48 (1)* / Faessler, A. (ur.). Oxford : Pergamon, 2002. 291-300.
2. Bilić, Neven; Munyaneza, Faustin; Tupper, Gary B.; Viollier, Raoul D. Comparison of the black hole and Fermion ball scenarios of the galactic center // *Proceedings of the 4th International Heidelberg Conference on Dark Matter in Astro and Particle Physics (DARK 2002)* / Klapdor-Kleingrothaus, H. V.; Viollier, R. D. (ur.). Berlin-Heidelberg : Springer, 2002. 46-57.
3. Bilić, Neven; Tupper, Gary B.; Viollier, Raoul D. Dark matter in the halo of the galaxy // *Proceedings of the 4th International Heidelberg Conference on Dark Matter in Astro and Particle Physics (DARK 2002)* / Klapdor-Kleingrothaus, H. V.; Viollier, R. D. (ur.). Berlin-Heidelberg : Springer, 2002. 164-172.
4. Bilić, Neven; Tupper, Gary B.; Viollier, Raoul D. Dark matter, dark energy and the Chaplygin gas // *Proceedings of the 4th International Heidelberg Conference on Dark Matter in Astro and Particle Physics (DARK 2002)* / Klapdor-Kleingrothaus, H. V.; Viollier, R. D. (ur.). Berlin-Heidelberg : Springer, 2002. 306-314.
5. Dadić, Ivan. Out of equilibrium TFT beyond gradient expansion : resummed propagators // *STATISTICAL QCD : Proceedings* / Karsch, F.; Satz, H. (ur.). Amsterdam : North-Holland, 2002. 356-361.
6. Krstačić, Goran; Krstačić, Antonija; Martinis, Mladen; Vargović, Emil; Knežević, Andrea; Smalcelj, Anton; Jembrek-Gostović, Mirjana; Gamberger, Dragan; Šmuc, Tomislav. Non-linear analysis of heart rate variability in patients with coronary heart disease // *Computers in cardiology 2002* / Alan Murray (ur.). Memphis : IEEE, 2002. 673-675.
7. Krstačić, Goran; Martinis, Mladen; Vargović, Emil; Knežević, Andrea; Krstačić, Antonija; Smalcelj, Anton; Jembrek-Gostović, Mirjana. Non-linear dynamics in patients with stable angina pectoris // *Computers in Cardiology*

2001. Rotterdam : IEEE, 2002. 45-48.

8. Lindebaum, Robert; Bilić, Neven; Tupper, Gary B.; Viollier, Raoul D. On the formation of degenerate heavy Fermion stars // *Proceedings of the 4th International Heidelberg Conference on Dark Matter in Astro and Particle Physics (DARK 2002)* / Klapdor-Kleingrothaus, H. V.; Viollier, R. D. (ur.). Berlin-Heidelberg : Springer, 2002. 149-156.
9. Passek-Kumerički, Kornelija. Leading-twist two gluon distribution amplitude and exclusive processes involving eta and eta' mesons // *Exclusive processes at high momentum transfer* / Radyushkin, Anatoly; Stoler, Paul (ur.). New Jersey : World Scientific, 2002. 136-141.
10. Skender, Marina; Vršnak, Bojan; Martinis, Mladen. Physical conditions in the reconnection outflow // *10th SPM Proceedings* / A. Wilson (ur.): Nordwijk, ESA Publication Division ESTEC, 2002. 757-761.
11. Andrić, Ivan; Jurman, Daniel. Duality in low dimensional field theory // *"100 Years Werner Heisenberg - Works and Impact"* / Papenfuss, D.; Lust, D.; Schleich, W. P. (ur.). Berlin : Wiley-VCH, 2002. 675-679.

Doktorske disertacije:

1. Krstačić, Goran. Ispitivanje nelinearne dinamike kratkih vremenskih serija kod bolesnika sa stabilnom anginom pectoris. Zagreb : Medicinski fakultet, 11.12.2002., 211 str., Voditelji: Šmalcelj, Anton; Martinis, Mladen.
2. Stojić, Marko. Poopćene statistike i operatorske algebre. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 5.6.2002, 122 str., Voditelji: Mileković, Marijan; Meljanac, Stjepan.
3. Štefančić, Hrvoje. Hijerarhija vremena života hadrona s teškim kvarkovima. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 1.7.2002, 124 str., Voditelj: Guberina, Branko.

Diplomski radovi:

1. Samsarov, Anđelo. Teorija bozonske strune. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 27.9.2002., 85 str., Voditelj: Meljanac, Stjepan.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

Melić, B.: Vremena života teških hadrona, 8.1.2002.
 Melić, B.: Vremena života teških hadrona, 2.4.2002.
 Jurman, D.: Calogero model, konformna simetrija, dualnost, 4.4.2002.
 Nikolić, H.: Čestice kao lokalni objekti u teoriji polja, 9.4.2002.
 Jonke, L.: Chern-Simonsova teorija u nekomutativnoj ravnini, 11.4.2002.
 Štefančić, H.: Hijerarhija vremena života hadrona s teškim kvarkovima, 20.06.2002.
 Krajnović, D.: SAURON Studija NGC2974, 20.12.2002.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

Passek, K.: Transition form factor for the flavour singlet pseudoscalar meson, Universität Wuppertal, Wuppertal, Njemačka, 13.2.2002.
 Martinis, M.: Sepsa i teorija kaosa, Klinika za infektivne bolesti "Dr Fran Mihaljević", Zagreb, 6.3.2002.

- Andrić, I.: Strong-weak coupling duality in low dimensional field theory, Center for Theoretical Physics, Massachusetts Institute of Technology, Boston, SAD, 11.3.2002.
- Duplancić, G.: The $Z \rightarrow \gamma \gamma$, gg decays in the noncommutative standard model, Max-Planck-Institute, München, Njemačka, 8.4.2002.
- Martinis, M.: Od informatike do bioinformatike, Medicinski fakultet u Osijeku, Osijek, 24.5.2002.
- Passek-Kumerički, K.: Hard exclusive processes and the two-gluon components of the eta and eta' mesons, University of Aachen, Aachen, Njemačka, 24.10.2002.
- Andrić, I.: Duality in the low dimensional field theory, Helsinki Institute of Physics, Helsinki, Finska, 5.12.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

- Baković, I., Ludwig-Maximilians-Universität, Sektion Physik, München, Njemačka, 1.1.-31.12.2002.
- Krajnović, D. Universiteit Leiden, Leiden Observatory, Nizozemska, 1.1.-31.12.2002.
- Melić, B., Institut für Physik, Johannes-Gutenberg Universität Mainz, Mainz, Njemačka, 1.1.-31.10.2002.
- Melić, B., Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Bayerische Julius-Maximilians-Universität Würzburg, Würzburg, Njemačka, 1.1.-31.10.2002.
- Passek-Kumerički, K., Universität Wuppertal, Wuppertal, Njemačka, 1.1.-31.10.2002.
- Velić, M., University of Cambridge, Cavendish Laboratory, Cambridge, Velika Britanija, 1.1.2002.-30.9.2004.
- Zlatić, V., Faculteit der Netuurwetenschappen, Wiskunde en Informatica, Amsterdam, Nizozemska, 8.2.2002.-7.2.2003.
- Trampetić, J., Ludwig-Maximilians-Universität, München, Njemačka, 18.2.-7.3.2002.
- Duplancić, G., Ludwig-Maximilians-Universität, München, Njemačka, 24.2.-6.3.2002.
- Knežević, A., The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Trst, Italija, 26.2.-26.3.2002.
- Andrić, I., Massachusetts Institute of Technology, Boston, SAD; Brown University, Providence, SAD, 3-23.3.2002.
- Skender, M., Schumacher College, Phymouth, Engleska, 3-22.3.2002.
- Jurman, D., Brown University, Providence, SAD, 3-23.3.2002.
- Trampetić, J., Ludwig-Maximilians-Universität, München, Njemačka, 7-12.4.2002.
- Duplancić, G., Ludwig-Maximilians-Universität, Max-Planck-Institute, München, Njemačka, 8-10.4.2002.
- Crljen, Ž., Chalmers University of Technology, Göteborg, Švedska, 7-22.4.2002.
- Crljen, Ž., The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Trst, Italija, 16.5.-19.7.2002.
- Lazić, P., The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Trst, Italija, 10.6.-22.7.2002.
- Trampetić, J., Ludwig-Maximilians-Universität, München, Njemačka, 20-24.5.2002.
- Trampetić, J., Institute of Physics, Jagellonian University, Cracow, Poljska, 29-31.5.2002.
- Trampetić, J., Ludwig-Maximilians-Universität, München, Njemačka, 2-17.7.2002.
- Trampetić, J., CERN, Geneve, Švicarska, 1.9.2002.-31.3.2003.
- Melić, B., Institut für Theoretische Teilchenphysik, Universität Karlsruhe, Karlsruhe, Njemačka, 1.11.2002.-30.4.2003.
- Trampetić, J., Max-Planck-Institute; Institute of Theoretical Physics, München, Njemačka, 19-22.11.2002.
- Andrić, I., University of Helsinki, Helsinki, Finska, 25.11.-9.12.2002.
- Passek-Kumerički, K., Universität Bochum, Bochum, Njemačka, 10-19.12.2002.
- Passek-Kumerički, K., Universität Wuppertal, Wuppertal, Njemačka, 20-21.12.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

DARK 2002: 4TH INTERNATIONAL HEIDELBERG CONFERENCE ON DARK MATTER IN ASTRO AND PARTICLE PHYSICS

Cape Town, Južnoafrička Republika, 4-9.2.2002.

Sudionici: Bilić, N.

Prilozi:

Bilić, N.; Munyaneza, F.; Tupper, G. B.; Viollier, R. D. Comparison of the black hole and Fermion ball scenarios of the galactic center, predavanje.

Bilić, N.; Tupper, G. B.; Viollier, R. D. Dark matter in the halo of the galaxy, predavanje.

Bilić, N.; Tupper, G. B.; Viollier, R. D. Dark matter, dark energy and the Chaplygin gas, predavanje.

Lindebaum, R.; Bilić, N.; Tupper, G. B.; Viollier, R. D. On the formation of degenerate heavy Fermion stars, predavanje.

WORKSHOP ON THE CKM UNITARITY TRIANGLE

Geneve, Švicarska, 13-16.2.2002.

Sudionik: Štefančić, H.

ESO-CERN-ESA SYMPOSIUM ON ASTRONOMY, COSMOLOGY AND FUNDAMENTAL PHYSICS

Garching bei München, Njemačka, 4-7.3.2002.

Sudionik: Palle, D.

CERN WORKSHOP: HARD PROBES IN HEAVY ION COLLISIONS AT THE LHC

Geneve, Švicarska, 10-15.3.2002.

Sudionik: Dadić, I.

Prilog:

Dadić I.: Production of photons from unequilibrated QCD plasma, seminar.

EUROPEAN WORKSHOP ON THE QCD STRUCTURE OF THE NUCLEON, QCD-N '02

Ferrara, Italija, 3-6.4.2002.

Sudionica: Passek, K.

FOUR-SEAS CONFERENCE

Thessaloniki, Grčka, 16-21.4.2002.

Sudionici: Babić, A.; Duplančić, G.

3rd EUROPEAN ADVANCED STUDIES CONFERENCE (EASC): NONLINEARITY, NONCOMMUTATIVITY AND APPLICATIONS

Trakošćan, Hrvatska, 9-11.5.2002.

Sudionici: Knežević, A.; Martinis, M.; Mikuta-Martinis, V.

Prilozi:

Knežević, A.; Krstajić, G.; Martinis, M.; Vargović, E. "Memory effect" in heart rate dynamics, predavanje.

Martinis, M.; Mikuta-Martinis, V. Quantum Lyapunov exponents, pozvano predavanje.

9. MEĐUNARODNI SASTANAK "VAKUUMSKA ZNANOST I TEHNIKA"

Trakošćan, Hrvatska, 15.5.2002.

Sudionici: Brako, R.; Lazić, P.; Šokčević, D.

Prilog:

Brako, R.; Crljen, Ž.; Lazić, P.; Šokčević, D. Proračun svojstava čistih (111) površina

i površina s adatomima, za metale Au, Cu i Pt, predavanje.

WORKSHOP ON EXCLUSIVE PROCESSES AT HIGH MOMENTUM TRANSFER

Newport News, SAD, 15-18.5.2002.

Sudionica: Passek-Kumerički, K.

Prilog:

Passek-Kumerički, K. Leading-twist two gluon distribution amplitude and exclusive processes involving eta and eta' mesons, predavanje.

INTERNATIONAL SCHOOL "HEAVY QUARK PHYSICS"

Jinr, Dubna, Rusija, 27.5.-4.6.2002.

Sudionica: Melić, B.

Prilog:

Melić, B.: Exclusive nonleptonic B decays from QCD light-cone sum rules, pozvano predavanje.

42nd CRACOW SCHOOL OF THEORETICAL PHYSICS

Zakopane, Poljska, 28.5.-7.6.2002.

Sudionik: Trampetić, J.

Prilog:

Trampetić, J.: Rare B-meson decays, pozvano predavanje.

PARTICLE PHYSICS AND GRAVITATION

Bad Herrenalb, Njemačka, 31.5.-7.6.2002.

Sudionica: Jonke, L.

EUROPEAN RESEARCH CONFERENCE ON "FUNDAMENTAL ASPECTS OF SURFACE SCIENCE: STRUCTURE AND REACTIVITY OF OXIDE SURFACES"

Acquafredda di Maratea (Napulj), Italija, 1-6.6.2002.

Sudionik: Lazić, P.

Prilog:

Lazić, P.; Brako, R. Oxygen chemisorption on Pt(111) surface, poster.

WORKSHOP ON MESOSCOPIC PHYSICS AND ELECTRON INTERACTIONS

Trst, Italija, 9.6.-19.7.2002.

Sudionici: Crljen, Ž.; Lazić, P.

9TH JOINT VACUUM CONFERENCE

Schloss Seggau bei Leibnitz, Austrija, 16-20.6.2002.

Sudionik: Šokčević, D.

Prilog:

Crljen, Ž.; Šokčević, D.; Brako, R.; Lazić, P. Density functional calculations of (111) surfaces of Au, Cu, Pt and Ni, predavanje.

WORKSHOP ON CORRELATION EFFECTS IN ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATIONS

Trst, Italija, 17-21.6.2002.

Sudionici: Crljen, Ž.; Lazić, P.

SUMMER SCHOOL OF ASTROPARTICLE PHYSICS AND COSMOLOGY

Trst, Italija, 17.6.-5.7.2002.

Sudionica: Knežević, A.

7TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON NANOMETER-SCALE SCIENCE AND TECHNOLOGY AND 21ST EUROPEAN CONFERENCE ON SURFACE SCIENCE (NANO-7/ECOSS-21)

Malmö, Švedska, 24-26.6.2002.

Sudionik: Brako, R.

Prilog:

Lazić, P.; Brako, R. Substrate relaxations in co chemisorption on Pt(111) surface, poster.

5th INTERNATIONAL SUMMER SCHOOL AND CONFERENCE "LET'S FACE CHAOS THROUGH NONLINEAR DYNAMICS"

Maribor, Slovenija, 30.6.-14.7.2002.

Sudionik: Martinis, M.

Prilog: Martinis, M.: Spectral statistic of R-R intervals in ECG, pozvano predavanje.

INTERNATIONAL WORKSHOP ON SPONTANEOUSLY BROKEN CHIRAL SYMMETRY AND HARD QCD PHENOMENA

Bad Honnef, Njemačka, 15-19.7.2002.

Sudionica: Passek-Kumerički, K.

Prilog:

Passek-Kumerički, K.: The leading-twist two gluon distribution amplitude in exclusive processes involving eta and eta' mesons, predavanje.

SAURON WORKSHOP

Leiden, Nizozemska, 29.7.-2.8.2002.

Sudionik: Krajnović, D.

NATO ADVANCED RESEARCH WORKSHOP: BRIJUNI CONFERENCE - SPACE, TIME AND LIFE

Brijuni, Hrvatska, 26-30.8.2002.

Sudionici: Martinis, M.; Mikuta-Martinis, V.

Prilog:

Mikuta-Martinis, V.; Martinis, M. Time operator in quantum mechanics, poster.

12TH GENERAL CONFERENCE OF THE EUROPEAN PHYSICAL SOCIETY, EPS 12, TRENDS IN PHYSICS

Budimpešta, Mađarska, 26-30.8.2002.

Sudionik: Tomaš, M.-S.

Prilog:

Tomaš, M.-S. Casimir force in layered systems, poster.

INTERNATIONAL SCHOOL OF ASTROPHYSICS "DANIEL CHALONGE", 9th COURSE ON ASTROFUNDAMENTAL PHYSICS – THE EARLY UNIVERSE AND THE COSMIC MICROWAVE BACKGROUND: THEORY AND OBSERVATIONS

Palermo, Italija, 7-18.9.2002.

Sudionik: Štefančić, H.

10TH EUROPEAN SOLAR PHYSICS MEETING

Prag, Češka, 9-14.9.2002.

Sudionica: Skender, M.

Prilozi:

Skender, M.; Vršnak, B.; Martinis, M. Physical conditions in the reconnection outflow, poster

Skender, M.: Formation of the termination shock in the reconnection outflow, poster.

MEĐUNARODNI ZNANSTVENI SKUP "MARKO ANTUN DE DOMINIS"

Split, Hrvatska, 16-21.9.2002.

Sudionik: Martinis, M.

Prilog:

Martinis, M.: De Dominis kao fizičar, pozvano predavanje.

COMPUTERS IN CARDIOLOGY 2002

Memphis, SAD, 22-26.9.2002.

Sudionici: Šmuc, T.

Prilozi:

Krstačić, G.; Krstačić, A.; Martinis, M.; Vargović, E.; Knežević, A.; Smalcelj, A.; Jembrek-Gostović, M.; Gamberger, D.; Šmuc, T. Non-linear analysis of heart rate variability in patients with coronary heart disease, predavanje.

QUANTUM CHROMODYNAMICS, DESY THEORY WORKSHOP

Hamburg, Njemačka, 24-27.9.2002.

Sudionica: Passek-Kumerički, K.

Prilog:

Passek-Kumerički, K.: The leading-twist two gluon distribution amplitude in exclusive processes involving eta and eta' mesons, predavanje.

SCIENTIFIC MEETING AT ECOLE NORMALE SUPERIEURE

Pariz, Francuska, 30.9.2002.

Sudionik: Andrić, I.

3rd MEETING OF THE CERN WORKSHOP ON HEAVY ION PHYSICS AND LHC

Geneve, Švicarska, 5-12.10.2002.

Sudionik: Dadić, I.

Prilog:

Dadić, I.: Application of out of equilibrium field theory to heavy-ion collisions, predavanje.

LHC DAYS IN SPLIT

Split, Hrvatska, 4-12.10.2002.

Sudionici: Babić, A.; Duplančić, G.; Guberina, B.; Trampetić, J.

Prilozi:

Babić, A.: Cabibbo-suppressed decays of Ω_c^- – feedback to Ξ_c^+ lifetime, predavanje.

Duplančić, G.: NLO pQCD calculations for many particles processes, predavanje.

Guberina, B.: Cosmological constant running, the Higgs boson mass and the fate of the Universe, pozvano predavanje.

Trampetić, J.: Rare and forbidden decays, pozvano predavanje.

WORKSHOP ON B PHYSICS AND CP VIOLATION, FRONTIER SCIENCE 2002

Frascati, Italija, 6-11.10.2002.

Sudionica: Melić, B.

Prilog:

Melić, B.: Nonfactorizable effects for the $B \rightarrow J/\psi K$ decay, pozvano predavanje.

6th HVAR ASTROPHYSICAL COLLOQUIUM: EXPLOSIVE PHENOMENA IN THE SOLAR ATMOSPHERE

Hvar, Hrvatska, 6-11.10.2002.

Sudionica: Skender, M.

Prilog:

Skender, M.: Analytic solutions for the sward type reconnection including

longitudinal component of the magnetic field, predavanje.

KROATISCHER HUMBOLDTIANER-KLUB

TEIL 1: WORKSHOP "REGIONALE ZUSAMMENARBEIT IN SÜDOSTEUROPA"

TEIL 2: KOLLOQUIUM ZUR FEIER DES 10-JÄHRIGEN BESTEHENS DER
KROATISCHEN HUMBOLDTIANER-KLUBS "SCIENTIFIC DIALOGUE IN SOUTH
EASTERN EUROPE"

Zagreb, Hrvatska, 17-20.10.2002.

Sudionik: Andrić, I.

Prilog:

Andrić, I.: Duality in the field theory, predavanje.

TRIANGLE SEMINAR ON PARTICLE PHYSICS

Beč, Austrija, 29-30.11.2002.

Sudionici: Andraši, A.; Bilić, N.; Guberina, B.; Jonke, L.; Štefančić, H.

Prilozi:

Jonke, L.: Representations of quantum mechanics in noncommutative spaces and symmetries, predavanje

Štefančić, H.: Cosmological constant running – from the Higgs boson mass to the fate of the universe, predavanje.

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Brako, R. Suradnja između Instituta "Ruđer Bošković", Zavod za teorijsku fiziku i Technische Universität München, projekt "Interaction of Gases with Surfaces", Hrvatsko – Bavarska suradnja putem Ministarstva znanosti i tehnologije RH

Martinis, M. Vanjski suradnik na projektu: Primjena fraktalne analize u obradi agregacijskih procesa u binarnim i ternarnim sustavima (dr. Đ. Težak, voditeljica projekta, Kemijski odsjek PMF-a, Zagreb).

Martinis, M., Trampetić, J. (koordinatori): Wissenschaftler in globaler Verantwortung; inicijativa znanstvene pomoći Njemačke u odgoju znanstvenog podmladka u zemljama jugoistočne Europe koju vodi Prof. dr. Julius Wess, Max-Planck Institute, München, Njemačka.

Martinis, M.: Znanstveno-istraživački rad u okviru Hrvatsko-bavarske suradnje (gl. istraživač: dr. Đ. Težak, Kemijski odsjek PMF-a, Zagreb): Fazni prijelazi, dinamike i struktura supramolekularnih agregata u otopini (Defined clusters of association colloids in aqueous solutions).

Martinis, M.: Memorandum of Understanding između Instituta "Ruđer Bošković", Zavod za teorijsku fiziku i CAMTP, Maribor, Slovenija

Martinis, M.: Trilateral Memorandum of Understanding između Instituta "Ruđer Bošković", Zavod za teorijsku fiziku i CAMTP, Maribor, Slovenija, te Center for Mathematical Sciences, Technische Universität München, Njemačka.

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

András Patkós, Eotvos University, Budimpešta, Mađarska, 10-12.6.2002.

Anais Smailagić, University of Trieste, Department of Theoretical Physics, Trst, Italija, 10-15.12.2002.

Znanstveni skupovi u organizaciji Instituta Ruđer Bošković:

3rd EUROPEAN ADVANCES STUDIES CONFERENCE (EASC): NONLINEARITY, NONCOMMUTATIVITY AND APPLICATIONS

Trakošćan, Hrvatska, 9-11.5.2002.

<http://www.irb.hr/zef.html>

ZAVOD ZA EKSPERIMENTALNU FIZIKU

DIVISION OF EXPERIMENTAL PHYSICS

Dr. sc. Ante Ljubičić, predstojnik Zavoda

Tel: ++385 1 4680 203 i ++385 1 4561 138 (Tajništvo), fax. ++385 1 46 80 239

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za nuklearne reakcije, dr. sc. Đuro Miljanić, voditelj laboratorija

Laboratorij za teškoionsku fiziku, dr. sc. Roman Čaplar, voditelj laboratorija

Laboratorij za elektromagnetske i slabe interakcije, dr. sc. Ante Ljubičić, voditelj laboratorija

Laboratorij za interakcije ionskih snopova, dr. sc. Milko Jakšić, voditelj laboratorija

Laboratorij za mjerenje niskih aktivnosti, dr. sc. Bogomil Obelić, voditelj laboratorija

Laboratorij za fiziku visokih energija, dr. sc. Krešo Kadija, voditelj laboratorija

Grupa za razvoj i primjenu analitičkih metoda, dr. sc. Vladivoj Valković, voditelj grupe

Tajništvo: Zdenka Kuzmić, Ljiljana Liščević

U okviru Zavoda do 30. 6. 2002. provodila su se istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

ISTRAŽIVANJA IZ SUBATOMSKE FIZIKE

INVESTIGATIONS IN SUBATOMIC PHYSICS

Direktor programa: dr. sc. Ante Ljubičić

Teme u sastavu programa:

Reakcije među lakim jezgrama, dr. sc. Đuro Miljanić, voditelj teme

Simetrije i međudjelovanja, dr. sc. Alfred Švarc, voditelj teme

Fizika teških iona, dr. sc. Roman Čaplar, voditelj teme

Fizika elementarnih čestica izvan standardnog modela, dr. sc. Ante Ljubičić, voditelj teme

Foton atom raspršenje, dr. sc. Krunoslav Pisk, voditelj teme

Međudjelovanja iona MeVskih energija i materije, dr. sc. Milko Jakšić, voditelj teme

Prirodni radioizotopi i procesi u plinovima, dr. sc. Bogomil Obelić, voditelj teme

Eksperimentalna fizika visokih energija, dr. sc. Krešo Kadija, voditelj teme

Razvoj i primjena nuklearnih analitičkih metoda, dr. sc. Vladivoj Valković, voditelj teme

Poticajni projekti znanstvenih novaka i asistenata u okviru tema:

Nuklearne reakcije izazvane ${}^7\text{Li}$ i građa lakih jezgara, mr. sc. Neven Soić, nositelj projekta

Istraživanje neutrinjskih oscilacija na CERN-u, dr. sc. Mario Stipčević, nositelj projekta

Ionizacija atoma i produkcija K, L i M x-zraka težim ionima MeVskih energija, dr. sc. Ivančica Bogdanović Radović, nositeljica projekta

Program rada:

Uz upotrebu stabilnih i radioaktivnih snopova mjeren je niz reakcija među lakim jezgrama radi proučavanja tih procesa i građe lakih jezgara u stanjima visoke uzbude (posebno tražeći egzotične nuklearne tvorevine) te radi dobivanja podataka važnih za nuklearnu astrofiziku. Provjeren je valjanost različitih aproksimacija pri računanju amplitude prijelaza u okviru Bornove aproksimacije distordiranih valova za kulonski rascjep jezgri s neutronsom aureolom.

U BNL-u je dovršeno sakupljanje podataka za E958, (Pion CEX Cross Sections at Low Energies) koji proučava nukleon i njegova pobuđena stanja mjerenjem kutne distribucije udarnog presjeka reakcije $\pi-p \rightarrow \pi^0 n$ između 50-180 MeV/c. Analiza toga, kao i predhodno izvršenih BNL eksperimenata (AGS E913, ABS E914 i AGS E897) je u toku. U PSI, Švicarska, mjeren je pionski beta raspad s velikom preciznošću koji zbog odsustva jakog međudjelovanja i korekcija zbog zračenja pruža mogućnost teorijski najizravnijeg proučavanja slabog (u-d) kvarkovskog miješanja koji izravno testira kvark-lepton univerzalnost. Nastavljena je aktivnu suradnja u Baryon Resonance Analysis Group-u (BRAG). Naš model analize parcijalnih valova mezonsko-nukleonskih amplituda raspršenja postao je opće prihvaćen u znanstvenoj zajednici.

Proučavani su sudari teških iona u širokom rasponu energija i vrsti jezgara snopa i mete. Pri nižim energijama pokazana je važnost izmjene alfa čestice za potpuni opis elastičnog raspršenja jezgara ugljika i kisika te dobivene jasne indikacije o pobuđivanju u sudaru $^{12}\text{C} + ^{28}\text{Si}$ stanja visokog spina koja odgovaraju jako deformiranim stanjima jezge ^{40}Ca . Na višim energijama (400 AMeV) pokazan je izostanak punog miješanja čestica sustava te prisutnost djelomične nuklearne prozirnosti analizom sudara svih četiriju kombinacija jezgara ^{96}Zr i ^{96}Ru istog masenog broja no različitog izospina. Usporedba rezultata tih sudara i mikroskopskog transportnog proračuna ne ukazuje na postojanje promjene nukleon-nukleon udarnih presjeka u nuklearnoj tvari. Dodatni podaci o nukleon-nukleon udarnim presjecima dobiveni su mjerenjem vrlo malih udarnih presjeka dvofotonskog i virtualnog zakočnog zračenja pri proton-proton sudarima na 190 MeV.

Tijekom 2002. sudjelovali smo u ispitivanju probnih RPC detektora velikih dimenzija (cca. 5 m x 1 m) koji bi trebali biti ugrađeni u mionske spektrometre detektora OPERA smještenog u tunelu Gran Sasso blizu Rima. Također nastavili smo istraživanjima sunčevih aksiona u okviru CERN-ovog eksperimenta CAST. Sudjelovali smo u razvoju TPC detektora te u razvoju sistema za sakupljanje podataka. Na IRB u Laboratoriju za elektromagnetske i slabe interakcije započeli smo izgradnjom novog uređaja za detekciju hadronskih aksiona

emitiranih sa Sunca u M1 prijelazu između prvog pobuđenog 9.3 keV stanja i osnovnog stanja u ^{83}Kr .

Teorijski nađene su interesantne nove granice za mogući doprinos "quintessence"-a kršenju Principa Ekvivalencije, kako u sektoru obične materije tako i u neutrinskom sektoru. U nekim slučajevima naše granice čak su bolje od onih dobivenih iz današnjih eksperimentalnih podataka o univerzalnosti slobodnog pada. Vezani sustav Schwinger-Dyson i Bethe-Salpeter jednadžbi je riješen za $\eta - \eta'$ sistem. Izračunati form faktori za dvofotonske prijelaze uspoređeni su s eksperimentom.

Izučavaju se korelacije među česticama u procesima fotoapsorpcije, raspršenja fotona i raspršenja nabijenih čestica na atomskim sistemima. Predložena je nova kovarijantna formulacija relativističke elektrodinamike.

Međudjelovanja iona MeVskih energija i materije proučavana se u dva osnovna smjera. To su temeljna istraživanja fizikalne prirode samih procesa (ionizacija unutrašnjih atomskih ljuski, elastična i neelastična raspršenja iona na atomima i atomskim jezgrama), a u drugom smjeru i proučavanja karakteristika samog materijala temeljem poznatih svojstava međudjelovanja. Pri tom je najveći uspjeh ostvaren u razvoju i primjeni metode IBIC (ion beam induced charge) koja se koristila za ispitivanje mikroskopskih svojstava transporta naboja u nizu poluvodičkih materijala.

Nastavljeno je praćenje izotopa ^{14}C i ^3H u atmosferi i proučavanje njihove izmjene u prirodnom okolišu u cilju određivanja paleoklimatskih uvjeta na području Dinarskog krša. Izotopna mjerenja (^3H , ^2H , ^{18}O) u oborinama proširena su na jadransko područje. Određeni su optimalni uvjeti za mjerenje aktivnosti ^{14}C i tricija u tekućinskom scintilacijskom brojaču (LSC). Za mjerenje starosti metodom ^{14}C u LSC razvijen je postupak pripreme uzoraka metodom direktne apsorpcije, a napravljena je i testirana nova vakuumska linija za pripremu benzena. Datirano je više serija arheoloških i geoloških uzoraka s raznih lokaliteta u Hrvatskoj i Sloveniji.

Analizirani su pp, pA i AA podaci na SpS energijama od 40-160 GeV/nukleonu, na NA49 eksperimentu u CERN-u. Dobiveni su detaljni rezultati o energijskoj ovisnosti produkcije nabijenih čestica (piona, protona, kaona) kao i produkcije stranih hiperona (λ , Ξ , Ω). Ovi rezultati, zajedno sa rezultatima ostalih teškoinskih eksperimenata na CERN-u, čvrsta su indikacija otkrića kvarkovsko-gluonske plazme u laboratorijskim uvjetima.

Ispitivane su mogućnosti korištenja 14 MeV neutrona za identifikaciju opasnih materijala, u prvom redu eksploziva, pomoću $(n;n',\gamma)$ reakcija uz detekciju pridružene alfa čestice. Izvršena je karakterizacija tla u kojem se nalaze minsko-eksplozivna sredstva. Mjerenja varijacije vlage na maloj skali pokazala su granice primjenljivosti nekih nuklearnih metoda u detekciji AP i AT mina.

Research programme and results:

In the experiments with stable and radioactive beams numerous reactions between light nuclei have been measured in order to study these processes and the structure of light nuclei in the states at high excitations (especially by searching for exotic phenomena) as well as to obtain data important to nuclear astrophysics. Validity of different approximations to the postform DWBA transition amplitude for the Coulomb break-up of neutron halo nuclei has been studied.

The Crystal Ball collaboration has finished collecting data for AGS E958 experiment (Pion Charge Exchange Cross Sections at Low Energies), which studies nucleon and its excited states by measuring cross section and angular distribution of $\pi^-p \rightarrow \pi^0n$ reaction in momentum range of 50 – 180 MeV/c. The data analyses of this experiment and previously done BNL experiments (E913, E914 and E897) are underway. We are continuing active participation in Baryon Resonance Analysis Group (BRAG). Our partial wave analysis model of meson-nucleon scattering amplitudes has become universally acknowledged in scientific community.

Heavy-ion collisions have been investigated in a broad range of energies and for various projectile-target pairs. At low energies the importance of the alpha-particle exchange process for the proper description of carbon and oxygen reactions has been shown and a clear indication of the formation of the strongly deformed high-spin states of ^{40}Ca in the $^{12}\text{C} + ^{28}\text{Si}$ reaction has been found. At higher energies (400 AMeV) lack of the full particle mixing and partial nuclear transparency has been found by analysing all four colliding systems of ^{96}Zr and ^{96}Ru , the nuclei of the same mass number but of different isospin. Comparison of the obtained experimental results with the theoretical predictions of the microscopic transport calculation do not require a modification of the free nucleon-nucleon cross section in nuclear medium. Additional data on the nucleon-nucleon cross section have been obtained by measuring with high statistics the very small cross sections of two-photon and virtual bremsstrahlung from proton-proton scattering at 190 MeV.

In 2002 we were involved in the investigation of the trial RPC detectors of large dimensions (cc. 5m x 1 m) that are supposed to be built in the muon spectrometer detector of the OPERA experiment placed at the Gran Sasso tunnel near Rome. We have also participated in the CAST experiment at CERN, which is designed to search for solar axions. We have participated in the development of the TPC detector as well as in the development of data acquisition system. At the Laboratory for Electromagnetic and Weak Interactions we have started the construction of a new system for detection of hadronic axions emitted from the Sun in the M1 transition between first excited 9.3 keV and ground state in ^{83}Kr .

We have found interesting new bounds for possible contribution of "quintessence" to violation of the Equivalence Principle, both in the sector of ordinary matter and neutrinos. In

some cases, our bounds are even better than the limits from present experimental data on the universality of the free fall. The consistently coupled Schwinger-Dyson and Bethe-Salpeter equations are solved for $\eta - \eta'$ complex. Results for the two-photon transitions are calculated and compared with the experiment.

Correlations in high-energy atomic processes, including photoabsorption, photon scattering and scattering of charged particles, is studied. A new covariant formulation of the relativistic electrodynamics is proposed.

Interactions of ion beams of MeV energy range have been studied in two main directions. The first one has been research of the basic properties of ion beam interactions with atoms (ionization of inner shells) and nuclei (elastic and inelastic scattering). The second direction has been development and application of ion beam techniques for the material characterization and modifications. The most significant was development of IBIC (Ion Beam Induced Charge) technique that has been applied in studies of charge transport properties at microscopic level in different wide gap semiconductors.

Monitoring of isotopes ^{14}C and ^3H in the atmosphere was continued in order to study their natural cycle in the environment and to assess paleoclimatic condition in Dinaric Karst. Isotopic measurements (^3H , ^2H , ^{18}O) in precipitation were extended to the Adriatic region. Optimal conditions for ^{14}C and ^3H measurements in liquid scintillation counter (LSC) were established. For ^{14}C dating method in LSC the procedure of sample preparation by direct absorption method was developed and a new vacuum rig for benzene preparation was constructed and tested. Radiocarbon dating of several archaeological and geological series from different sites in Croatia and Slovenia was performed.

Pp, pA and AA data was analysed at SpS energies of 40-160 GeV/nucleon at the CERN NA49 experiment. Detailed energy dependence of the charged particle production (pions, protons, kaons) as well as of the production of strange hyperons (Lambda, Xi, Omega) was arrived at. These results, together with the results from the other heavy ion experiments at CERN provide a strong indication for the discovery of quark-gluon plasma in a laboratory environment.

Possibilities of using 14 MeV neutron induced (n;n'gamma) reactions, with associated alpha particle detection, for threat material (explosives in the first place) identification have been investigated. Characterization of soil samples taken from mine affected areas has been performed. Measurements of small scale variations of soil humidity have determined the limits of applicability of some nuclear methods for detection of AP and AT landmines.

REAKCIJE MEĐU LAKIM JEZGRAMA

LIGHT NUCLEUS – LIGHT NUCLEUS REACTIONS

Voditelj teme: dr. sc. Đuro Miljanić

Tel. ++385 1 4561 163 e-mail: miljanic@lnr.irb.hr

Suradnici na temi:

Saša Blagus, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Matko Milin, magistar fiz. znanosti, asistent, znanstveni novak

Đuro Miljanić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Dubravko Rendić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Neven Soić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Mile Zadro, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Mladen Koncul, viši tehničar

Program rada i rezultati na temi:

Ova istraživanja služe stjecanju spoznaja zanimljivih za nuklearnu fiziku i astrofiziku, kao i razvoju eksperimentalnih metoda. Mjerenja se izvode na akceleratorima u Hrvatskoj, drugdje u Europi i Australiji u suradnji s više istraživačkih skupina uglavnom iz Italije, Njemačke i Ujedinjenog Kraljevstva. Istraživanja obavljena u 2002. su:

mjeren je niz reakcija među lakim jezgrama (na pr.; ${}^7\text{Li}+{}^8\text{He}$, ${}^{10}\text{B}+{}^{10}\text{B}$, ${}^9\text{Be}+{}^{13}\text{C}$, ${}^{12}\text{C}+{}^{18}\text{O}$, ${}^{19}\text{F}+{}^{19}\text{F}$, itd.) služeći se stabilnim i radioaktivnim snopovima s namjerom proučavanja općenito tih procesa i građe lakih jezgara te posebno traženja egzotičnih nuklearnih tvorevina;

pretragom dostupnih eksperimentalnih podataka o stanjima visokog pobuđenja u jezgrama ${}^{13}\text{C}$ i ${}^{14}\text{C}$ identificirana su stanja s mogućom molekulolikom građom;

mjeren je rascjep deuteronu protonom na niskim energijama (<2 MeV iznad njegovog praga); provjerena je valjanost različitih aproksimacija pri računanju amplitude prijelaza u okviru Bornove aproksimacije distordiranih valova za kulonski rascjep jezgara s neutronsom aureolom, a posebno na primjeru rascjepa jezgara ${}^{11}\text{Be}$ i ${}^2\text{H}$;

opažen je po prvi put raspad stanja ${}^{12}\text{B}$ u $\alpha+{}^8\text{Li}$ na energijama pobuđenja većim od 10 MeV i pokazano je kako ta saznanja mogu pomoći točnijem poznavanju udarnog presjeka za reakciju ${}^8\text{Li}(\alpha,n){}^{11}\text{B}$, koja je prema nekim modelima imala ključnu ulogu u stvaranju "metala" (svih elemenata težih od ugljika) u Velikom prasku;

nastavljena je upotreba Metode trojanskog konja za dobivanje podataka važnih za nuklearnu astrofiziku;

u prvoj fazi izgradnje sustava za mjerenje nuklearnih reakcija izrađeno je 160 pretpojačala i nabavljen dio opreme i detektora.

Research programme and results:

This research is providing information relevant to nuclear physics and astrophysics. The development of experimental methods is also done. The measurements are performed together with several research groups mainly from Italy, Germany and United Kingdom using the accelerators in Croatia and elsewhere in Europe, as well as in Australia. Main topics of the research in 2002 were the following:

measurements of many reactions between light nuclei (e.g. ${}^7\text{Li}+{}^8\text{He}$, ${}^{10}\text{B}+{}^{10}\text{B}$, ${}^9\text{Be}+{}^{13}\text{C}$, ${}^{12}\text{C}+{}^{18}\text{O}$, ${}^{19}\text{F}+{}^{19}\text{F}$, etc.) have been performed with stable and radioactive beams in order to study structure of light nuclei and their reactions as well as to search for exotic structures and other phenomena;

the states with possible moleculelike structure were identified in a systematic search through available experimental data on highly excited states of nuclei ${}^{13}\text{C}$ and ${}^{14}\text{C}$;

measurement of deuteron breakup by protons was performed at low energies (<2 MeV above its threshold);

validity of different approximations to the postform DWBA transition amplitude for the Coulomb break-up of neutron halo nuclei has been studied for special cases of ${}^{11}\text{Be}$ and ${}^2\text{H}$ nuclei;

decay of highly excited (>10 MeV) states of ${}^{12}\text{B}$ into $\alpha+{}^8\text{Li}$ was observed for the first time and it was shown how the results may help in more precise determination of the cross section for of the ${}^8\text{Li}(\alpha,n){}^{11}\text{B}$ reaction, which according to some models of big bang nucleosynthesis would have had a crucial role for the production of "metals" (elements heavier than carbon);

use of Trojan horse method for obtaining the data important to nuclear astrophysics has been continued;

160 preamplifiers were completed and a part of other electronics and detectors was acquired for a system for nuclear reaction measurements.

Poticajni projekt u okviru teme:

NUKLEARNE REAKCIJE IZAZVANE ${}^7\text{Li}$ I GRAĐA LAKIH JEZGARA **${}^7\text{Li}$ INDUCED NUCLEAR REACTIONS AND STRUCTURE OF LIGHT NUCLEI**

Nositelj projekta: dr.sc. Neven Soić

SIMETRIJE I MEĐUDJELOVANJA**SYMMETRIES AND INTERACTIONS**

Voditelj teme: dr. sc. Alfred Švarc

Tel: ++ 385 1 4561 090 email: svarc@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Saša Ceci, dipl. inž. fizike, znanstveni novak

Ivan Supek, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Alfred Švarc, doktor.fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Program rada i rezultati na temi:

Kvantna kromodinamika (QCD) se danas općenito uzima kao ishodišna teorija za opis jakih međudjelovanja među hadronima i u njoj su hadroni prikazani kao posljedica pobuđenja QCD vakuuma. Posebno interesantna posljedica takve fizikalne slike za je očita ovisnost hadronskih masa o samom mediju. Drugi vrlo važan aspekt u razumjevanju jakih međudjelovanja je određivanje stupnja narušenja simetrija, a određeni rijetki i do sada nedovoljno proučeni raspadi mezona mogu znatno doprinijeti razumijevanju određenih aspekata fizike izvan okvira zadanih Standardnim modelom

U BNL-u je dovršeno sakupljanje podataka za E958, ("Pion CEX Cross Sections at Low Energies") koji proučava nukleon i njegova pobuđenih stanja mjerenjem kutne distribucije udarnog presjeka reakcije $\pi\text{-p}\rightarrow\pi^0\text{n}$ između 50-180 MeV/c. Cilj je bio sakupiti što točnije podatke koji bi omogućili istraživanje isospinske invarijantnosti u πN sistemu i nadomjestiti upitne podatke u postojećim PWA. Analiza toga kao i predhodno izvršenih BNL eksperimenata (AGS E913: udarni presjeci $\pi\text{-p}\rightarrow\gamma\text{n}$, $\pi\text{-p}\rightarrow\pi^0\text{n}$ i $\pi\text{-p}\rightarrow\eta\text{n}$ reakcija; ABS E914: totalni udarni presjek i kutna distribucija za inverznu K⁻ fotoprodukciju; AGS E897: raspad eta mezon) je u toku, a CB kolaboracija je tokom prošle godine objavila neke od tih rezultata.

U PSI, Švicarska, mjeren je pionski beta raspad s velikom preciznošću koji zbog odsustva jakog međudjelovanja i korekcija zbog zračenja pruža mogućnost teorijski najizravnijeg proučavanja slabog (u-d) kvarkovskog miješanja koji izravno testira kvark-lepton univerzalnost. PIBETA kalorimetar izgrađen je i testiran 1999. godine, kada je otpočelo sakupljanje podataka. Sudeći prema preliminarnoj analizi kvaliteta podataka je odlična, a pozadinski procesi su manji barem za faktor 10. Ovim mjerenjem dosegla bi se točnost od 0.2-03% što bi predstavljalo najbolji test CVC hipoteze za mezone do sada.

Nastavljena je aktivnu suradnja u Baryon Resonance Analysis Group-u (BRAG). Naš model analize parcijalnih valova mezonsko-nukleonskih amplituda raspršenja, postao je opće prihvaćen u znanstvenoj zajednici. Daljnji razvoj modela se odvija u nekoliko smjerova. Uključivanje dodatnih kanala, zbog velikog broja parametara, zahtjeva nove metode minimizacije, koje ispituje (genetic algorithms, i sl.). S tim u vezi se istražuju poboljšanja modela kako bi se smanjio broj potrebnih parametara. S druge strane, dobivanje rezonantnih parametara u raznim modelima nije jednoznačno, stoga razvijamo nove metode i

provjeravamo stare, da bismo što više standardizirali proceduru. Također se nastavlja i s primjenom rezultata parcijalne valne analize na procese s više čestica i na višim energijama.

Research program and results:

Nowadays it is generally accepted that quantum chromodynamics (QCD) describes the strong interactions among hadrons. In this picture, hadrons arise due to the excitations of QCD vacuum. An immediate, and particularly interesting, consequence of this is that the hadron masses are medium dependent. Another, very important, aspect in understanding strong interactions is determination of the amount of symmetry breaking, and, in particular, explore rare meson decays that may constrain certain aspects of physics beyond the Standard Model.

CB collaboration has finished collecting data for AGS E958 experiment (Pion Charge Exchange Cross Sections at Low Energies), which studies nucleon and its excited states by measuring cross section and angular distribution of $\pi^-p \rightarrow \pi^0n$ reaction in momentum range of 50 – 180 MeV/c. The goal is to provide accurate data to explore isospin invariance in the πN system and to supersede existing data that do not agree well with PWA. The data analyses of this experiment and previously done BNL experiments (E913: differential cross sections for $\pi^-p \rightarrow \gamma n$, $\pi^-p \rightarrow \pi^0n$ i $\pi^-p \rightarrow \eta n$ reactions; E914: total cross sections and angular distribution of inverse K- photo-production; E897 measures eta meson decays) are underway and CB collaboration have published some of these results last year.

At PSI, Switzerland pion beta decay is measured with unprecedented accuracy and, due to the absence of strong interactions and radiative corrections, it is the least ambiguous process to study weak (u-d) quark mixing. PIBETA apparatus was built, and tested, in 1999 when also data taking has started. Judged by the preliminary results, the quality of our data is excellent, and signal-to-background ratio is in excess of 10. Under those conditions an accuracy of 0.2-0.3% is within reach and would provide the most sensitive test of the CVC hypothesis in a meson.

We are continuing active participation in Baryon Analysis Resonance Group (BRAG). Our partial wave analysis model of meson-nucleon scattering amplitudes has become universally acknowledged in scientific community. We are developing the model further, and several paths have crystallized. Incorporation of additional channels due to large numbers of parameters demand new methods of minimization, which we are investigating (i.e. Genetic algorithms etc.). That is the reason that we are investigating improvements of the model in order to reduce number of required parameters. On the other hand, getting results concerning resonance parameters in various models is not single valued. Therefore, we are developing new methods and evaluating old ones in order to standardize the procedure of

getting resonance parameters. We are continuing with application of the results of the partial wave analysis to the multi particle systems and on the higher energies.

FIZIKA TEŠKIH IONA

HEAVY ION PHYSICS

Voditelj teme: dr. sc. Roman Čaplar

Tel: ++ 385 1 4561 031 e-mail: caplar@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Zoran Basrak, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Roman Čaplar, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Igor Gašparić, dipl. inž. fiz., mlađi asistent, znanstveni novak

Milorad Korolija, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Suzana Szilner, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Suradnik iz druge ustanove:

Mile Dželalija, doktor fiz. znanosti, izvanredni profesor, Fakultet prirodoslovno-matematičkih i obrazovnih znanosti, Split

Program rada i rezultati na temi:

Eksperimentalno i teorijski se istražuju sudari teških iona u širokom rasponu energija od nekoliko AMeV do nekoliko AGeV. Eksperimentalni rad se odvijao u okviru nekoliko međunarodnih suradnji: suradnja FOPI na SIS/ESR akceleratoru u Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI), Darmstadt, Njemačka, suradnje ICARE i BRS u Institut de Recherches Subatomiques, Strasbourg, Francuska i suradnja PISOLO/PRISMA u Laboratori Nazionali di Legnaro (LNL), Legnaro (Padova), Italija, te suradnjom s Kernphysisch Versneller Instituut (KVI), Groningen, Nizozemska. Rezultati istraživanja daju značajne informacije kako o mehanizmu sudara teških iona tako i o svojstvima jezgara i nuklearne tvari u ekstremnim uvjetima gustoće, temperature i deformacije.

Ukratko, glavna postignuća u 2002. godini su:

Proučavana je ovisnost o rapiditetu protona i deuterona emitiranih pri sudarima jezgara ^{96}Ru i jezgara ^{96}Zr na energiji od 400 AMeV, teškoionskih sustava istih masa no različitog izospina. Pokazan je izostanak punog miješanja čestica sustava, te prisutnost djelomične nuklearne prozirnosti, odnosno da je na tim energijama zaustavna moć jezgara nepotpuna. Usporedba rezultata mjerenja i teorijskih predviđanja mikroskopskog transportnog proračuna ne pokazuje postojanje promjene nukleon-nukleon udarnih presjeka u nuklearnoj tvari.

Analiza emisije lakih čestica i teških fragmenata u sudaru jezgara ^{12}C i ^{28}Si daje jasne indikacije da se u sudaru pobuđuju stanja visokog spina koja odgovaraju jako deformiranim jezgrama ^{40}Ca .

Koristeći postupak vezanih reakcijskih kanala pokazana je važnost doprinosa izmjene alfa čestice za potpun opis elastičnog raspršenja jezgara ugljika i kisika.

Korelacijskim mjerenjem neutronske emisije načinjena je odvojena analiza predravnotežnog izvora i tzv. kvaziprojektila, te su tim izvorima određena prostorno-vremenska svojstva.

Analizom mjerenja vrlo malih udarnih presjeka virtualnog (emisija elektron-pozitron para) i dvofotonskog zakočnog zračenja iz proton-proton sudara pri 190 MeV na AGOR ciklotronu u KVI dobiveni su rezultati dobre statistike (više desetaka tisuća događaja) koji daju putem novih mjernih veličina dodatne informacije o nukleon-nukleon međudjelovanju.

Dovršeni su svi testovi i novi detektor za fokalnu ravninu velikog magnetskog spektrometra PRISMA-e je pripravan za prvo mjerenje.

Na osnovu proračuna brze promjene reakcijskog mehanizma centralnih sudara teških iona oko Fermijeve energije poluklasičnim transportnim modelom Landau-Vlasova predloženo je i u okviru suradnje ISOSPIN prihvaćeno mjerenje koje bi moglo pokazati djelomičnu prozirnost jezgara na tim energijama.

Research programme and results:

The project includes the experimental and theoretical investigations of heavy-ion collisions over a wide energy range from a few AMeV to a few AGeV. The experiments have been carried out in the framework of several international collaborations: the FOPI collaboration at the SIS/ESR accelerator facility of the Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt, Germany, the ICARE and BRS collaborations at the Institut de Recherches Subatomiques, Strasbourg, France and the PISOLO/PRISMA collaboration with Laboratori Nazionali di Legnaro (LNL), Legnaro (Padova), Italy, as well as the collaboration with the Versneller Instituut, Groningen (KVI), the Netherlands. The results thus obtained reveal important information both on nuclear-reaction mechanisms and on the properties of nuclei and nuclear matter under extreme conditions of density, temperature and deformation.

Briefly, the main results achieved in 2002 are as follows:

The rapidity distributions of protons and deuterons emitted in the 400 AMeV collisions of ^{96}Ru nuclei as well as of ^{96}Zr nuclei, two heavy-ion systems of the same mass but different isospin content have been studied. Lack of the full mixing of nucleons has been shown demonstrating partial nuclear transparency at these energies, i.e. an incomplete nuclear stopping. Comparison of the obtained experimental results with the theoretical predictions of a microscopic transport calculation do not require a modification of the free nucleon-nucleon cross section within nuclear medium.

The analysis of light-particle and fragment emission of ^{28}Si on ^{12}C clearly indicates that high-spin states excited in this collision are states of a large deformation of the ^{40}Ca nucleus.

The coupled-reaction-channel calculation has demonstrated the importance of the alpha-particle exchange process for the proper description of the elastic scattering of carbon and oxygen nuclei.

A separate analysis of pre-equilibrium and quasi-projectile emission sources has been carried out by using neutron small-angle correlations, and the space-time properties of these sources have been deduced.

The analyses of the two-photon and virtual bremsstrahlung (emission of the electron-positron pair) from proton-proton scattering at 190 MeV measured at the KVI AGOR accelerator, has been performed. The high-statistics data of these processes with very low cross section, thus obtained, yield new information on the nucleon-nucleon interaction.

Tests of a new focal-plane detector for the large magnetic spectrometer PRISMA have been accomplished and the instrument is ready for the first production run.

Based on the semiclassical Landau-Vlasov prediction of a rapid change of reaction mechanism in the central collisions around the Fermi energy an experiment aiming at demonstrating partial transparency of nuclei at these energies has been proposed and accepted in the framework of the international ISOSPIN collaboration.

FIZIKA ELEMENTARNIH ČESTICA IZVAN STANDARDNOG MODELA

ELEMENTARY PARTICLES BEYOND STANDARD MODEL

Voditelj teme: dr. sc. Ante Ljubičić

Tel. ++385 1 46 80 203 e-mail: aljubic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Raul Horvat, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Krešimir Jakovčić, dipl. inž. fizike, znanstveni novak

Dalibor Kekez, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Milica Krčmar, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica

Zvonko Krečak, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Biljana Lakić, magistrica fiz. znanosti, asistentica

Ante Ljubičić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Mario Stipčević, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Željko Orlić, tehničar

Program rada i rezultati na temi:

Tijekom 2002. nastavili smo radom na eksperimentu OPERA u CERN-u. OPERA je tzv. "long-baseline" eksperiment čiji je cilj istražiti postojanje oscilacija mionskih neutrina u tau neutrine u području vrijednosti oscilacijskih parametara na koje ukazuju rezultati eksperimenta Super-Kamiokande. Neutrinski snop proizveden na CERN-u Ženeva bit će usmjeren prema 731 km udaljenom tunelu u Gran Sassu blizu Rima, gdje će se postaviti detektor tauonskih neutrina. U toku dosadašnje suradnje Zagrebačka grupa je sudjelovala u ispitivanju svojstava RPC detektora i izradi simulacije odziva RPC detektora radi njihove moguće primjene kao target-tracker sub-detektora u sistemu za detekciju neutrina smještenom u Gran Sassu. Tijekom 2002. sudjelovali smo u ispitivanju probnih RPC detektora velikih dimenzija (cca. 5 m x 1 m) koji bi trebali biti ugrađeni u mionske spektrometre detektora OPERA. Ispitivanja su se provodila na CERN-u, a obuhvaćala su ispitivanja prostorne efikasnosti, efikasnosti za različite vrijednosti radnog napona, prostorne rezolucije itd.

Tijekom 2002. nastavili smo s analizom svih podataka dobivenih u eksperimentu NOMAD u CERN-u u razdoblju od 1995-1998. godine. Koristeći eksperimentalne podatke NOMAD-a istraživane su produkcije stranih čestica u interakcijama mionskih neutrina preko nabijenih struja.

Nastavili smo istraživanjima sunčevih aksiona u okviru CERN-ovog eksperimenta CAST (CERN Axion Solar Telescope). Aksioni bi se mogli stvarati u jezgri Sunca raspršenjem termalnih fotona u Coulombovom polju električnih naboja (Primakoff efekt). U transverzalnom magnetskom polju u laboratoriju sunčevi se aksioni mogu koherentno konvertirati natrag u fotone čija energija iznosi nekoliko keV-a. U CAST eksperimentu test LHC magnet je zajedno s detektorima X-zračenja montiran na pokretnu platformu koja omogućava motrenje Sunca u trajanju od po 90 minuta pri izlasku i zalasku. Tri različita tipa detektora su razvijena za potrebe ovog eksperimenta: TPC (time projection chamber), poziciono osjetljiv CCD detector te mikromegas. Sudjelovali smo u razvoju TPC detektora (računalna simulacija, testiranje prototipa, probno sakupljanje podataka) te u razvoju sustava za sakupljanje podataka.

Ujedinjenje gravitacije s ostalim temeljnim silama prirode sugerira da svijet ima više od tri prostorne dimenzije. U okviru teorije dodatnih velikih dimenzija analizirali smo osjetljivost eksperimenta CAST na sunčeve Kaluza-Klein aksione. Preliminarana granica na konstantu vezanja K-K aksiona s fotonima je reda veličine niža od očekivane granice za obične QCD aksione.

U 2002. godini na IRB u Laboratoriju za elektromagnetske i slabe interakcije započeli smo s konstrukcijom novog uređaja za detekciju hadronskih aksiona emitiranih iz Sunca. U tom eksperimentu pretpostavljamo da su aksioni emitiraju sa sunca u M1 prijelazu između prvog

pobuđenog 9.3 keV stanja i osnovnog stanja u ^{83}Kr , a detektirali bismo ih pomoću proporcionalnog brojača punjenog kriptomom i smještenog u našem Laboratoriju.

Čestični doprinos jednadžbi renormalizacijske grupe za Kozmološku Konstantu je izveden i primijenjen na opservacijsku kozmologiju. Da bi izbjegli katastrofalne posljedice po kozmologiju, pokazano je da Standardni Model mora sadržavati relativno teški Higgs, mase oko 550 GeV-a. Budući da takva masa nije preferirana sa današnjim uvjetima, naši rezultati se mogu uzeti za nezavisnu indikaciju da Standardni Model ne može biti potpuna teorija na svim skalama. Nađene su interesantne nove granice za mogući doprinos "quintessence" kršenju principa ekvivalencije, kako u sektoru obične materije tako i u neutrinskom sektoru. U nekim slučajevima naše granice čak su bolje od onih dobivenih iz današnjih eksperimentalnih podataka o univerzalnosti slobodnog pada.

Vezani sustav Schwinger-Dyson i Bethe-Salpeter jednadžbi je riješen za $\eta - \eta'$ sistem. Računati su form faktori za dvofotonske prijelaze (u području prenesenih momenata prostornog tipa). Rezultati su uspoređeni sa eksperimentom i drugim teorijskim pristupima.

Research programme and results:

In 2002 we continued with the OPERA experiment at CERN. OPERA is long-baseline experiment with the aim to investigate the existence of oscillations between muon and tau neutrinos, which was suggested by the results of the Super-Kamiokande experiment. The neutrino beam produced at CERN, Geneva will be directed at the 731 km distant tunnel at Gran Sasso near Rome, when tauon neutrino detector will be placed. Members of our Laboratory were involved in investigation of the characteristics of RPC detector and also in simulation of RPC detector response function because it was planned to use it as the target tracker detector in OPERA experiment. We were involved in the investigation of the trial RPC detectors of large dimensions (cc. 5m x 1 m) which are supposed to be built in the muon spectrometer detector of the OPERA experiment. Investigations, performed at CERN, included space efficiency, space resolution, efficiency as a function of voltage and other parameters.

Data analyses from the NOMAD experiment obtained in the period 1995-1998 were performed. Using experimental data the production of strange particles in the charge current interactions of muon neutrinos were investigated.

In 2002 we have participated in the CAST (CERN Axion Solar Telescope) experiment at CERN, which is designed to search for solar axions. The axions would be produced in the solar core through the scattering of thermal photons in the Coulomb field of electric charges (Primakoff effect). In a transverse magnetic field in a laboratory, the solar axions can be coherently converted back into X-ray photons of a few keV. In the CAST experiment the LHC test magnet is mounted on a moving platform with low-background X-ray detectors on

either end, allowing it to observe the Sun for three hours per day. Three different types of detectors have been developed to be used to detect the X-rays: a time projection chamber (TPC), a position sensitive CCD and a micromegas detector. We have participated in the development of the TPC detector (Monte-Carlo simulations, test of prototypes, first data taking) as well as in the development of data acquisition system.

Unification of gravity with other forces of nature suggests that the world has more than three spatial dimensions. In the frame of extra large dimensions theory we have analyzed the sensitivity of the CAST experiment with respect to solar Kaluza-Klein axions. The preliminary limits on the axion to photons coupling strength are about one order of magnitude more stringent than the expected limits in the case of ordinary QCD axions.

Particle contribution to the renormalization-group equation for the cosmological constant is derived and applied to observational cosmology. It is shown that, in order to avoid a disaster for cosmology, one should deal with a relatively heavy higgs in the standard model, with mass about 550 GeV. Since this mass is not favoured by the present constraints, our results can be considered as an independent indication that the standard model cannot be the full theory at all scales. We have found interesting new bounds for possible contribution of "quintessence" to violation of the equivalence principle, both in the sector of ordinary matter and neutrinos. In some cases, our bounds are even better than the limits from present experimental data on the universality of the free fall.

The consistently coupled Schwinger-Dyson and Bethe-Salpeter equations are solved for $\eta - \eta'$ complex. The two-photon transitions for η and η' are calculated (for spacelike momentum transfer). The results are compared with experiment and other theoretical approaches.

Poticajni projekt u okviru teme:

ISTRAŽIVANJE NEUTRINSKIH OSCILACIJA NA CERN-U

INVESTIGATIONS OF NEUTRINO OSCILLATIONS AT CERN

Nositelj projekta: dr. sc. Mario Stipčević

FOTON ATOM RASPRŠENJE

PHOTON ATOM SCATTERING

Voditelj teme: dr. sc. Krunoslav Pisk

Tel. ++385 1 4561 056

e-mail: pisk@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Tomislav Ivezić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik
Krunoslav Pisk, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Tihomir Surić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Program rada i rezultati na temi:

Izučavaju se korelacije među česticama u procesima fotoapsorpcije, raspršenja fotona i raspršenja nabijenih čestica na atomskim sistemima. Želimo razumjeti one korelacijske efekte koji su važni za opis atomskih procesa na visokim energijama. Posebno nas zanima koliko je ponašanje atomskih procesa određeno singularitetima fotonske i elektronskih interakcija, a koliko to ponašanje ovisi o korelacijama. Dosadašnji rezultati objašnjavaju ponašanje foton-atom procesa u području vrlo visokih energija.

Predložena je nova kovarijantna formulacija relativističke elektrodinamike pomoću 4-vektora električnog i magnetskog polja i njihove kompleksne kombinacije. Također je predložena nova invarijantna formulacija specijalne relativnosti i posebno relativističke elektrodinamike koristeći geometrijske veličine, apstraktne tenzore. Napravljena je detaljna usporedba s eksperimentima i nađeno je vrlo dobro slaganje.

Research programme and results:

Correlations in high-energy atomic processes, including photoabsorption, photon scattering and scattering of charged particles, is studied. The study can provide understanding of the correlation effects, which persist at high energies. Specific studies include examining to which extends the high energy behaviours of atomic processes are determined by the singularities of the photon and electron interactions and to which extend they depend on correlations. Understanding of photon-atom processes at very high energies is achieved.

A new covariant formulation of the relativistic electrodynamics is proposed. It is constructed in terms of 4-vectors of the electric and magnetic fields and their complex combination. Also, a new invariant formulation of special relativity and particularly of the relativistic electrodynamics is proposed, which uses geometric quantities, abstract tensors. This theory is compared with experiments and an excellent agreement is obtained.

**MEĐUDJELOVANJA IONA MEVSKIH ENERGIJA I MATERIJE
INTERACTIONS OF MEV ENERGY IONS WITH MATTER**

Voditelj teme: dr. sc. Milko Jakšić

Tel.: ++385 1 46 80 942 e-mail: jaksic@irb.hr

Suradnici na temi:

Ivančica Bogdanović-Radović, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica

Mladen Bogovac, magistar fiz. znanosti, asistent
Željka Marija Bošnjak, dipl. inž. fiz., znanstvena novakinja
Milko Jakšić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Zvonko Medunić, doktor fiz. znanosti, viši asistent
Željko Pastuović, dipl. inž. fiz., mlađi asistent
Tonči Tadić, doktor fiz. znanosti, viši asistent (od 2.2.2000. na mirovanju prava)

Tehnički suradnici:

Andrija Gajski, tehničar
Željko Periša, tehničar
Natko Skukan, viši tehničar

Program rada i rezultati na temi:

Sudari iona s elektronima vanjskih ljuski atoma mete zbog kojih se ion postupno usporava i raspršenja iona pod malim kutem na atomskim jezgrama, dva su najvjerojatnija primarna procesa koji se zbivaju pri prolasku iona energije 0.1 – 10 MeV kroz materijal. Ovi procesi su zbog svoje učestalosti pogodni za proučavanje svojstava materijala mete uz vrlo niske doze ozračavanja, te time i minimalno oštećenje ispitivanih uzoraka. Niske ionske struje omogućuju i mnogo preciznije fokusiranje ionskog snopa u sustavu nuklearne mikroprobe i ispod 500 nm prostorne razlučivosti.

Cilj istraživanja je eksperimentalna provjera osnovnih svojstava ove dvije grupe procesa u uvjetima korištenja ionskih snopova iz Tandem Van de Graaff akceleratora IRB-a, te njihova primjena u razvoju metoda za karakterizaciju materijala ERDA (Elastic Recoil Detection Analysis) i TRIBIC (Time Resolved Ion Beam Induced Charge).

U pogledu metode ERDA, koja se zasniva na mjerenju energije izbijenih jezgri u prednje kuteve, nadopunjuju se postojeće eksperimentalne baze podataka za raspršenja Li iona na lakim jezgrama mete. Razvoj ERDA spektroskopskog sustava baziranog na IEE (ion electron emission) detekcijskom sustavu završen je i nalazi se u fazi testiranja. S ciljem postizanja najbolje dubinske rezolucije i osjetljivosti, razmatra se i mogućnost konstrukcije detekcijskog sustava baziranog na mjerenju vremena proleta izbijenih jezgri.

Kod sudara iona s elektronima, što je ujedno i osnovni način gubitka energije iona u materijalu, posebno je važna vremenska evolucija pulsa upadnim ionom stvorenih nosilaca naboja (elektrona i šupljina) u poluvodičima. Prolazak samo jednog iona kroz metu dovoljan je za sakupljanje informacije o pokretljivosti i relaksacijskim vremenima nosilaca naboja u proučavanom materijalu što čini osnovu metode TRIBIC (Time Resolved Ion Beam Induced Charge). Ova metoda primjenjena je na proučavanju temperaturne ovisnosti transporta naboja u CdZnTe.

ERDA i TRIBIC metode će uz već razvijene PIXE i RBS tehnike, biti primjenjene pri proučavanju niza poluvodičkih materijala i elektroničkih sklopova, te tankih filmova u suradnji s drugim istraživačkim grupama i industrijom u Hrvatskoj i u inozemstvu.

Research programme and results:

Ion collisions with outer shell electrons of target atoms (ion stopping mechanism) and scattering of ions with atomic nuclei under small angles are the two most probable processes that happen when ions of mid and high energy (0.1-10 MeV) travel through the target. Due to the high probability of these processes, it is suitable to use them for studying the properties of target material with low irradiation doses and consequently a minimal damage of samples under test. Low beam currents allow also more precise focusing of low divergence ion beam in nuclear microprobe system with spatial resolution below 500 nm. The aim of the project is experimental research of basic properties of these two groups of processes with ion beams obtained from Ruđer Bošković Institute Tandem Van de Graaff accelerator and their application in the development of techniques for material characterisation. In the case of ERDA (Elastic Recoil Detection Analysis) technique, the existing experimental databases are being updated for Li beam. Development of ERDA spectroscopic system based on IEE (ion electron emission) detection system has been recently finished and the first tests have been performed. Further work on time of flight ERDA is planned as well in order to achieve better depth resolution.

In the case of ion collision with electrons, that is a basic process responsible for ion energy loss in target material, time evolution of the induced charge carrier (electrons and holes) pulse in semiconductors is of particular interest. Only one ion is sufficient for evaluation of charge carrier mobility and lifetime in the studied material. This makes the basic principle of the TRIBIC (Time Resolved Ion Beam Induced Charge) method. This technique has been applied for the studies of temperature dependence of charge collection in wide gap semiconductors. In addition to already well established PIXE and RBS techniques, ERDA and TRIBIC methods are used in the study of the whole series of semiconductor materials, electronic devices, and thin films in cooperation with research groups and industry in Croatia and worldwide.

Poticajni projekt u okviru teme:

IONIZACIJA ATOMA I PRODUKCIJA K, L I M X-ZRAKA TEŽIM IONIMA MEVSKIH ENERGIJA

ATOM IONISATION AND K, L AND M X-RAY PRODUCTION BY HEAVY IONS

Nositeljica projekta: dr. sc. Ivančica Bogdanović Radović

PRIRODNI RADIOIZOTOPI I PROCESI U PLINOVIMA

NATURAL RADIOISOTOPES AND PROCESSES IN GASES

Voditelj teme: dr. sc. Bogomil Obelić

Tel. ++385 1 4680219 e-mail: obelic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Jadranka Barešić, dipl. inž. kem., znanstvena novakinja

Nada Horvatinčić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica.

Ines Krajcar Bronić, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica.

Bogomil Obelić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehnička suradnica:

Božica Mustač, viša tehničarka.

Program rada i rezultati na temi:

U okviru znanstvenih istraživanja nastavili smo s praćenjem izotopa ^{14}C i ^3H u atmosferi i proučavanjem njihove izmjene u prirodnom okolišu (voda i karbonatni sedimenti) u cilju određivanja paleoklimatskih uvjeta na području Dinarskog krša. Usporednim proučavanjem starosti siga i sedri došli smo do zaključka da su se sedre u holocenu počele stvarati mnogo kasnije nego sige. Istraživanje pokazuje da se sige mogu upotrijebiti kao obilježivači globalnih klimatskih promjena, dok sedre više odražavaju promjene lokalnog okoliša. Primjenom izotopnih metoda u datiranju potopljenih siga istraživana je i dinamika dizanja morske razine Jadranskog mora kao posljedica temperaturnih promjena na prijelazu iz kasnog pleistocena u holocen. U okviru hidroloških istraživanja napravljena su izotopna mjerenja (^{14}C i ^3H) u podzemnim i površinskim vodama s područja Gorskog kotara, Like i Dalmacije.

Određeni su optimalni uvjeti za mjerenje aktivnosti ^{14}C i tricija u tekućinskom scintilacijskom brojaču (LSC) nabavljenom 2001. godine putem projekta tehničke pomoći IAEA. U okviru izrade magistarskog rada razvijen je postupak pripreme uzoraka za mjerenje ^{14}C starosti metodom direktne apsorpcije. Kod te metode se CO_2 , dobiven spaljivanjem organskog ili otapanjem u kiselini karbonatnog uzorka, apsorbira u smjesi *Permafluora* i *Carbosorba* i mjeri pomoću LSC. Iako nešto manje precizna od postojeće metode mjerenja aktivnosti ^{14}C proporcionalnim brojačem, ta se je metoda pokazala vrlo dobrom za mjerenje geoloških uzoraka i uzoraka iz okoliša. Za vrlo precizna mjerenja starosti (poglavito arheoloških uzoraka) u LSC uzorci se moraju pripremiti u obliku benzena, za što je potreban složeni

kemijski postupak. U tu svrhu napravljena je i testirana nova vakuumska linija. Započelo se je također s mjerenjima aktivnosti tricija u novom brojaču.

U okviru ugovora s Međunarodnom agencijom za atomsku energiju mjeri se sadržaj izotopa ^3H , ^2H i ^{18}O u oborinama na nekoliko lokacija jadranskog područja (Malinska, Zavižan, Zadar, Komiža, Dubrovnik). Uz količinu oborina, mjere se i neki fizikalno-kemijski parametri važni za praćenje onečišćenja u okolišu. Opažene su razlike u izotopnom sastavu oborina kontinentalnog i primorskog područja. Ostvarena je znanstvena suradnja s Institutom "Jožef Stefan" iz Ljubljane putem dva bilateralna hrvatsko-slovenska ugovora, te s Leibniz Institute for Applied Geosciences iz Hannovera (Njemačka) i Universitat Autònoma de Barcelona (Španjolska). Uključeni smo u rad Međunarodnog komiteta za radijacijske jedinice (ICRU) na projektu "Elastična raspršenja elektrona i pozitrona". Krajem godine je potpisan ugovor s Europskom komisijom za projekt "Studija antropogenog zagađenja i zaštite krškog ekosustava na graničnom području Hrvatske i Bosne i Hercegovine" (ICA2-CT-2002-10009) na kojem ćemo raditi tri naredne godine u suradnji s kolegama iz Španjolske, Njemačke, Hrvatske i Bosne i Hercegovine.

Usluge mjerenja ^{14}C i ^3H metodom izvršene su za Institut za geološka istraživanja (Zagreb), Oceanografski institut (Split), Filozofski fakultet iz Zadra, Institut za arheologiju (Zagreb), gradske muzeje u Vinkovcima i Osijeku, Institut "Jožef Stefan" (Ljubljana), Geološki zavod Slovenije (Ljubljana), Filozofski fakultet Univerze u Ljubljani, Pokrajinske zavode za čuvanje kulturne baštine iz Ptuja i Novog Mesta, Pokrajinski muzej iz Murske Sobote i Muzej na Makedonija iz Skopja.

Research programme and results:

Within the scientific research, we continued to monitor isotopes ^{14}C and ^3H in the atmosphere and to study their natural cycle in the environment (water and carbonate sediments) in order to assess paleoclimatic condition in Dinaric Karst. By comparing the ages of speleothems and tufa it was concluded that tufa in Holocene started to precipitate much later than speleothems. The study shows that speleothems from the Dinaric Karst keep the global palaeoclimatic records, whereas tufa records changes in the local palaeoenvironment. The dynamics of the Adriatic Sea level change as the consequence of temperature variations during the transition from Late Pleistocene to Holocene was studied by dating submerged speleothems. Within the frame of hydrological investigations isotope measurements (^{14}C , ^3H) in ground- and surface water from Gorski Kotar, Lika and Dalmatia were performed.

Optimal conditions for ^{14}C and ^3H measurements in liquid scintillation counter (LSC), purchased in 2001 within the program of technical co-operation with IAEA, were established. The procedure of sample preparation by direct absorption method for ^{14}C measurements in LSC was developed within the elaboration of a master thesis. In this method, CO_2 , obtained

by combustion of organic samples or dilution of carbonates by acid, has been absorbed in a mixture of *Permafluor* and *Carbosorb*. Although less precise than the existing gas proportional counter method, the direct absorption method is suitable for measurements of geological and environmental samples. For very precise age determinations by LSC (mainly archaeological samples) samples should be prepared in the form of benzene, which requires a complex chemical procedure. For this purpose, a new vacuum rig was constructed and tested. Measurements of tritium activity in the new counter have been also performed.

Within the frame of an IAEA contract ^3H , ^2H and ^{18}O isotope contents in precipitation from several locations on Adriatic coast have been measured (Malinska, Zavižan, Zadar, Komiža, Dubrovnik). The amount of precipitation and several physico-chemical parameters were measured too. The differences among particular locations were observed as the consequence of different isotope distribution pattern over the continent and at the sea. Scientific co-operation with Leibniz Institute for Applied Geosciences from Hannover (Germany) and Universitat Autònoma de Barcelona (Spain) was established as well as with Jožef Stefan Institute from Ljubljana through two bilateral Croatian-Slovene contracts. We are taking part in the ICRU (International Committee on Radiation Units and Measurements) project "Elastic scattering of electrons and positrons". The contract with the European Commission was signed by the end of the year for the project "Study of Anthropogenic Pollution after the War and Establishing of Measures for Protection of Plitvice National Park and Bihać Region at the Border Area of Croatia and Bosnia-Herzegovina" (ICA2-CT-2002-10009). Work on this project will be realized with colleagues from Spain, Germany, Croatia and Bosnia and Herzegovina during the next three years.

Numerous measurements of ^{14}C and ^3H activity were performed within the collaboration with following institutions: Institute of Geology (Zagreb), Oceanographic Institute (Split), Faculty of Philosophy from Zadar, Institute of Archaeology (Zagreb), Municipal Museums in Vinkovci and Osijek, Jožef Stefan Institute (Ljubljana), Geological Survey of Slovenia (Ljubljana), Faculty of Philosophy of the University in Ljubljana, Regional Institutes for Preservation of Cultural Heritage from Novo Mesto and Ptuj (Slovenia), Regional Museum in Murska Sobota (Slovenia) and Museum of Macedonia (Skopje).

EKSPERIMENTALNA FIZIKA VISOKIH ENERGIJA

HIGH ENERGY EXPERIMENTAL PHYSICS

Voditelj teme: dr. sc. Krešo Kadija

Tel. ++385 1 4561 028

e-mail: kadija@joshua.irb.hr

Suradnici na temi:

Tome Antičić, doktor fiz. znanosti, viši asistent
Sandra Horvat, dipl. inž. fiz., znanstvena novakinja
Krešo Kadija, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Tatjana Šuša, dipl. inž. fiz., mlađa asistentica

Program rada i rezultati na temi:

Program istraživanja vezan je uz rad na eksperimentima NA49, ALICE i ATLAS u CERN-u i može se podijeliti na tri dijela.

Prvi dio su istraživanja elementarnih (p+p, n+p, pion+p), hadron jezgra (p+Pb, pion+Pb) i jezgra jezgra (C+C, Pb+Pb) sudara na ultrarelativističim energijama u okviru NA49 eksperimenta. Cilj je proučavanje produkcije čestica u dosad nedovoljno istraženom neperturbativnom području i istraživanje svojstava materije u ekstremnim uvjetima temperature i/ili gustoće. U 2002. godini veliki je napor uložen u analizi Kaona te o ovisnosti njihove produkcije o energiji u Pb-Pb sudarima, u radu na eliptičnom protoku, te u detaljnu analizu produkcije stranih hiperona.

Drugi dio istraživanja vezan je uz LHC eksperiment ALICE. Prototipovi brzih elektroničkih sklopova nužnih za rad "Time Projection Chamber", glavnog detektora eksperimenta ALICE su testirani i usavršeni s brojnim modifikacijama tako da su njihove performanse poboljšane i sve je pripremljeno da se počne s njihovom serijskom izradom. Softver za simulacije ALICE DAQ sustava je proširen i na simulaciju "trigger" sustava, te je intenzivno korišten za poboljšanje konačnog dizajna ALICE DAQ i "trigger" sustava. Također je program za monitoriranje rada kompjutera dodatno razvijan i testiran u praksi u ALICE eksperimentu.

Treći dio istraživanja odnosi se na razvoj i konstrukciju drift komora za mionski spektrometar eksperimenta ATLAS. Taj rad se izvodi u kolaboraciji sa Max-Planck Institutom u Munchenu. Detaljno testiranje u "testbeam" uvjetima je izvršeno, te se intenzivno radi na određivanju i usavršavanju preciznosti ovih komora. Također se radi na programu za simulaciju odziva tih komora na pojedine kanale raspada Higgsova bozona.

Research programme and results:

The research programme is tied to the work at the NA49, ALICE and ATLAS experiments at CERN and can be divided into three areas: The first part is work in elementary (p+p,n+p,pion+p), hadron nucleus (p+Pb, pion+Pb), and nucleus nucleus (C+C, Pb+Pb) collisions at ultrarelativistic energies within the NA49 experiment. The goal is to investigate the production of particles in the yet not sufficiently explored nonperturbative region and to discover the properties of matter at extreme energies and/or densities. In 2002, a large effort was undertaken in the analysis of the energy dependence of Kaon production in Pb-Pb

collisions, in investigating the elliptic flow, and in a detailed investigation of strange hyperon production.

The second part involves the work within the ALICE experiment at LHC. Prototypes of fast pulsers, necessary for the operation of the Time Projection Chamber, the main ALICE detector, were tested and improved with numerous modifications, so that all the necessary conditions are in place to start with their serial production. The ALICE DAQ simulation software was extended to also incorporate the simulation of the Trigger system, and was intensively used in designing the final ALICE DAQ and Trigger system. The software for monitoring the performance of a network of computers was improved and was field-tested in the ALICE experiment.

The third part of the research concerns the development and construction of drift chambers for the muon spectrometer of the ATLAS experiment at CERN. This work is done in collaboration with the Max-Planck Institute in Munich. Test beams were used to test them, and intensive work was done in determining and improving the reconstruction precision of the chambers. Progress has also been made on the software for simulating the chamber response on particular decay channels of the Higgs boson.

RAZVOJ I PRIMJENA NUKLEARNIH ANALITIČKIH METODA

DEVELOPMENT AND THE USE OF NUCLEAR ANALYTICAL METHODS

Voditelj teme: dr. sc. Vladivoj Valković

Tel: +385-1-468-0101 e-mail: valkovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Jasmina Obhođaš, dipl. inž. geol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Davorin Sudac, dipl. inž. fiz., mlađi asistent, znanstveni novak

Vladivoj Valković, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehnički suradnik:

Karlo Nađ, viši tehničar

Program rada i rezultati na temi:

Rad na temi osnivao se je na činjenici da kod svakog akta terorizma mora postojati i faza nezakonitog prometa, od mjesta proizvodnje do mjesta korištenja, naročito eksploziva, ali isto tako i kemijskih sredstava, nuklearnog materijala ili pak ljudi. Zbog toga organizirano društvo mora uvesti niz mjera za kontrolu prometa tih materijala, napraviti jednu infrastrukturu koja uključuje izučeno osoblje i adekvatnu instrumentalnu bazu.

Moderni sistemi za inspekciju osoblja, pošiljaka, vozila i tereta se osnivaju na korištenju neinvazivnih "imaging" tehnika s primjenom nuklearnih analitičkih metoda. Sistemi za inspekciju koriste penetrirajuće zračenje (neutrone, gama zrake, i x-zrake) u "scanning" geometriji, uz detekciju transmitiranog (prolaznog) zračenja ili zračenja proizvedenog u ispitivanom objektu. Detekcioni sistemi za eksplozive i kemijska sredstva se osnivaju na činjenici da se problem identifikacije takvih materijala može reducirati na problem mjerenja koncentracija i/ili omjera koncentracija kemijskih elemenata. Za tu svrhu mogu se koristiti različite nuklearne i atomske metode. Pokazalo se je da primjena neutronske snopove ima komparativne prednosti, i razvojni rad na toj tematici može rezultirati u konstrukciji nove instrumentacije. Od posebne je važnosti mogućnost konstruiranja prijenosnog sistema, koji koristi izvor gama zračenja, za pregled tereta u vozilima i kontejnerima, te identifikaciju nezakonitog transporta eksploziva, kemikalija, oružja, vozila ili ljudi. Provedeni eksperimentalni rad osnivao se je na korištenju 14 MeV neutrona uz detekciju pridruženih alfa čestica. Dobiveni preliminarni rezultati su ohrabrujući.

Rizik nuklearnog terorizma koji bi izvele sub-nacionalne grupe je također predmet pažnje ovih istraživanja. Naime, ne samo da postoji opasnost konstrukcije i upotrebe nuklearnog oružja, već postoji i opasnost radioaktivne kontaminacije urbanih sredina.

Navedeni projekt se realizira kroz rad na sljedećim problematikama:

- detekcija i identifikacija eksploziva i eksplozivnih naprava;
- identifikacija kemijskih tvari (droga, bojni otrovi, i sl.);
- redukcija rizika nuklearnog terorizma;
- infrastruktura za spriječavanje nezakonitog prometa;
- nove metode detekcije (razvoj, transfer tehnologije, obuka kadrova).

Research programme and results:

The work on this project was based on the fact that any act of terrorism must involve at some stages the illicit trafficking either of explosives, chemical agents, nuclear materials and/or humans. Therefore the society must rely on the anti-trafficking infrastructure which encompasses responsible authorities: their personnel and adequate instrumental base.

Modern personnel, parcel, vehicle and cargo inspection systems are non-invasive imaging techniques based on the use of nuclear analytical techniques. The inspection systems are using penetrating radiations (neutrons, gamma and x-rays) in the scanning geometry, with the detection of transmitted radiation, or radiation produced in investigated samples.

Explosives and chemical agents detection systems are based on the fact that the problem of explosive identification can be reduced to the problem of measurement of elemental concentrations. Different nuclear analytical techniques could be used for this purpose, however the use of neutrons has some specific advantages. Of special interest is the design

and functioning of a transportable gamma-ray system for inspecting cargo vehicles and containers for contraband, explosives, weapons or humans. The experimental work performed was based on the use of 14 MeV neutrons with the detection of associated alpha particles. The obtained preliminary results are very encouraging.

The risk of nuclear terrorism carried out by sub-national groups is also considered not only in construction and/or use of nuclear device, but also in possible radioactive contamination of large urban areas. An ever increasing danger of terrorist actions involving theft and unauthorized proliferation of fissionable and radioactive materials makes it imperative to develop and manufacture reliable equipment for detection of explosive, fissionable and radioactive materials concealed inside various objects and hand luggage.

The proposed project is being implemented by the work on the following subjects:

- detection and identification of explosives and explosive devices,
- identification of chemical material (drugs, chemical warfare, and similar),
- reduction of the threat of nuclear terrorism,
- infrastructure for the control of illicit trafficking,
- new methods of detection (development, technology transfer, training).

Nakon 30. 6. 2002. u okviru Zavoda provodila su se istraživanja u okviru sljedećih znanstvenoistraživačkih projekata:

HADRONSKA FIZIKA I QCD

HADRONIC PHYSICS AND QCD

Voditelj projekta: dr. sc. Ivan Supek

Tel. ++385 1 4561 062 e-mail: supek@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Ivan Supek, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Milorad Korolija, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Darko Mekterović, dipl. inž. fiz., znanstveni novak

Suradnici iz drugih ustanova:

Emil Frlež, doktor fiz. znanosti, University of Virginia, Charlottesville, VA, SAD

Dinko Počanić, doktor fiz. znanosti, University of Virginia, Charlottesville, VA, SAD

Michael Sadler, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Abilene Christian University, Abilene, TX, SAD

Ivo Šlaus, doktor fiz. znanosti, akademik

Krzysztof Wisniewski, doktor fiz. znanosti, Univerzitet u Varšavi (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Znanstvenici iz Instituta Ruđer Bošković rade na postavljanju Crystal Ball detektora u MAMI-ju, Mainz s ciljem mjerenja čitavog niza značajnih eksperimenata. Prvi eksperiment je mjerenje dipolnog magnetskog momenta Delta (1232) rezonance. Osim toga radi se i na analizi podataka prethodno sakupljenih u BNL-u (Pion Charge Exchange Cross Sections at Low Energies).

Naši znanstvenici u GSI-u, Mainz rade na analizi nedavno prikupljenih podataka FOPI kolaboracije (eksperimenti S261/S263), kao i na pripremi nedavno prihvaćenog FOPI pionskog eksperimenta S273 koji će mjeriti produkciju stranih cestica (K_0 i Lambda) u pion - nukleus međudjelovanju kod impulsa pionskog snopa od otprilike 1 GeV/c.

Research program and results:

Scientists from Ruđer Bošković Institute are setting up Crystal Ball detector at MAMI, Mainz with objective to measure a series of very important experiments. First experiment is measurement of the magnetic dipole moment of the Delta (1232) resonance. We are also actively working on analyses of data previously collected at BNL (Pion Charge Exchange Cross Sections at Low Energies).

IRB scientists are also working at GSI, Mainz, on data analysis of the recently obtained FOPI Collaboration data (experiments S261/S263), as well as on preparation for the approved FOPI pion experiment S273, which will measure the associated strangeness (K_0 and Lambda) production from pion nucleus reactions at about 1 GeV/c incident pion momentum.

**LAKE ATOMSKE JEZGRE: KLASITERI, NUKLEARNE MOLEKULE, REAKCIJE
LIGHT ATOMIC NUCLEI: CLUSTERS, NUCLEAR MOLECULES, REACTIONS**

Voditelj projekta: dr. sc. Đuro Miljanić

Tel. ++385 1 4561 163 e-mail: miljanic@lnr.irb.hr

Suradnici na projektu:

Saša Blagus, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Matko Milin, magistar fiz. znanosti, asistent, znanstveni novak

Đuro Miljanić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Dubravko Rendić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Neven Soić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Mile Zadro, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Mladen Koncul, viši tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Norman Clark, doktor fiz. znanosti, docent, University of Birmingham, Birmingham, Velika Britanija (konzultant)

Martin Freer, doktor fiz. znanosti, izvanredni profesor, University of Birmingham, Birmingham, Velika Britanija (konzultant)

Brian Fulton, doktor fiz. znanosti redovni profesor, University of York, York, Velika Britanija (konzultant)

Marcello Lattuada, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Università di Catania i Laboratori Nazionali del Sud, INFN, Catania, Italija (konzultant)

Claudio Spitaleri, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Università di Catania i Laboratori Nazionali del Sud, INFN, Catania, Italija (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

U suradnji s inozemnim skupinama mjerit ćemo i proučavati reakcije među lakim jezgrama te tražiti egzotične tvorevine u njihovim stanjima visokog pobuđenja. Nastavit ćemo s određivanjem nuklearnih podataka važnih za nuklearnu astrofiziku posebno za izučavanje nukleosinteze.

Research programme and results:

In collaboration with foreign groups we shall measure and study reactions between light nuclei as well as search for exotic structures in their highly excited states. We shall proceed with the determination of nuclear data relevant to nuclear astrophysics, especially for the study of nucleosynthesis.

**MEĐUDJELOVANJA U SUBATOMSKOJ I MEDICINSKOJ FIZICI
INTERACTIONS IN SUBATOMIC AND MEDICAL PHYSICS**

Voditelj projekta: dr. sc. Alfred Švarc

Tel: ++ 385 1 4561 090 e-mail: svarc@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Saša Ceci, dipl. inž. fiz., znanstveni novak

Alfred Švarc, doktor. fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Hrvoje Zorc, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik, konzultant

Mladen Martinis, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik, konzultant

Ivan Dadić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik, konzultant

Suradnik iz druge ustanove:

Marko Doko, doktor med. znanosti, KB "Sestre Milosrdnice", Klinika za kirurgiju

Program rada i rezultati na projektu:

Nastavljamo aktivnu suradnju u Baryon Resonance Analysis Group-u (BRAG). Naš model analize parcijalnih valova mezonsko-nukleonskih amplituda raspršenja, postao je općeprihvaćen u znanstvenoj zajednici. Daljni razvoj modela se odvija u nekoliko smjerova. Uključivanje dodatnih kanala, zbog velikog broja parametara, zahtjeva nove metode minimizacije, koje ispituje (genetic algorithms, i sl.). S tim u vezi se istražuju poboljšanja modela kako bi se smanjio broj potrebnih parametara. S druge strane, dobivanje rezonantnih parametara u raznim modelima nije jednoznačno, stoga razvijamo nove metode i provjeravamo stare, da bismo što više standardizirali proceduru.

Nastavlja se primjena rezultata parcijalno valne analize na procese s više čestica i na višim energijama.

Research program and results:

We are continuing active participation in Baryon Resonance Analysis Group (BRAG). Our partial wave analysis model of meson-nucleon scattering amplitudes has become universally acknowledged in scientific community. We are developing the model further, and several paths have crystallized. Incorporation of additional channels, due to large numbers of parameters, demand new methods of minimization, which we are investigating (i.e. genetic algorithms etc.). The reason for investigation of improvements of the model is to reduce the number of required parameters. On the other hand, obtained results concerning resonance parameters in various models are not unambiguous. Therefore, we are developing new methods, and evaluating old ones, in order to standardize the procedure of getting resonance parameters.

We are continuing with application of the results of the partial wave analysis to the multi-particle systems and also on higher energies.

FIZIKA TEŠKIH IONA

HEAVY-ION PHYSICS

Voditelj projekta: dr. sc. Zoran Basrak

Tel. ++ 385 1 4561 169 e-mail: basrak@irb.hr

Suradnici na projektu:

Zoran Basrak, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Roman Čaplar, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Igor Gašparić, dipl. inž. fiz., mlađi asistent, znanstveni novak

Suzana Szilner, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Suradnici iz drugih ustanova:

Mile Dželalija, doktor fiz. znanosti, izvanredni profesor, Fakultet prirodoslovno-matematičkih i obrazovnih znanosti, Split

Mladen Kiš, doktor fiz. znanosti, Kernfysisch Versneller Instituut, Groningen, Nizozemska

Program rada i rezultati na projektu:

Istraživat će se niz pojava koje nastaju pri sudarima atomskih jezgara u rasponu energija od nekoliko MeV do nekoliko GeV po nukleonu u svrhu boljeg razumjevanja termodinamičkih svojstava nuklearnog fluida i utjecaja nuklearne sredine na osnovne procese među hadronima i mezonima (srednje i relativističke energije), te svojstava nuklearne površine (niske energije). Istraživanja su pretežno eksperimentalna i odvijaju se u okviru međunarodnih suradnji na vrhunskim europskim akceleratorima, a što pruža nenadomjestive uvjete za visokokvalitetnu izobrazbu mladih znanstvenika.

Research programme and results:

A number of phenomena that occur in collisions of atomic nuclei at energies ranging from a few MeV to a few GeV per nucleon will be investigated with the aim to understand better the thermodynamical properties of nuclear fluid and the influence of nuclear medium on elementary processes between hadrons and mesons (intermediate and relativistic energies) as well as the properties of nuclear surface (low energies). Investigations are mostly experimental and are carried out within international collaborations on prominent European accelerator facilities, offering a unique framework for the high-level education of young scientists.

MASIVNI NEUTRINI I ASTROČESTICE**MASSIVE NEUTRINOS AND ASTRO-PARTICLES**

Voditelj projekta: dr. sc. Ante Ljubičić

Tel. ++385 1 46 80 203 e-mail: aljubic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Raul Horvat, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Krešimir Jakovčić, dipl. inž. fiz., mlađi asistent, znanstveni novak
Dalibor Kekez, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik
Milica Krčmar, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica
Zvonko Krečak, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik
Biljana Lakić, magistrica fiz. znanosti, asistentica
Ante Ljubičić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Mario Stipčević, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Željko Orlić, tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Brian A. Logan, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, University of Ottawa, Ottawa, Kanada
(konzultant)
David Bradley, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, University of Exeter, Engleska
(konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

U okviru CERN-INFN kolaboracije OPERA istraživat ćemo oscilacije neutrina između mionske i tauonske obitelji. U okviru CAST kolaboracije na CERN-u i u Laboratoriju za elektromagnetske i slabe interakcije na IRB tragat ćemo za hipotetičkim sunčevim aksionima. Teorijski proučavat ćemo oscilacije neutrina, aksioni i problem kozmološke konstante.

Research programme and results:

Within CERN-INFN collaboration OPERA we will investigate neutrino oscillations between muon and tauon flavour. In the CAST collaboration at CERN and in the Laboratory for electromagnetic and weak interactions at the Ruđer Bošković Institute we will search for the hypothetical solar axions. Theoretically we will investigate neutrino oscillations, axions and problem of cosmological constants.

**FOTON ATOM MEĐUDJELOVANJE I KORELACIJE
PHOTON ATOM INTERACTIONS AND CORRELATIONS**

Voditelj projekta: dr. sc. Tihomir Surić

Tel. ++385 1 4680 102 e-mail: suric@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Krunoslav Pisk, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Tihomir Surić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Richard H. Pratt, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, University of Pittsburgh, Pittsburgh, SAD (konzultant)

Evgenii G. Drukarev, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Petrovgradski institut nuklearne fizike, Petrovgrad, Rusija (konzultant)

Zoran Kaliman, doktor fiz. znanosti, Filozofski fakultet, Rijeka (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Izučavaju se korelacije među česticama u procesima fotoapsorpcije, raspršenja fotona i raspršenja nabijenih čestica na atomskim sistemima. Želimo razumjeti one korelacijske efekte koji su važni za opis atomskih procesa na visokim energijama. Posebno nas zanima koliko je ponašanje atomskih procesa određeno singularitetima fotonske i elektronskih interakcija, a koliko to ponašanje ovisi o korelacijama.

Research programme and results:

Correlations in high-energy atomic processes, including photoabsorption, photon scattering and scattering of charged particles, is studied. The study can provide understanding of the correlation effects, which persist at high energies. Specific studies include examining to which extends the high energy behaviours of atomic processes are determined by the singularities of the photon and electron interactions and to which extend they depend on correlations.

PROCESI MEĐUDJELOVANJA BRZIH IONA I TVARI**PROCESSES OF FAST ION INTERACTIONS WITH MATTER**

Voditelj projekta: dr. sc. Milko Jakšić

Tel.: ++385 1 46 80 942 e-mail: jaksic@irb.hr

Suradnici na projektu:

Ivančica Bogdanović-Radović, doktorica fiz. znanosti, znanstvena suradnica (od 16.7.2002.)

Mladen Bogovac, magistar fiz. znanosti, asistent

Milko Jakšić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Željko Pastuović, dipl. inž. fiz., mlađi asistent

Tonči Tadić, doktor fiz. znanosti, viši asistent (od 2.2.2000. na mirovanju prava)

Zvonko Medunić, doktor fiz. znanosti, viši asistent

Davor Gracin, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik (konzultant)

Tehnički suradnici:

Andrija Gajski, tehničar

Željko Periša, tehničar

Natko Skukan, viši tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Stjepko Fazinić, doktor fiz. znanosti, IAEA, Beč, Austrija (konzultant)

Vesna Borjanović, doktorica fiz. znanosti, Fakultet elektrotehnike i računarstva, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Osnovni smjer istraživanja međudjelovanja snopova iona i materije teži prema proučavanju najvjerojatnijih procesa, kao što su primjerice elastična raspršenja težih iona niskih energija na vanjskim elektronskim ljuskama i atomskim jezgrama. Zbog svoje učestalosti, takvi procesi će omogućiti istraživanja svojstava mete uz vrlo niske doze ozračavanja, te bitna poboljšanja prostorne razlučivosti prilikom analize.

Research programme and results:

Processes of interaction between accelerated ion beam and target material will be studied using heavier and low energy projectiles from the accelerator. Scattering of heavier ions with outer shell electrons or atomic nuclei are processes with high cross sections, enabling characterization of target with low dose rate. Due to the small ion range, high depth resolution for depth profiling of light elements can be obtained.

PRIRODNI IZOTOPNI NISKIH AKTIVNOSTI I RAZVOJ INSTRUMENTACIJE NATURAL ISOTOPES OF WEAK ACTIVITIES AND DEVELOPMENT OF INSTRUMENTATION

Voditelj projekta: dr. sc. Bogomil Obelić

Tel. ++385 1 4680 219 e-mail: obelic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Jadranka Barešić, dipl. inž. kem., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Nada Horvatinčić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica.
Ines Krajcar Bronić, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica.
Bogomil Obelić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehnička suradnica:

Božica Mustač, viša tehničarka

Suradnici iz drugih ustanova:

Douglas Harkness, doktor fiz. znanosti redovni profesor, NERC Radiocarbon Laboratory,
Glasgow, Škotska (konzultant)
Sonja Lojen, doktorica kem. znanosti, Inštitut Jožef Stefan, Ljubljana (konzultant)
Sonja Kapelj, doktorica geol. znanosti, Institut za geološka istraživanja, Zagreb
Sonja Vidić, doktorica geofiz. znanosti, Državni hidrometeorološki zavod, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Djelatnost rada na projektu će obuhvaćati znanstvena istraživanja zasnovana na prirodnim radioaktivnim izotopima ^3H i ^{14}C , te stabilnim izotopima ugljika (^{13}C), kisika (^{18}O) i vodika (^2H), razvoj novih mjernih tehnika i instrumentacije, izobrazbu mladih znanstvenika, rad na međunarodnim projektima, kao i usluge ^{14}C i ^3H mjerenja za razne institucije ili poduzeća.

Research programme and results:

Activities within the project will include scientific investigations based on natural radioactive isotopes ^3H and ^{14}C and stable isotopes of carbon (^{13}C), oxygen (^{18}O) and hydrogen (^2H), development of measurement techniques and instrumentation, education of young scientists, work on international projects, as well as ^{14}C and ^3H measurement services to various institutions and firms.

EKSPERIMENTALNA FIZIKA VISOKIH ENERGIJA**HIGH-ENERGY EXPERIMENTAL PHYSICS**

Voditelj projekta: dr. sc. Krešo Kadija

Tel. ++385 1 4561 028 e-mail: kadija@joshua.irb.hr

Suradnici na projektu:

Tome Antičić, doktor fiz. znanosti, viši asistent
Sandra Horvat, magistrica fiz. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Krešo Kadija, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tatjana Šušša, magistrica fiz. znanosti, asistentica

Suradnici iz drugih ustanova:

Ante Ljubičić, ml., doktor fiz. znanosti, Brookhaven National Laboratory, Upton, N.Y., SAD

Danilo Vranić, doktor fiz. znanosti, GSI Darmstadt, Njemačka

Guy Paić, doktor fiz. znanosti, CERN, Ženeva, Švicarska

Hans Grhard Fischer, doktor fiz. znanosti, CERN, Ženeva, Švicarska (konzultant)

Peter Seyboth, doktor fiz. znanosti, Max Planck Institut, Muenchen, Njemačka (konzultant)

Pierre Van de Vyvre, doktor fiz. znanosti, CERN, Ženeva, Švicarska (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Nastavit će se analiza prikupljenih podataka na NA49 eksperimentu, sa posebnim naglaskom na analizi produkcije stranih hiperona u pA reakcijama. Vezano uz LHC eksperiment ALICE radit će se na razvoju, dizajnu i izradi brzih elektroničkih sklopova nužnih za efikasniji rad "Time Projection Chamber". Razvijat će se software za simulaciju ALICE DAQ sustava, kao i program za monitoriranje rada velikog broja kompjutora. U sklopu ATLAS eksperimenta radit će se na razvoju driftnih komora za mionski spektrometar, kao i na programu za simulaciju odziva tih komora na pojedine kanale raspada Higgsovih bozona.

Research programme and results:

The analysis of data from the NA49 experiment will continue, with special emphasis on the strange hyperons production in pA interactions. Regarding the LHC experiment ALICE, effort will be placed on the research, design and production of the fast electronic pulsers necessary for the efficient work of the Time Projection Chamber. The ALICE DAQ simulation software will be improved, as well as the monitoring software for a large number of computers. For the ATLAS experiment, work will be done on the drift chambers for the Muon spectrometer, and on the simulation of the spectrometer response for several Higgs boson decay channels.

METODA DETEKCIJE EKSPLOZIVA, KEMIJSKOG I NUKLEARNOG MATERIJALA

METHODS OF EXPLOSIVE, CHEMICAL AND NUCLEAR MATERIAL DETECTION

Voditelj projekta: dr. sc. Vladivoj Valković

Tel: +385-1-468-0101; e-mail: valkovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Saša Blagus, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Jasmina Obhođaš, dipl. inž. geol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Dubravko Rendić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Davorin Sudac, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak
Vladivoj Valković, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Đuro Miljanić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik, (konzultant)

Tehnički suradnik:

Karlo Nađ, viši tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Dario Matika, doktor tehn. znanosti, MORH, Zagreb
Nenad Mikulić, magistar tehn. znanosti, Uprava za zaštitu okoliša, Zagreb
Dražen Kaučić, magistar biol. znanosti, Državni hidrometeorološki zavod, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Identifikacija eksploziva, kemijskog i nuklearnog materijala koji su predmet nezakonitog prometa može se korištenjem nuklearnih analitičkih metoda reducirati na problem elementalne identifikacije. Efikasno mjerenje koncentracije elemenata kao što su H, C, N, O, P, S, Ca, Cl i drugi, osniva se poglavito na moći penetracije neutrona i gama zraka u ispitivanom mediju. Ispitat će se mogućnost identifikacije elemenata od interesa u opasnim materijalima, kao i u matricama u kojima se oni najčešće nalaze, ozračavanjem neutronima i mjerenjem raspršenih neutrona i/ili proizvedenih gama zraka.

Research programme and results:

The identification of explosives, chemical and nuclear materials which are subject to illicit trafficking could be reduced to the problem of chemical elements identification by using nuclear analytical methods. The measurements of concentrations of chemical elements like H, C, N, O, P, S, Ca, Cl and others are based mainly on the penetration power of neutrons and gamma rays in side the investigated media. The feasibility of element identification in threat materials, as well as in matrices in which such materials are usually contained, will be investigated by irradiation with neutrons and by measurements of scattered neutrons and/or produced gamma rays.

INVARIJANTNA SPECIJALNA RELATIVNOST I ELEKTRODINAMIKA**INVARIANT SPECIAL RELATIVITY AND ELECTRODYNAMICS**

Voditelj projekta: dr. sc. Tomislav Ivezić

Tel. ++ 4561 111/1323 e-mail: izevic@rudjer.irb.hr

Suradnik na projektu:

Tomislav Ivezić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Program rada i rezultati na projektu:

U ovom projektu detaljno ću ispitati moju formulaciju specijalne relativnosti (SR) i posebno relativističke elektrodinamike bez korištenja referentnih sustava primjenjujući Cliffordovu algebru. Nadalje napraviti ću poopćenje te moje formulacije SR na relativističke valne jednačbe i relativističku kvantnu mehaniku te ću izvršiti usporedbu teorije s postojećim eksperimentima.

Research programme and results:

In this project it will be examined in detail my recent formulation of special relativity (SR) and the relativistic electrodynamics without reference frames. Furthermore, the generalization of that formulation of SR to the relativistic wave equations and to the relativistic quantum mechanics will be done. The proposed theory will be compared with the existing experiments.

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Aalseth, C.E.; Arik, E.; Autiero, D.; Avignone, F.T.; Barth, K.; Bowyer, S.M.; Brauning, H.; Brodzinski, R.L.; Carmona, J.M.; Cebrián, S.; Celebi, G.; Cetin, S.; Collar, J.I.; Creswick, R.; Delbart, A.; Delattre, M.; DiLella, L.; De Oliveira, R.; Eleftheriadis, Ch.; Erdutan, N.; Fanourakis, G.; Farach, H.A.; Fiorini, C.; Gerasis, Th.; Giomataris, I.; Girard, T.A.; Gninenko, S.N.; Golubev, N.A.; Hasinoff, M.; Hoffmann, D.; Irastorza, I.G.; Jacoby, J.; Jeanneau, F.; Knopf, M.A.; Kovzelev, A.V.; Kotthaus, R.; Krčmar, Milica; Krečak, Zvonko; Lakić, Biljana; Liolios, A.; Ljubičić, Ante; Lutz, G.; Longoni, A.; Luzón, G.; Mailov, A.; Matveev, V.A.; Miley, H.S.; Morales, A.; Morales, J.; Mutterer, M.; Nikolaidis, A.; Nussinov, S.; Ortiz de Solórzano, A.; Pitts, W.K.; Placci, A.; Postoev, V.E.; Raffelt, G.G.; Riege, G.; Sampieto, M.; Sarsa, M.L.; Savvidis, I.; Stipčević, Mario; Thomas, C.W.; Thompson, R.C.; Valco, P.; Villar, J.A.; Villierme, B.; Walckiers, L.; Wilcox, W.; Zachariadou, K.; Zioutas, K. The CERN Axion Solar Telescope (CAST). // Nuclear physics B - Proceedings supplements. 110 (2002), (1-3); 85-87.

2. Afanasev, S.V.; Antičić, Tome; Baechler, J.; Barna, D.; Barnby, L.S.; Bartke, J.; Barton, R.A.; Behler, M.; Betev, L.; Bialkowska, H.; Billmeier, A.; Blume, C.; Blyth, C.O.; Boimska, B.; Botje, M.; Bracinik, J.; Brady, F.P.; Bramm, R.; Brun, R.; Buncic, P.; Carr, L.; Cebra, D.; Cerny, V.; Cooper, G.E.; Cramer, J.G.; Csato, P.; Dinkelaker, P.; Eckardt, V.; Eckhardt, F.; Ferenc, D.; Filip, P.; Fischer, H.G.; Fodor, Z.; Foka, P.; Freund, P.; Friese, V.; Gal, J.; Ganz, R.; Gazdzicki, M.; Georgopoulos, G.; Gladysz, E.; Harris, J.W.; Hegyi, S.; Hohne, C.; Igo, G.; Jacobs, P.; Jones, P.G.; Kadija, Krešo; Kolesnikov, V.I.; Kollegger, T.; Kowalski, M.; Kraus, I.; Kreps, M.; Lasiuk, B.; Levai, P.; Malakhov, A.I.; Margetis, S.; Markert, C.; Mayes, B.W.; Melcumov, G.L.; Mischke, A.; Molnar, J.; Nelson, J.M.; Odyniec, G.; Oldenburg, M.D.; Palla, G.; Panagiotou, A.D.; Perl, K.; Petridis, A.; Pikna, M.; Pinsky, L.; Poskanzer, A.M.; Prindle, D.J.; Puhlhofer, F.; Putschke, J.; Reid, J.G.; Renfordt, R.; Retyk, W.; Ritter, H.G.; Rohrich, D.; Roland, C.; Roland, G.; Rybicki, A.; Sammer, T.; Sandoval, A.; Sann, H.; Schafer, E.; Schmitz, N.; Seyboth, P.; Sikler, F.; Sitar, B.; Skrzypczak, E.; Snellings, R.; Squier, G.T.A.; Stock, R.; Strobele, H.; Šušša, Tatjana; Szentpetery, I.; Sziklai, J.; Toy, M.; Trainor, T.A.; Trentalange, S.; Ullrich, T.; Varga, D.; Vassiliou, M.; Veres, G.I.; Vesztergombi, G.; Voloshin, S.; Vranić, Danilo; Wang, F.; Weerasundara, D.D.; Wenig, S.; Wetzler, A.; Whitten, C.; Xu, N.; Yates, T.A.; Yoo, I.K.; Zaraneck, J.; Zimanyi, J. New results from NA49. // Nuclear physics A. 698 (2002); 104-111.
3. Afanasiev, S.V.; Antičić, Tome; Barna, D.; Bartke, J.; Barton, R.A.; Behler, M.; Betev, L.; Bialkowska, H.; Billmeier, A.; Blume, C.; Blyth, C.O.; Boimska, B.; Botje, M.; Bracinik, J.; Bramm, R.; Brun, R.; Buncic, P.; Cerny, V.; Cramer, J.G.; Csato, P.; Dinkelaker, P.; Eckardt, V.; Filip, P.; Fischer, H.G.; Fodor, Z.; Foka, P.; Freund, P.; Friese, V.; Gal, J.; Gazdzicki, M.; Georgopoulos, G.; Gladysz, E.; Hegyi, S.; Hohne, C.; Igo, G.; Jones, P.G.; Kadija, Krešo; Karev, A.; Kolesnikov, V.I.; Kollegger, T.; Kowalski, M.; Kraus, I.; Kreps, M.; Levai, P.; Malakhov, A.I.; Margetis, S.; Markert, C.; Mayes, B.W.; Melcumov, G.L.; Mischke, A.; Molnar, J.; Nelson, J.M.; Palla, G.; Panagiotou, A.D.; Perl, K.; Petridis, A.; Pikna, M.; Pinsky, L.; Puhlhofer, F.; Reid, J.G.; Renfordt, R.; Retyk, W.; Roland, C.; Roland, G.; Rybicki, A.; Sammer, T.; Sandoval, A.; Sann, H.; Schmitz, N.; Seyboth, P.; Sikler, F.; Sitar, B.; Skrzypczak, E.; Squier, G.T.A.; Stock, R.; Strobele, H.; Šušša, Tatjana; Szentpetery, I.; Sziklai, J.; Trainor, T.A.; Varga, D.; Vassiliou, M.; Veres, G.I.; Vesztergombi, G.; Vranić, Danilo; Wenig, S.; Wetzler, A.; Whitten, C.; Yoo, I.K.; Zaraneck, J.; Zimanyi, J. Energy Dependence of Pion and Kaon Production in Central Pb+Pb Collisions. // Physical review C. 66 (2002); 054902.
4. Afanasiev, S.V.; Antičić, Tome; Barna, D.; Bartke, J.; Barton, R.A.; Betev, L.; Bialkowska, H.; Billmeier, A.; Blume, C.; Blyth, C.O.; Boimska, B.; Botje, M.; Bracinik,

- J.; Bramm, R.; Brun, R.; Buncic, P.; Cerny, V.; Cramer, J.G.; Csato, P.; Dinkelaker, P.; Eckardt, V.; Filip, P.; Fischer, H.G.; Fodor, Z.; Foka, P.; Freund, P.; Friese, V.; Gal, J.; Gazdzicki, M.; Georgopoulos, G.; Gladysz, E.; Hegyi, S.; Hohne, C.; Igo, G.; Jones, P.G.; Kadija, Krešo; Karev, A.; Kolesnikov, V.I.; Kollegger, T.; Kowalski, M.; Kraus, I.; Kreps, M.; Levai, P.; Malakhov, A.I.; Margetis, S.; Markert, C.; Mayes, B.W.; Melkumov, G.L.; Molnar, J.; Nelson, J.M.; Palla, G.; Panagiotou, A.D.; Perl, K.; Petridis, A.; Pikna, M.; Pinsky, L.; Puhlhofer, F.; Reid, J.G.; Renfordt, R.; Retyk, W.; Roland, C.; Roland, G.; Rybicki, A.; Sammer, T.; Sandoval, A.; Sann, H.; Schmitz, N.; Seyboth, P.; Sikler, F.; Sitar, B.; Skrzypczak, E.; Squier, G.T.A.; Stock, R.; Strobele, H.; Šušša, Tatjana; Szentpetery, I.; Sziklai, J.; Trainor, T.A.; Varga, D.; Vassiliou, M.; Veres, G.I.; Vesztergombi, G.; Vranić, Danilo; Wenig, S.; Wetzler, A.; Whitten, C.; Yoo, I.K.; Zaranek, J.; Zimanyi, J. Lambda production in central Pb+Pb collisions at CERN-SPS energies. // *Journal of physics G*. 28 (2002); 1761-1768.
5. Afanasiev, S.V.; Antičić, Tome; Barna, D.; Bartke, J.; Barton, R.A.; Betev, L.; Bialkowska, H.; Billmeier, A.; Blume, C.; Blyth, C.O.; Boimska, B.; Botje, M.; Bracinik, J.; Bramm, R.; Brun, R.; Buncic, P.; Cerny, V.; Cramer, J.G.; Csato, P.; Dinkelaker, P.; Eckardt, V.; Filip, P.; Fischer, H.G.; Fodor, Z.; Foka, P.; Freund, P.; Friese, V.; Gal, J.; Gazdzicki, M.; Georgopoulos, G.; Gladysz, E.; Hegyi, S.; Hohne, C.; Igo, G.; Jones, P.G.; Kadija, Krešo; Karev, A.; Kolesnikov, V.I.; Kollegger, T.; Kowalski, M.; Kraus, I.; Kreps, M.; Levai, P.; Malakhov, A.I.; Margetis, S.; Markert, C.; Mayes, B.W.; Melkumov, G.L.; Mischke, A.; Molnar, J.; Nelson, J.M.; Palla, G.; Panagiotou, A.D.; Perl, K.; Petridis, A.; Pikna, M.; Pinsky, L.; Puhlhofer, F.; Reid, J.G.; Renfordt, R.; Retyk, W.; Roland, C.; Roland, G.; Rybicki, A.; Sammer, T.; Sandoval, A.; Sann, H.; Schmitz, N.; Seyboth, P.; Sikler, F.; Sitar, B.; Skrzypczak, E.; Squier, G.T.A.; Stock, R.; Strobele, H.; Šušša, Tatjana; Szentpetery, I.; Sziklai, J.; Trainor, T.A.; Varga, D.; Vassiliou, M.; Veres, G.I.; Vesztergombi, G.; Vranić, Danilo; Wenig, S.; Wetzler, A.; Whitten, C.; Yoo, I.K.; Zaranek, J.; Zimanyi, J. Ξ^- and anti- Ξ^+ Production in Central Pb+Pb Collisions at 158 GeV/c per Nucleon. // *Physics letters B*. 538 (2002); 275-281.
6. Astier, P.; Autiero, D.; Baldisseri, A.; Baldo-Ceolin, M.; Banner, M.; Bassompierre, G.; Benslama, K.; Besson, N.; Bird, I.; Blumenfeld, B.; Bobisut, F.; Bouchez, J.; Boyd, S.; Bueno, A.; Bunyatov, S.; Camilleri, L.; A. Cardini, A.; Cattaneo, P.W.; Cavasinni, V.; Cervera-Villanueva, A.; Challis, R.; Chukanov, A.; Collazuol, G.; Conforto, G.; Conta, C.; Contalbrigo, M.; Cousins, R.; Daniels, D.; Degaudenzi, H.; Del Prete, T.; De Santo, A.; Dignan, T.; Di Lella, L.; do Couto e Silva, E.; Dumarchez, J.; Ellis, M.; Fazio, T.; Feldman, G. J.; Ferrari, R.; Ferrere, D.; Flaminio, V.; Fraternali, M.; Gaillard, J. -M.; Gangler, E.; Geiser, A.; Geppert, D.; Gibin, D.; Gninenko, S.; Godley,

- A.; Gomez-Cadenas, J.-J.; Gosset, J.; Goessling, C.; Gouanere, M.; Grant, A.; Graziani, G.; Guglielmi, A.; Hagner, C.; Hernando, J.; Hubbard, D.; Hurst, P.; Hyett, N.; Iacopini, E.; Joseph, C.; Juget, F.; Kent, N.; Kirsanov, M.; Klimov, O.; Kokkonen, J.; Kovzelev, A.; Krasnoperov, A.; Kustov, D.; Kuznetsov, V.; Lacaprara, S.; Lachaud, C.; Lakić, Biljana; Lanza, A.; La Rotonda, L.; Laveder, M.; Letessier-Selvon, A.; Levy, J. -M.; Linssen, L.; Ljubičić, Ante; Long, J.; Lupi, A.; Marchionni, A.; Martelli, F.; Méchain, X.; Mendiburu, J. -P.; Meyer, J. -P.; Mezzetto, M.; Mishra, S.R.; Moorhead, G.F.; Naumov, D.; Nédélec, P.; Nefedov, Yu.; Nguyen-Mau, C.; Orestano, D.; Pastore, F.; Peak, L.S.; Pennacchio, E.; Pessard, H.; Petti, R.; Placci, A.; Polesello, G.; Pollmann, D.; Polyarush, A.; Popov, B.; Poulsen, C.; Rico, J.; Riemann, P.; Roda, C.; Rubbia, A.; Salvatore, F.; Schahmaneche, K.; Schmidt, B.; Schmidt, T.; Sevier, M.; Sillou, D.; Soler, F.J.P.; Sozzi, G.; Steele, D.; Stiegler, U.; Stipčević, Mario; Stolarczyk, Th.; Tareb-Reyes, M.; Taylor, G.N.; Tereshchenko, V.; Toropin, A.; Touchard, A.M.; Tovey, S.N.; Tran, M.T.; Tsesmelis, E.; Ulrichs, J.; Vacavant, L.; Valdata-Nappi, M.; Valuev, V.; Vannucci, V.; Varvell, K.E.; Veltri, M.; Vercesi, V.; Vidal-Sitjes, G.; Vieira, J.-M.; Vinogradova, T.; Weber, F.W.; Weisse, T.; Wilson, F.F.; Winton, L.J.; Yabsley, B.D.; Zacccone, H.; Zuber, H.; Zuccon, P. A study of strange particle production in $\nu\mu$ charged current interactions in the NOMAD experiment. // Nuclear physics B. 621 (2002), (1-2); 3-34.
7. Astier, P.; Autiero, D.; Baldisseri, A.; Baldo-Ceolin, M.; Banner, M.; Bassompierre, G.; Benslama, K.; Besson, N.; Bird, I.; Blumenfeld, B.; Bobisut, F.; Bouchez, J.; Boyd, S.; Bueno, A.; Bunyatov, S.; Camilleri, L.; A. Cardini, A.; Cattaneo, P.W.; Cavasinni, V.; Cervera-Villanueva, A.; Challis, R.; Chukanov, A.; Collazuol, G.; Conforto, G.; Conta, C.; Contalbrigo, M.; Cousins, R.; Daniels, D.; Degaudenzi, H.; Del Prete, T.; De Santo, A.; Dignan, T.; Di Lella, L.; do Couto e Silva, E.; Dumarchez, J.; Ellis, M.; Fazio, T.; Feldman, G. J.; Ferrari, R.; Ferrere, D.; Flaminio, V.; Fraternali, M.; Gaillard, J. -M.; Gangler, E.; Geiser, A.; Geppert, D.; Gibin, D.; Gninenko, S.; Godley, A.; Gomez-Cadenas, J.-J.; Gosset, J.; Goessling, C.; Gouanere, M.; Grant, A.; Graziani, G.; Guglielmi, A.; Hagner, C.; Hernando, J.; Hubbard, D.; Hurst, P.; Hyett, N.; Iacopini, E.; Joseph, C.; Juget, F.; Kent, N.; Kirsanov, M.; Klimov, O.; Kokkonen, J.; Kovzelev, A.; Krasnoperov, A.; Kustov, D.; Kuznetsov, V.; Lacaprara, S.; Lachaud, C.; Lakić, Biljana; Lanza, A.; La Rotonda, L.; Laveder, M.; Letessier-Selvon, A.; Levy, J. -M.; Linssen, L.; Ljubičić, Ante; Long, J.; Lupi, A.; Marchionni, A.; Martelli, F.; Méchain, X.; Mendiburu, J. -P.; Meyer, J. -P.; Mezzetto, M.; Mishra, S.R.; Moorhead, G.F.; Naumov, D.; Nédélec, P.; Nefedov, Yu.; Nguyen-Mau, C.; Orestano, D.; Pastore, F.; Peak, L.S.; Pennacchio, E.; Pessard, H.; Petti, R.; Placci, A.; Polesello, G.; Pollmann, D.; Polyarush, A.; Popov, B.; Poulsen, C.; Rico, J.; Riemann, P.; Roda,

- C.; Rubbia, A.; Salvatore, F.; Schahmaneche, K.; Schmidt, B.; Schmidt, T.; Sevier, M.; Sillou, D.; Soler, F.J.P.; Sozzi, G.; Steele, D.; Stiegler, U.; Stipčević, Mario; Stolarczyk, Th.; Tareb-Reyes, M.; Taylor, G.N.; Tereshchenko, V.; Toropin, A.; Touchard, A.M.; Tovey, S.N.; Tran, M.T.; Tsesmelis, E.; Ulrichs, J.; Vacavant, L.; Valdata-Nappi, M.; Valuev, V.; Vannucci, V.; Varvell, K.E.; Veltri, M.; Vercesi, V.; Vidal-Sitjes, G.; Vieira, J.-M.; Vinogradova, T.; Weber, F.W.; Weisse, T.; Wilson, F.F.; Winton, L.J.; Yabsley, B.D.; Zacccone, H.; Zuber, H.; Zuccon, P. Study of D^{*+} production in muon neutrino charged current interactions in the NOMAD experiment. // Physics letters B. 526 (2002), 3-4; 278-286.
8. Astier, P.; Autiero, D.; Baldisseri, A.; Baldo-Ceolin, M.; Banner, M.; Bassompierre, G.; Benslama, K.; Besson, N.; Bird, I.; Blumenfeld, B.; Bobisut, F.; Bouchez, J.; Boyd, S.; Bueno, A.; Bunyatov, S.; Camilleri, L.; A. Cardini, A.; Cattaneo, P.W.; Cavasinni, V.; Cervera-Villanueva, A.; Collazuol, G.; Conforto, G.; Conta, C.; Contalbrigo, M.; Cousins, R.; Daniels, D.; Degaudenzi, H.; Del Prete, T.; De Santo, A.; Dignan, T.; Di Lella, L.; do Couto e Silva, E.; Dumarchez, J.; Ellis, M.; Fazio, T.; Feldman, G. J.; Ferrari, R.; Ferrere, D.; Flaminio, V.; Fraternali, M.; Gaillard, J. -M.; Gangler, E.; Geiser, A.; Geppert, D.; Gibin, D.; Gninenko, S.; Godley, A.; Gonzales-Garcia, M.C.; Gomez-Cadenas, J.-J.; Gosset, J.; Goessling, C.; Gouanere, M.; Grant, A.; Graziani, G.; Guglielmi, A.; Hagner, C.; Hernando, J.; Hubbard, D.; Hurst, P.; Hyett, N.; Iacopini, E.; Joseph, C.; Juget, F.; Kirsanov, M.; Klimov, O.; Kokkonen, J.; Kovzelev, Krasnikov, V.; A.; Krasnoperov, A.; Lacaprara, S.; Lachaud, C.; Lakić, Biljana; Lanza, A.; La Rotonda, L.; Laveder, M.; Letessier-Selvon, A.; Levy, J. -M.; Linszen, L.; Ljubičić, Ante; Long, J.; Lupi, A.; Marchionni, A.; Martelli, F.; Méchain, X.; Mendiburu, J. -P.; Meyer, J. -P.; Mezzetto, M.; Mishra, S.R.; Moorhead, G.F.; Naumov, D.; Nédélec, P.; Nefedov, Yu.; Nguyen-Mau, C.; Orestano, D.; Pastore, F.; Peak, L.S.; Pennacchio, E.; Pessard, H.; Petti, R.; Placci, A.; Polesello, G.; Pollmann, D.; Polyarush, A.; Popov, B.; Poulsen, C.; Rathouit, P.; Rico, J.; Roda, C.; Rubbia, A.; Salvatore, F.; Schahmaneche, K.; Schmidt, B.; Sevier, M.; Sillou, D.; Soler, F.J.P.; Sozzi, G.; Steele, D.; Stiegler, U.; Stipčević, Mario; Stolarczyk, Th.; Tareb-Reyes, M.; Taylor, G.N.; Tereshchenko, V.; Toropin, A.; Touchard, A.M.; Tovey, S.N.; Tran, M.T.; Tsesmelis, E.; Ulrichs, J.; Vacavant, L.; Valdata-Nappi, M.; Valuev, V.; Vannucci, V.; Varvell, K.E.; Veltri, M.; Vercesi, V.; Vidal-Sitjes, G.; Vieira, J.-M.; Vinogradova, T.; Weber, F.W.; Weisse, T.; Wilson, F.F.; Winton, L.J.; Yabsley, B.D.; Zacccone, H.; Zuber, H.; Zuccon, P. New results on a search for a $33.9 \text{ MeV}/c^2$ neutral particle from π^+ decay in the NOMAD experiment. // Physics letters B. 527 (2002), (1-2); 23-28.

9. Babić, Ana; Guberina, Branko; Horvat, Raul; Štefančić, Hrvoje. Renormalization-group running of the cosmological constant and its implication for the Higgs boson mass in the Standard Model. // *Physical review D*. 65 (2002); 085002.
10. Blaauw, M.; Campbell, J.L.; Fazinić, Stjepko; Jakšić, Milko; Orlić, Ivo; Van Espen, P. The 2000 IAEA intercomparison of PIXE spectrum analysis software. // *Nuclear instruments and methods in physics research B*. 189 (2002); 113-122.
11. Bogdanović-Radović, Ivančica; Jakšić, Milko; Benka, O.; Gurbich, A.F. Helium elastic scattering from carbon for 30^0 to 150^0 in the energy region from 2 to 4.8 MeV. // *Nuclear instruments and methods in physics research B*. 190 (2002); 100-106.
12. Borjanović, Vesna; Jakšić, Milko; Pastuović, Željko; Pivac, Branko; Vlahović, Branislav; Dutta, J.; Ječmenica, Rade. Defects in polycrystalline silicon studied by IBICC. // *Solar energy materials and solar cells*. 72 (2002); 487-494.
13. Briscoe, W.J.; Berman, B.L.; Carter, R.W.C.; Dhuga, K.S.; Matthews, S.K.; Nicholas, N.-J.; Greene, S.J.; Nefkens, B.M.K.; Price, J.W.; Isenhower, L.D.; Sadler, M.E.; Šlaus, Ivo; Supek, Ivan. Elastic scattering of charged pions from ^3H and ^3He . // *Physical review C*. 66 (2002); 054006.
14. Gracin, Davor; Jakšić, Milko; Bogdanović-Radović, Ivančica; Medunić, Zvonko; Car, Tihomir; Pracek, B. Characterization of amorphous silicon carbon alloys by IBA technique and optical spectroscopy. // *Vacuum*. 67 (2002); 519-523.
15. Gržeta, Biserka; Tkalčec, E.; Goebbrt, C.; Takeda, M.; Takahashi, M.; Nomura, K.; Jakšić, Milko. Structural studies of nanocrystalline SnO_2 doped with antimony: XRD and Mossbauer spectroscopy. // *Journal of physics and chemistry of solids*. 63 (2002); 765-772.
16. Hong, B.; Kim, Y.J.; Kang, D.H.; Leifels, Y.; Rami, F.; de Schauenburg, B.; Sim, K.S.; Alard, J.P.; Andronic, A.; Barret, V.; Basrak, Zoran; Bastid, N.; Berek, G.; Čaplar, Roman; Crochet, P.; Devismes, A.; Dupieux, P.; Dželalija, Mile; Finck, C.; Fodor, Z.; Gobbi, A.; Grishkin, Yu.; Hartmann, O.N.; Herrmann, Hildenbrand, K.D.; Kecskemeti, J.; Kirejczyk, M.; Koczon, P.; Korolija, Milorad; Kotte, R.; Kress, T.; Kutsche, R.; Lebedev, A.; Lopez, X.; Neubert, W.; Pelte, D.; Petrovici, M.; Reisdorf, W.; Schuell, D.; Seres, Z.; Sikora, B.; Simion, V.; Siwek-Wilczyska, K.; Smolyankin, V.; Stockmeier, M.R.; Stoicea, G.; Wagner, P.; Winiewski, K.; Wohlfarth, D.; Yushmanov, I.; Zhilin, A. Proton and deuteron rapidity distributions and nuclear stopping in 96-Ru(96-Zr)+96-Ru(96-Zr) collisions at 400A MeV. // *Physical review C*. 66 (2002); 034901-034909.
17. Horvat, Raul. Observable interactions of quintessence with ordinary matter and neutrinos. // *Journal of high energy physics*. 208 (2002); 31.

18. Horvat, Raul; Krčmar, Milica; Lakić, Biljana. Recent searches for solar axions and large extra dimensions. // *Physical review D*. 65 (2002); 087701.
19. Ivezić, Tomislav. An invariant formulation of special relativity, or the "True transformations relativity," and comparison with experiments. // *Foundation of physics letters*. 15 (2002), 1; 27-69.
20. Jakšić, Milko; Bošnjak, Željka; Gracin, Davor; Medunić, Zvonko; Pastuović, Željko; Vittone, Ettore; Nava, F. Characterisation of SiC by IBIC and other IBA techniques. // *Nuclear instruments and methods in physics research B*. 188 (2002); 130-134.
21. Kekez, Dalibor; Klabučar, Dubravko. Eta and eta' in a coupled Schwinger-Dyson and Bethe-Salpeter approach. II. The gamma* gamma transition form factors. // *Physical review D*. 65 (2002); 057901-057905.
22. Manley, D.M.; Abaev, V.V.; Allgover, C.; Bekrenev, V.; Briscoe, W.J.; Clajus, M.; Comfort, J.R.; Craig, K.; Grosnick, D.; Isenhowe, D.; Knecht, H.; Koetke, D.; Koulbardis, A.; Kozlenko, N.; Kruglov, S.; Lolos, G.J.; Lopatin, I.; Manweiler, R.; Marušić, Aljoša; McDonald, S.; Nefkens, B.M.K.; Olmsted, J.; Papandreu, Y.; Peaslee, D.; Phaisangittisakul, N.; Prakhov, S.; Price, J.; Ramirez, A.F.; Sadler, M.E.; Shafi, A.; Spinka, H.; Stanislaus, T.D.S.; Starostin, A.B.; Staudenmaier, H.M.; Starkovsky, I.I.; Supek, Ivan; Tippens, W.B. Properties of the Lambda[1670] 1/2-Resonance. // *Physical review letters*. 88 (2002); 012002.
23. Milin, Matko; von Oertzen, W. Search for molecular bands in 13-C. // *The European physical journal A*. 14 (2002), (3); 295-307.
24. Nsouli, B.; Roumie, M.; Zahraman, K.; Thomas, J.-P.; Jakšić, Milko; Pastuović, Željko; Dole, P.; Nasreddine, M. PIXE, micro-PIXE and RBS analysis of thermal aged rubber material: On the additives behaviour versus aging time. // *Nuclear instruments and methods in physics research B*. 198 (2002); 201-207.
25. Obelić, Bogomil; Krajcar Bronić, Ines; Horvatinčić, Nada. Rudjer Bošković Institute radiocarbon measurements XV. // *Radiocarbon*. 44 (2002), 2; 601-630.
26. Oreščanin, Višnja; Mikulić, Nenad; Obhodaš, Jasmina; Nađ, Karlo; Valković, Vladivoj. Distribution of trace elements in the coastal sea sediments: Punat bay in the Northern Adriatic. // *Journal of trace and microprobe techniques*. 20 (2002), (2); 247-260.
27. Oreščanin, Višnja; Tibljas, Darko; Valković, Vladivoj. A study of coagulant production from red mud and its use for heavy metals removal. // *Journal of trace and microprobe techniques*. 20 (2002), (2); 233-245.
28. Plenković-Moraj, Anđelka; Horvatinčić, Nada; Primc-Habdija, Biserka. Periphyton and its role in tufa deposition in karstic waters (Plitvice Lakes, Croatia). // *Biologia*. 57 (2002), 4; 423-431.

29. Rousseau, M.; Beck, C.; Bhattacharya, C.; Rauch, V.; Dorvaux, O.; Eddahbi, K.; Enaux, C.; Freeman, R.M.; Haas, F.; Mahboub, D.; Nouicer, R.; Papka, P.; Stezowski, O.; Szilner, Suzana; Hachem, A.; Martin, E.; Sanders, S.J.; Dummer, A.K.; de Toledo, A.S. Highly deformed ^{40}Ca configurations in $^{28}\text{Si}+^{12}\text{C}$. // *Physical review C - nuclear physics*. 66 (2002), (3); 034612.
30. Šušša, Tatjana (for NA49 collaboration). Cascade production in p+p, p+A and A+A interactions at 158 AGeV. // *Nuclear physics A*. 698 (2002); 491-494.
31. Szilner, Suzana; von Oertzen, W.; Basrak, Zoran.; Haas, F.; Milin, Matko. Elastic alpha-transfer in the elastic scattering of $^{16}\text{O}+^{12}\text{C}$. // *The European physical journal A*. 13 (2002), (3); 273-275.
32. Wosinska, K.; Pluta, J.; Hanappe, F.; Stuttge, L.; Angelique, J.C.; Basrak, Zoran; Benoit, B.; De Goes Brennand, E.; Bizard, G.; Colin, J.; Costa, G.; Desesquelles, P.; Dorvaux, O.; Durand, D.; Erasmus, B.; Kieliszek, A.; Kuleshov, S.; Lednicky, R.; Leszczynski, P.; Marques, M.; Materna, T.; Mikhailov, K.; Miller, K.; Papatheofanous, G.; Pawlak, T. et al. Parameters of emitting sources in Ar-Ni reaction at 77 MeV/u Source. // *Acta physica polonica B*. 33 (2002), (1); 507-513.

Knjige i poglavlja u knjigama:

1. Obelić, Bogomil; Ranogajec-Komor, Maria; Miljanić, Saveta; Krajcar Bronić, Ines (ur.). Proceedings of the IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe: Radiation Protection and Health, Dubrovnik, 20.-25.5.2001. Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002.

Ostali radovi u časopisima:

1. Miljanić, Đuro; Soić, Neven; Blagus, Saša; Cherubini, S.; Costanzo, E.; Lattuada, M.; Milin, Matko; Mussumara, A.; Pizzone, R.G.; Rendić, Dubravko; Romano, S.; Spitaleri, C.; Tumino, A.; Zadro, Mile. ^{10}Be and molecular states. // *Fizika B*. 10 (2002), 4; 235-246

Radovi u preprint arhivama:

1. Cortese, P.; ..., Antičić, Tome; Kadija, Krešo; Šušša, Tatjana. ALICE: Addendum to the technical design report of the Time of Flight System (TOF), CERN-LHCC-2002-016
2. Starostin, A.; ..., Šlaus, Ivo; Supek, Ivan; ..., Stanislaus, S. Meson production on complex nuclei by Pi- with Crystal Ball detector, arXiv.org, nucl-ex/0204002

Znanstveni radovi u tisku:

1. Kutle, Ante; Nađ, Karlo; Obhođaš, Jasmina; Oreščanin, Višnja; Valković, Vladivoj. Assessment of environmental condition in the waste disposal site of ex-aluminum plant near Obrovac in Croatia. // X-Ray spectrometry.
2. Kutle, Ante; Oreščanin, Višnja; Obhođaš, Jasmina; Valković, Vladivoj. Trace element analysis of school children's hair from island Krk in Adriatic Sea. // Journal of radioanalytical and nuclear chemistry.
3. Kutle, Ante; Oreščanin, Višnja; Valković, Vladivoj. Trace element distribution in geochemical environment of the island Krk and health of its inhabitants. // Journal of radioanalytical and nuclear chemistry.
4. Oreščanin, Višnja; Nađ, Karlo; Obhođaš, Jasmina; Sudac, Davorin; Valković, Vladivoj. Genesis of Plomin bay sediments. // X-ray spectrometry.
5. Surić, Tihomir; Drukarev, E.G.; Pratt, R.H. Characterization of high energy photoionization in terms of the singularities of the atomic potential: I. Photoionization in independent particle approximation (IPA). // Physical review A.
6. Surić, Tihomir; Drukarev, E.G.; Pratt, R.H. Characterization of high energy photoionization in terms of the singularities of the atomic potential: III. Beyond K-shell ionization using the example of a two electron atom in an excited state. // Physical review A.
7. Surić, Tihomir; Drukarev, E.G.; Pratt, R.H. Characterization of high energy photoionization in terms of the singularities of the atomic potential: II. Photoionization of the ground state of a two-electron atom. // Physical review A.
8. Valković, Vladivoj; Obhođaš, Jasmina; Sudac, Davorin; Nađ, Karlo; Nebbia, G.; Viesti, G. The soil moisture and its relevance to the landmine detection by neutron backscattering technique. // Nuclear instruments and methods in physics research B: beam interactions with materials and atoms.
9. Valković, Vladivoj; Oreščanin, Višnja; Kutle, Ante; Obhođaš, Jasmina. Elemental composition of the vegetation on the island Krk. // Journal of trace and microprobe techniques.

Radovi objavljeni u zbornicima skupova:

1. Bohlen, H.G.; von Oertzen, W; Blažević, A.; Gebauer, B.; Milin, Matko; Kokalova, T.; Schulz, Ch.; Thummerer, S.; Tumino, A.; Kalpakchieva, R; Massey, T.N. ; Grimes, S.M. Structure of neutron-rich Beryllium isotopes // Proceedings of International Symposium on Exotic Nuclei, EXON 2001, Baikal Lake, July 24-28, 2001 / Penionzhkevich, Yu.E.; Cherepanov, A. (ur.): World Scientific, 2002. 453.

2. Danielyan, Varuzhan; Horvat, Sandra; Kroha, Hubert. Studies of semitransparent optoelectronic position sensors // Proceedings of IEEE Sensors 2002 / IEEE Sensor Council (ur.). Orlando, Florida, 2002. 829-835.
3. Krajcar Bronić, Ines. W value and the Fano factor in rare gases and rare gas mixtures // Proceedings of the IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe: Radiation Protection and Health / Obelić, B; Ranogajec-Komor, M; Miljanić, S; Krajcar Bronić, I (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002. 20-02.
4. Krajcar Bronić, Ines; Grosswendt, Bernd. Statistical fluctuations in gas amplification factor of a low-pressure proportional counter // Proceedings of the IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe: Radiation protection and Health / Obelić, B; Ranogajec-Komor, M; Miljanić, S; Krajcar Bronić, I (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002. 8p-17.
5. Obelić, Bogomil; Horvatinčić, Nada; Krajcar Bronić, Ines. Improving of quality control and quality assurance in Radiocarbon and Tritium laboratory; participation in the IAEA model project // Proceedings of the IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe (on CD-ROM) / Obelić, B; Ranogajec-Komor, M; Miljanić, S; Krajcar Bronić, I (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002. 10-09.

Elaborati, izvjestaji i studije:

1. Horvatinčić, Nada; Krajcar Bronić, Ines; Obelić, Bogomil; Barešić, Jadranka; Vidič, Sonja; Šojat, Višnja. Tritium and stable isotope distribution in the atmosphere at the coastal region of Croatia, 2002.
2. Krajcar Bronić, Ines. Određivanje izotopnog sastava kisika i vodika u oborinama u svrhu ekoloških i hidroloških istraživanja, 2002.

Magistarski radovi:

1. Horvat, Sandra. Laserski sustav ALMY za precizno određivanje položaja detektora tragova čestica. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 3.7.2002., 118 str., Voditelj: Kadija, Kešo.
2. Šuša, Tatjana. Tvorba stranih hiperona u p+p sudarima pri energiji 158 GeV/nukleonu. Zagreb : Prirodoslovno-matematički u Zagrebu, 8.5.2002., 96 str., Voditelj: Kadija, Krešo.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

Horvat, S. Razvoj novog opto-elektroničkog sustava ALMY za precizno određivanje položaja detektora tragova čestica, Fizički odsjek Prirodoslovno matematičkog fakulteta, Zagreb, 14.1.2002.

Jakšić, M. Nuclear microprobe applications, Institute of High Energy Physics of Chinese Academy of Science, Beijing, Kina, 20.3.2002.

Horvat, S. Tests of the ATLAS MDT chambers in muon beam at CERN, DPG, Leipzig, Njemačka, 21.3.2002.

Horvat, S. Production of tests of the precision drift tube chambers for the ATLAS muon spectrometer, DPG, Leipzig, Njemačka, 21.3.2002.

Horvat, S. Search for the Higgs(es) at LHC, Max-Planck-Institut, Muenchen, Njemačka, 22.5.2002.

Antičić, T. Performance monitoring with AFFAIR, CERN IT seminar, Ženeva, Švicarska, 12.6.2002.

Antičić, T. Simulation of the ALICE Trigger and DAQ, ALICE Technical Board, CERN, Ženeva, Švicarska, 14.6.2002.

Bogdanović Radović, I. Facilities and activities of nuclear physics groups in Croatia, University of Sofija, Sofija, Bugarska, 16.9.2002.

Surić, T. Correlation effects in high energy photoabsorption and in pair-production near threshold", National Institute of Standards and Technology, Ionizing Radiation Division, Washington, SAD, 5.11.2002.

Švarc, A. The possibility of production of the BRAG coupled channel two-body meson-nucleon amplitudes and their test in the three body processes, University of Pittsburg, Pittsburgh, Pennsylvania, SAD, 10.11.2002.

Antičić, T. ALICE rare trigger acceptance, ALICE Technical Board, CERN, Ženeva, Švicarska, 16.12.2002.

Horvat, S. ATLAS experiment project review, Max-Planck-Institut, München, Njemačka, 16.12.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

Milin, M., Hahn-Meitner-Institut, Berlin, Njemačka, 1.1.-15.2.2002.

Mekterović, D., Brookhaven National Laboratory, Upton New York, SAD, 15.2.-15.8.2002.

Horvat, S., Max Planck Institut za fiziku, Muenchen, Njemačka, 1.1.-31.12.2002.

Szilner, S., INFN Laboratori Nazionali di Legnaro, Legnaro (Padova), Italija, 1.1.-31.12.2002.

Soić, N., University of Birmingham, Birmingham, Velika Britanija, 1.1.-12.9.2002.

Barešić, J., Institute of Physics, Silesian University of Technology, Gliwice, Poljska, 13.5.-9.6.2002.

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje:

Lakić, B., CERN (CAST), Ženeva, Švicarska, 28.2.-28.3.2000. i 28.8.-26.9.2002.

Gašparić, I., Kernfysisch Versneller Instituut, Groningen, Nizozemska, 15-30.4.2002.

Supek, I., Brookhaven National Laboratory, Upton, New York, SAD, 18.4.-10.5.2002.

Zadro, M., Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, od 28.4.- 26.5.2002. i 10.11.- 9.12.2002.

Čaplar, R., Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt, Njemačka, 12-26.5.2002. i 10-24.11.2002.

Šuša, T., CERN (NA49), Ženeva, Švicarska, 25.5.-24.6.2002.

Antičić, T., CERN (NA49), Ženeva, Švicarska, 10-30.6.2002.

Surić, T., Department of Physics and Astronomy, University of Pittsburgh, Pittsburgh, SAD, 19.10-19.11.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

ESO-CERN-ESA SYMPOSIUM ON ASTRONOMY, COSMOLOGY AND FUNDAMENTAL PHYSICS

Garching, Njemačka, 3-7.3.2002.

Sudionik: Horvat, R.

BUDAPEST 2002 WORKSHOP "QUARK HADRON DYNAMICS IN RELATIVISTIC HEAVY ION COLLISIONS"

Budimpešta, Mađarska, 4-8.3.2002.

Sudionik: Kadija, K.

SPRING MEETING (NUCLEAR PHYSICS) OF THE GERMAN PHYSICAL SOCIETY

Münster, Njemačka, 11-15.3.2002.

Sudionik: Čaplar, R.

Prilog:

Kiš, M.; Amir Ahmad, H.; Bacelar, J.C.S.; Castelijns, R.; Čaplar, R.; Ermisch, K.; Gašparić, I.; Harakeh, M.N.; Kalantar-Nayestanaki, N.; Loehner, H.; Mahjour-Shafiei, M.: Dilepton detection in the Plastic Ball detector at KVI, poster

SYMPOSIUM ON NUCLEAR CLUSTERS: FROM LIGHT EXOTIC TO SUPERHEAVY NUCLEI

Münster, Njemačka, 11-15.3.2002.

Prilog:

Mahjour-Shafiei, M.; Amir-Ahmadi, H.; Bacelar, J.C.S.; Castelijns, R.; Ermisch, K.; Gašparić,

I.; Harakeh, M.N.; Kalantar-Nayestanaki, N.; Kiš, M., Loehner, H.: High-precision measurements of proton-proton bremsstrahlung, poster

14C ARCHEOLOGY: FOURTH SYMPOSIUM

Oxford, Engleska, 9-14.4.2002.

Sudionici: Krajcar Bronić, I.

Prilog:

Krajcar Bronić, I.; Minichreiter, K.; Obelić, B.; Horvatinčić, N.: Zadubravlje-Dužine - the oldest early Neolithic (Starčevo culture) settlement in Croatia, predavanje

FOUR SEAS CONFERENCE

Thessaloniki, Grčka, 15-21.4.2002.

Sudionici: Antičić, T., Horvat, S.

COMPRESSED BARYONIC MATTER CONFERENCE

Darmstadt, Njemačka, 13-16.5.2002.

Sudionik: Čaplar, R.

THE 29TH IEEE PHOTOVOLTAIC SPECIALISTS CONFERENCE

New Orleans, SAD, 20-24.5.2002.

Prilog:

Pivac, B.; Borjanović, V.; Jakšić, M.; Pastuović, Ž.; Zulim, I.; Vlahović, B.: IBICC studies of polycrystalline silicon, poster

CONFERENCE ON ABSOLUTE DATING METHODS

Lublin, Poljska, 23-24.5.2002.

Sudionici: Barešić, J.

NEUTRINO 2002 CONFERENCE

München, Njemačka, 25-30.5.2002.

Prilog:

Pizzone, R.G.; Spitaleri, C.; Lattuada, M.; Musumarra, A.; Pellegriti, M.G.; Rolfs, C.; Miljanić, Đ.; Di Pietro, A.; Figuera, P.; Romano, D.S.; Tudisco, S.; Tumino, A.; Typel, S.; Wolter, H.H.; Castellani, V.; Degl'Innocenti, S.; Imperio, A.: The ${}^7\text{Li}(p,\alpha){}^4\text{He}$ fusion reaction studied via the Trojan Horse Method and its astrophysical implications, poster

5th INTERNATIONAL TOPICAL MEETING ON INDUSTRIAL RADIATION AND
RADIOISOTOPE MEASUREMENT APPLICATIONS, IRRMA-V

Bologna, Italija, 8-16.6.2002.

Sudionici: Blagus, S.; Krečak, Z.; Ljubičić, A.; Valković, V.

IEEE SENSORS CONFERENCE 2002

Orlando, Florida, SAD, 12-14.6.2002.

Sudionica: Horvat, S.

Prilog:

Varuzhan, D.; Horvat, S.; Hubert, K.: Studies of semitransparent optoelectronic position sensors, predavanje

EUROPEAN CONFERENCE ON ENERGY DISPERSIVE X-RAY SPECTROMETRY
(EDXRS 2002)

Berlin, Njemačka, 16-20.6.2002.

Sudionici: Obhodaš, J.; Sudac, D.

9th JOINT VACUUM CONFERENCE

Seggau, Austrija, 16-20.6.2002.

Prilog:

Borjanović, V.; Jakšić, M.; Pastuović, Ž.; Pivac, B.; Katz, E.: Ibc studies of structural defect activity in different polycrystalline silicon material, predavanje

7th INTERNATIONAL CONFERENCE ON NUCLEAR ANALYTICAL METHODS IN LIFE
SCIENCES

Antalya, Turska, 16-21.6.2002.

Sudionik: Valković, V.

MATH/CHEM/COMP 2002

Dubrovnik, Hrvatska, 24-29.6.2002.

Sudionik: Pisk, K.

7th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON NUCLEI IN THE COSMOS (NIC7)

Fuji-Yoshida, Japan, 8-12.7.2002.:

Prilog:

Pizzone, R.G.; Lattuada, M.; Musumarra, A.; Pellegriti, M.G.; Spitaleri, C.; Tumino, A.; Typel, S.; Cherubini, S.; Figuera, P.; Miljanić, Đ.; Rolfs, C.; Romano, S.; Wolter, H.H.; Castellani, V.;

Degl'Innocenti, S.; Imperio, A.: Bare astrophysical S(E)-factor for the ${}^6\text{Li}(d,\alpha){}^4\text{He}$ and ${}^7\text{Li}(p,\alpha){}^4\text{He}$ reactions at astrophysical energies, poster

12th INTERNATIONAL CONFERENCE ON THIN FILMS

Bratislava, Slovačka, 15-20.7.2002.

Sudionici: Gracin, D.

Prilozi:

Gracin, D.; Dubček, P.; Jakšić, M.: Nanostructural properties of amorphous silicon carbide by GISAX and optical spectroscopy, predavanje

Gracin, D.; Jakšić, M.; Dubček, P.; Medunić, Z.: Nano-structural properties of amorphous hydrogenated silicon ? carbon alloys by IBA technique, optical methods and GISAX, predavanje

YOUNG SCIENTISTS' WORKSHOP

Ringberg bei Muenchen, Njemačka, 24-26.7.2002.

Sudionici: Horvat, S.

SYMPOSIUM ON NUCLEAR CLUSTERS: FROM LIGHT EXOTIC TO SUPERHEAVY NUCLEI

Rauischholzhausen, Njemačka, 5-9.8.2002.

Sudionici: Milin, M.; Szilner, S.

EPS CONFERENCE

Budimpešta, Mađarska, 26-30.8.2002.

Prilog:

Musumarra, A.; Spitaleri, C.; Lattuada, M.; Miljanić, Đ.; Figuera, P.; Pellegriti, M.G.; Pizzone, R.G.; Di Pietro, A.; Rolfs, C.; Romano, S.; Tumino, A.; Typel, S.; Wolter, H.H.: Advanced application of quasi-free reaction mechanism to nuclear astrophysics, predavanje

CONFERENCE ON FEW BODY PROBLEMS IN PHYSICS

Bled, Slovenija, 8-14.9.2002.

Sudionici: Ceci, S.; Gašparić, I.

CONSULTING MEETING ON "STRENGTHENING OF NATIONAL NETWORKS FOR MONITORING ISOTOPES IN PRECIPITATION"

Rim, Italija, 11-14.9.2002.,

Sudionica: Horvatinčić, N.

4th MEDITERRANEAN BASIN CONFERENCE ON ANALYTICAL CHEMISTRY - MBCAC IV
2002

Portorož, Slovenia, 15-20.9.2002.

Sudionica: Krajcar Bronić, I.

FOPI WORKSHOP ON RELATIVISTIC HEAVY-ION COLLISIONS

Trakošćan, Hrvatska, 25–29.9.2002.

Sudionici: Basrak, Z.; Čaplar, R.; Gašparić, I.; Korolija, M.

EUROPEAN IRPA CONGRESS 2002

Firenze, Italija, 8-11.10.2002.

Sudionica: Horvatinčić, N.

LHC DAYS IN SPLIT

Split, Hrvatska, 8-12.10.2002.

Sudionici: Antičić, T.; Horvat, S.

17th INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE APPLICATION OF ACCELERATORS IN
RESEARCH AND INDUSTRY CAARI 2002

Denton, Texas, SAD, 12-16.11.2002.

Sudionica: Obhođaš, J., Surić, T.

I. WORKSHOP OF THE COMPRESSED BARYONIC MATTER COLLABORATION

Darmstadt, Njemačka, 15-16.11.2002.

Sudionici: Basrak, Z.; Čaplar, R.

FINAL WORKSHOP ON TECHNICAL COOPERATION PROJECT RER/2/004 "QUALITY
ASSURANCE/QUALITY CONTROL OF NUCLEAR ANALYTICAL TECHNIQUES"

Varšava, Poljska, 18-23.11.2002.

Sudionici: Horvatinčić, N.; Obelić, B.

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija:

Basrak, Z.: Član Steering Committee of the South East European Nuclear Physics Network
(SEENet)

Jakšić, M.; Skukan, N., Eksperti IAEA za procjenu instalacije Tandem akceleratora, Nigerija Centre for Energy Research and Development, Ile-Ife, Nigerija, 29.6–6.7.2002.

Švarc, A.; Ceci, S., Članstvo u međunarodnoj istraživačkoj grupi Baryon Resonance Analysis Group (BRAG).

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Basrak, Z.: Izospinska opservabla kao sredstvo provjere uspostave nuklearne ravnoteže (Tracing Equilibration by Isospin), u okviru međunarodne suradnje CHIMERA/ ISOSPIN, Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija

Bogdanović Radović, I.: Analiza lakih elemenata ionskim snopovima u sunčevim ćelijama, SiC i polimerskim baterijama korištenjem nuklearne mikroprobe (Ion beam analysis of light elements in solar cells, SiC and gel polymer batteries using nuclear microprobe), multilateralni program s IAEA, Beč, Austrija

Čaplar, R.: Relativistički sudari teških iona (Relativistic Heavy-Ion Collisions), Research Institute for Particle and Nuclear Physics, Budimpešta, Mađarska, putem HAZU i Mađarske Akademije

Čaplar, R.: Sudari teških iona relativističkih energija (Heavy-ion Collisions at Relativistic Energies), u okviru međunarodne FOPI suradnje, Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt, Njemačka

Horvatinčić, N.: Raspodjela tricija i stabilnih izotopa na obalnom području Hrvatske (Tritium and stable isotope distribution in the atmosphere at the coastal region of Croatia), ugovor br.11265 s IAEA, Beč, Austrija

Jakšić, M.: Istraživanje transportnih svojstava naboja u SiC tehnikama nuklearne mikroprobe (Research of charge transport properties in SiC by nuclear microbeam techniques), multilateralni projekt s Experimental Physics Department, Universita di Torino Italija i NATO-om.

Jakšić, M.: Modularni dizajn komore za analizu ionskim snopovima (Modular design of the universal ion beam analysis chamber), multilateralni ugovor s IAEA, Beč, Austrija

Jakšić, M.: Primjene nuklearne mikroprobe i sinhrotronskog zračenja na karakterizaciju keramika (Applications of nuclear microprobe and synchrotron radiation analytical techniques in the characterisation of ceramics), bilateralna hrvatsko-kineska suradnja između IRB i Institute of high energy physics, Academia Sinica, Peking, Kina

Jakšić, M.: Sporazum između IAEA i IRB o korištenju eksperimentalne linije na Tandem akceleratoru IRB-a (Agreement between IAEA and IRB concerning the use of Agency's beam line attached to the Tandem Van de Graaff accelerator of the IRB), ugovor s IAEA, Beč, Austrija

Jakšić, M; Obelić, B.: Tehnike nuklearne spektroskopije i analiza ionskim snopovima s primjenom u okolišu i industriji (Nuclear Spectroscopy Techniques and Ion Beam Analysis in Environmental and Industrial Applications), program tehničke suradnje CRO/2/002 s IAEA, Beč, Austrija.

Kadija, K.: Suradnja u konstrukciji ALICE detektora (Collaboration in the Construction of the ALICE Detector), multilateralni program s CERN-om, Ženeva, Švicarska

Krajcar Bronić, I.: Određivanje izotopnog sastava oborina u cilju ekoloških i hidroloških istraživanja (Determination of isotopic composition of oxygen in precipitation for the purpose of ecological and hydrological investigations), bilateralna suradnja između IRB i Instituta Jožef Stefan, Odsek za kemijo, Ljubljana, Slovenija

Krčmar, M.: CAST -CERN-ov teleskop za sunčeve aksione (CERN Axion Solar Telescope), multilateralni program, CERN, Ženeva, Švicarska

Ljubičić, A.: NOMAD WA96 - Magnetski detektor neutrijskih oscilacija (Neutrino Oscillation MAGnetic Detector), multilateralni program, CERN, Ženeva, Švicarska

Ljubičić, A.: OPERA – Iznalaženje oscilacija neutrina između mionske i tauonske vrste (Oscillation Project with Emulsion-tRacking Apparatus), multilateralni program, CERN, Ženeva, Švicarska

Miljanić, Đ.: Građa lakih jezgara, rezonance u nuklearnim reakcijama i njihova važnost za astrofiziku (Structure of light nuclei, resonances in nuclear reactions and their astrophysical relevance), bilateralna suradnja s Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali del Sud (LNS), Catania, Italija

Obelić, B.: Osiguranje i kontrola kakvoće kod nuklearnih analitičkih tehnika (Quality Assurance/Quality Control of Nuclear Analytical Techniques), multilateralni project RER/2/004 s IAEA, Beč, Austrija

Obelić, B.: Praćenje antropogenog utjecaja u kršu (Anthropogenic influence in karst regions), bilateralna hrvatsko-slovenska suradnja između IRB i Univerze v Ljubljani, Naravoslovniteniška fakulteta, Odelek za geologiju, Ljubljana, Slovenija

Supek, I.: Barionske rezonance (Baryonic resonances), bilateralna suradnja sa Abilene Christian University, Charlottesville, Virginia, SAD

Szilner, S.: Istraživanje nuklearne površine reakcijama transfera više nukleona (Exploring Nuclear Surface by Multinucleon Transfer Reactions), u okviru međunarodne suradnje PISOLO/PRISMA, Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali di Legnaro, Legnaro (Padova), Italija

Szilner, S.; Basrak, Z.: Stanja ekstremne deformacije atomskih jezgri (Extreme Deformation of Atomic Nuclei), (u okviru međunarodnih suradnji ICARE i BRS), Institut de Recherches Subatomiques, Strasbourg, Francuska

Valković, V.: "DIAMINE", EU projekt, ugovor s Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Padova, Italija

Valković, V.: Detekcija eksploziva pomoću atomskih i nuklearnih metoda (Explosive detection by atomic and nuclear methods), NATO Science Programme, međunarodni ugovor s INFN, Padova, Italija

Valković, V.: Postrojenje za testiranje nuklearnih metoda detekcije i identifikacije mina i UXO (Facility for testing nuclear methods for landmine and UXO detection and identification), CRO/1/003, program tehničke pomoći IAEA, Beč, Austrija

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

Giancarlo Nebbia, INFN, Legnaro (Padova), Italija, 11-12.2.2002. i 7-8.11.2002.

Giuseppe Viesti, Università di Padova, Padova, Italija, 11-12.2.2002.

Barbara Vokal, Naravoslovnotehniška fakulteta, Univerza v Ljubljani, Ljubljana, Slovenija, 2-7.5.2002., 14-16.6.2002. i 21-23.6.2002.

Sonja Lojen, Institut Jožef Stefan, Ljubljana, Slovenija, 20.5.2002.

Polona Vreča, Institut Jožef Stefan, Ljubljana, Slovenija, 20.5.2002., 8-19.6.2002. i 29.11.2002.

Jose Bacelar, Kernfysisch Versneller Instituut, Groningen, Nizozemska, 26-30.6.2002.

Mladen Kiš, Kernfysisch Versneller Instituut, Groningen, Nizozemska, 26-30.6.2002.

Alessandro Lo Guidice, University of Torino, Torino, Italija, 18-21.6.2002.

Paolo Olivero, University of Torino, Torino, Italija, 18-21.6.2002.

Samuel Bamford, IAEA Laboratories, Seibersdorf, Austrija, 8-18.7.2002.

Günther Dollinger, Technische Universität, Garching, Njemačka, 14-19.7.2002.

György J. Köteles, National Research Institute, Budapest, Mađarska, 4.9.2002.

Aurora Tumino, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 11-15.9.2002.

Salvatore Tudisco, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 11-15.9.2002.

Maria Grazia Pellegriti, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 11-19.9.2002.

Claudio Spitaleri, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 11-19.9.2002.

Stefano Romano, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 14-19.9.2002.

Rosario Gianluca Pizzone, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 15-22.9.2002.

Alessia DiPietro, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 15-22.9.2002.

Luciano Papalardo, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 19-25.9.2002.

Agatino Musumarra, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 19-26.9.2002.

Pierpaolo Figuera, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 19-26.9.2002.

Antonio Del Zoppo, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 21-26.9.2002.

Marcello Lattuada, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italija, 21-26.9.2002.

Ettore Vittone, INFN, Torino, Italija, 5-8.11.1002.

Stefano Bianco, University of Torino, Torino, Italija, 5-8.11.2002.

Roberto Casiraghi, University of Milano, Milano, Italija, 5-8.11.2002.

Bamford Samuel, IAEA Laboratories, Seibersdorf, Austrija, 11-15.11.2002.

Znanstveni skupovi u organizaciji Instituta Ruđer Bošković:

FOPI WORKSHOP ON RELATIVISTIC HEAVY-ION COLLISIONS

Trakošćan, Hrvatska, 25–29.9.2002.

<http://www.irb.hr/dmf/>

**ZAVOD ZA FIZIKU MATERIJALA
DIVISION OF MATERIALS PHYSICS**

Dr. sc. Branko Pivac, predstojnik Zavoda

Tel: ++385 1 4561 068, Fax: ++385 1 4680 114, e-mail: pivac@rudjer.irb.hr

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za poluvodiče i srodne materijale, dr. sc. Branko Pivac, voditelj laboratorija

Laboratorij za tanke filmove, dr. sc. Nikola Radić, voditelj laboratorija

Laboratorij za molekulsku fiziku, dr. sc. Krešimir Furić, voditelj laboratorija

Tajništvo: Moira Španović, tajnica

U okviru Zavoda provodila su se do 30.6.2002. godine istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

**ISTRAŽIVANJE DEFEKATA NEUREĐENE/UREĐENE MATERIJE I MOLEKULA;
INTERAKCIJE I DINAMIKA
STUDY OF DEFECTS DISORDERED/ORDERED MATTER AND MOLECULES;
INTERACTIONS AND DYNAMICS**

Direktor programa: dr. sc. Branko Pivac

Teme u sastavu programa:

Istraživanje defekata u poluvodičima i izolatorima, dr. sc. Branko Pivac, voditelj teme

Amorfni tanki filmovi, dr. sc. Nikola Radić, voditelj teme

Raspršenje svjetla, interakcije i dinamika materije, dr. sc. Krešimir Furić, voditelj teme

Poticajni projekti znanstvenih novaka i asistenata u okviru tema:

Neizotermna kinetika kristalizacije amornih metala, dr. sc. Tihomir Car, nositelj projekta

Vibracijsko-spektroskopska karakterizacija gljiva, dr. sc. Vlasta Mohaček Grošev, nositeljica projekta

Program rada:

Program istraživanja usmjeren je na:

- istraživanje temeljnih svojstava defekata, njihovih međusobnih interakcija, kao i njihovih utjecaja na vezu mikroskopskih i makroskopskih svojstava materijala u jednostavnim (Si) binarnim (GaAs, GaN, CdS) i višekomponentnim poluvodičima i komplementarnim oksidima. Određivanje karakteristika nanofaznih i staklastih materijala.
- istraživanja karakteristika amornih tankih filmova dobivenih termodinamički neravnotežnim metodama (magnetronsko rasprašivanje). Posebno će se istraživati Al-W i WC filmovi. Istraživat će se procesi u plazmi dobivenoj pri laserskoj ablaciji metala i nemetala.
- fundamentalna istraživanja u području molekulske fizike i fizike čvrstog stanja s naglaskom na vibracijsku spektroskopiju i laser - materija interakcije. Sistemi koji se izučavaju su raznorodni - od metala, poluvodiča i keramika, do molekulskih kristala i bioloških uzoraka.

Research programme:

Research programme is focussed on following subjects:

- study of fundamental characteristics of defects, their mutual interaction, as well as their impact on connection between microscopic and macroscopic properties of materials in simple (Si), binary (GaAs, GaN, CdS), and multinary semiconductors and complementary oxides. Study of nanophase and glassy material characteristics.
- study of amorphous thin films produced by non-equilibrium thermodynamical processes (magnetron sputtering). Particularly Al-W and WC films will be studied. Processes in plasma obtained during laser ablation of metallic and non-metallic materials will be studied.

- fundamental research in the field of molecular and solid state physics with special emphasis on vibrational spectroscopy. The systems under investigation vary in their origin and composition - from metals, semiconductors, and ceramics on one side to molecular crystals and biological samples on the other.

ISTRAŽIVANJE DEFEKATA U POLUVODIČIMA I IZOLATORIMA STUDY OF DEFECTS IN SEMICONDUCTORS AND INSULATORS

Voditelj teme: dr. sc. Branko Pivac

Tel: ++ 385 1 4561-068, e-mail:pivac@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Maja Buljan, dipl. inž. fiz., znanstvena novakinja
Dunja-Ida Desnica, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica
Uroš Desnica, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Pavo Dubček, doktor fiz. znanosti, viši asistent
Božidar Etlinger, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Ivana Kovačević, dipl. inž. fiz., znanstvena novakinja
Andrea Moguš-Milanković, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Mladen Pavlović, doktor fiz. znanosti, viši asistent
Branko Pivac, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Ana Šantić, dipl. inž. kem., znanstvena novakinja
Branko Šantić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Aleksandra Turković, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica
Natko Urli, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Suradnik iz druge ustanove:

Mladen Kranjčec, doktor fiz. znanosti, docent, Geotehnički fakultet, Varaždin

Program rada i rezultati na temi:

Istraživali smo doprinos precipitata kisika u Si pri IR određivanju koncentracije intersticijskog O. Pokazali smo da dosadašnja metodologija određena međunarodnim standardima ASTM i DIN unosi značajnu pogrešku i predložili smo novi način određivanja koncentracije intersticijskog kisika u Si. Istraživali smo važnost granica zrna za sliku defekata u polikristaliničnim materijalima različitim metodama. Istražujući defekte u Si uvedene zračenjem pokazali smo veliku važnost prisutnosti ugljika zbog njegove interakcije s točkastim defektima. Istraživali smo strukturne promjene u amorfnom i Kr implantiranom Si metodama GISAXS i refleksije rendgenskog zračenja.

Istraživali smo promjene morfologije izazvane ionskom implantacijom (samo-implantacija u vrlo velikom rasponu doza - 3×10^{12} do 3×10^{16} /cm²) u početno monokristalnim uzorcima germanija, Ge, i galijevog arsenida, GaAs. Mikrostrukture kristaliničnih i amorfnih poluvodiča značajno utječu na optoelektronička svojstva materijala. Ovo istraživanje prekriva nekoliko stupnjeva mikrostrukturnih modifikacija, koji su svi povezani s parametrima implantacije i naknadnih termičkih tretmana:

- a) u području malih doza materijal pokazuje svojstva karakteristična za mikro- i nano-strukture, kao što je pokazano preko "confinement" efekata u Ramanskoj spektroskopiji.
 - b) za srednje i visoke doze promjene parametara uređenosti praćenih Ramanskom i EXAFS spektroskopijom korelirani su s frakcijama pod- i nad-koordiniranih atoma, promjenama kuteva i duljina medju vezama i formiranjem karakterističnih defekata.
 - c) za najviše doze u Ge počinju efekti poroznosti zbog aglomeracija vakancija.
- Istraživanja utjecaja red-nered stanja (termički, strukturni, topološki, kompozicijski) na procese fundamentalne optičke apsorpcije, fotovodljivosti refraktometrijske i druge optičke parametre u seriji novih opto-elektroničkih materijala, $\text{Cu}_6\text{P}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5$, u cijelom rasponu koncentracija S i Se.

Proučavana su transportna svojstva, i utjecaj defekata na električne karakteristike u nitridima (GaN , $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$) na nizu uzoraka, od jednostavnih slojeva do složenih heterostruktura (od Schottky do laserskih dioda) dobivenih MOCVD tehnikom. Posebno su studirane I-V karakteristike metal-poluvodič kontakata za nekoliko metala, i to na n- i p-tipu nitrida. Pokazano je da morfologija površine i površinski sloj bitno utiču na svojstva Schottky dioda na p-tipu materijala, tj. imaju veći i važniji utjecaj na električna svojstva nego rad izlaza izabranog metala ili nivo dopiranosti poluvodiča.

Nanokristali poluvodiča CdS sintetizirani su u SiO_2 podlozi putem implantacije jedankih doza konstituenata, tj. Cd i S atoma, te dodatnom termičkom obradom. Implantirani sloj analizirali smo uz pomoć: XRD, GISAXS, UV transmitancijom i reflektancijom, te Ramanskom spektroskopijom. XRD i optičke metode dokazale su sintezu CdS nanokristala. Razrađene je nova metodologija (posebno iz spektara reflektancije) određivanja veličine CdS nanokristala. Pokazalo se je da veličina nanokristala ovisi sistematski o dozi implantiranih iona i temperaturi odgrijavanja, što otvara put inženjeringa željenih veličine nanokristala (a time i željenih širine zabranjenog pojasa, tj. boje takvih nanokristal- SiO_2 kompozita). Raspon veličina kretao se od 4 do 10 nm. Općenito, za određenu ionsku dozu manji nanokristali dobiveni su za niže temperature odgrijavanja, dok se za određenu temperaturu odgrijavanja dobivaju to manji nanokristali što je ionska doza niža.

Započet je rad na analizi GISAXS spektara, koji bi omogućio – u kombinaciji s ostalim metodama – određivanje ne samo prosječne veličine nanokristala već i raspodjela veličina, prosječne udaljenost kristalita, morfologija (oblike) sintetiziranih nanokristala, te dubinsko i lateralno profiliranje svih ovih veličina (tj. kako u smjeru okomitom na površinu tako i unutar ravnina paralelnih s površinom).

Koristeći Raman spektroskopiju i impedancijsku analizu ispitivana je struktura, električna vodljivost i dielektrična konstanta natrijskih fosfatnih stakala dopiranih s različitim koncentracijama Al_2O_3 i/ili Fe_2O_3 . Ova istraživanja pokazuju da promjene mehanizma u električnoj vodljivosti koincidiraju s promjenama u strukturi ovih stakala. Istraživana je i redox ravnoteža između Fe(II)/Fe(III) iona kod željeznih fosfatnih stakala. Pokazano je da porast električne provodnosti i dielektrične konstante ovisi o koncentraciji Fe(II) iona u staklu. Nastavili smo istraživanja na nanostrukturnim V/Ce oksidnim filmovima uz pomoć GISAXS mjerenja.

Research programme and results:

We studied contribution of oxygen precipitates in silicon to IR concentration determination of interstitial oxygen, It has been shown that current methodology based on ASTM and DIN standards fails to give a precise data on interstitial oxygen concentration when oxide precipitates are also present in the bulk. We proposed a new method for interstitial oxygen determination. The importance of grain boundaries for defect characterization in polycrystalline material has been studied by several techniques. Studying defects in silicon introduced with irradiation we have demonstrated the importance of carbon presence due to its interaction with point defects. Structural changes due to Kr implantation in Si has been studied by XRR and GISAXS methods.

Morphological changes induced by ion implantation (self-implantation in a wide dose range – 3×10^{12} do 3×10^{16} / cm^2) in monocrystalline Ge and GaAs has been studied. Microstructural properties of crystalline and amorphous semiconductors affect significantly the optoelectronic properties of material. This studies covered several stages of microstructural changes related to the parameters of implantation and subsequent thermal treatments: for small doses material exhibits properties typical for micro- and nano-structures, as shown through confinement effects in Raman spectroscopy.

for middle and high doses changes in parameters of the order followed by Raman and EXAFS spectroscopy are correlated with fractions of under- and over-coordinated atoms, changes in bond angles and lengths, and formation of typical defects.

For the highest doses in Ge effects of porosity emerges due to vacancy agglomeration. Influence of order-disorder states (thermal, structural, topological and compositional) on fundamental processes in optical absorption, photoconductivity and other optical parameters

were studied in a series of new opto-electronical materials, $\text{Cu}_6\text{P}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$, in the whole range of S and Se concentrations.

Nanocrystals of CdS were synthesized in SiO_2 substrates by ion implantation and subsequent thermal treatment. Implanted layer has been analyzed by XRD, GISAXS, UV transmittance/reflectance and Raman spectroscopy. XRD and optical methods confirmed the synthesis of CdS nanocrystals. A new methodology has been developed (using reflectance spectra) for determination of the size of CdS nanocrystals. It has been shown that the size of nanocrystals depends on the doses of implanted ions and the temperature of annealing which opens a way to engineering of size (and hence the width of the gap, i.e. color) of this nanocrystal composites. The size has been varied in the range 4 to 10 nm.

We started the complex analysis of GISAXS spectra, that in combination with other methods, would permit the determination not only the average size of the nanocrystals, but also depth and lateral profiling.

Transport properties and the influence of defects on electrical characteristics of nitrides (GaN , $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$) were studied on the series of samples from simple layers to complex heterostructures (from Schottky to laser diodes). Particularly we studied I-V characteristics of metal-semiconductor contact for several metals on p- and n-type of nitrides. It has been shown that the effect of the surface morphology and the surface layer is dominant in determining the electrical properties of diode.

Using Raman spectroscopy and impedance analysis we studied structure, electrical conductivity and dielectric constant of sodium phosphate glasses doped with different concentrations of Al_2O_3 and/or Fe_2O_3 . This studies have shown that changes in conductivity mechanism correspond to structural changes in this glasses. Redox equilibrium of Fe(II)/Fe(III) ions in iron phosphate glasses has been studied. It has been shown that increase in electrical conductivity and dielectric constant depends on concentration of Fe(II) ions in the glass.

Studies of the V/Ce oxide films are continued by GISAXS measurements.

AMORFNI TANKI FILMOVI AMORPHOUS THIN FILMS

Voditelj teme: dr. sc. Nikola Radić

Tel: ++385 1 4680-224 e-mail: radić@irb.hr

Suradnici na temi:

Željko Andreić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Tihomir Car, doktor fiz. znanosti, viši asistent

Davor Gracin, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Nikola Radić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Aleksa Pavlešin, viši tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Jovica Ivkov, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik, Institut za fiziku, Zagreb

Mirjana Metikoš-Huković, doktorica kemijskih znanosti, redovna profesorica, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Ognjen Milat, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik, Institut za fiziku, Zagreb

Mirko Stubičar, doktor fiz. znanosti, docent, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Antun Tonejc, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Istraživale su se osobine amorfnih (Al-W, a-Si_xC_{1-x}:H) i mikrokristalnih (W, W-C) filmova pripremljenih magnetronskim rasprašenjem, te procesi pri laserskoj ablaciji materijala. Na binarnom sustavu aluminij-volfram mjereno je Hall efekt, napravljena je završna analiza pojave strukturne relaksacije, fazne transformacije pri izotermalnom napuštaju, i korozivskog ponašanja. Ispitana je pojava metastabilne β-faze volframa u tankim filmovima pripremljenim pri različitim uvjetima. Struktura W-C filmova ispitana je GISAXS metodom. Nastavljeno je istraživanje tankih filmova legura amorfno hidrogeniziranog silicija i silicij karbida, formiranih magnetronskim rasprašenjem i plazmom pojačanom kemijskom depozicijom iz pare. Završeno je istraživanje sudarajućih plazmi proizvedenih laserskom ablacijom i s time povezanih pojava.

Research programme and results:

Sputter-deposited amorphous (Al-W, a-Si_xC_{1-x}:H) and microcrystalline (W, W-C) films were investigated, as well as laser ablation of various materials.

For the Al-W alloys the Hall effect was measured, and the analysis of structural relaxation phenomena, phase transformation during isothermal annealing, and corrosion behaviour were completed. The occurrence of metastable β-W phase in tungsten thin films prepared under various deposition conditions has been examined. The structure of W-C thin films was examined by the GISAXS method using synchrotron radiation.

The quantitative and structural analysis of amorphous hydrogenated silicon and silicon carbide thin films, deposited by magnetron sputtering and hot wire plasma enhanced chemical deposition method (HW PECVD) was performed. The research on colliding laser produced plasmas and related topics was completed.

RASPRŠENJE SVJETLA, INTERAKCIJE I DINAMIKA MATERIJE LIGHT SCATTERING, INTERACTIONS AND DYNAMICS OF MATTER

Voditelj teme: dr. sc. Krešimir Furić

Tel: ++385 1 4561-020, Fax/Tel: ++385 1 4680112, e-mail: kfuric@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Ivan Budimir, magistar fiz. znanosti, stručni suradnik
Krešimir Furić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Andreja Gajović, magistrica fiz. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Mile Ivanda, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Davor Kirin, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Stjepan Lugomer, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Vlasta Mohaček Grošev, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica
Dubravko Risović, doktor fiz. znanosti, viši asistent

Program rada i rezultati na temi:

U Laboratoriju za molekulska fiziku istražuju se vrlo raznorodni sistemi počevši od čistih metala u laser-materijal eksperimentima, preko amorfnih poluvodiča, tankih slojeva, metalnih oksida, keramika, stakala, sve do molekulskih kristala i bioloških uzoraka. Najčešće korištene eksperimentalne metode su laser-Raman i infracrvena spektroskopija, te svjetlosna i elektronska mikroskopija.

Proučavane su laserski-inducirane modifikacije površinskih svojstava različitih materijala, te je utvrđeno da se one odvijaju uz samoorganizaciju površine. Ove spoznaje imaju istaknuta tehnološka i fizikalna značenja. Pokazano je da se površinska svojstva kao mikrotvrdoća, korozivna i erozivna otpornost, poboljšavaju i za nekoliko redova veličine. Fundamentalne fizikalne spoznaje ukazuju da se modifikacija površinskih svojstava odvija pobudom Kelvin-Helmholtz nestabilnosti što dovodi do formiranja vrtložnih mikrofilamenata, solitona na filamentima, te "upletenih", "zamršenih" i "učvorenih" struktura. Ovaj niz laser-materijal eksperimenata prepoznat je kao originalna metoda (uvedena na IRB-u) za generiranje

laboratorijskog modela sličnih struktura prisutnih u fizikalnim sistemima od ekstremno male do ekstremno velike skale, a koje su inače teško pristupačne za direktno proučavanje. Molekula ortoterfenila, jedna od najznačajnijih molekula koje tvore staklastu fazu, izučavana je Ramanovom spektroskopijom i modelnim računima.

Spektroskopsko izučavanje polisaharida nastavlja se na spoznaje drugih autora koji su pokazali da glukani mogu modificirati imunološka svojstva visoko-složenih organizama, sve do ljudskog. Primjenom Fourier - transform infracrvene spektroskopije identificirani su tipovi glukana u sporama više od sedamdeset vrsti Asco- i Basidio-myceta.

Metoda statičkog raspršenja svjetlosti primjenjuje se u istraživanju optičkih svojstava mora radi izučavanja utjecaja veličinske raspodjele partikulata. U suradnji s Laboratorijem za fizičko-kemijske separacije ZIMO nastavljeno je istraživanje fraktalnih svojstava adsorbiranih slojeva na živinoj elektrodi metodom skaliranja. Analizirana su dinamička svojstva procesa adsorpcije organskih tvari, kao i utjecaj fraktalnih svojstava adsorbiranog sloja na oksido-redukcijske procese.

Istraživana su strukturalna i optička svojstva različitih nanočestičnih materijala. Predložen je novi postupak određivanja distribucije čestica, a rezultati su uspoređeni s distribucijama čestica dobivenim visoko-rezolucijskom elektronskom mikroskopijom. Analizirano je uređenje srednjeg dosega u kvarcnom staklu. Određenja je spektralna ovisnost koeficijenta vezanja svijetlosti s vibracijama u spektralnom intervalu do 600 cm^{-1} .

Ramanovom spektroskopijom izučavaju se strukturne i dimenzijske promjene TiO_2 , ZrO_2 i njihovih smjesa izazvane intenzivnim kugličnim mljevenjem. Niskofrekventnom Ramanovom spektroskopijom praćeno je smanjenje čestica sve do nanometarskih veličina, a konačni rezultat je dodatno potvrđen transmisijskom elektronskom mikroskopijom. Izučava se nanokristalinični RuO_2 pripremljen novom metodom razvijenom u Zavodu za kemiju materijala.

Research program and results:

A number of different materials are currently under study in Molecular physics laboratory, ranging from pure metals in laser-matter interactions, amorphous semiconductors, thin films, metal oxides, ceramics, glasses, molecular crystals, to the samples of different biological origin. The main experimental methods used in the group are laser Raman and infrared spectroscopy together with light and electron microscopy.

Laser-induced modifications of surface properties of different materials were studied and it was found that they occur through the surface selforganization, with technological and fundamental meaning. It was shown that the surface micro-hardness, corrosion and erosion resistance can be increased for several orders of magnitude. In the physical aspect, these studies demonstrated that modification of surface properties occurs through the excitation of Kelvin-Helmholtz instability, formation of vortex microfilaments, solitons on filaments, braided and tangled structures as well as of knotted structures. These experiments have been recognized as the original method (introduced at the IRB), for generation of the "laboratory model" of similar structures present in other physical systems, ranging from extremely small scale, to extremely large scale, where such structures are out of reach for a direct study. Orthoterphenyl molecule, one of the most important glassformers, is studied by Raman spectroscopy and by theoretical model calculations.

The spectroscopic study of polysaccharides was continued on the basis of results of the other authors, which have shown that glucanes can modify the immunological properties of complex organisms up to the human one. Application of the Fourier-transform IR spectroscopy has shown the existence of various glucanes in spores of more than 70 species Asco- and Basidio mycetes.

Light scattering methods is applied for the study of the optical properties of seawater and for the influence of particle size distribution on backscattering ratio. In the cooperation with the Laboratory for physical and chemical separations (ZIMO) the study of fractal properties of adsorbed layers on mercury electrode has been continued by the electrode scaling method. The fractal analysis also proved to be well suited for characterization and identification of mechanisms responsible for formation of adsorbed layer.

Structural and optical properties of different nanocrystalline materials were studied. A new method for determination of particle size distribution was proposed. The results were compared with size distributions determined directly by HRTEM. The validity of this approach has been illustrated on the larger set of different samples. The medium range order has been analysed in quartz. The light-to-vibrations-coupling coefficient has been determined in the spectral interval till 600 cm^{-1} .

Raman spectroscopy was applied to study structural and dimensional changes during high-energy ball milling of TiO_2 , ZrO_2 and their mixtures. The diminution of particles to the nanometric size was monitored by low-frequency Raman spectroscopy. The nanometric sizes were confirmed using transmission electron microscopy (TEM). The samples of nanocrystalline RuO_2 , prepared by a new method developed in the Division of material chemistry, were characterized by Raman spectroscopy.

Od 30.6.2002. godine u okviru Zavoda za fiziku materijala provode se istraživanja na sljedećim znanstveno-istraživačkim projektima:

**TANKOSLOJNE MULTIKOMPONENTNE LEGURE AMORFNOG SILICIJA
MULTYPHASE AMORPHOUS SILICON ALLOYS AS A THIN FILMS**

Voditelj projekta: dr. sc. Davor Gracin

tel: ++385 1 4560 970; e-mail: gracin@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Uroš Desnica, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Davor Gracin, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Milko Jakšić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik (konzultant)

Tehnički suradnik:

Aleksa Pavlešin, viši tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Ivan Begonja, dipl.inž. fiz. "Solarne ćelije", Split (konzultant)

Milorad Milun, dr. fizičkih znanosti, znanstveni savjetnik, Institut za fiziku, Zagreb (konzultant)

Mirko Stubičar, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik, Prirodoslovno-matematički fakultet - Fizika, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Na tankoslojnim legurama amornog silicija će se istraživati mogućnost formiranja višefaznog materijala sastavljenog iz kombinacije amorfne i nano odnosno mikrokristalinične faze za koju se očekuje da zadrži veliku apsorpciju elektromagnetskog zračenja u vidljivom području, karakterističnu za amorfne poluvodiče a da istovremeno posjeduje transportna svojstva što bliža kristaliničnom materijalu. Također, očekuje se da ovakva struktura pokaže veću stabilnost od amorfne a posebno da uobičajena degradacija izazvana svjetlom bude minimalna. Karakteristični uzorci za ispitivanje bit će formirani rasprašenjem i reaktivnom depozicijom iz plinske plazme, uz variranje uvjeta rasta, što će omogućiti uspostavljanje čvršće korelacije između uvjeta rasta tankih filmova ovim metodama i svojstava dobivenog materijala.

Predložena istraživanja, osim produblivanja općih znanja o povezanosti strukturnog uređenja i optičkih svojstava materijala, kao i veze uvjeta formiranja filmova i njihove strukture, imaju direktnu primjenu u optoelektroničkim napravama. Neposredni korisnik će biti tvornica fotonaponskih panela Solarne ćelije iz Splita koja dijelom sufinancira ovaj projekt. Formiran je veći broj uzoraka tankog filma amornog hidrogeniziranog silicij karbida u širokom rasponu sastava i uz različite uvjete rasta rasprašenjem. Uzorci su smjesa

komponenti različitog uređenja, od amorfno do mikrokristaliničnog. Osim toga, pojedine komponente imaju različiti kemijski sastav. Uzorcima su mjerena svojstva i određivana struktura korištenjem standardne vibracione spektroskopije (Ramanova i infra-crvena spektroskopija), analize ionskim snopom (RBS, ERDA), spektroskopije u vidljivom i ultraljubičastom dijelu spektra. Ovako dobiveni rezultati su korelirani sa strukturnim osobinama na nano-skali procijenjenim na osnovi mjerenja difrakcije roentgenskih zraka pod malim kute (GISAXS). Izbor, odnosno izgradnja modela koji dobro opisuje povezanost strukture i svojstava u ovako složenom mediju je u toku.

Research programme and results:

The amorphous silicon alloys, in the form of thin films, consisting of several structural phases from amorphous to nano-crystalline, are expected to have optical properties close to amorphous phase. In the same time, the transport properties and stability should be better than in pure amorphous phase. This assumption will be tested by formation of structurally and compositionally various specimens. The characteristic samples will be deposited by magnetron sputtering and plasma enhanced chemical vapour deposition, under various deposition condition, which will provide better understanding of the processes of growth in correlation with properties of deposited thin films.

The results of above proposed research, besides the improvement in understanding the correlation between structural and optical properties of amorphous and nanocrystalline materials from one side and the correlation between structural properties and deposition condition from the other side, can be used in opto-electronic devices. The first final users will be partial sponsor of the project, photovoltaic producer "Solar cells" from Split.

A representative set of amorphous hydrogenated silicon carbide thin films was deposited by magnetron sputtering under variety of composition and growing conditions. The deposited films are mixture of amorphous, nano-crystalline and microcrystalline phases with variations in composition. Their optical and vibrational properties were measured in standard way by using Raman, IR, UV-visible spectroscopy and correlated with results obtained analysing small angle diffraction of x-rays (GISAX – spectroscopy). The proper model for this kind of composite medium, that describe the correlation between properties and nano-scale ordering is going to be constructed and/or tested.

**DINAMIKA HIDRATACIJE ŠEĆERA
SUGAR HYDRATION DYNAMICS**

Voditeljica projekta: dr. sc. Vlasta Mohaček Grošev

Tel: ++385 1 4561-020 e-mail: mohacek@rudjer.irb.hr

Suradnica na projektu:

Vlasta Mohaček Grošev, doktorica fiz. znanosti, znanstvena suradnica

Program rada i rezultati na projektu:

Ramanovom i infracrvenom spektroskopijom može se uspješno pratiti hidratacija šećera. Radi potpunijeg razumijevanja dinamike nastajućih vodikovih veza potrebno je provesti vibracijsku analizu molekula šećera, počevši od jednostavnijih monosaharida kao što su gliceraldehid, glikolaldehid, dihidroxiaceton. Početni rad obuhvaća asignaciju vrpce kristalnih prašaka, dok bi se kasnije pristupilo studiji vodenih otopina. Navedenim spektroskopskim metodama može se ukazati na fazne prijelaze u pojedinom sistemu.

Research programme and results:

Raman and infrared spectroscopies can be used to monitor sugar hydration dynamics. In order to better understand hydrogen bonding in these systems, the vibrational analysis of sugars will be undertaken. Several small sugars are chosen for that purpose: glycolaldehyde, glyceraldehyde and hydroxyacetone. Preliminary work deals with crystal powders, while the

solutions would be studied later on. Temperature dependence of vibrational bands can indicate the occurrence of phase transitions in these systems.

UTJECAJ DEFEKATA I NANOSTRUKTURA NA SVOJSTVA POLUVODIČA IMPACT OF DEFECTS AND NANOSTRUCTURES ON SEMICONDUCTOR PROPERTIES

Voditelj projekta: dr. sc. Branko Pivac

Tel: ++ 385 1 4561-068, e-mail:pivac@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Maja Buljan, dipl. inž. fiz., mlađa asistentica

Dunja Ida Desnica, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica

Uroš Desnica, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Pavo Dubček, doktor fiz. znanosti, viši asistent

Božidar Etlinger, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Ivana Kovačević, dipl. inž. fiz., mlađa asistentica

Mladen Pavlović, doktor fiz. znanosti, viši asistent

Suradnici iz drugih ustanova:

Sigrid Bernstorff, doktorica fiz. znanosti, Sinchrotrone Elettra, Trst, Italija, (konzultantica)

Vesna Borjanović, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica, Fakultet elektrotehnike i računarstva, Zagreb (konzultantica).

Federico Corni, doktor fiz. znanosti, docent, Sveučilište u Modeni, Modena, Italija, (konzultant)

Mladen Kranjčec, doktor fiz. znanosti, docent, Geotehnički fakultet, Varaždin (konzultant)

C.W. White, doktor fiz. znanosti, Oakridge National Laboratory, USA (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Istraživanje defekata i njihove uloge u materijalima, razvilo se tijekom posljednjih par decenija u posebnu disciplinu tzv. inženjering (prepoznavanje i modificiranje) defekata, gdje se poznavanje fundamentalnih svojstava defekata iskorištava za kontrolirano mijenjanje svojstava poluvodiča, pa i dobivanje poluvodiča s potpuno novim karakteristikama. Isto tako, smanjivanje dimenzija kristalita (u nanometarskom području) zbog dominantnih utjecaja kvantnih efekata bitno utječe na njihova optička svojstva. Cilj i svrha predloženih istraživanja je s jedne strane potpuno upoznavanje fundamentalnih svojstava defekata u poluvodičima, kako bi se potaknula njihova korisna svojstva i potisnula ona nepoželjna, a s druge strane proširivanje saznanja važnih pri sintezi (posebno upotrebom ionske implantacije) nanoskopskih kristalita, materijala s potpuno novim svojstvima. U tu svrhu istraživat će se morfologija i dinamika točkastih i složenih defekata u bazičnim poluvodičima (Si, Ge), te na binarnim (GaAs, InP, GaN i sl.). Predloženo istraživanje želi pokazati kako prisutnost točkastih i kompleksnih defekata, te neuređenih struktura utječe na mikroskopska i makroskopska svojstva istraživanih materijala. Od rezultata predloženog istraživanja očekuje se bolje razumijevanje interakcije lakih i nedopirajućih primjesa u Si, te određivanje elektro-optičkih svojstva defekata s dubokim nivoima u visokootpornom InP i GaN. Ujedno se želi pokazati kako izrazito netermodinamički procesi utječu na morfologiju i dinamiku defekata. Jedan od ciljeva je dobiti na kontrolirani i reproducibilan način poluvodičke nanostrukture željenih dimenzija putem ionske implantacije, te utvrditi kako im se mijenjaju osnovna strukturalna i optička svojstva s promjenom veličine nanokristala. Kao model sistem, detaljno će se istražiti nanokristali CdS-a dobiveni implantacijom konstituenata u različite matrice, te korelirati njihova svojstva i dimenzije s parametrima sinteze. U istraživanju će se koristiti širok spektar komplementarnih metoda za karakterizaciju ovisno o specifičnosti problema.

Research programme and results:

Study of defects and their role in materials has been developed, in last couple of decades, in special discipline, so called defect engineering (recognition and/or modification of defects).

The knowledge about the fundamental properties of defects is used for controlled modification of semiconductor properties and/or production of semiconductors with completely new characteristics. Furthermore, size reduction of crystallite (in the nanometer range), due to the dominant influence of quantum effects, affects significantly its optical properties. The goal of the proposed research is on the one side, completing the knowledge of fundamental properties of semiconductors to stimulate its favorable properties and to suppress its undesired ones, and on the other side widening the knowledge relevant for synthesis (particularly by ion implantation) of nanoscopic crystallites, material with completely different properties. With mentioned goal morphology and dynamics of point and extended defects will be studied in elementary semiconductors (Si, Ge), as well as in binary (GaAs, InP, GaN etc.). Proposed research aims to demonstrate link between the presence of point and complex defects and disordered structures to microscopic and macroscopic properties of studied materials. From the results of the proposed study it is expected better understanding of the interaction of light and non-doping impurities in Si, as well as determination of electro-optical properties of defects with deep levels in semiinsulating InP and GaN. It is also intention to demonstrate how nonthermodynamical processes influence the morphology and dynamics of defects. One of targets is to obtain in controlled and reproducible way semiconducting nanostructures of desired dimensions by ions implantation. We shall also study the changes in optical and structural properties with the dimension of nanocrystals. As a model system we shall study nanocrystals of CdS obtained by implantation of constituent elements into various substrates, and correlate their properties and dimension with parameters of synthesis. A wide spectrum of different complementary techniques will be used for the analysis.

MAGNETRONSKA DEPOZICIJA TANKIH FILMOVA MAGNETRON DEPOSITION OF THIN FILMS

Voditelj projekta: dr.sc. Nikola Radić

Tel.: ++385 1 46 80 224

e-mail: radic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Željko Andreić, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik (do 1.12.2002.)

Tihomir Car, doktor fiz. znanosti, viši asistent

Milko Jakšić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik (konzultant)

Branko Pivac, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Nikola Radić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnici:

Aleksa Pavlešin, samostalni tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Jovica Ivkov, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik, Institut za fiziku, Zagreb (konzultant)

Mirjana Metikoš-Huković, doktor kemijskih znanosti, redovni profesor, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultantica)

Ognjen Milat, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik, Institut za fiziku, Zagreb (konzultant)

Mirko Stubičar, doktor fiz. znanosti, docent, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Anđelka Tonejc, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultantica)

Antun Tonejc, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Analizirana je povezanost faznog sastava, strukture i naprezanja sa uvjetima pripravljanja (p – tlak argona, T – temperatura podloge) tankih volframskih filmova. Iako udio β -W općenito opada s porastom tlačnog naprezanja, utvrđeno je da mikro- i makronaprezanje (koja su međusobno dobro korelirana) ne korespondira potpuno sa pojavom β -W faze u (p, T) dijagramu. Udio β -W faze povećava kroz porast veličine β -W kristalnih zrna i smanjenje α -W zrna. Pri povišenom tlaku argona dobivena je nova, tzv. amorfična faza volframa. Ispitivana je termička stabilnost različitih faza volframa: β -W faza je termički stabilna do iznad 500°C , i potpuno se transformira u α -W oko 700°C , a amorfični volfram dovoljno je termički stabilan da bude i tehnološki zanimljiv. Preliminarna ispitivanja pokazala su da se tri faze volframa mogu razlikovati SAXS i GISAXS metodama, te su pripremljeni uzorci sa različitim W-fazama za određivanje raspodjele po dubini u slojevitim strukturama.

U cilj ispitivanja hipoteze o o porastu udjela nevezanog ugljika u volfram karbid filmovima kroz porast gustoće grafitnih nakupina slične veličine ($\sim 1 \mu\text{m}$) izvršena su sustavna mjerenja raspršenja sinkrotronskog zračenja. Uočena je singularna pojava kontinuiranog difrakcijskog prstena koja indicira strukturu sa podjednakom veličinom C-nakupina i WC_{1-x} -zrna, koja ne postoji pri drugim uvjetima pripravljanja. Modeliranje strukture filma i usporedba sa SAXS i GISAXS mjerenjima je u tijeku.

Korozija Al-W amorfni filmova ispitana je u modelnim tjelesnim otopinama. Utvrđeno je da je materijal vrlo stabilan u umjetnoj slini te prikladan za dentalnu uporabu.

Rezultati eksperimenata sa PVC ablativnim kapilarnim izbojem prikupljeni prethodnih godina u Bochumu su obrađeni i analizirani, a najvažniji preliminarni rezultati su objavljeni.

Research programme and results:

A correlation between phase composition, structure and stress in thin tungsten films, and magnetron deposition conditions (p – argon pressure, T – substrate temperature) is analysed. Although the β -W fraction generally decreases with the increase of compressive stress, no complete correspondence is established between the micro- and macrostresses and the appearance of β -W phase in (p, T) diagram. Increase of β -W phase fraction is effected by growth of β -W grains and shrinking of α -W grains. At higher working gas pressure, a new amorphous-like tungsten phase is obtained. Thermal stability of metastable tungsten phases is remarkable: β -W transforms completely only above 700°C , while amorphous-like tungsten is stable enough to be technologically interesting. Various tungsten phases are discernable by SAXS and GISAXS methods, and a series of tungsten samples is prepared for further examination of depth distribution of different phases in multilayered films. A systematic investigation of tungsten-carbon films by SAXS and GISAXS methods is performed in order to check the assumption of density increase of roughly uniformly sized ($\sim 1 \mu\text{m}$) graphitic clusters as a model for carbon fraction enhancement in the films. The appearance of continuous diffraction ring in a particular sample indicates a (singular) situation of equal size of C-clusters and WC_{1-x} grains. A more detailed interpretation of the measurements is in progress.

Corrosion of the Al-W amorphous films in artificial body liquids is investigated. It is found that the examined material is rather stable in artificial saliva, and is suitable for dental applications.

The experimental data gathered in experiments with PVC ablative capillary discharge device in Bochum in previous years are being reduced and analysed. The most important preliminary results were published.

FIZIKA I PRIMJENA NANOSTRUKTURA PHYSICS AND APPLICATION OF NANOSTRUCTURES

Voditelj projekta: dr. sc. Krešimir Furić

Tel/Fax: ++385 1 46 80 112

e-mail: kfuric@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Ivan Budimir, magistar fiz. znanosti, stručni suradnik
Krešimir Furić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Andreja Gajović, magistrica fiz. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Mile Ivanda, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik
Svetozar Musić, doktor kem. Znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Suradnici iz drugih ustanova:

Vladimir Bermanec, doktor geol. znanosti, redovni profesor, Zavod za mineralogiju i petrografiju, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu (konzultant)
Petar Biljanović, doktor elektroteh. znanosti, redovni profesor, Fakultet elektronike i računarstva, Sveučilišta u Zagrebu (konzultant)
Ozren Gamulin, magistar fiz. znanosti, stručni suradnik, Medicinski fakultet Sveučilišta u Zagrebu (konzultant)
Mirko Ljevar, dipl. inž. stroj., Zrakoplovno-tehnički zavod, Velika Gorica (konzultant)
Zvonko Orehovec, magistar kem. znanosti, MORH Zagreb (konzultant)
Mladen Tomić, magistar stroj. znanosti, Marin Getaldić d.o.o. Zagreb (konzultant)
Josip Turković, dipl. inž. fizike, CEI elektronika, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Ovim projektom proučavaju se struktura, optoelektronska svojstva kao i mogućnost optičkog pojačanja svjetlosti u poluvodičkim (Si, CdS_xSe_{1-x}) materijalima, oksidnim nanočesticama (TiO₂, SnO₂, ZnO) veličine između 1 i 30 nm, te tankim poluvodičkim filmovima. Uzorci se pripremaju LPCVD metodom, sol-gel tehnikom i ionskom implantacijom, a istražuju se različitim spektroskopskim i mikroskopskim metodama. Razvijaju se, također, nove metode za karakterizaciju čestica na nanoskali. Međutim, glavni cilj bilo bi dobivanje materijala s povoljnim optičkim/električkim karakteristikama koji vode razvoju svjetlosnih pojačala, fotonaponskih modula i termičkih elemenata.

Neki oksidni nanočestični materijali poput ZrO₂, TiO₂ i njihove smjese pripremaju se drugom tehnikom tj. planetarnim mlinom, a potom se izučavaju procesi sinteriranja kao i sinteza novih materijala na različitim temperaturama. Temeljne spoznaje se ciljano proširuju i izučavanjem složenih procesa sinteze homo- i hetero-nanočestičnih sustava u nove materijale. Neke izabrane strukturne i kemijske promjene prate se spektroskopski, "in situ", na visokim temperaturama.

Dijelom vezano s ovim, na nanočestičnoj skali se također izučavaju male aglomeracije molekule vode i drugih konstituenata atmosfere. Tehnika matrične izolacije na niskim temperaturama je pri tome posebno korisna, jer omogućava spektroskopski uvid u skoro slobodni nanočestični objekt, koji je unutar sebe vezan vodikovom vezom. Ovime pokazujemo da molekula vode i vodikova veza značajno utiču na svojstva polaznih supstanci i gotovih materijala.

Rezultati dosadašnjeg rada na projektu su objavljeni u jednom poglavlju u knjizi, šest znanstvenih radova u CC časopisima, tri rada prihvaćena za objavljivanje u CC časopisima, pet radova u zbornicima skupova s međunarodnom recenzijom i tri sažetka u zbornicima skupova. Održana su dva pozvana predavanja na skupovima, te tri seminara u drugim ustanovama. Dio rezultata se koristi za doktorsku dizertaciju koja je u završnoj fazi izrade.

Research program and results:

The structural and optoelectronic properties as well as the possibility of optical gain of light are investigated in semiconductor (like Si, CdS_xSe_{1-x}) materials, oxide (TiO₂, SnO₂, ZnO) nanoparticles between 1 - 30 nm, and in the thin semiconductor films. The samples are prepared by LPCVD method, by sol-gel technique, by ion implantation and studied using various spectroscopic and microscopic methods. Also, some new methods for nanoscale particle characterization are developed. However, a final goal would be the obtaining of new materials with favourable optical/electrical characteristics, which are leading to new light amplifiers, photovoltaic cells and thermal elements.

For some of the nanosized oxide materials, like ZrO_2 , TiO_2 and their mixtures, ball milling is used as a preparation method, and the sintering processes as well as the synthesis of new materials are studied at different temperatures. Homo- and hetero- nanoparticle systems and their complex synthesis are also included in the research. Some selected structural and chemical changes are monitored "in situ" using spectroscopy at high temperatures.

Small agglomerations of water molecules and other atmospheric constituents are also investigated on the nanoparticle scale. Matrix isolation technique at low temperatures is particularly useful since it gives a spectroscopic view inside of a hydrogen-bonded nanoparticle object. Hereby we demonstrate that the presence of water molecule as well as hydrogen bonding influence very significantly the properties of starting and synthesized materials.

Results are published in one book chapter, six scientific papers published in CC journals, three papers accepted for publication in CC journals, five papers published in proceedings of meetings with international referring and three abstracts in book of abstracts of meetings. Two invited speaks were presented at international meeting and three seminars in institutions other than RBI. The part of results is used for dissertation, which is in finale phase.

ISTRAŽIVANJA NANOFAZNIH FILMOVA I NANOKOMPOZITNIH ČVRSTIH ELEKTROLITA

NANOPHASE FILMS AND NANOCOMPOSITE SOLID ELECTROLYTES RESEARCH

Voditeljica projekta: dr. sc. Aleksandra Turković

Tel.: 4561-086, e-mail: turkovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Pavo Dubček, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Aleksandra Turković, doktorica fiz. znanosti, viša znanstvena suradnica

Tehnički suradnik:

Vladimir Vraneša, tehnički suradnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Zorica Crnjak Orel, dr. kem. znanosti, znanstvena savjetnica, Nacionalni kemijski institut, Ljubljana, Slovenija (konzultantica)

Magdy Lučić-Lavčević, dr. fiz. znanosti, viša znanstvena asistentica, Kemijsko-tehnološki fakultet u Splitu (suradnica/ konzultantica)

Dario Posedel, dipl. inž. fiz. mlađi asistent, Ekoteh dozimetrija d.o.o. za zaštitu od zračenja, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Nanostrukturalna znanost i tehnologija je široko interdisciplinarno područje istraživanja i razvojnih aktivnosti, koje eksplozivno raste širom svijeta u zadnjih nekoliko godina. Ono ima potencijal za revolucionarizaciju načina na koji se stvaraju materijali, proizvodi, područja i prirode funkcionalnosti, koje se moraju dostići. Suština ovog područja su nove izvedbe i mogućnosti nanostrukturiranjem. Sintezom i kontrolom materijala u nanometarskim dimenzijama želimo dostići nova svojstva materijala i karakteristike uređaja.

U okviru toga šireg područja vršit ćemo eksperimentalna i teorijska istraživanja u fizici i kemiji čvrstog stanja sa slijedećim znanstvenim istraživanjima:

-priprema i karakterizacija nanofaznih oksidnih slojeva (nano-slojeva)

-priprema i karakterizacija nanokompozitnih čvrstih elektrolita

- studij morfologije i strukturnih faznih prijelaza u nanofaznim poroznim slojevima i nanokompozitnim čvrstim elektrolitima pomoću spektroskopskih (Rentgen, elektronska difrakcija, raspršenja sinkrotronskog zračenja pri malim kutevima priklona i raspršenja, IR i

Ramanova spektroskopija, UV-VIS spektroskopija) mikroskopskih (TEM, HREM) i električnih metoda (impedancijsko/admitancijska spektroskopija)

- primjena nano-slojeva u novim optičkim nanosima te foto-osjetljivim bojom senzitiviranim solarnim ćelijama nove generacije. Odgovarajuće kombinacije slojeva dati će višeslojne nanose kod kojih će biti kombinirano raspršenje i apsorpcija na nano-česticama u izabranoj matrici. Istovremeno kod pripreme nano-slojeva morat ćemo rješavati probleme prijanjanja slojeva uz podlogu kao i prijanjanja među slojevima.

- primjena nano-slojeva i nanokompozitnih čvrstih elektrolita u galvanskim ćelijama druge generacije.

Konstruirali smo novu galvansku ćeliju $Zn/(PEO)_8ZnCl_2/[V_2O_5-CeO_2 \text{ (at 38\% at.\% of V)}]$;

$SnO_2:F$ sa višestrukim ciklusima punjenja i pražnjenja i naponom od 1.78 V.

Radimo na poboljšanju električnih svojstava polimernog elektrolita uvođenjem nanočestica TiO_2 i ozračavanjem γ -zrakama.

Research program and results:

Nanostructure science and technology is a broad and interdisciplinary area of research and development activity that has been growing explosively world-wide in the past few years. It has potential of revolutionising the ways in which materials and products are created and the range and nature of functionalities that can be accessed. The essential theme of this field is novel performance through nanostructuring. The synthesis and control of materials in nanometer dimensions can access new material properties and device characteristics.

In the frame of Priority thematic areas of research in FP6 and particularly area 1.1.3

Nanotechnologies and nanosciences, knowledge-based multifunctional materials and new production processes and devices, the project supposes both intensive work in experimental and theoretical investigations in solid state physics and chemistry with the following scientific subjects:

- preparation and characterisation of nanophased oxide films (nano-films)
- preparation and characterisation of nanocomposite solid electrolytes
- study of morphology and structural phase transitions in nanophased porous films and nanocomposite solid electrolytes with spectroscopic (X-ray diffraction, Electron diffraction, grazing-incidence small-angle X-ray scattering), microscopical (TEM, HREM) and electrical methods (impedance/admittance spectroscopy)
- application of nano-films in the new optical coatings and photosensitive electrodes in dye-sensitized solar cells of new generation. Adequate combinations of films will give multilayered coatings that will induce combined scattering and absorption on nano-particles in chosen matrix. Simultaneously at preparation of nano-films we shall solve problems of adhesion of films to the substrate and adhesion between the layers.
- application of nano-films and nanocomposite solid electrolytes in galvanic cells and dye-sensitized solar cells of the second generation.

We have constructed new galvanic cell $Zn/(PEO)_8ZnCl_2/[V_2O_5-CeO_2 \text{ (at 38\% at.\% of V)}]$;

$SnO_2:F$ with multiple charge-discharge cycles and voltage of 1.78 V.

We are working upon improvement of electrical properties of polymer electrolyte by introducing nano-particles of TiO_2 and irradiation with γ -rays.

STRUKTURA I ELEKTRIČNA RELAKSACIJA U STAKLIMA I STAKLO-KERAMICI STRUCTURE AND ELECTRICAL RELAXATION IN GLASSES AND GLASS-CERAMICS

Voditeljica projekta: dr. sc. Andrea Moguš-Milanković

Tel: ++385 1 4561 149 e-mail : andrea@faust.irb.hr

Suradnici na projektu:

Andrea Moguš-Milanković, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Ana Šantić, dipl. inž. kem., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Program rada na temi i rezultati:

Ovim se projektom želi istražiti kako dodatak i priroda različitih prelaznih metala utječu na strukturu i promjene električnog mehanizma kod fosfatnih i teluridnih stakala. Istraživan je odnos između sastava, strukture i električnih svojstava u $\text{MoO}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$ i $\text{SrO-Fe}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$ staklima. Strukturne promjene istraživane su Ramanskom spektroskopijom. Pokazano je da se MoO_3 ugrađuje u fosfatnu mrežu a struktura i svojstva ovise o O/P odnosu. Električna su svojstva istraživana impedancijskom spektroskopijom u frekvencijskom području od 0.01 Hz do 3 MHz na različitim temperaturama od 303 do 473 K. Istraživanja pokazuju da električna provodnost i dielektrična permitivnost ovise o količini Fe_2O_3 i odnosu Fe(II)/Fetot određenom Mossbauerovom spektroskopijom, odnosno pokretljivosti malih polarona, a neovisa su o količini MoO_3 u ovim staklima. Porast dielektrične permitivnosti, $\varepsilon'(\omega)$, rezultat je povećanja deformacija odnosno broja defekata u strukturi stakla. Struktura, električna provodnost i dielektrična permitivnost kod $\text{SrO-Fe}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$ stakala ne ovise o količini SrO. Rezultati istraživanja strukturnih promjena kod $\text{Na}_2\text{O-TeO}_2$ stakala i njihovih kristaliziranih faza pokazuju da se lokalna struktura stakla razlikuje od strukture kristaliziranih uzoraka.

Research programme and results:

This study is undertaken to investigate how the addition and origin of various transition metal oxides have an effect on the structure and changes in electrical mechanisms within phosphate and tellurite glasses. The relationship between the composition, structure and electrical properties of $\text{MoO}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$ i $\text{SrO-Fe}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$ glasses has been investigated. The structural changes in these glasses have been studied by Raman spectroscopy. The Raman spectra show that MoO_3 is incorporated into the phosphate network. The structure/properties are strongly influenced by the overall O/P ratio.

The electrical and dielectric properties for these glasses were measured by impedance spectroscopy in the frequency range from 0.01 Hz to 3 MHz and over the temperature range from 303 to 473 K. The Fe_2O_3 content and Fe(II)/Fetot ratio in these glasses have significant effects on the electrical conductivity and dielectric permittivity. With decreasing Fe_2O_3 content in $\text{MoO}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$ glasses with O/P at 3.5 the dc conductivity, $\sigma_{dc}(\omega)$ decreases for two orders of magnitude, which indicates that the conductivity for these glasses depends on Fe_2O_3 and is independent of the MoO_3 content. The increase in the dielectric permittivity, $\varepsilon'(\omega)$ is attributed to the increase in the deformation of glass network with increasing bonding defects. For $\text{SrO-Fe}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$ glasses the conductivity and dielectric permittivity remained constant with increasing SrO.

The study of structural properties of $\text{Na}_2\text{O-TeO}_2$ glasses and crystallized compositions containing > 20 mol% Na_2O was shown that the local structure of glasses differs from the structure of their crystalline counterparts.

STATIKA I DINAMIKA MOLEKULSKIH KRISTALA STATICS AND DYNAMICS OF MOLECULAR SOLIDS

Voditelj projekta: dr. sc. Davor Kirin

Tel: ++385 1 4561 106 e-mail: kirin@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu :

Davor Kirin, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Mladen Žinić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Suradnici iz drugih ustanova:

G. S. Pawley, doktor fiz. znanosti, Department of Physics, University of Edinburgh, Edinburgh, Velika Britanija (konzultant)

Janez Pirnat, doktor fiz. znanosti, Univerza v Ljubljani, Inštitut za matematiko, fiziko in mehaniko, Ljubljana, Slovenija (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Istraživanja na projektu su usmjerena na izučavanje fizikalnih svojstava molekulskih sistema s ciljem s jedne strane dubljeg razumijevanja mikroskopskih procesa, a s druge nalaženje molekula s poželjnim električkim, mehaničkim i drugim svojstvima interesantnim za primjenu. Molekulski sistemi ulaze sve više u primjenu u mnogim granama tehnologije (liquid crystal display LCD, organic light emitting diodes OLED i sl) i za očekivati je da će se ovaj trend nastaviti i u budućnosti. Detaljno razumijevanje svojstava molekulskih sistema je bitan preduvjet za sintetiziranje novih molekula pogodnih za primjenu. Na projektu se radi na istraživanju svojstava fleksibilnih molekula koje pokazuju fazne prijelaze u ovisnosti o temperaturi (halogenizirani benzofenoni, živa(II) halidima), kao i na molekulama koje imaju staklastu fazu (o-terfenil) s ciljem razumijevanja mikroskopskih procesa koji dovode do faznog prijelaza ili formiranja staklaste faze.

Research program and results:

The subject of the research is on physical properties of molecular solids in order to understand microscopic properties (intermolecular forces, molecular conformation etc.). Molecular systems are rapidly becoming important in practical application (liquid crystal display LCD, organic light emitting diodes OLED etc.) and it is very likely that this trend will continue in the future. In order to design new molecular materials it is important to understand their properties at molecular level. We have investigated properties of flexible (semi rigid) molecules, which either exhibit phase transition (halogenated benzophenones, methylmercury halides) or are the glass formers molecules (o-terphenyl).

**OPTIČKE INTERAKCIJE I ORGANIZACIJSKI PROCESI U MATERIJU
OPTICAL INTERACTIONS AND ORGANIZATIONAL PROCESSES IN MATTER**

Voditelj projekta: dr. sc. Stjepan Lugomer

Tel/Fax: ++385 1 45 60 928 e-mail: lugomer@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Božena Čosović, doktor kem. znanosti, znanstvena savjetnica (konzultantica)

Stjepan Lugomer, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Dubravko Risović, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Suradnik iz druge ustanove:

Aleksa Bijeliš, doktor fiz. znanosti, redovni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultant).

Program rada i rezultati na projektu:

U aspektu primjene optičkih interakcija male snage, program rada usmjeren je na proučavanje materijalnih sistema u slabo, odnosno jako neravnotežnim uvjetima koji su karakterizirani procesima samo-organizacije (SO): Takvi procesi zbivaju se u tekućinskim sistemima koji sadrže otopljene i dispergirane tvari, procese na granicama faza, kao i na čvrstim površinama. Laserske interakcije male snage (u modu raspršenja), s takvim sistemima omogućuju karakterizaciju tvari, analizu procesa adsorpcije, agregacije i faznih prijelaza., s dominantnom primjenom za proučavanje dinamike organskih i anorganskih tvari, bioloških produkata i partikulata u akvatičnim sistemima okoliša.

U aspektu primjene optičkih interakcija velike snage, program rada usmjeren je na proučavanje SO struktura generiranih na površinama čvrstih tijela. Takve interakcije stvaraju površinski tekući sloj (shear layer) čija nelinearna i neravnotežna dinamika dovodi do SO procesa i pojave veoma kompleksnih struktura, od kojih neke nisu do sada istraživane. One se jaavljaju u lokaliziranim domenama, a zbog ultrabrzog hlađenja na kraju nanosekundnog laserskog impulsa ostaju trajno smrznute ,omogućujući tako a posteriri uvid u proces njihova nastanka, topološku kompleksnost, ako i teorijski opis. Pomoću optičkih interakcija male snage proučavani su slabo i jako nelinearni procesi koji rezultiraju samo-organizacijom materije u otopljenom, dispergiranom i čvrstom stanju. Interakcije raspršenja na akvatičkim

otopljenim i dispergiranim sistemima ukazale su na nove karakteristike samoorganizacijskih (SO) procesa i rezultirajuću fraktalnu strukturu, sa slijedećim karakteristikama:

- Razvijen je novi fizikalni model relativne permitivnosti SO struktura i kao i njihov fraktalni model. Nasuprot važećem konceptu, novi model predviđa ovisnost o fraktalnoj dimenziji (D) kao i prostornoj skali strukture (R) uz scaling: $\sim RD-d$ (d = Euklidska dimenzija). Teorija je eksperimentalno verificirana elektrokemijskim mjerenjima na adsorbiranim slojevima neionske tvari T-X-100 i linolenske kiseline, koji formiraju fraktalnu strukturu.

- Izvedena su scaling mjerenja na kapljicastoj Hg elektrodi radi utvrđivanja hidrodinamičkih utjecaja na fraktalna svojstva rastućeg agregata. Nađeno je, da fraktalna dimenzija agregata bitno utječe na procese formiranja površine.

Pomoću optičkih laser- materija interakcija velike (gustoće) snage, u apsorptivnom modu proučavani su procesi modifikacije površina: metala, legura. Fundamentalni aspekt ovih istraživanja rezultirao je u novim značajnim spoznajama o samoorganizacijskim (SO) procesima u (rastopljenom) površinskom posmičnom sloju (shear layer), od kojih su mnogi dobiveni po prvi puta uopće. Među takvim procesima najzanimljiviji su oni koji rezultiraju formiranjem vrtložnih mikrofilamenata, te stvaranjem složenijih SO struktura, kao «pletenica» (braids), zamršenih (tangled) struktura, solitona (loop solitons), njihovim slomom i transformacijom u ring strukture i sl. Kod toga, po prvi puta eksperimentalno su dobiveni Hasimoto solitoni, te, Fukumoto-Myazaki nestabilnosti, Kida vrtlozi i sl. Na osnovi ovih rezultata uspostavljena je suradnja s janskim znanstvenicima radi povezivanja teorijskih i eksperimentalnih aspekata istraživanja ovih SO struktura.

Research program and results:

From the aspect of application of the low power lasers, the research project is directed to the study of material systems in weakly and strongly nonequilibrium conditions, which result in the formation of self-organized (SO) structures. Such processes take place in the liquid systems that comprise dissolved and dispersed matter, processes on the phase interfaces, as well as on the solid surfaces. Low power laser-matter interactions in the scattering mode enable the characterization of substances, the analysis of the adsorption, aggregation, and of phase transitions, with dominant application for the study of dynamics of organic and inorganic matter, biological products and particulates in the aquatic systems in the environment.

From the aspect of application of high power laser-matter interactions, the research project is directed to the study of SO structures generated on the solid surfaces. These interactions generate the surface shear layer of molten material, the nonlinear and nonequilibrium dynamics of which results in the SO processes, and formation of very complex structures, some of which have never been studied. They appear in localized domains, and after ultra fast cooling at the end of nanosecond pulse, they stay frozen permanently, thus enabling a posteriori study of their generation, of topological complexity, and enable their theoretical description.

Low power optical interactions have been used to study weakly and highly nonlinear processes that result in the self-organization (SO) of matter in dissolved, dispersed as well as in the solid state. The scattering interactions on aquatic dissolved and dispersed systems have indicated quite new characteristics of SO processes and on the resulting fractal structure, with the following characteristics:

- The new physical model of relative permittivity of SO structures, as well as their fractal model, were derived. In contrast to the accepted concept, the new model suggests dependence on the fractal dimension (D) as well as on the spatial scale (R) of the structure, with the scaling:

$\sim RD-d$ (d = Euclid's dimension). Theory was verified by the electrochemical measurements on the adsorbed layers of the nonionic substance T – X –100 and the linoleic acid, which form the fractal structures.

High power optical laser-matter interactions in the absorptive mode have been used to study the processes of surface modification on: metals, alloys. The fundamental aspect of these studies resulted in the new important conclusions about the SO processes on the (melted)

surface shear layer, of which some were obtained for the first time, at all. Among them, the most interesting and important structures are those that result in the formation of vortex microfilaments, as well as in the formation of more complex SO structures such as: braided and tangled structures, solitons, loop solitons, their break-up, and transformation into ring structures. Of these structures, for the first time were obtained experimentally: the Hasimoto solitons, the Fukumoto-Myazaki instabilities, the Kida vortices etc. On the basis of these results the cooperation with Japanese scientists was established in order to unify the theoretical and the experimental aspect of these studies.

POLUVODIČKI MATERIJALI ZA OPTOELEKTRONIKU SEMICONDUCTOR MATERIALS FOR OPTOELECTRONICS

Voditelj projekta: dr. sc. Branko Šantić

tel.: ++385 1 456-09-88, email: santic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Branko Šantić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Program rada i rezultati:

Istraživana su svojstva poluvodičkih materijala koji su interesantni za primjenu u optoelektronici. Prošle godine, eksperimentalni i teorijski rad je bio koncentriran na nitridne poluvodiče (GaN , $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$).

Proučavan je električni transport na kontaktima metal/p-tip-GaN (dopiran magnezijem) za nekoliko različitih metala (Ti, In, Au, Al). Mjerenjem I-V karakteristika i teorijskom analizom, pokazano je da je kvantno tuneliranje dominantan oblik električnog transporta na kontaktu metal/p-GaN, a to je objašnjeno atipičnim statističkim svojstvima Mg-dopanda. Također, pokazano je da su svojstva površine poluvodiča bitna u određivanju kontaktnog otpora, koji je još uvijek važan limitirajući faktor u primjeni nitrida.

Vrh valentne zone GaN je složene strukture. Energetske vrpce su rascijepljene 3 valentne vrpce koje su sve anizotropne u k-prostoru. To bitno određuje statistiku slobodnih nosilaca naboja i električni transport u p-tipu GaN. Usprkos obimnoj višegodišnjoj literaturi, jedan od osnovnih parametara za GaN nije bio poznat. Radi se o efektivnoj masi za šupljine, koja se u literaturi navodi u rasponu 0.3-2.2 m_0 . Teorijskom analizom, određena je efektivna masa za šupljine u GaN ($m_{h3ds}=1.25m_0$). Nadalje, pokazano je da se u električnom transportu, različito ponašaju šupljine iz pojedinih valentnih vrpca, što je posljedica anizotropije vrpca. Šupljine iz A- vrpce prevladavaju u 'horizontalnom' transportu. Šupljine iz C- vrpce dominiraju transportom u 'vertikalnom' smjeru (duž z-osi), što je neočekivano, jer je njihova koncentracija najmanja. To ima važne posljedice na djelovanje optoelektroničkih komponenti jer su i matični koeficijenti za optičke prelaze izrazito ovisni o smjeru.

Istraživane su i različite nano-strukture u nitridnim poluvodičima. Sintetizirani su uzorci s $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ kvantnim jamama (QW) u matrici GaN. Započela su ispitivanja dimetil-hidracin-indij-a, kao mogućeg izvora indija za nisko-temperaturni rast InGaN kvantnih jama, koje su iznimno važne u primjeni.

Research programme and results:

The properties of the semiconductor materials which are of interest for the applications in optoelectronics have been studied. Last year, particular attention was concentrated on the nitride semiconductors (GaN , $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$).

We have studied the electrical transport mechanism on the metal/p-GaN:Mg contact for several metals (Ti, In, Au, Al). From the examination of the I-V characteristics, and based on theoretical analyses, it has been established that the quantum-tunneling is the dominant type of electrical transport. That result has been explained by the unusual statistical properties of the Mg-acceptor which serve as dopant. It is further shown that the properties of GaN-surface are critical for the contact resistance, which is still the important limiting factor for the applications of the nitrides.

The uppermost valence band of GaN is split into three sub-bands which are all anisotropic in k-space. This feature has important consequences on the free hole statistics and on the electrical transport in the p-GaN. In spite of considerable amount of data available in literature, the effective mass for the free holes remain poorly known, and the values can be found in the 0.3-2.2 m_0 range. In our work, based on the theoretical analyses, the reliable value for the effective mass for the density of states have been determined, $m_{h3ds}=1.25m_0$. The band anisotropy has substantial influence on the electrical transport. It is shown that, although relatively less numerous, the C-holes are the dominating charge carriers in the z-direction, while the A-holes dominate only in the t-direction. This is of considerable relevance for optoelectronic devices since the matrix moments for the optical transitions of various bands are significantly anisotropic as well.

Various nano-structures in the nitride semiconductors have been studied. Particularly, various InGaN quantum wells (QW) have been grown using GaN as the barrier. Such QW are important in numerous opto-electronic devices. The assessment of the dimethyl-hydrazine-Indium as a possible source of Indium for the growth of low-temperature InGaN-QW, have been started.

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Andreić, Željko; Ellwi, Samir Shakir; Pleslić, Sanda; Kunze, Hans-Joachim. A simple XUV source at a wavelength of 13.5 nm from an ablative capillary discharge. // *Surface review and letters*. 9 (2002); 627-630.
2. Borjanović, Vesna; Jakšić, Milko; Pastuović, Željko; Pivac, Branko; Vlahović, Branislav; Dutta, Jasna; Ječmenica, Rade. Defects in polycrystalline silicon studied by IBICC. // *Solar energy materials and solar cells*. 72 (2002); 487-494.
3. Borjanović, Vesna; Kovačević, Ivana; Zorc, Hrvoje; Pivac, Branko. Irradiation effects on polycrystalline silicon. // *Solar energy materials and solar cells*. 72 (2002), 1-4; 183-189.
4. Car, Tihomir; Radić, Nikola; Turković, Aleksandra. UV photoconductivity of nanocrystalline TiO₂ films annealed in oxygen. // *Japanese journal of applied physics*. 41 (2002), 1/9; 5618-5623.
5. Desnica, Uroš; Desnica-Franković, Ida-Dunja; Gamulin, Ozren; White, C.Woody; Sonder, Eugen; Zuhr, Ray A. Formation of CdS nanocrystals in SiO₂ by ion implantation. // *Journal of non-crystalline solids*. 299-302 (2002); 1100-1104.
6. Desnica, Uroš; Desnica-Franković, Ida-Dunja; Gamulin, Ozren; White, C.Woody; Sonder, Eugen ; Zuhr, Ray A. UV - visible reflectivity study of the synthesis and growth of nanocrystals obtained by ion implantation. // *Vacuum*. 65 (2002); 407-411.
7. Desnica, Uroš; Pavlović, Mladen; Fang, Z.-Q.; Look, David C. Thermoelectric effect spectroscopy of deep levels in semi-insulating GaN. // *Journal of applied physics*. 92 (2002); 4126-4128.
8. Desnica-Franković, Ida-Dunja. Exponential absorption edge and implantation-induced modifications in amorphous gallium arsenide. // *Philosophical magazine B*. 82 (2002),

- 15; 1671-1678.
9. Dubček, Pavo; Radić, Nikola; Milat, Ognjen; Bernstorff, Sigrid. Grazing incidence small angle X-ray scattering investigation of tungsten-carbon films produced by reactive magnetron sputtering. // *Surface and coatings technology*. 151-152 (2002); 218-221.
 10. Dubček, Pavo; Bernstorff, Sigrid; Desnica, Uroš; Desnica-Franković, Ida-Dunja; Salamon, Krešimir. GISAXS study of Cadmium Sulfide quantum dots obtained by ion implantation. // *Surface review and letters*. 9 (2002); 455-459.
 11. Götze, Swen; Ellwi, Samir Shakir; Andreić, Željko; Dussart, Remi; Pons, Jerome; Viladrosa, Raymond; Pouvesle, J-M; Fleurier, C; Kunze, Hans-Joachim. Time resolved diagnostics of plasmas created by ablative capillary discharges. // *Physics letters A*. 299 (2002); 571-576.
 12. Gracin, Davor; Jakšić, Milko; Bogdanović-Radović, Ivančica; Medunić, Zvonko; Car, Tihomir; Pracek, Borut. Characterization of amorphous silicon carbon alloys by IBA technique and optical spectroscopy. // *Vacuum*. 67 (2002); 519-523.
 13. Gradišnik, Vera; Pavlović, Mladen; Pivac, Branko; Zulim, Ivan. Study of the color detection of a-Si:H by transient response in the visible range. // *IEEE transactions on electronic devices*. 49 (2002); 550-556.
 14. Jakšić, Milko; Bošnjak, Željka; Gracin, Davor; Medunić, Zvonko; Pastuović, Željko; Vittone, Ettore; Nava, Filippo. Characterisation of SiC by IBIC and other IBA techniques. // *Nuclear instruments and methods in physics research B*. 188 (2002); 130-134.
 15. Lučić-Lavčević, Magdy; Turković, Aleksandra. Small-angle X-ray scattering and wide-angle X-ray diffraction on thermally annealed nanostructured TiO₂ films. // *Thin solid films*. 419 (2002); 105-113.
 16. Lučić-Lavčević, Magdy; Turković, Aleksandra. The measurements of particle/crystallite size in nanostructured TiO₂ films by SAXS/WAXD method. // *Scripta materialia*. 46 (2002); 501-505.
 17. Lugomer, Stjepan; Maksimović, Aleksandar; Stipančić, Mladen. Growth of Mo-oxide patterns by anomalous dynamic diffusion of cations. // *Physica scripta*. 65 (2002), 5; 447-453.
 18. Medunić, Zvonko; Gracin, Davor; Bogdanović-Radović, Ivančica; Jakšić, Milko. Characterisation of amorphous silicon solar cells by IBA method. // *Nuclear instruments and methods in physics research B*. 190 (2002); 611-614.
 19. Metikoš-Huković, Mirjana; Radić, Nikola; Grubač, Zoran; Tonejc, Antun. The corrosion behavior of sputter-deposited aluminum-tungsten alloys. // *Electrochimica acta*. 47 (2002), 5; 2387-2397.
 20. Mikšić, Vesna; Pivac, Branko; Rakvin, Boris; Zorc, Hrvoje; Corni, Federico; Tonini, Rita; Ottaviani, Giampiero. DLTS and EPR study of defects in H implanted silicon. // *Nuclear instruments and methods in physics research B*. 186 (2002); 36-40.
 21. Musić, Svetozar; Popović, Stanko; Maljković, Miroslava; Furić, Krešimir; Gajović, Andreja. Formation of RuO₂ and Ru by thermal decomposition of ruthenium(III)-

- acetylacetonate. // *Journal of materials science letters*. 21 (2002), 14; 1131-1134.
22. Musić, Svetozar; Popović, Stanko; Maljković, Miroslava; Furić, Krešimir; Gajović, Andreja. Influence of synthesis procedure on the formation of RuO₂. // *Materials letters*. 56 (2002), 5; 806-811.
23. Pivac, Branko; Borjanović, Vesna; Kovačević, Ivana; Evtody, B.N.; Katz, Eugen. Comparative studies of EFG ribbon poly-Si grown by different procedures. // *Solar energy materials and solar cells*. 72 (2002); 165-171.
24. Pivac, Branko; Kovačević, Ivana; Borjanović, Vesna. Defects in carbon and oxygen implanted p-type silicon. // *Nuclear instruments and methods in physics research B*. 186 (2002); 355-359.
25. Pivac, Branko; Kovačević, Ivana; Zulim, Ivan. Defects introduced in amorphous silicon thin films by light soaking. // *Thin solid films*. 403 (2002); 513-516.
26. Pivac, Branko; Rakvin, Boris; Tonini, Rita; Corni, Federico; Ottaviani, Giampiero. Reply to comments written by M. Kakazey, M. Vlasova, and J.G. Gonzales-Rodriguez - Reply to discussion. // *Materials science and engineering B*. 72 (2002); 211-212.
27. Posedel, Dario; Turković, Aleksandra; Dubček, Pavo; Crnjak Orel, Zorica. Grazing-incidence X-ray reflectivity on nanosized vanadium oxide and V/Ce oxide films. // *Materials science and engineering B*. 90 (2002); 154-162.
28. Prasanth Kumar, N.; Major, S.; Satish, Vitta; Talwar, S.S.; Dubček, Pavo; Amenitsch, Heinz; Bernstorff, Sigrid; Ganesan, V.; Gupta, Ajay; Dasannacharya, B.A. Molecular packing in cadmium and zinc arachidate LB multilayers. // *Colloids and surfaces A. Physicochemical and engineering aspects*. 198 (2002); 75-81.
29. Prasanth Kumar, N.; Narang, S.N.; Major, S.; Satish, Vitta; Talwar, S.S.; Dubček, Pavo; Amenitsch, Heinz; Bernstorff, Sigrid. Structure of CdS-arachidic acid composite LB multilayers. // *Colloids and surfaces A. Physicochemical and engineering aspects*. 198 (2002); 59-66.
30. Risović, Dubravko. Effect of suspended particulate-size distribution on the backscattering ratio in remote sensing of seawater. // *Applied optics: lasers, photonics and environmental optics*. 41 (2002); 33; 7092-7101.
31. Risović, Dubravko; Gašparović, Blaženka; Čosović Božena. The impact of fractal geometry on permittivity and related quantities. // *Journal of physical chemistry B*. 106 (2002); 9810-9814.
32. Ristić, Mira; Ivanda, Mile; Popović, Stanko; Musić, Svetozar. Dependence of nanocrystalline SnO₂ particle size on synthesis route. // *Journal of non-crystalline solids*. 303 (2002), 2; 270-280.
33. Šantić, Branko; Dörnen, Achim. Current transport mechanism and I-V characteristics of Titanium and Indium contacts to p-type GaN. // *Materials science and engineering B - solid state materials for advanced technology*. B 93 (2002); 202-206.
34. Studenyak, Igor Petrovich; Kranjčec, Mladen; Kovacs Gy. Sh.; Desnica-Franković, Ida-Dunja; Molnar, A. A.; Panko V. V.; Slivka, V. Yu. Electrical and optical absorption studies of Cu₇GeS₅I fast-ion conductor. // *Journal of physics and chemistry of solids*.

63 (2002); 267-271.

35. Vidya, V.; Prasanth Kumar, N.; Narang, S. N.; Major, S.; Satish, Vitta; Talwar, S. S.; Dubček, Pavo; Amenitsch, H.; Bernstorff, S. Molecular packing in CdS containing conducting polymer composite LB multilayers. // *Colloids and surfaces A. Physicochemical and engineering aspects*. 198-200 (2002); 67-74.
36. Volovšek, Vesna; Bistričić, Lahorija; Kirin, Davor; Baranović, Goran. Low-wavenumber lattice vibrations and dynamics of 4,4'-dibromobenzophenone. // *Journal of Raman spectroscopy*. 33 (2002), 10; 761-768.
37. Zgrablić, Goran; Vinković, Dejan; Gradečak, Silvija; Kovačić, Damir; Biliškov, Nikola; Grbac, Neven; Andreić, Željko; Garaj, Slaven. Instrumental recording of electrophonic sounds from Leonid fireballs. // *Journal of geophysical research - space physics*. 107 (A7) (2002); 1124-1132.

Knjige i poglavlja u knjigama:

1. Ivanda, Mile; Tonejc, Anđelka; Đerđ, Igor; Gotić, Marijan; Musić, Svetozar; Mariotto, Gino; Montagna, Maurizio. Determination of nanosized particles distribution by low frequency Raman scattering: Comparison to electron microscopy // *Lecture Notes in Physics*. Vol. 588. / Watanabe, Y. et al. (ur.). Heidelberg : Springer, 2002. 24-36.

Ostali radovi u časopisima:

1. Etlinger, Božidar. Eksplozija plina u Puli. // *EGE Energetika - Gospodarstvo - Ekologija - Etika*. (2002), 5; 88-91.
2. Šauperl, Olivera; Stana-Kleinschek, Karin; Vončina, Bojana; Sfiligoj-Smole, Majda; Etlinger, Božidar. Utjecaj mercerizacije na umrežavanje celuloze 1,2,3,4 Butantetrakarboksilnom kiselinom (BTCA). // *Tekstil*. 51 (2002), 10; 455-462.

Znanstveni radovi u tisku:

1. Crnjak, Orel, Zorica; Turković, Aleksandra. Spectroscopic characterization of nanocrystalline V/Ce oxides for novel counter electrodes. // *NATO ASI: Nanostructures, synthesis, functional properties and applications*. (2002).
2. Desnica, Vladan; Furić, Krešimir; Hochleitner, Bernadette; Mantler, Michael. A comparative analysis of five Cr green pigments based on different spectroscopic techniques. // *Spectrochimica acta B*.
3. Hrestak, Kristina; Turković, Aleksandra; Dubček, Pavo; Crnjak Orel, Zorica. Raspršenje rentgenskih zraka sinkrotronskog izvora pri malom kutu u nanostrukturnim V/Ce oksidnim slojevima. // *Strojarstvo*. (2002).
4. Radmanović, Kristijan; Pucić, Irina; Turković, Aleksandra; Crnjak Orel, Zorica. Impedancijska, IR, Ramanova spektroskopija i diferencijalna pretražna kalorimetrija nanokompozitnog (PEO)₈ZnCl₂ polielektrolita. // *Strojarstvo*.

Elaborati, izvještaji, studije:

1. Desnica, Uroš; Dubček, Pavo; Desnica-Franković, Ida-Dunja; Buljan, Maja; Salamon, Krešimir; Milat, Ognjen; Bernstorff, Sigrid; White, C.W. Morphological Characterization of CdS Quantum Dots (QDs) in SiO₂ Substrate by Grazing Incidence Small Angle X-Ray Scattering (GISAXS), 2002. (Austrian SAXS Beamline

at Elettra, Anual Report 2001)

2. Dubček, Pavo; Pivac, Branko; Bernstorff, Sigrid; Tonini, R.; Corni, F.; Ottaviani, G. Grazing incidence small angle x-ray scattering study of irradiation induced defects in monocrystalline silicon, 2002. (Austrian SAXS Beamline at Elettra, Anual Report 2001)
3. Urli, Natko; Desnica, Uroš; Glasnović, Zvonimir; Sesartić, Mladen; Mišćević, Ljubomir; Perić, Nedjeljko; Firak, Mihajlo; Krčmar, Suzana; Etlinger, Božidar; Metikoš, Mirjana; Galaso, Ivan; Pavlović, Mladen. Hrvatska Solarna Kuća - Studija izvodljivosti, 2002. Elaborat

Radovi objavljeni u zbornicima skupova:

1. Babocsi, K.; Ivanda, Mile; Dem, C.; Schmitt, M.; Montagna, M.; Kiefer, Wolfgang. Low wavenumber Raman scattering from nanosized CdsxSe1-X crystals embeded in glass matrix // *Proceedings of XVIIIth International Conference on Raman spectroscopy* / Janos Mink, Gyorgy Jalsovszky, Gabor Keresztury (ur.). Chichester : John Wiley, 2002. 497-498.
2. Bangert, Herwig; Mantyla, Tapio; Pauleau, Yves; Radić, Nikola; Radnoczi, Gyorgy. Preface to Proceedings of Protective Coatings and Thin Films Symposium, 2002.
3. Dem, C.; Ivanda, Mile; Babocsi, K.; Schmitt, M.; Kiefer, Wolfgang. Determination of nanosized particle distribution by means of low frequency Raman scattering // *Proceedings of XVIIIth International Conference on Raman spectroscopy* / Janos Mink, Gyorgy Jalsovszky, Gabor Keresztury (ur.). Chichester : John Wiley, 2002. 499-500.
4. Etlinger, Božidar. Neodržavanje infrastrukture - opasnost za okoliš // *Sigurnost u okolišu i graditeljstvu. Safety concerning the environment and building* / Mišćević, Ljubomir (ur.). Zagreb : SUN ARH d.o.o., 2002. 50-59.
5. Furić, Krešimir. Artificial cobweb: chemical and phisical analysis // *Proceedings of the CBMTS - Industry II: The First World Congress on Chemical and Biological Terrorism* / Slavko Bokan, Zvonko Orehovec (ur.). Zagreb : Applied Science and Analysis - ASA, Maryland, 2002. 140-145.
6. Gamulin, Ozren; Ivanda, Mile; Mitsa, Vladymir. Structural phase transition in (Ge2S3)X (As2S3) 1-X chalcogenide glasses // *Proceedings of XVIIIth International Conference on Raman spectroscopy* / Janos Mink, Gyorgy Jalsovszky, Gabor Keresztury (ur.). Chichester : John Wiley, 2002.
7. Glasnović, Zvonimir; Urli, Natko; Etlinger, Božidar; Sesartić, Mladen; Perić, Nedjeljko; Pavlović, Mladen. Razvoj malih solarnih tehnologija // *Energy and enviroment 2002 (Energija i okoliš)* / Franković, Bernard (ur.). Rijeka : Tisak Zambelli, 2002. 255-263.
8. Gradišnik, Vera; Pavlović, Mladen; Pivac, Branko; Zulim, Ivan. The Fourier analysis of a-Si:H photodiode transient response // *IEEE MELECON 2002 Proceedings*. Cairo : IEEE, 2002. 45-48.
9. Ivanda, Mile; Kiefer, Wolfgang; White, C. Woody; Desnica, Uroš. Raman scattering and stimulated light emission from nanosized silicon crystals // *Proceedings of XVIIIth International Conference on Raman spectroscopy* / Janos Mink, Gyorgy Jalsovszky,

Gabor Keresztury (ur.). Chichester : John Wiley, 2002. 501-502.

10. Moguš-Milanković, Andrea; Šantić, Ana; Day, Delbert E. Structural and electrical properties of iron phosphate glasses // *Proceedings of the 6th ESG Conference / Vacher, R. (ur.)*. Montpellier: Universite Montpellier, 2002. 1-6.
11. Urli, Natko; Desnica, Uroš; Glasnović, Zvonimir; Sesartić, Mladen; Mišćević, Ljubomir; Perić, Nedjeljko; Firak, Mihajlo; Krčmar, Suzana; Etlinger, Božidar; Metikoš, Mirjana; Galaso, Ivan; Pavlović, Mladen. Croatian Solar House // *Energy and Environment 2002 / Franković, Bernard (ur.)*. Rijeka : HUSE, 2002. 215-224.

Magistarski radovi:

1. Mikšić, Vesna. Defekti u siliciju nastali implantacijom vodika. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 5.3.2002., 88 str., Voditelj: Pivac, Branko; Ogorelec, Zvonko.

Diplomski radovi:

1. Srzić, Mladen. Modeliranje debljine slojeva pripremljenih kružnim planarnim magnetronom. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 14.2.2002., 50 str., Voditelj: Radić, Nikola.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

Furić, K. Vibration spectroscopy of water molecule in different surroundings. Fritz Haber Institute, Abteilung für Anorganische Chemie, Berlin, Njemačka, 20.2.2002.

Lugomer, S. Complex structures of vortex filaments generated in laser-matter interactions. University of Tokyo, Department of Applied Physics, Tokyo, Japan. 6.6.2002.

Lugomer, S. Open-loop and closed-loop vortex filaments generated in laser-matter interactions. Hiroshima University; Department of Nonlinear Sciences and Life Sciences, Hiroshima, Japan, 17.6.2002.

Lugomer, S. Open-loop and closed-loop vortex filaments in laser-matter interactions. Shinsu University; Department of Applied Mathematics, Matsumoto, Japan. 5.6.2002.

Lugomer, S. Organization of vortex filaments in the presence of Rayleigh-Taylor instability, 2002. Osaka University, Institute for Laser Engineering, Osaka, Japan. 29.5.2002.

Lugomer, S. Vortex filament patterns generated in laser-matter interactions. Kyushu University, Department of Applied Physics, Fukuoka, Japan, 22.6.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

LASER U MEDICINI I STOMATOLOGIJI – PRVI HRVATSKI SIMPOZIJ S MEĐUNARODNIM UČEŠĆEM

Zagreb, 22-24.11.2002.

Sudionik: Lugomer, S.

Prilog:

Lugomer, S. Teoretske pretpostavke upotrebe lasera u medicini i stomatologiji, pozvano predavanje

FRUHJARSTAGUNG DPG, BOCHUM 2002

Bochum, Njemačka, 18-21.3.2002.

Prilog:

Andrić, Ž.; Pleslić, S.; Kunze, H.-J. Generation of quasi-band EUV radiation by ablative

capillary discharges, poster.

ELEVENTH IEEE MEDITERRANEAN ELECTROTECHNICAL CONFERENCE

Kairo, Egipat, 7-9.5.2002.

Prilog:

Gradišnik, V.; Pavlović, M.; Pivac, B.; Zulim, I. The Fourier analysis of a-Si:H photodiode transient response, poster.

SIGURNOST U OKOLIŠU I GRADITELJSTVU. SAFETY CONCERNING THE ENVIRONMENT AND BUILDING

Šibenik, Hrvatska, 9-11.5.2002.

Sudionik: Etlinger, B.

Prilog:

Etlinger, B. Neodržavanje infrastrukture - opasnost za okoliš, predavanje.

9. MEĐUNARODNI SASTANAK VAKUUMSKA ZNANOST I TEHNIKA

Trakošćan, Hrvatska, 15.5.2002.

Sudionici: Andreić, Ž., Buljan, M., Car, T., Desnica-Franković, D., Desnica, U., Dubček, P., Etlinger, B., Pavlešić, A., Pavlović, M., Pivac, B., Radić, N., Turković, A.

Prilozi:

Buljan, M.; Salamon, K.; Dubček, P.; Bernstorff, S.; Desnica-Franković, I.-D.; Milat, O.; Desnica, U. Analiza 2D GISAXS spektara CdS nanokristala u SiO₂ substratu, predavanje.
Car, T.; Radić, N.; Turković, A. UV fotovodljivost nanokristalnih TiO₂ filmova napuštanih u kisiku, poster.

Desnica, U.; Desnica-Franković, I.-D.; Gamulin, O.; White, C.W. UV - visible reflectivity study of the synthesis and growth of nanocrystals obtained by ion implantation, poster.

Dubček, P. Istraživanje strukture tankih filmova raspršenjem rendgenskog zračenja pod malim kutovima, poster.

Etlinger, B.; Pavlović, M. Defekt dubokog energetskog nivoa u nedopiranom In Se, poster
Grozđanić, D.; Rakvin, B.; Pivac, B.; Slaoui, A.; Monna, R. Study of paramagnetic defects in RTCVD polycrystalline silicon, poster.

Hrestak, K.; Turković, A.; Dubček, P.; Crnjak Orel, Z. Utjecaj interkalacije Li⁺ iona u matricu nanostrukturnih V/Ce oksida, poster.

Pavlović, M.; Desnica, U. V.; Fang, Z.; Look, D. Spektroskopija termoelektričnim efektom: primjena na tankom filmu visokootpornog GaN, poster.

Pivac, B.; Kovačević, I.; Borjanović, V. Implantacija C⁺ u Si, poster.

Pucić, I.; Posedel, D.; Turković, A.; Crnjak Orel, Z. Diferencijalna pretražna kalorimetrija (DSC), Impedancijska, IR i Ramanova spektroskopija (PEO)₈ZnCl₂ polielektrolita, poster.

Radić, N.; Tonejc, A.; Ivkov, J. Amorfični volfram, poster.

Radmanović, K.; Crnjak Orel, Z.; Turković, A. Impedancijska, IR i Ramanova spektroskopija nanokompozitnog (PEO)₈ZnCl₂ polielektrolita, poster.

Salamon, K.; Milat, O.; Dubček, P.; Radić, N. Površinska i podpovršinska analiza nanostrukture W-C sloja na Si podlozi, poster.

Srzić, M.; Radić, N. Modeliranje debljine tankih slojeva pripremljenih kružnim planarnim magnetronom, poster.

Stubičar, M.; Tonejc, A.; Radić, N. Changes of microhardness and microstructure of Al-W thin films during isochronal annealing, poster.

Turković, Aleksandra. Impedancijska spektroskopija, predavanje.

Vraneša, V.; Posedel, D.; Pavlović, M.; Turković, A. Impedancijska spektroskopija i termički stimulirane struje Fe₂O₃ dopiranog litijem, poster.

THE 29TH IEEE PHOTOVOLTAIC SPECIALISTS CONFERENCE

New Orleans, SAD, 20-24.05.2002.

Sudionik: Pivac, B.

Prilog:

Pivac, B.; Borjanović, V.; Jakšić, M.; Pastuović, Ž.; Zulim, I.; Vlahović, B. IBICC studies of polycrystalline silicon, poster.

2002 GLASS ODYSSEY, 6TH ESG CONFERENCE

Montpellier, Francuska, 2-6.6.2002.

Sudionici: Moguš-Milanković, A., Šantić, A.

Prilozi:

Moguš-Milanković, A.; Šantić, A.; Day, D. E. Structural and electrical properties of iron phosphate glasses, predavanje.

Šantić, A.; Moguš-Milanković, A.; Ray Chandra S.; Day Delbert E. Structural properties of tellurite glasses, poster.

9TH JOINT VACUUM CONFERENCE

Schloss Seggau, Austrija, 16-20.6.2002.

Sudionici: Buljan, M., Car, T., Dubček, P., Gracin, D., Kovačević, K., Pavlović, M., Pivac, B., Radić, N.

Prilozi:

Borjanović, V.; Jakšić, M.; Pastuović, Ž.; Pivac, B.; Katz, E. Ibic studies of structural defect activity in different polycrystalline silicon material, predavanje.

Buljan, M.; Salamon, K.; Dubček, P.; Bernstorff, S.; Desnica-Franković, I.-D.; Milat, O.; Desnica, U. Analysis of 2D GISAXS patterns obtained on semiconductor nanocrystals, poster.

Car, T.; Ivkov, J.; Radić, N. Phase transformation of amorphous Al₇₈W₂₂ thin films under isothermal conditions, poster.

Gracin, D.; Jakšić, M.; Dubček, P.; Medunić, Z. Nano-structural properties of amorphous hydrogenated silicon carbide alloys by IBA technique, optical methods and GISAX, predavanje.

Kovačević, I.; Borjanović, V.; Pivac, B. Interstitial defects in ion-implanted Si, poster.

Pavlović, M.; Desnica, U. V.; Fang, Z.; Look, D. Thermoelectric effect spectroscopy measurements on semi-insulating GaN, poster.

Pivac, B.; Ilić, S.; Borghesi, A.; Sassella, A.; Porrini, M. Gap states produced by oxygen precipitation in czochralski silicon, poster.

Pivac, B.; Pavlović, M.; Kovačević, I., Etlinger, B.; Zulim, I. Light induced defects in amorphous silicon thin films, poster.

Posedel, D.; Turković, A.; Crnjak Orel, Z. Electrical and optical properties of Zn/(PEO)₈ ZnCl₂/[V₂O₅-CeO₂(at 38 at.% of V)]; SnO₂:F nanostructured thin film galvanic cells, poster.

Radić, N.; Tonejc, A.; Tonejc, A. M.; Furlan, A.; Panjan, P.; Čekada, M.; Jakšić, M.; Medunić, Z.; Ivkov, J. Beta-W phase occurrence and stability in sputter-deposited tungsten thin films, poster.

Salamon, K.; Milat, O.; Dubček, P.; Radić, N. Structure of W-C films deposited on Si substrates; Surface and subsurface analysis by GISAXS and SAXS patterns, poster.

EUROPEAN MATERIAL RESEARCH SOCIETY (E-MRS), SPRING MEETING 2002

Strasbourg, Francuska, 16-22.6.2002.

Sudionici: Dubček, P., Desnica, U., Desnica-Franković, I.D.

Prilozi:

Desnica, U.; Dubček, P.; Desnica-Franković, I.-D.; Buljan, M.; Bernstorff, S.; White, C.W. GISAXS studies of the synthesis and growth of CdS quantum dots from constituent atoms in SiO₂ matrix, poster.

Dubček, P.; Desnica, U.; Desnica-Franković, I.-D.; Bernstorff, S. GISAXS study of shape and size of CdS nanocrystals formed in monocrystalline silicon by ion implantation, predavanje.

Dubček, P.; Pivac, B.; Milat, O.; Bernstorff, S.; Tonini, R.; Corni, F.; Ottaviani, G. GISAXS study of hydrogen implanted silicon, poster.

Dubček, P.; Radić, N.; Milat, O. Characterisation of grains in tungsten-carbon films, poster.

Pivac, B.; Dubček, P.; Bernstorff, S.; Borghesi, A.; Sassella, A.; Porrini, M. SAXS study of

oxygen precipitation in silicon, poster.

THE 17TH DUBROVNIK INTERNATIONAL COURSE & CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATHEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCES - MATH/CHEM/COMP/2002

Dubrovnik, Hrvatska, 24-29.6.2002.

Sudionik: Etlinger, B.

Prilog:

Etlinger, B.; Pavlović, M. Deep level native defect in InSe, poster.

11TH SLOVENIAN-CROATIAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING

Bohinj, Slovenija, 27-30.06.2002.

Prilozi:

Tonejc, A.; Đerđ, I.; Tonejc, A.; Radić, N. The comparison of various methods for extraction of size-strain data from XRD powder pattern of thin films, predavanje

Tonejc, A.; Radić, N.; Đerđ, I.; Tonejc, A.; Ivkov, J. observation of amorphous tungsten in "bulk" thin films deposited by magnetron sputtering technique, predavanje

NATO ASI NANOSTRUCTURES SYNTHESIS, FUNCTIONAL PROPERTIES AND APPLICATIONS

Heraklion, Kreta, Grčka, 26.7.-4.8.2002.

Prilog:

Crnjak Orel, Z.; Turković A. Spectroscopic characterization of nanocrystalline V/Ce oxides with new spectroscopic methods (GISAXS, GIXR), poster.

224TH ACS NATIONAL MEETING

Boston, SAD, 18-22.8.2002.

Prilog:

Crnjak Orel, Z.; Turković, A.; Kosec, M. Preparation and characterization of nanocrystalline V/ce oxides with new spectroscopic methods, predavanje.

XII INTERNATIONAL CONFERENCE ON SMALL-ANGLE SCATTERING

Venecija, Italija, 25-29.8.2002.

Sudionik: Dubček, P.

Prilozi:

Desnica-Franković, I.-D.; Desnica, U.; Dubček, P.; Buljan, M.; Bernstorff, S.; Karl, H.; Stritzker, B. Ion beam synthesis of buried Zn-VI quantum dots in SiO₂: a GISAXS studies, poster.

Dubček, P.; Pivac, B.; Bernstorff, S.; Corni, F.; Tonini, R.; Ottaviani, G. GISAXS study of defects in deuterium implanted monocryalline silicon, poster.

Dubček, P.; Pivac, B.; Bernstorff, S.; Tonini, R.; Corni, F.; Ottaviani, G. Grazing incidence small angle x-ray scattering study of irradiation induced defects in monocryalline silicon, poster.

XVIIITH INTERNATIONAL CONFERENCE ON RAMAN SPECTROSCOPY

Budimpešta, Mađarska, 25-30.8.2002.

Sudionik: Kirin, D.

Prilozi:

Babocsi, K.; Ivanda, M.; Dem, C.; Schmitt, M.; Montagna, M.; Kiefer, W. Low wavenumber Raman scattering from nanosized CdsxSe1-X crystals embeded in glass matrix, poster.

Dem, C.; Ivanda, M.; Babocsi, K.; Schmitt, M.; Kiefer, W. Determination of nanosized particle distribution by means of low frequency Raman scattering, poster.

Gamulin, O.; Ivanda, M.; Mitsa, V. Structural phase transition in (Ge₂S₃)X (As₂S₃) 1-X chalcogenide glasses, poster.

Ivanda, M.; Kiefer, W.; White, C. W.; Desnica, U. Raman scattering and stimulated light

emission from nanosized silicon crystals, poster.

Kirin, D.; Mohaček Grošev, V. Raman scattering studies of phase transitions in CH_3HgX (X= Cl, Br, I) crystals, poster.

XXVI EUROPEAN CONGRESS ON MOLECULAR SPECTROSCOPY (XXVI EUCMOS)

Villeneuve d'Ascq, Francuska, 1-6.9.2002.

Prilog:

Gajović, A.; Furić, K.; Musić, S. Raman spectroscopy of ball milling of TiO_2 and ZrO_2 to nanometric sizes, poster.

12TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THIN FILMS

Bratislava, Slovačka, 15-20.9.2002.

Sudionici: Gracin, D., Radić, N.

Prilozi:

Gracin, D.; Dubček, P.; Jakšić, M. Nanostructural properties of amorphous silicon carbide by GISAX and optical spectroscopy, predavanje.

Ivkov, J.; Radić, N.; Tonejc, A. Hall effect in amorphous Al-W thin films, poster.

IV SYMPOSIUM SiO_2 AND ADVANCED DIELECTRICS

Trento, Italija, 16-18.9.2002.

Sudionik: Ivanda, M.

Prilog:

Ivanda, M.; Clasen, R.; Hornfeck, M.; Kiefer, W. Raman spectroscopy on SiO_2 glasses sintered from nanosized particles, poster.

"OPTICAL AMPLIFICATION AND STIMULATION IN SILICON" NATO ADVANCED RESEARCH WORKSHOP TOWARDS THE FIRST SILICON LASER

Trento, Italija, 21-26.09.2002.

Sudionik: Ivanda, M.

Prilog:

Ivanda, M.; Desnica, U.; White, C. W.; Kiefer, W. Experimental observation of optical amplification in silicon nanocrystals, pozvano predavanje.

AUTUMN SCHOOL ON MATERIALS SCIENCE AND ELECTRON MICROSCOPY 2002, "PROGRESS IN ADVANCED MATERIALS SCIENCE THROUGH ELECTRON MICROSCOPY"

Berlin, Njemačka, 28.9.-3.10.2002.

Sudionici: Forić, K., Gajović, A.

Prilozi:

Furić, K. Basic of Raman spectroscopy and its application in materials science, pozvano predavanje

Gajović, A.; Furić, K.; Musić, S. Ball milling of TiO_2 and ZrO_2 , poster.

ENERGY AND ENVIRONMENT 2002 (ENERGIJA I OKOLIŠ)

Opatija, Hrvatska, 23-25.10.2002.

Sudionici: Desnica, U., Etlinger, B.

Prilozi:

Glasnović, Z.; Urli, N.; Etlinger, B.; Sesartić, M.; Perić, N.; Pavlović, M. Razvoj malih solarnih tehnologija, predavanje.

Urli, N.; Desnica, U.; Glasnović, Z.; Sesartić, M.; Mišćević, Lj.; Perić, N.; Firak, M.; Krcmar, S.; Etlinger, B.; Metikoš, M.; Galaso, I.; Pavlović, M. Croatian Solar House, predavanje.

10TH CONFERENCE ON MATERIALS AND TECHNOLOGY

Portorož, Slovenija, 13-15.11.2002

Sudionica: Turković, A.

Prilog:

Turković, A.; Crnjak Orel Z.; Kosec, M. Determination of grain sizes and porosity in nanophase vanadium oxide and V/Ce oxide with new methods (GISAXS, GIXR), pozvano predavanja.

<http://lelpc1.irb.hr/default.htm>

**ZAVOD ZA ELEKTRONIKU
DIVISION OF ELECTRONICS**

Dr.sc. Božidar Vojnović, predstojnik Zavoda
Tel: ++385 1 4680-090, fax: ++385 1 4680-114

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za informacijske sustave, dr. sc. Dragan Gamberger, voditelj laboratorija
Laboratorij za istraživanje slučajnih signala i procesa, dr. sc. Božidar Vojnović, voditelj laboratorija

Grupa za optoelektroniku i hipermedijske sustave, dr. sc. Karolj Skala, voditelj grupe
Tajništvo, Moira Španović

U okviru Zavoda do 30. 6. 2002. provodila su se istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

**MODELIRANJE PROCESA INTELIGENTNIM RAČUNALSKIM SUSTAVIMA
PROCESS MODELLING BY INTELLIGENT COMPUTER SYSTEMS**

Direktor programa: dr. sc. Nikola Bogunović

Teme u sastavu programa:

Automatizirano rasuđivanje u modeliranju, optimizaciji i dijagnostici tehničkih procesa, dr. sc. Nikola Bogunović, voditelj teme

Optimizacija obrade signala i podataka u mjernim i dijagnostičkim postupcima, dr. sc. Božidar Vojnović, voditelj teme

Vizualna sučelja i tehnologija prijenosa znanja, dr. sc. Karolj Skala, voditelj teme

Program rada:

Program nastoji istražiti i razviti postupke modeliranja, optimizacije i automatizirane dijagnostike tehničkih procesa inteligentnim računalskim sustavima. Preduvjet za optimalno modeliranje procesa su kvalitetni postupci primarne obrade signala, koji polaze od klasičnih metoda (determinističkih i stohastičkih). Istražuju se mogućnosti poboljšanja tih postupaka umjetnim neuronskim mrežama i genetičkim algoritmima. Pretpostavka o probabilističkoj prirodi signala obuhvaća inherentna obilježja procesa te sve poremećaje u amplitudnome (energetskom) i vremenskom području. Izgradnja modela oslanja se na postupke indukcije relacija iz skupa podataka dobivenih simulacijom ili mjerenjem parametara procesa. Rasuđivanje u modelu temelji se na logičkim postupcima dokazivanja teorema proširenima neizravnom logikom, indikatorima neizvjesnosti, probabilističkim kauzalnim mrežama, te obrascima uspješno riješenih problema. Pozornost u radu posvećena je primjerenom adaptivnom modeliranju 3D vizualnih sučelja. Istraživanja na ovom programu rezultirala su u poboljšanim i novim postupcima optimizacije i dijagnostike procesa, kao i novim arhitekturama računalskih sustava koji čine ugrađivu radnu podlogu za napredno modeliranje procesa.

Research programme:

The programme strives to investigate and develop modelling, optimisation and automated diagnostic procedures of technical processes by intelligent computer systems. Prerequisites for optimal process modelling are first-rate primary signal processing methods that build upon the classical deterministic and stochastic techniques, and aspire to enhance these methods by employing artificial neural networks and genetic algorithms. The presumption on probabilistic features of signals includes

inherent process characteristics and all perturbations in its amplitude (energy) and time domain. Process model construction are based on automated inductive procedures that discover relations within the measured or simulated data sets. Automated model-based reasoning continue to employ symbolic logic and theorem proving methods, augmented with fuzzy variables, uncertainty measures, probabilistic causal networks and case-based reasoning. Special attention is paid to contemporary adaptive modelling of 3D visual user interfaces. The research on this programme generated several refined and new optimisation, predictive and diagnostic procedures, as well as new computer architectures that support advanced embedded process modelling.

**AUTOMATIZIRANO RASUĐIVANJE U MODELIRANJU, OPTIMIZACIJI I
DIJAGNOSTICI TEHNIČKIH PROCESA
AUTOMATED REASONING IN MODELLING, OPTIMISATION AND DIAGNOSTICS
OF TECHNICAL PROCESSES**

Voditelj teme: dr. sc. Nikola Bogunović

Tel: ++385 1 4680-220

e-mail: nikola.bogunovic@irb.hr

Suradnici na temi:

Nikola Bogunović, doktor rač. znanosti, znanstveni savjetnik

Dragan Gamberger, doktor rač. znanosti, viši znanstveni suradnik

Ivan Marić, doktor elektroteh. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tomislav Šmuc, doktor elektroteh. znanosti, viši asistent

Program rada i rezultati na temi:

U okviru teme, u dijelu istraživanja radnih okolina za učinkovito modeliranje tehničkih i drugih procesa, reaktivno vizualno programiranje i oblikovanje sustava prošireno je na heterogene, raspodijeljene instrumentacijske sustave koji slijede podatkovno upravljani obrazac. Istraživane su mogućnosti razvrstavanja i implementacije funkcija mjernog sustava u samostojeće poslužiteljske objekte koji se mogu seliti po mreži te opsluživati veći broj istodobnih poziva. Istraživanja u području induktivnog učenja bila su koncentrirana na probleme relevantnosti, otkrivanja šuma i sinteze pravila visoke pouzdanosti. Sustav ILLM za strojno učenje nadograđen je radi efikasnog rješavanja klasifikacijskih problema u velikim bazama podataka, a također je prilagoden radu sa skupovima koji mogu sadržavati i neispravne primjere. Eksperimentalna evaluacija algoritama učenja odvijala se uglavnom na problemu koronarne bolesti srca. U sklopu istraživanja postupaka automatiziranoga modelskog rasuđivanja, empirički su istražene korelacije između različitih domena primjene i postupaka zaključivanja. Istraženi su izvori nekonzistentnog upravljanja s faktorima neizvjesnosti u dedukcijskom zaključivanju.

Research programme and results:

The research covered by the grant, within the process modelling environment research area, has resulted in extending the reactive visual programming to the (re)configuration of heterogeneous distributed instrumentation systems that follow a data-flow processing paradigm. We have investigated the possibilities of partitioning the measurement system functions into services that could be implemented as separate server components shareable and relocatable across the network. In the framework of automated inductive model building, research has been concentrated on the problems of relevance, noise detection, and synthesis of high reliability rules. The ILLM (Inductive Learning by Logic Minimisation) system has been improved and upgraded so that it can efficiently handle huge data sets with erroneous examples. Experimental evaluation was performed mostly

on coronary heart disease problem. The research on automated, model-based reasoning has resulted in empirically established domain dependencies of reasoning strategies. Sources of inconsistent uncertainty management in deductive automated reasoning have been investigated and identified.

OPTIMIZACIJA OBRADJE SIGNALA I PODATAKA U MJERNIM I DIJAGNOSTIČKIM POSTUPCIMA

OPTIMIZATION OF SIGNAL AND DATA PROCESSING IN MEASUREMENT AND DIAGNOSTIC PROCEDURES

Voditelj teme: dr. sc. Božidar Vojnović

Tel: ++385 1 4680 090, e-mail: vojnovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Aleksandar Maksimović, doktor fiz. znanosti, viši asistent
Branka Medved Rogina, doktorica tehn. znanosti, znanstvena suradnica
Ivan Michieli, doktor stroj. znanosti, znanstveni suradnik
Strahil Ristov, doktor rač. znanosti, znanstveni suradnik
Božidar Vojnović, doktor tehn. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehnički suradnik:

Ivan Kontušić, samostalni tehničar

Program rada i rezultati na temi:

Istraživanja u okviru teme usmjerena su u dva osnovna pravca: mjerenje i analiza parametara slučajnih 1D i 2D signala s obradom signala radi optimizacije mjerenja; poboljšanje metoda analize slučajnih procesa kao i podatkovnih struktura i algoritama obrade.

Nastavljen je rad na usporednoj analizi svojstava naprednih metoda u obradi i klasifikaciji signala (vremenskih serija); klasičnih metoda optimizacije obrade signala, wavelet-transformacija, te primjene teorije kaosa i fraktalne geometrije u obradi signala. Razmatrane su metode optimalne obrade elektroničkih i optoelektroničkih signala radi minimizacije pogreške mjerenja njihovih parametara: amplitude i vremena dolaska, odnosno kašnjenja. Prikazan je jedan novi tip elektroničkog sklopa timing filter-timing discriminatora, koji daje rezultate blizu teoretskog optimuma. Sistem je osobito pogodan za mjerenje udaljenosti metodom vremena proleta (time-of-flight) relativno sporih optoelektroničkih pulsnih signala. Metoda vremenske analize stohastičkih impulsnih signala primjenjena je kod mjerenja svojstava metastabilnosti FIFO memorija u asinhronim digitalnim sustavima, te procjeni točnosti mjerenja vremena kašnjenja laserskog impulsnog signala.

U obradi podataka o atenuaciji gama zraka razvijena je reprezentacija Secant integrala, koja uključuje nekompletne gamma funkcije, preko brzo konvergentnog beskonačnog niza. Izvedene su opće rekurentne relacije, koje omogućuju točno računanje integrala za negativne „a“ vrijednosti.

Implementirana je metoda brojanja kvadrata (box counting) za određivanje fraktalne i generalizirane dimenzije „čudnih“ (strange) atraktora koja koristi algoritam Liebovich-Toth. Metoda je primjenljiva za analizu vremenskih nizova. Kao konkretni primjeri obrađeni su: logistic map, Henonov atraktor i trokut Sierpinskog. U analizi 2D i 3D oblika (struktura) završena je detaljna analiza vrtložnih filamenata na metalima induciranih nanosekundnim laserskim impulsima.

Istraživanje optimizacije obrade i analize podatkovnih struktura rezultiralo je u novoj metodi pohranjivanja velikih leksikona. Prikazana je vrlo efikasna, sa stanovišta brzine pristupa i kapaciteta, podatkovna struktura za pohranu velike baze podataka (rječnika) prirodnog jezika. Struktura je korištena za pohranu kompleksnog leksikona francuskih riječi, DELAF, vrlo velikog kapaciteta.

Research programme and results:

The research covered by the grant is two side oriented: measurement and analysis of stochastic signal parameters as well as processing of 1D and 2D stochastic signals for optimization; improvement of methods of stochastic processes analysis as well as improvement of algorithms for analysis of data (trie) structures.

Work was proceeded on comparative characteristics analysis of advanced methods in signal (time series) processing and classification: classic optimal processing methods, wavelet transformations, as well as application of chaos theory and fractal geometry in signal processing.

Methods of optimal processing of electronic and optoelectronic stochastic pulse signals, minimizing the error of measurement of their parameters, i.e. amplitude and time-delay were considered. A new type of electronic system timing filter-timing discriminator was described, which gives the results (timing resolution) close to the theoretical optimum. The system (circuit) is very applicable for distance measurements using time-of-flight measurement of slow optoelectronic pulse signals. Method of pulse timing analysis was applied in estimation of turn-on time-delay of laser pulse signal as well as in metastability characterization of clocked FIFO memories in asynchronous digital systems.

In the analysis of optimization of data processing, the problem of calculation of gamma-rays attenuation through shields was performed. A method of generalized secant integral representation involving incomplete Gamma functions, was introduced using fast convergent infinite series. Validity of such representation was established for zero and positive values of integral parameter "a". In addition, general recurrence relations are established that allow precise calculations of the integral for negative "a" values.

A method was implemented to compute the fractal and generalized dimensions for strange attractors, which uses box counting by the algorithm given by Liebovich and Toth. The method is also applicable for time series. By means of Mathematica programing, logistic map, Henon attractor and Sierpinski triangle were examined.

Analysis of 2D and 3D structures (fluid dynamics) obtained in interaction of high power nanosecond pulsed laser beam with metal, was completed.

In the area of optimal processing and analysis of data structures a new method for large lexicon storage, was analyzed in detail for further optimization. Very efficient, in terms of space and access speed, data structure for storing huge natural language data sets, was presented. Structure was used to store DELAF, a huge French lexicon with syntactical, grammatical and lexical information associated with each word.

VIZUALNA SUČELJA I TEHNOLOGIJA PRIJENOSA ZNANJA VISUAL INTERFACES AND KNOWLEDGE TRANSFER TECHNOLOGY

Voditelj teme: dr. sc. Karolj Skala

tel: ++385 1 4680212, skala@irb.hr

Suradnici na temi:

Amir Dubravić, magistar elektrotehnike, asistent

Darko Kolarić, magistar elektrotehnike, asistent

Karolj Skala, doktor tehn. znanosti, znanstveni savjetnik

Program rada i rezultati na temi:

Potvrđena je polazna teza da vizualno sučelje predstavlja hipermedijski podsustav koji se razvijau smjeru inteligentne interaktivnosti i adaptabilnosti visoke razine. Istraživana su vektorizirana, interaktivna eksperimentalna sučelja koja su programski izvedena.

Istraživana su eksperimentalna sučelja za prikaz MM baze podataka s spajanjem na SQL server preko ODBC-a i ASP-a.

Analiza multidiskretne daljinske detekcije slučajnog optičkog izvora. Provedena analiza očituje se u proširenju spektrometrijske metode kod multidiskretne detekcije, uvođenjem proširene dinamičke analize u vremenskoj domeni, kao dodatna nova mogućnost kvantitativnog određenja dinamičkih svojstvenih značajki optičkog izvora. Izvršena je optimalizacija parametara cjelovitog detekcijskog sustava kod prostorne, spektralne i vremenske diskretizacije, u svrhu postizanja maksimalne detektabilnosti slučajnog optičkog izvora. Određen je optimalni postupak ekstrakcije svojstvenih funkcija slučajnog optičkog izvora, primjenom algoritama koji koriste linearne integralne transformacije invarijantne jezgre. Obradena je nova metoda za određivanje proizvoljno zadane vremenske serije, zasnovane na specifičnom algoritmu automatske ortogonalizacije proizvoljne funkcije. Primjenom specifične konvolucije i obrade spektra definiran je algoritam određivanja kašnjenja (lag-time) umetnute (embedirane) funkcije u svrhu optimalnog prikaza putem atraktora vremenske serije u faznom prostoru, te detekcije i identifikacije kaotičnog ponašanja. Dobiveni rezultati eksperimentalno su potvrđeni. Provedeno je uspješno sudjelovanje u međunarodnim COST# 254 (Intelligent Video terminals) projektu i započet je rad u sklopu projekta COST# 276 (Information and Knowledge Management for Integrated Media Communication Systems).

Research programme and results:

The thesis that visual interfaces represent multidimensional hypermedia subsystems spreading into the infinity and developing in the direction of intelligent interactivity and adaptability of high level, has been confirmed. Vectored, interactive, experimental interfaces have been researched and programmed. Technology of displaying MM databases with the connection of an SQL server via ODBC and active servicing pages (ASP) has been checked by examination.

Methods of multispectral detection of a stochastic radiation source and a procedure of the extraction of characteristic values in a time, frequency and space range by the Morlet Haar's wavelet transformation have been developed. A new method of the arbitrarily given time series determination, based on the specific algorithm for automatic orthogonalization of the arbitrary function has been treated. Algorithm for lag time determination of the embedded function has been determined by specific convolution and spectrum processing for the purpose of an optimum display by a time series attractor within a phase space as well as detection and identification of chaotic behaviour by Poincare's cross-section.

Our active participation in European Association for Microprocessing and Microprogramming and the participation in EU COST 254 international project - Intelligent Video Terminals have been realized and also our work in COST 276 project - Information and Knowledge Management for Integrated Media Communication Systems has begun.

Nakon 30. 6. 2002. u okviru Zavoda provodila su se istraživanja u okviru sljedećih znanstvenoistraživačkih projekata:

**AUTOMATIZIRANO OTKRIVANJE ZNANJA I RASUĐIVANJE
AUTOMATED KNOWLEDGE DISCOVERY AND REASONING**

Voditelj projekta: prof. dr. sc. Nikola Bogunović

Tel. ++385 1 6129-721, e-mail: Nikola.Bogunovic@irb.hr

Suradnici na projektu:

Dragan Gamberger, doktor rač. znanosti, viši znanstveni suradnik

Ivan Marić, doktor elektroteh. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tomislav Šmuc, doktor elektroteh. znanosti, znanstveni suradnik

Gordan Bosanac, dipl. inž. fizike, znanstveni novak

Suradnici iz drugih ustanova:

Nada Lavrač, doktorica teh. znanosti, viša znanstvena suradnica, Institut J. Stefan, Ljubljana, Slovenija

Janos Sztipanovits, doktor elektroteh. znanosti, redovni profesor, Vanderbilt University, SAD

Bojan Jelaković, doktor med. znanosti, viši asistent, KB Rebro

Zdenko Sonicki, doktor med. znanosti, asistent, Škola narodnog zdravlja A. Štampar, Zagreb

Goran Krstajić, doktor med. znanosti, asistent, Stanica za bolesti srca, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Opći cilj ovoga projekta je istraživanje napredne strojne inteligentne obradbe informacija usmjerene prema pronalaženju integriranih automatiziranih postupaka otkrivanja i ekstrakcije pravilnosti i odnosa značajki u skupovima signala i podataka. Temeljem tako induciranih struktura poboljšali bi se dosadašnji ili izgraditili novi modeli sustava i procesa, t.j. generirale nove znanstvene spoznaje iz kojih se mogu izdvojiti one presudne za povećanje konkurentnosti hrvatskog gospodarstva i efikasnosti javnih i državnih službi. Modelski pristup omogućuje djelotvornije rasuđivanje o sustavima i procesima, posebice njihovu analizu, dijagnostiku, predikciju i optimiranje. Očekuje se da istraživanja na ovom projektu rezultiraju u poboljšanim i novim postupcima automatiziranog otkrivanja znanja i strojnog rasuđivanja, te da se, pored objavljivanja rezultata u relevantnim znanstvenim publikacijama, ti postupci validiraju i verificiraju na stvarnim skupovima podataka. Predloženo istraživanje ključno je za razvitak društva znanja jer iz postojećeg i novonastalog fundusa znanosti izrazitije nego do sada omogućuje odabir, oblikovanje i prijenos znanja presudnog za napredak gospodarstva, uz proširenje novonastalih spoznaja na veći broj stručnjaka različitih profila.

Istraživanja u području razvoja metoda i metodologije strojnog učenja rezultirala su u novom pristupu otkrivanja i opisivanja podgrupa, koji predstavlja značajan doprinos aktivnom induciranju i prikazivanju znanja iz podataka. Kao važan doprinos treba spomenuti i novi vizualni alat za prikaz podgrupa podataka u prostoru atributa. Primjenom ove metodologije na bazi podataka pacijenata koji boluju od koronarnih bolesti došlo se do 5 kvalitativno novih modela pacijenata koji mogu poslužiti za rano detektiranje oboljenja i njenu prevenciju.

Prošireno je i područje istraživanja grupe na analizu kompleksnih vremenskih serija, s naglaskom na nelinearne karakteristike (fraktalne karakteristike, entropija) EKG signala. Vrlo uspješno sudjelovanje na znanstvenom izazovu (Computers in cardiology challenge) organiziranom od strane Physionet-a, u okviru međunarodne konferencije

Computers in cardiology, na problemu modeliranja i karakterizacije rada srca, potvrda je odličnih početnih rezultata.

Povezivanje strojnog učenja i evolucijskog modela optimizacije jedna je od najnovijih paradigmi u računarstvu. Novi algoritam baziran na diferencijalnom evolucijskom modelu, namijenjen optimiranju proizvoljnih funkcija s ograničenjima proizvoljnog tipa, rezultat je istraživanja na tom području.

Istraživanja na području automatiziranog rasuđivanja o sistemima i procesima, orijentirana su na unificiranje kvalitativnih i kvantitativnih modela u otkrivanju stvarnih modela procesa. Kao rezultat, stvorena je preliminarna verzija objektno usmjerene programske arhitekture kao podrška odlučivanju i analizi specifičnog poslovnog procesa.

U području primjene novih programskih rješenja realiziran je napredni mjerni sustav s raspodijeljenim resursima za mjerenje protoka fluida. Novi projekt u sklopu razvoja napredne informatičke infrastrukture, koji polazi od ovih rezultata, ima za cilj stvaranje biblioteke međunarodnih standarda u obliku aktivnih mrežnih objekata.

Research programme and results:

The aggregated goal of this project is the investigation of advanced techniques of intelligent computer information processing aimed at integrated automated procedures for mining, discovery and extraction of structural patterns and property relations in signal and data sets. Based on the induced structures, new or improved models of systems and processes can be constructed, i.e. new scientific concepts can be generated. Model based approach allows for more proficient reasoning on systems and processes, particularly their analysis, diagnosis, prediction and optimization. It is expected that the research on this project will result in new or improved automated knowledge discovery and reasoning techniques that will be validated and verified on real-world problem data sets. The proposed research is essential for the evolution of knowledge society and economic growth because it enables a more direct acquisition and transfer of knowledge to specialists in various domains.

Research in the field of theory and methodology of machine learning resulted in a novel approach of subgroup discovery for actionable knowledge induction from databases. An important offspring of this research is also a visualization tool for the description of discovered subgroups in the attribute space. The application of this methodology resulted in development of five distinct models important for the coronary heart disease early detection and prevention.

This year the research in the machine learning and knowledge discovery is extended to the field of the time series analysis, with emphasis on non-linear dynamic measures (e.g. fractal dimensions, approximate entropy), with particular application on the analysis of heart rate variability. The successful participation in the international challenge organized by the Physionet, within the framework of distinguished conference Computers in Cardiology is a confirmation of excellent preliminary achievements.

Coupling of the machine learning and evolutionary computation is a hot topic in the computing science. Novel algorithm based on differential evolution combined with different constraint handling was built for solving general optimization problems.

Research on model based approach for reasoning on systems and processes was oriented to the unification of qualitative and quantitative methods in complex process model discovery. Preliminary component-based problem-oriented software architecture for data mining and decision making, was built.

In the area of applied research, work on novel software paradigms resulted in the realization of the advanced measurement system model with distributed resources for

the measurement of fluid flow. A new project that builds on these results (started within the scope of informatic infrastructure projects financed by the Ministry of Science and Technology of Croatia), has intention to implement the international standards in the form of active network objects.

ANALIZA STOHAŠTIČKIH SIGNALA, VREMENSKIH I PODATKOVNIH NIZOVA ANALYSIS OF STOCHASTIC SIGNALS, TIME SERIES AND DATA STRUCTURES

Voditelj projekta: dr. sc. Božidar Vojnović

Tel. ++385 1 468 00 90, e-mail: vojnovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Aleksandar Maksimović, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Branka Medved Rogina, doktorica tehn. znanosti, znanstvena suradnica

Ivan Michieli, doktor stroj. znanosti, znanstveni suradnik

Strahil Ristov, doktor rač. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Ivan Kontušić, samostalni tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Vladimir Brlić, doktor tehn. znanosti, Hrvatski Telekom, Zagreb (konzultant)

Zdravko Batinić, kardiolog, Magdalena - Klinika za kardiovaskularne bolesti Medicinskog fakulteta Sveuč. J.J. Strossmayer u Osijeku, Krapinske Toplice (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Generiranje, mjerenje, analiza i primjena stohastičkih signala, vremenskih nizova i podatkovnih struktura. Studija nelinearne dinamike i sistema.

Generiranje slučajnih signala, vremenskih serija odnosno kaotičkih signala, pomoću računala i generatora proizvoljnih valnih oblika (arbitrary waveform generator). Sinteza i razvoj elektroničkih sklopova za generiranje ultrabrzih (nanosekundnih i subnanosekundnih) impulsnih signala. Postupci modulacije determinističkim, stohastičkim i kaotičkim signalom radi moguće primjene u ultrabrzim i kaotičkim komunikacijskim sistemima. Poboljšanje razlučivosti mjerenja parametara slučajnih impulsnih senzorskih signala sa primjenom u tehničkoj i medicinskoj dijagnostici te robotici. Linearne i nelinearne transformacije (filtriranje) jedno i dvodimenzionalnih signala te vremenskih nizova. Analiza kaotičkih podataka, rekonstrukcije atraktora vremenskih nizova u prisustvu šuma, te separacija determinističkih fenomena od slučajnih. Studija nelinearnih dinamičkih sustava te struktura samoorganizirajućih procesa, valova nelinearne dinamike, te solitona u dinamičkim procesima i sistemima. Primjena vlastitih rezultata na sažimanju podatkovnih struktura na kompresiju složenijih i općenitijih tipova podataka. Studija obrade podatkovnih nizova i signala u bioinformatici.

Istraživanje uključuje generiranje, mjerenje i analizu stohastičkih signala, vremenskih nizova i podatkovnih struktura linearnih i nelinearnih sustava i dinamičkih procesa. Analiziran je utjecaj parametara stohastičkog pulsog signala na pogrešku određivanja vremena pojave pulsa za tri osnovna tipa vremenskih diskriminatora (leading-edge, constant-fraction, charge-balanced), na osnovi poznatih, odnosno procijenjenih parametara signala i diskriminatora. Pretpostavka linearnog vremena porasta prednjeg brida pulsog signala te «bijelog» Gaussovog šuma rezultirala je odstupanjem između eksperimentalnih i teoretskih rezultata od oko 10 %. Razvijen je sistem visoke

razlučivosti za mjerenje vremenskih intervala koji se koristi za procjenu pouzdanosti ultra brzih digitalnih sklopova, kao i određivanje njihovih prijelaznih karakteristika. Uvedena je metoda filtriranja signala korištenjem Mathematica programa, te primijenjene odgovarajuće statističke analize za odvajanje stohastičkih strujnih pulsnih signala iz osnovnog amperometričkog signala, u elektrokemijskom senzoru s MDE, kao i SMDE elektrodama

Uvedena je i analizirana metoda karakterizacije signala vremenskog niza uz prisustvo šuma kaotičnih atraktora, koja definira optimalni parametarski prostor za rekonstrukciju kaotičnih atraktora u okviru PCA metodologije. Metoda optimizira rekonstrukcijske parametre u pseudo-faznom prostoru upotrebom specifično definiranih linearnih i nelinearnih transformacija vezanih za dimenzionalnost atraktora i sadržaj šuma u podacima. Razvijena je metoda određivanja minimalne fazno-prostorne dimenzije kaotičnih atraktora primjenom i analizom konvergencije dinamičkih invarijanti sustava. Proučavane su strukture i samoorganizacioni procesi u laser-materijal interakciji, nelinearna valna dinamika, solitoni i različiti modeli nestabilnosti u dinamici fluida. Različiti modeli nestabilnosti i raspada mlaza na kapljice implementirani su u Mathematici.

Rad na kompresiji strukturiranih podataka, pretežito indeksa i leksikona, proširen je na kompresiju slobodnog teksta. Mogućnost adaptacije ranije razvijenih algoritama upotrebljena je pri izradi kompaktnih indeksnih struktura. Rezultat ovog rada je, između ostalog, i nova, obećavajuća metoda kompresije teksta.

Research programme and results:

Generation, measurement, analysis and application of stochastic signals, time series and data structures. Study of nonlinear dynamics and systems.

Generation of stochastic signals, time series and chaotic signals using PC and arbitrary waveform generator. Synthesis and development of electronic circuits for generation of ultra wide-band signals and modulation by deterministic, stochastic, and chaotic signals for possible application in ultra wide-band chaotic communication systems. Resolution improvement in measurement of sensor stochastic pulse-signal parameters, with application in technical and medicine diagnostics as well as in robotics. Linear and nonlinear transformations (filtering) of 1D and 2D signals and time series. Analysis of chaotic data, reconstruction of noisy time-series attractors and extracting the determinism from randomness. Study of patterns, structures and self-organizing processes in some physical nonlinear dynamic systems as well as solitons. Structured data compression applied to indexes and lexicons with extension to free text compression. Study of signal and structured data processing in bioinformatics.

Research activity covered generation, measurement and analysis of stochastic signals, time series and data structures in linear and nonlinear systems and dynamic processes. Influence of stochastic pulse-signal parameters on pulse timing-error was analysed for the three most known types of timing discriminators (leading-edge, constant-fraction and charge-balanced) on the basis of accessible or estimated data on signal and discriminator parameters. The assumption of linear rise of pulse leading edge as well as white Gaussian noise, gave discrepancy between experimental and theoretical results in the range of 10 percent. High-resolution nanosecond time-interval measurement system was developed for reliability estimation of ultra high-speed digital circuits as well as their transient characteristics. Filtering method, using Mathematica, and appropriate statistical analysis were introduced to separate stochastic current pulse signals from basic amperometric signal in electrochemical sensors with MDE as well as SMDE electrodes.

A method of noise related characterization of chaotic trajectories, that provides users with quantitative measure for adequate reconstruction of chaotic attractors, in the realm of PCA methodology, was implemented and analyzed. The method includes reconstruction and parameter optimization in principal component pseudo-phase space using specific linear and nonlinear dynamical measures, related to attractor's dimensionality and noise content in the data. Minimal attractor embedding dimension determination and calculation through dynamical invariants convergence analysis using «optimal» reconstruction was done.

We studied structures, patterns and self-organization processes in laser-material interaction, nonlinear wave dynamics, solitons and various models of nonlinear instability in fluid dynamics. Various models of nonlinear instability and breakup of liquid jet were implemented in Mathematica.

Work on structured data compression, mainly indexes and lexicons was extended to free text compression. The possibilities of adapting previously developed algorithms were used to produce the most compact indexing structure. Among other things a result of this is a promising new text compression method.

DETEKCIJA NESTACIONARNIH IZVORA I DISTRIBUIRANA OBRADA INFORMACIJA

DETEKCTION OF NON-STATIONARY SOURCES AND DISTRIBUTED INFORMATION PROCESSING

Voditelj projekta: dr. sc. Karolj Skala

Tel. ++385 1 468 0212, e-mail: skala@irb.hr

Suradnici na projektu:

Amir Dubravić, doktor tehn. znanosti, asistent

Darko Kolarić, doktor tehn. znanosti, asistent

Suradnici iz drugih ustanova:

Kálmán Fazekas, prof. dr., Technical University Budapest, Mađarska

Program rada i rezultati na projektu:

Daljinska detekcija elektromagnetskim valom u vremenu i prostoru nije dovoljno razvijena za nestacionarne, stohastičke i kaotične pojave i procese. Kod takvih slučajeva zbog nemogućnosti jednoznačne spoznaje o parametrima i varijablama signala, kao i funkcionalne formalizacije, detekcijski sustavi moraju biti distribuirani u vremenu i prostoru. Suvremene detekcijske i diskretne analitičke metode u vremenskom, prostornom i energetskom području omogućuju ekstrakciju informacija i stvaranje znanja iz kompleksnih signala.

Predloženo istraživanje predviđa znanstvenu razradu problema detekcijske i stvaranje spoznaje o optimalnom algoritmu ekstrakcije i interpretacije podataka i informacija, primjenom proširene spektrometrijske metode kod multidiskretne detekcije. To se provodi uvođenjem dinamičke analize u vremenskom području (domeni), kao dodatna nova mogućnost kvantitativnog određenja dinamičkih svojstvenih značajki nestacionarnih optičkih izvora zračenja.

Ciljna namjera je optimizirati cjeloviti detekcijski sustav kod prostorne, spektralne i vremenske diskretizacije, u svrhu postizanja maksimalne detektabilnosti nestacionarnog optičkog izvora elektromagnetskog zračenja.

Očekuje se da će znanstvenoistraživački primijenjeni projekt rezultirati novim znanjima u području detekcije i obrade signala, kao i tehnologijama iz područja detekcijskih sustava.

Kao značenje predloženog istraživanja uočava se izraziti rast interesa i evidentan napredak zbog novih saznanja i tehnologija u području detekcije i algoritamske računalne obrade informacije s jedne strane, te sve veće potrebe razvoja učinkovitog sustava daljinske detekcije vatre u cilju zaštite resursa (šuma) i očuvanja okoliša s druge strane. Predloženo istraživanje je značajno jer osim znanstveno tehnološke korisnosti ima izrazitu ulogu u stvaranju preduvjeta za unapređenje sigurnosti, očuvanju materijalnih resursa i ekosustava (ekologije) živog okoliša.

Istraživanjima je postignut dokaz da postoji opravdanost optimizacije detekcije nestacionarnih optičkih izvora koji imaju prirodan razvoj u prostoru i vremenu. Početak istraživanja se oslonio na stanje znanosti, primjenom postojeće znanstvene teorije i metode iz područja statističke detekcijske teorije, algoritamskog procesiranja signala i metode ekstrakcije informacije. Daljinska detekcija pomoću elektromagnetskih valova u vremenu i prostoru nije dovoljno razvijena za nestacionarne, stohastičke i kaotične pojave i procese. Zbog toga je nemoguće jasno odrediti parametre i varijable, i funkcionalna formalizacija detekcijskog sustava mora biti distribuirana u vremenu i prostoru. Suvremene detekcijske i diskretne analitičke metode u vremenskoj, prostornoj i energetske domeni omogućuju ekstrakciju informacija i znanja iz detektiranog kompleksnog signala. Istraživanja provode znanstvenu elaboraciju detekcijskog problema i stvaraju znanje o optimalnom algoritmu za ekstrakciju podataka i informacije, primjenom proširene spektrometerske metode kod multidiskretne detekcije. To je postignuto uvođenjem dinamičke analize u vremenskoj domeni, kao dodatnu novu mogućnost određivanja dinamičke karakteristike nestacionarnih optičkih izvora. Povećani interes prema novim detekcijskim tehnologijama i algoritamskog procesiranja signala ukazuje na važnost istraživanja i potreba za razvojem učinkovitog sustava za daljinsku detekciju i zaštitu okoliša od šumskog požara. Svrha započetih istraživanja je optimizacija detekcijskog sustava kod prostorne, spektralne i vremenske diskretizacije u svrhu postizanja maksimalnu detektibilnost kod nestacionarnih optičkih izvora elektromagnetnog zračenja.

Research programme and results:

Remote detection by electromagnetic wave in time and space is not sufficiently developed for non-stationary, stochastic and chaotic phenomena and processes. In such cases, due to inability of an unambiguous finding about signal parameters and variables, and functional formalization, detection systems must be distributed in time and space. Modern detection and discrete analytical methods in temporal, spatial and energetic fields enable information extraction and knowledge creation from complex signals. The proposed research anticipates a scientific elaboration of the detection problem and creation of knowledge about the optimum algorithm for data and information extraction and interpretation, by the application of the expanded spectrometric method with multidiscrete detection. That is done by introducing the dynamic analysis in the temporal field (domain), as an additional new possibility of quality determining of dynamic characteristic features of non-stationary optical radiation sources.

The purpose is to optimize the whole detection system in case of spatial, spectral and temporal discretizing for achieving of the maximum detectability of the non-stationary optical electromagnetic radiation source.

It is expected that the scientific-research applied project will bring new findings in the field of signal detection and processing, and technologies of detection systems. As the significance of the proposed research is noticed an increasing interest and a noticeable improvement of new findings and technologies in detection and algorithmic computer information processing, and a growing need for developing an effective remote fire

detection system for protecting the resources (forests) and preserving the environment. The proposed research is important because, beside the scientific-technological use, it has an exceptional role in creating of preconditions for improvement of safety, preserving of material resources and eco-systems (ecology) of the living environment.

The research tries to gain knowledge to prove the thesis about the feasibility of optimum detection of non-stationary stochastic radiation sources, which have natural development in space and time. The starting point is the state of science, with the use of the existing scientific theory and method from the field of the theory of statistic detection, algorithmic signal processing and the method for information extraction. Remote detection by electromagnetic wave in time and space is not sufficiently developed for non-stationary, stochastic and chaotic phenomena and processes. In such cases, due to inability of an unambiguous finding about signal parameters and variables, and functional formalization, detection systems must be distributed in time and space. Modern detection and discrete analytical methods in temporal, spatial and energetic fields enable information extraction and knowledge creation from complex signals. The research anticipates a scientific elaboration of the detection problem and creation of knowledge about the optimum algorithm for data and information extraction and interpretation, by the application of the expanded spectrometric method with multidiscrete detection. That is done by introducing the dynamic analysis in the temporal field (domain), as an additional new possibility of determining of dynamic characteristic features of non-stationary optical radiation sources. As the significance of the research is noticed an increasing interest and a noticeable improvement of new findings and technologies in detection and algorithmic computer information processing, and a growing need for developing an effective remote fire detection system for protecting the resources (forests) and preserving the environment. The purpose is to optimize the whole detection system in case of spatial, spectral and temporal discretizing for achieving of the maximum detect ability of the non-stationary optical electromagnetic radiation source.

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Gamberger, Dragan; Lavrač, Nada. Expert - guided subgroup discovery: methodology and application. // Journal of artificial intelligence research. 17 (2002), 501-527
2. Gamberger, Dragan; Lavrač, Nada; Krstačić, Goran. Confirmation rule induction and its applications to coronary heart disease diagnosis and risk group discovery. // Journal of intelligent & fuzzy systems. 12 (2002), 1; 35-48.
3. Lugomer, Stjepan; Maksimović, Aleksandar; Stipančić, Mladen. Growth of mo-oxide patterns by anomalous dynamic diffusion of cations. // Physica scripta. 65 (2002), 5; 447-453.
4. Michieli, Ivan; Vojnović, Božidar. On reconstruction of strange attractors using their noise related directional properties. // Signal processing. 82 (2002), 10;

1443-1453.

Knjiga i poglavlja u knjigama:

1. Skala, Karolj; Zelenika, Hrvoje; Nikolić, Ivan. Retrospective of distributed media server technology // Intelligent media communications / Najim, Mohamed; Ansonage, Michael (ur.). London: Kluwer Academic Publishers, 2002. 316-332.

Ostali radovi u časopisima:

1. Ristov, Strahil. Using inverted files to compress text. // Journal of computing and information technology CIT. 10 (2002), 3; 157-161.
2. Skala, Karolj. Poticaj tehnologijskom generičkom skoku. // Tehničke znanosti. 9 (2002), 4; 4-5.
3. Skala, Karolj; Kalapis Rokus. Multimediás élő szótár. // Debreceni szemle. 10 (2002), 2; 268-273.

Radovi u zbornicima skupova:

1. Bogunović, Nikola. Exploring the constraints in formal verification of communication and computing systems // IEEE MELECON 2002 proceedings / Younis, Mohamed (ur.). Piscataway, NJ, USA : IEEE, The Institute of Electrical and Electronics Eng., 2002. 173-177.
2. Bogunović, Nikola; Jagnjić, Željko; Jović, Franjo. Qualitative modeling of complex systems based on similarity calculus // Proceedings of the 16th european simulation multiconference, modelling and simulation 2002 / Amborski, Krzysztof; Meuth, Herman (ur.). Darmstadt: SCS Europe, 2002. 312-316.
3. Bogunović, Nikola; Jagnjić, Željko; Jović, Franjo. An efficient automated learning of qualitative process models // The 4th Asian conference proceedings / Wang, Qing G. (ur.) Singapore: Causal Productions, 2002. 2107-2111.
4. Bosanac, Gordan; Bogunović, Nikola. Nonlinear information processing in extracting predictive attributes of an ECG signal // The 6th world multiconference on systemics, cybernetics and informatics, Proceedings / Callaos, Nagib (ur.). Orlando : IIS, International Institute of Informatics and Systemics, 2002. 275-279.
5. Gamberger, Dragan; Lavrač, Nada. Descriptive induction through subgroup discovery: A case study in a medical domain // Proceedings of international conference of machine learning (ICML2002) / Sammut, Claude; Hoffman, Achim (ur.). San Francisco : Morgan Kaufmann Publishers, 2002. 163-170.
6. Gamberger, Dragan; Lavrač, Nada. Generating actionable knowledge by expert-guided subgroup discovery // Proceedings of 6th european conference on principles of data mining and knowledge discovery / Elomaa, Tapio; Mannila, Heikki; Toivonen, Hannu (ur.). Berlin : Springer, 2002. 163-174.

7. Gamberger, Dragan; Lavrač, Nada; Wettschereck, Dietrich. Subgroup visualization: A method and application in population screening // Proceedings of international workshop on intelligent data analysis in medicine and pharmacology (IDAMAP2002) at ECAI 2002 Conference / Lucas, Peter; Asker, Lars; Miksch, Silvia (ur.). Lyon : University of Helsinki , 2002. 31-36.
8. Kolarić, Darko; Skala, Karolj; Šćepanović, Tomislav. Low spectral density analysis by video extraction // Proceedings of electronics in marine ELMAR 2002 / Kos, Tomislav (ur.). Zadar : Croatian society electronics in marine-ELMAR, 2002. 146-150.
9. Kolarić, Darko; Skala, Karolj. Detekcijski sustav za rano otkrivanje šumskih požara // Zbornik radova međunarodnog znanstveno-stručnog savjetovanja vatrozaštita, protuprovala i videonadzor / Mišćević, Ljubomir (ur.). Zagreb: Europska stručna naklada-Graditelj, 2002. 131-137.
10. Lavrač, Nada; Gamberger, Dragan; Flach, Peter. Subgroup discovery for actionable knowledge generation: deficiencies of classification rule learning and lessons learned // Proceedings of the ICML-2002 Workshop on data mining lessons learned / Lavrač, Nada; Motoda, Hiroshi; Fawcett, Tom (ur.). Sydney: University of New South Wales, 2002. 48-55.
11. Medved Rogina, Branka. High-resolution timing measurement system // Proceedings of the design automation and test in Europe Conference, DATE 2002 / Sciuto, Donatella (ur.). USA: IEEE Computer Society, 2002. 212-216.
12. Michieli, Ivan; Vojnović, Božidar. A method of noise time-series characterization using singular value decomposition // MIPRO 2002 25th international convention / Biljanović, Petar; Skala, Karolj (ur.). Rijeka: MIPRO, 2002. 32- 36.
13. Ristov, Strahil. Using inverted files to compress text // Proceedings of the 24th conference on information technology interfaces / Glavinić, Vlado; Hljuz Dobrić, Vesna; Šimić, Diana (ur.). Cavtat: SRCE University Computing Centre, University of Zagreb, 2002. 443-447.
14. Šmuc, Tomislav; Marić, Ivan; Bosanac, Gordan; Gamberger, Dragan; Bogunović, Nikola; Krstačić, Goran. Dynamic features of the normal heart rate variability // Proceedings of international conference computers in cardiology 2002 / A. Murray (ur.). IEEE, 2002. 241-244.
15. Šmuc, Tomislav. Sensitivity of differential evolution algorithm to values of control parameters // Proceedings of the international conference on artificial intelligence / Arabnia, H.R.; Mun, Y. (ur.). USA: CSREA Press, 2002. 1087-1093.
16. Šmuc, Tomislav. Improving convergence properties of the differential evolution algorithm // Proceedings of the MENDEL 2002 - 8th international conference on soft computing / Maotušek, R.; Ošmera, P. (ur.). Brno : Brno University of Technology, 2002. 80-86.
17. Ujević, Filip; Bogunović, Nikola. An integrated intelligent system for data mining and decision-making // Proceedings of the 2002 international conference on

- intelligent engineering systems / Lovrenčić, Alen; Rudas, Imre A. (ur.). Zagreb: Faculty of Organization and Informatics, University of Zagreb, 2002. 287-292.
18. Ujević, Filip; Bogunović, Nikola. Enhancing the efficiency of data mining process by circular coupling of multiple schemes // 2002 MIPRO, Computers in technical systems and intelligent systems / Budin, Leo; Ribarić, Slobodan (ur.). Rijeka : HU MIPRO, 2002. 9-14.
 19. Vojnović, Božidar. Error minimization of sensor pulse signal delay-time measurements // Proceedings of MIEL 2002, 23rd international conference on microelectronics / Stojadinović, N. (ur.). Piscataway, NJ: IEEE - Electron Devices Society, 2002. 265-268.
 20. Vojnović, Božidar; Medved Rogina, Branka. Measurement of noise influence on resolution of ultra fast timing discriminators // Proceedings of the 25th international convention MIPRO'02, conference on microelectronics, electronics and electronic technologies / Biljanović, Petar; Skala, Karolj (ur.). Rijeka : MIPRO, 2002. 37-40.
 21. Wendling, Ernest; Skala, Karolj. Analysis of IP and optical technologies convergence // Proceedings of the multimedia and hypermedia systems / Biljanović, Petar (ur.). Rijeka: MIPRO, 2002. 86-89.

Doktorske disertacije:

1. Dubravić, Amir. Analiza i interpretacija biomehanike lokomotornog sustava. Zagreb: Fakultet elektrotehnike i računarstva, 7.7.2002, 115 str., Voditelj: Šantić, Ante.
2. Kolarić, Darko. Analiza multidiskretne daljinske detekcije slučajnog optičkog izvora. Zagreb: Fakultet elektrotehnike i računarstva, 3.11.2002, 185 str., Voditelj: Skala, Karolj.

Diplomski radovi :

1. Bjelopetrović, Radomir. Poboljšanje strojnog učenja razvrstavanja kombinacijom algoritama. Zagreb: Fakultet elektrotehnike i računarstva, 17.4.2003, 63 str., Voditelj: Bogunović, Nikola.
2. Mrđa, Branislav. Oblikovanje interaktivnih mrežnih usluga zasnovanih na proširenoj Java Servlet tehnologiji. Zagreb: Fakultet elektrotehnike i računarstva, 17.4.2003, 94 str., Voditelj: Bogunović, Nikola.
3. Kerkez, Zoran. Oblikovanje informacijskih sustava zasnovanih na XML standardu. Zagreb: Fakultet elektrotehnike i računarstva, 11.7.2002, 70 str., Voditelj: Bogunović, Nikola.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

Maksimović, A.: Organizacija površine inducirana laserskim impulsima, 26.9.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

DESIGN AUTOMATION AND TEST IN EUROPE CONFERENCE, DATE 2002

Pariz, Francuska, 4-8.3.2002.

Sudionica: Medved Rogina, B.

Prilog:

Medved Rogina, B. High-resolution timing measurement system, predavanje

DATA COMPRESSION CONFERENCE

Snowbird, Utah, SAD, 2-4.4.2002.

Sudionik: Ristov, S.

Prilog:

Ristov, S.; Laporte, E. A method for compressing lexicons, poster

11TH IEEE MEDITERRANEAN ELECTROTECHNICAL CONFERENCE

Kairo, Egipat, 7-9.5.2002.

Sudionik: Bogunović, N.

Prilog:

Bogunović, N. Exploring the constraints in formal verification of communication and computing systems, predavanje

MEĐUNARODNO ZNANSTVENO STRUČNO SAVJETOVANJE VATROZAŠTITA,
PROTUPROVALA I VIDEONADZOR

Šibenik, Hrvatska, 9-11.5.2002.

Sudionici: Kolarić, D.; Skala, K.

Prilog:

Kolarić, D.; Skala, K. Detekcijski sustav za rano otkrivanje šumskih požara, predavanje

MIEL 2002, 23RD INTERNATIONAL CONFERENCE ON MICROELECTRONICS

Niš, Jugoslavija, 12-15.5.2002.

Sudionik: Vojnović, B.

Prilog:

Vojnović, B. Error minimization of sensor pulse signal delay-time measurements, poster

INTERNATIONAL CONVENTION MIPRO 2002

Opatija, Hrvatska, 20-24.5.2002.

Sudionici: Skala, K.; Vojnović, B.

Prilozi:

Michieli, I.; Vojnović, B. A method of noise time-series characterization using singular value decomposition, predavanje

Ujević, F.; Bogunović, N. Enhancing the efficiency of data mining process by circular coupling of multiple schemes, predavanje

Vojnović, B.; Medved Rogina, B. Measurement of noise influence on resolution of ultra fast timing discriminators, predavanje

Wendling, E.; Skala, K. Analysis of IP and optical technologies convergence, predavanje

6TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON INTELLIGENT ENGINEERING SYSTEMS -
INES 2002

Opatija, Hrvatska, 26-28.5.2002.

Prilog:

Ujević, F.; Bogunović, N. An integrated intelligent system for data mining and decision-making, predavanje

16TH EUROPEAN SIMULATION MULTICONFERENCE, MODELLING AND SIMULATION 2002

Darmstadt, Njemačka, 3-5.6.2002.

Prilozi:

Bogunović, N.; Jagnjić, Ž.; Jović, F. Qualitative modeling of complex systems based on similarity calculus, predavanje

MENDEL 2002 - 8TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON SOFT COMPUTING

Brno, Češka Republika, 5-7.6.2002.

Sudionik: Šmuc, T.

Prilozi:

Šmuc, T. Improving convergence properties of the differential evolution algorithm, predavanje

44TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ELECTRONICS IN MARINE - ELMAR-2002

Zadar, Hrvatska, 16-19.6.2002.

Sudionik: Skala, K.

Prilog:

Kolarić, D.; Skala, K.; Šćepanović, T. Low spectral density analysis by video extraction, predavanje

INTERNATIONAL CONFERENCE ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE

Las Vegas, SAD, 24-27.6.2002.

Sudionik: Šmuc, T.

Prilog:

Šmuc, T. Sensitivity of differential evolution algorithm to values of control parameters, poster

24TH CONFERENCE ON INFORMATION TECHNOLOGY INTERFACES

Cavtat, Hrvatska, 24-27.6.2002.

Sudionik: Ristov, S.

Prilog:

Ristov, S. Using inverted files to compress text, predavanje

INTERNATIONAL CONFERENCE OF MACHINE LEARNING (ICML2002)

Sydney, Australija, 8-12.7.2002.

Prilozi:

Lavrač, N.; Gamberger, D.; Flach, P. Subgroup discovery for actionable knowledge generation: deficiencies of classification rule learning and lessons learned, predavanje

Gamberger, D.; Lavrač, N. Descriptive induction through subgroup discovery: a case study in a medical domain, predavanje

6TH WORLD MULTICONFERENCE ON SYSTEMICS, CYBERNETICS AND INFORMATICS

Orlando, SAD, 14-18.7.2002.

Sudionik: Bosanac, G.

Prilog:

Bosanac, G.; Bogunović, N. Nonlinear information processing in extracting predictive

attributes of an ECG signal, predavanje

IDAMAP 2002 : INTELLIGENT DATA ANALYSIS IN MEDICINE AND PHARMACOLOGY 2002

Lyon, Francuska, 23.7.2002.

Prilog:

Gamberger, D.; Lavrač, N.; Wettschereck, D. Subgroup visualization: A method and application in population screening, predavanje

6TH EUROPEAN CONFERENCE ON PRINCIPLES OF DATA MINING AND KNOWLEDGE DISCOVERY

Helsinki, Finska, 19-23.8.2002.

Sudionik: Gamberger, D.

Prilog:

Gamberger, D.; Lavrač, N. Generating actionable knowledge by expert-guided subgroup discovery, predavanje

COMPUTERS IN CARDIOLOGY 2002

Memphis, SAD, 22-25.9.2002.

Sudionik: Šmuc, T.

Prilog:

Šmuc, T.; Marić, I.; Bosanac, G.; Gamberger, D.; Bogunović, N.; Krstajić, G. Dynamic features of the normal heart rate variability, predavanje

4TH ASIAN CONTROL CONFERENCE

Singapur, 25-27.9.2002.

Sudionik: Bogunović, N.

Prilog:

Bogunović, N.; Jagnjić, Ž.; Jović, F. An efficient automated learning of qualitative process models, predavanje

<http://www.irb.hr/zfk.html>

**ZAVOD ZA FIZIČKU KEMIJU
DIVISION OF PHYSICAL CHEMISTRY**

Dr. sc. Leo Klasinc, predstojnik zavoda

Tel. ++385 1 468 02 32; ++385 1 468 00 96, fax: ++385 1 468 02 45

e-mail: klasinc@joker.irb.hr

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za kemijsku kinetiku i atmosfersku kemiju, dr. sc. Dunja Srzić, voditeljica laboratorija

Laboratorij za radiokemiju, dr. sc. Nada Filipović-Vinceković, voditeljica laboratorija

Grupa za teorijsku kemiju, dr. sc. Aleksandar Sabljčić, voditelj grupe

Laboratorij za kemijsku i biološku kristalografiju, dr. sc. Biserka Kojić-Prodić, voditeljica laboratorija

Laboratorij za magnetske rezonancije, dr. sc. Boris Rakvin, voditelj laboratorija

Laboratorij za analitičku kemiju, dr. sc. Ivan Habuš, voditelj laboratorija

Tajništvo, Albina Baruškin, tajnica

U okviru Zavoda za fizičku kemiju do 30. 6. 2002. provodila su se istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

**STRUKTURA I DINAMIKA SINTETIČKIH I BIOLOGIJSKIH TVARI
STRUCTURE AND DYNAMICS OF SYNTHETIC AND BIOLOGICAL SUBSTANCES**

Direktor programa: akademik Nenad Trinajstić

Teme u sastavu programa:

Sastav, svojstva i dinamika plinskih sustava, dr. sc. Tomislav Cvitaš, voditelj teme

Istraživanje homogenih i heterogenih sustava, dr. sc. Nada Filipović-Vinceković, voditeljica teme

Reaktivnost i reakcijski mehanizmi, dr. sc. Leo Klasinc, voditelj teme

Istraživanje statičkih i dinamičkih svojstava molekula, dr. sc. Aleksandar Sabljčić, voditelj teme

Razvoj i primjena modela u kemiji, akademik Nenad Trinajstić, voditelj teme

Struktura i bioaktivnost organskih i organometalnih spojeva, dr. sc. Ljerka Tušek-Božić, voditeljica teme

Struktura i svojstva (bio)molekula, dr. sc. Biserka Kojić-Prodić, voditeljica teme

Spektroskopska istraživanja lipoproteina, dr. sc. Greta Pifat-Mrzljak, voditeljica teme

Relaksacijski procesi feroelektrika i supravodiča, dr. sc. Boris Rakvin, voditelj teme

Istraživanja polimera metodama magnetske rezonancije, dr. sc. Zorica Vekseli, voditeljica teme

Studij međudjelovanja biomembrana s amino kiselinama, tripeptidima i peptidoglikanom metodama elektronske paramagnetske rezonancije na više frekvencija, dr. sc. Vesna Nöthig-Laslo, voditeljica teme

Program rada :

Suradnici Zavoda za fizičku kemiju su međunarodno priznati stručnjaci (eksperti) s iznimnim znanstvenim doprinosom u strukturalnoj kemiji, teorijskoj kemiji, različitim spektroskopijama, atmosferskoj kemiji, kemijskoj kinetici, modeliranju svojstava spojeva i materijala te kemijskoj i strukturalnoj analizi. Pored toga nekoliko istraživačkih grupa je proširilo istraživačku djelatnost i na različita područja bio-znanosti.

Istražuje se sastav zraka s obzirom na mikrokonstituente te njihova svojstva, transformacije i transport u atmosferi nad različitim područjima Hrvatske: kontinentalnim krajevima daleko od velikih izvora zagađenja i primorskim krajevima. Također se radi na ispitivanju strukturalnih, kinetičkih i termodinamičkih svojstava spojeva koji ulaze u atmosferu ili sudjeluju u izmjeni zrak-tlo ili zrak-voda. Nastavljena su istraživanja homogenih kemijskih reakcija u tekućoj i plinovitoj fazi te heterogenih reakcija u plinovito/čvrstim i plinovito/tekućim fazama koje su od

posebne važnosti za biološku aktivnost, kemijsku proizvodnju i istraživanje okoliša, a za koje reakcijski mehanizam nije poznat. Cilj tih istraživanja je pronaći u kojem se opsegu reakcijama može upravljati mijenjanjem uvjeta, odnosno koji dio zavisi isključivo o reaktantima. Primjer su istraživanja svojstva i reakcije radikal aniona prirodnih spojeva antioksidansnih svojstava (posebice flavonoida) odnosno pokušaj da se antioksidanska aktivnost objasni uz pomoć kvantno-kemijskih računa spinske gustoće u njima. Kombinacijom fotoelektronske spektroskopije i kvantno-kemijskih računa studirana je elektronska struktura važnih skupina prirodnih spojeva (npr. seskviterpena) te njezin utjecaj na biološku aktivnost. Metodama rendgenske difrakcije i računalne kemije, molekularne kompjutorske grafike, te spektroskopije kao i primjenom bioloških testova, prati se odnos molekularne strukture i ponašanja biološki aktivnih spojeva i njihovih analoga. Prepoznavanje biološki aktivnih molekula na temelju karakterističnih strukturnih parametara, posebno aktivnog mjesta u molekuli ili njene (bio)aktivne konformacije, uz poznavanje njihovih fizičko-kemijskih svojstava, koristi se kao doprinos razumijevanju bioloških procesa na molekularnoj razini. Molekularno modeliranje, uključujući metode molekularne dinamike koje služe oponašanju eksperimentalnih uvjeta ili/i realnih uvjeta *in vivo*, čini sastavni dio pristupa molekularnog prepoznavanja; rabi se u izučavanju dinamike konformacijskih promjena molekula i vezivanja supstrata i inhibitora u aktivno mjesto bakterijskih lipaza. EPR i fluorescentna spektroskopija su korištene u istraživanju odnosa strukture i funkcije lipoproteina iz ljudske plazme. Cilj istraživanja je odrediti složenu strukturu ovih supramolekularnih sustava te njihov utjecaj na patologiju različitih bolesti (ateroskleroze, dijabetesa). Lipozomi s ugrađenim biomolekulama koriste se za prijenos farmakološki aktivnih tvari kroz krv do ciljanih stanica. Za razvoj efikasnih metoda prijenosa od primarnog je značaja proučavanje fizikalno-kemijske prirode interakcija farmakološki aktivnih biomolekula, amino kiselina, peptida i njihovih kompleksa bakra s lipozomima. Za proučavanje tako kompleksnih supramolekularnih sustava korištena je EPR spektroskopija. Razvijan je opći matematički formalizam za efikasan i točan opis interakcije kvantnih sustava. Cilj je razviti matematički formalizam koji će dati točne rezultate i za jake interakcije te opisati statička i dinamička svojstva kvantnih sustava koji su u interakciji. Formalizam bi trebao omogućiti detaljnu analizu i opis interakcije molekule s elektromagnetskim poljem molekule na površini kristala ili čvrstog tijela, molekule koja se nalazi u otopini s otapalom, itd. U istraživanju nisko energijskih sudara atoma i molekula proučavan je potencijal za sustav Ar-HF budući da za njega ne postoje pouzdani podaci. Nastavljen je rad na klasičnom relativističkom računu dinamike elektrona u elektromagnetskom ravnom valu uz uključenje reakcijske sile zračenja. Danas je moguće primjenom naprednih metoda kvantne-kemije i kvantne-dinamike direktno istraživati ultrabrze intermolekularne procese i kemijske reakcije. Multikonfiguracijskim metodama (CASSCF i CASPT2) istraživani su struktura i elektronska svojstva reaktanata, pred-reakcijskih kompleksa, prijelaznih stanja i produkata za reakcije ozona s etanom, fluoretanom i kloretnom te termodinamički i kinetički parametri tih reakcija. Tijekom 2002. godine istraživani su spektroskopija i dinamika intramolekularne vodikove veze u malonaldehidu i acetilacetonu, a rađeno je i na analitičkom oblikovanju multirezonantnih laserskih pulseva namijenjenih kontroli prijenosa populacije u kvantnim sustavima. Algoritam za izbor najznačajnijih varijabli/deskriptora u linearne i nelinearne regresijske modele nadograđen je, poboljššan i uspoređen s alternativnim metodama za izbor deskriptora. Razvijeni modeli za predviđanje viskoznosti i topljivosti molekula i za predviđanje udjela sekundarne strukture u topljivim proteinima značajno su pojednostavljeni i poboljšani. Istraživana je mogućnost optimizacije topoloških deskriptora. Topologija umreživanja ugljikovih atoma u fullerene, nanocjevčice i srodne sustave uvelike određuje strukturu i svojstva ovih spojeva. Topološki postupci mogu se primjeniti u odabiru najplauzibilnijih izomera nanostrukture te određivanju njihovih geometrija. Dijelom smo riješili problem određivanja geometrija primjenom tzv. AME (Adjacency Matrix Eigenvectors) postupka. Istražuje se mogućnost numeričkog karakteriziranja DNA i segmenata od kemijskog i biološkog interesa. Također se istražuju paramagnetski defekti i njihova uporaba kao paramagnetskih proba u ispitivanju dinamike kristalne rešetke feroelektričnih i magnetskih sustava, te sintetičkih

makromolekula. Primijenit će se metoda elektronske spinske rezonancije (ESR) koja omogućuje istraživanja različitih tipova defekata u molekulskim strukturama te pruža uvid u dinamiku samog centra i okolnih atomskih i molekulskih skupina. Time je omogućeno dobro poznavanje mikroskopskih parametara koje je od temeljnog značaja za razumijevanje i predviđanje makroskopskih svojstava molekulskih sustava s uređenjem kratkog i dugog doseg. U feroelektricima s vodikovim vezama proučavana je mikroskopska osnova za detaljno razumijevanje faznog prijelaza između feroelektričnog i paraelektričnog stanja i fluktuacije polarizacije u paraelektričnoj fazi. EPR spektroskopijom proučavana je i dinamička heterogenost blok-kopolimera u ovisnosti o duljini blokova i tipu otapala te polimernih smjesa temeljenih na komponentama modificiranim funkcionalnim skupinama koje omogućuju stvaranje vodikovih veza. Istraživanja novih kompleksnih spojeva s određenim strukturnim i biološkim svojstvima usmjerena su na ispitivanje interakcije iona alkalnih i prijelaznih metala s esterima aminofosfonskih kiselina te različitih makrocikličkih i heterocikličkih spojeva koji mogu poslužiti kao modeli za biološke i biološki aktivne molekule. Istraživanja obuhvaćaju sintezu polidentatnih liganada koji sadrže N i O donorne atome i njihovih kompleksa, ispitivanje kemijskih i strukturnih svojstava tih spojeva te mehanizma reakcija kompleksiranja i stabilnosti kompleksa u otopini, krutom i plinovitom stanju. Biološka svojstva liganada i kompleksa ispituju se određivanjem *in vitro* antitumorske i antivirusne aktivnosti na staničnim kulturama ljudskog i životinjskog podrijetla. Nastavljena su laboratorijska istraživanja kompleksa aluminija i silicija s organskim ligandima od geokemijskog interesa kao i mjerenja ukupne žive i metil-žive u sedimentima Kaštelanskog zaljeva. Ispitivat će se sastav elemenata u tragovima u sedimentima i sedrama što može doprinijeti poznavanju njihovog geokemijskog ciklusa. Istraživanja kemije površinski aktivnih tvari su usmjerena na studiranje odnosa strukture molekula i dinamike samoorganiziranja u supramolekule (monosloj, micelle, vezikule, liotropni tekući kristali) u vodenim otopinama, te na određivanje strukturnih i termičkih svojstava njihovih kristala (polimorfizam, termotropni tekući kristali). Istraživanja kemije slobodnih radikala obuhvaćaju istraživanje fizičko-kemijskih svojstava, kinetike i reakcijskih mehanizama procesa u kojima sudjeluju slobodni radikali. Studirano je i ponašanje esencijalnih i toksičnih metala u modelnim sustavima važnim za procese u biljkama. Pored intenzivnog znanstvenog rada Zavod za fizičku kemiju nudi i slijedeće servisne usluge: (i) analiza bubrežnih kamenaca FT-IR spektroskopijom, (ii) organsku mikroanalizu (ugljik, vodik, dušik, sumpor, klor i brom) i (iii) procjena efikasnosti dispergatora za uklanjanje mrlja nafte s površine mora.

Pored iznimne znanstvene produktivnosti, suradnici Zavoda za fizičku kemiju su dali veliki doprinos obrazovanju i na dodiplomskoj i na postdiplomskoj razini. Suradnici Zavoda imaju i bogatu tradiciju u organizaciji međunarodnih znanstvenih konferencija i ljetnih škola, tako da je od 1986. godine organizirano čak 28 skupova. Tijekom protekle godine članovi Zavoda su bili voditelji (predavači) 32 kolegija na dodiplomskoj i postdiplomskoj nastavi na Sveučilištima u Zagrebu, Rijeci, Splitu i Osijeku te su organizirali dvije međunarodne konferencije, 17. MATH/CHEM/COMP u Dubrovniku i 8. Brijunsku konferenciju "Space, Time and Life" na Brijunima.

Research programme:

Division of Physical Chemistry has expertise and exceptional research productivity in structural chemistry, theoretical chemistry, spectroscopy, atmospheric chemistry, chemical kinetics, modelling of substance properties and both physical and chemical processes, risk assessment, structural and chemical analyses. Furthermore, several research teams have also applied their expertise and extended their research activities into various areas of biosciences.

Current research in atmospheric chemistry involves investigation of trace constituents of air, their properties, transformation and transport in the atmosphere over the different regions of Croatia: continental remote regions and coastal areas. Structural, kinetic and thermodynamic properties are investigated for compounds that enter the atmosphere and contribute in air-soil and air-water exchange. Continuous efforts are made to study homogeneous chemical reactions with an unknown reaction mechanism in liquid and gaseous phase and

heterogeneous reactions in gas/solid and gas/liquid phases which are very important for biological activity, chemical production and environmental research. The main aim is to find to what extent a reaction can be guided by changing reaction conditions; in other words, which part depends exclusively on the reactants. An example of such study is the investigation on properties and reactions of natural compounds radical anions with antioxidant property (especially flavonoids) and the attempt to explain their antioxidant activity through quantum chemical calculations. A powerful combination of photoelectron spectroscopy and quantum chemical calculations has been used to resolve electronic structure of small natural products (e.g. sesquiterpenes) and its effect on their physiological activity. In structure-activity relationship studies of biologically active molecules and their analogues, X-ray diffraction analysis, computational chemistry methods, molecular computer graphics, spectroscopic methods and bioassays have been used. Molecular recognition approach, based on the characteristic structural parameters, particularly of the active site or bioactive conformations together with physico-chemical properties of the molecules studied have been used to study biological processes at the molecular level. Molecular modelling, including methods of molecular dynamics which can simulate experimental conditions and/or real parameters *in vivo*, is one of the elements of molecular recognition approach. Molecular dynamics simulations have been used to study conformational stability and substrate binding to the active site of a receptor. The structure-function relationship of human serum lipoproteins is studied by EPR and fluorescence spectroscopy to elucidate the complex structure of these supramolecular assemblies and their functions in the pathology of different diseases (atherosclerosis, diabetes). Liposomes with incorporated drugs are used as a delivery system for pharmacologically active molecules to the targeted cells. The study of physical and chemical nature of interactions of the pharmacologically active molecules, amino acids, peptides and their copper(II) complexes with liposomes is of special interest for development of the efficient delivery methods. EPR spectroscopy was used to study such complex supramolecular systems.

A general mathematical formalism is developed for describing interaction of an arbitrary finite quantum system with an arbitrary finite but known quantum system. This formalism is exact, produces correct results even for strong interaction between the two systems, and can be applied to describe static and dynamical properties of a system subject to such interaction. This formalism should enable a detailed description of the interaction of a molecule with electromagnetic field, a molecule with the surface or a solid state, a molecule in a solution with the solvent, etc. In the research on the low energy collisions of atom and molecule the potential for Ar-HF system was investigated since existing data are unreliable. The classical relativistic calculation of dynamics of the electron in the electromagnetic plane wave was investigated, including radiation reaction force. Today, it is feasible to study the ultrafast intramolecular processes and chemical reactions directly by the application of advanced quantum-chemical and quantum-dynamic methods. *Ab initio* multiconfigurational CAS-SCF and CASPT2 methods were employed to study the reaction mechanisms and kinetics of the gas-phase ozone additions to ethene, fluoroethene, and chloroethene. We have also investigated the spectroscopy and dynamics of the intramolecular hydrogen bond in malonaldehyde and acetylacetone as well as the specific type of multiresonant laser pulses that can be used to achieve very precise and complete population transfer between two arbitrary states connected by a cascade of dipole transitions in a general quantum system. Algorithm for selection of most important variables/descriptors in linear and nonlinear multiregression models was upgraded, improved and compared with alternative selection methods. Previously developed models for calculation of viscosity and solubility of molecules and for prediction of protein secondary structure content in soluble proteins were significantly simplified and improved. Possibility to optimize topological descriptors was investigated. Basic factors determining structure and properties of fullerenes, nanotubes and similar carbon cages is their topology, i.e. how carbon atoms are connected to build these structures. The topological methods could be also applied to select the most plausible isomers and to determine their geometry. The problem of geometry determination is partially solved by applying the so called AME (Adjacency Matrix Eigenvectors) method. The

possibility of numerical characterization of DNA and its segments of chemical and biological interest is examined.

The paramagnetic defects and their usage as paramagnetic probes in the study of dynamics of the crystal lattice of ferroelectric and magnetic systems as well as synthetic macromolecules have been investigated. Electron spin resonance (ESR) method which provides investigation of various types of defects in molecular structures and enables an insight into the dynamics of observed center including surrounding atomic and molecular groups will be used. By using this method a better understanding of microscopic parameters important for the prediction of macroscopic properties of molecular systems with short and long range order will be achieved. The new theoretical model for phase transition, suggested earlier, was employed to better describe microscopic origin of ferroelectric-paraelectric phase transition. The paramagnetic probes were also used to study the motional heterogeneity of segmented polyurethane-polymethacrylate in order to learn more on structural and dynamic heterogeneity of polymers, copolymers, polymer mixtures and interpenetrating polymer networks. The research programme comprises investigations of the novel complex compounds with specific structural and biological properties. Special attention is directed to the study of interactions of alkali and transition metal ions with derivatives of aminophosphonic acids as well as various macrocyclic and heterocyclic compounds, which are used as models for biological and biologically active molecules. The investigations include preparation of the polydentate ligands with N and O donor atoms as well as their complexes, determination of chemical and structural properties of these compounds and studying the mechanism of complexation reactions and stability of complexes in solution, gas and solid phase. The biological properties of ligands and complexes are examined by evaluation of their *in vitro* antitumor and antiviral activity on human and animal cell lines. Research has been continued on complexes of aluminium and silicon with organic ligands of geochemical significance as well as the measurements of total mercury and of methylmercury in the sediments of Kaštela Bay. Trace elements will be determined in sediments and tufa in an effort to better understand their geochemical cycles. The research in chemistry of the surfactants is focused on the relation between surfactant molecular structure and supramolecular organization (monolayers, micelles, vesicles, lyotropic liquid crystals) in aqueous solutions as well as to determine the structure and thermal phase transitions of surfactant crystals (polymorphism, thermotropic liquid crystals). The research in free radical chemistry covers physico-chemical properties, kinetics and reaction mechanisms of processes involving free radicals and excited molecules. The mobility of essential and toxic metals in plants has been studied on the model systems. Moreover, the Division also provides the following custom services: (i) FT-IR urinary calculi spectroscopic analysis, (ii) organic microanalysis (C, H, N, S, and halogens Cl, Br) and (iii) evaluation of oil spill dispersant efficiency.

In addition to the exceptional research productivity, the Division of Physical Chemistry has contributed extensively to undergraduate as well as to graduate education in Croatia. It has also rich tradition in the organization of international scientific conferences, workshops and summer schools; e.g. 28 conferences organized since 1986. During the last year Division members have provided 32 undergraduate and graduate courses at Universities in Zagreb, Split, Rijeka and Osijek as well as organized two international conferences, the 17th MATH/CHEM/COMP in Dubrovnik and the 8th Brijuni Conference "Space, Time and Life" at the Brijuni Islands.

SASTAV, SVOJSTVA I DINAMIKA PLINSKIH SUSTAVA COMPOSITION, PROPERTIES AND DYNAMICS OF GASEOUS SYSTEMS

Voditelj teme: dr. sc. Tomislav Cvitaš

Tel. ++385 1 46 80 232 e-mail: cvitas@joker.irb.hr

Suradnici na temi:

Tomislav Cvitaš, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Saša Kazazić, magistar kem. znanosti, asistent
Nenad Kezele, doktor. kem. znanosti, znanstveni suradnik
Katja Džepina, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Dunja Srzić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehnička suradnica:

Elena Vukoša, tehničar

Suradnica iz druge ustanove:

Ljiljana Paša-Tolić, doktorica kem. znanosti, Pacific National Laboratory, Richland, Washington, SAD

Program rada i rezultati na temi:

Tema istražuje sastav zraka s obzirom na mikrokonstituente te njihova svojstva, transformacije i transport u atmosferi nad različitim područjima Hrvatske: kontinentalnim krajevima daleko od velikih izvora zagađenja (npr. Medvednica) i primorskim krajevima (npr. Srđ). Istraživano je stvaranje, razgradnja i transport ozona i fotooksidansa na raznim lokacijama Hrvatske.

Research programme and results:

The programme involves investigation of trace constituents of air, their properties, transformation and transport in the atmosphere over the different regions of Croatia: continental remote regions (e.g. Medvednica) and coastal areas (e.g. Srđ). Formation, destruction and transport of ozone and photooxidants in different locations in Croatia have been investigated.

**ISTRAŽIVANJE HOMOGENIH I HETEROGENIH SUSTAVA
INVESTIGATION OF HOMOGENEOUS AND HETEROGENEOUS SYSTEMS**

Voditeljica teme: dr. sc. Nada Filipović-Vinceković
Tel. ++385 1 45 61 074 e-mail: filipovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Marija Bonifačić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Nataša Brajenović, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
Nada Filipović-Vinceković, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Lászlo Horvath, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Maja Sikirić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
Vlasta Tomašić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Maja Tonković, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Tehničke suradnice:

Nevenka Nekić, viša tehničarka
Biserka Špoljar, viša tehničarka

Suradnice iz drugih ustanova:

Marija Bujan, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, Agronomski fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Helga Füredi-Milhofer, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, Casali Institute of Applied Chemistry, Jeruzalem, Izrael
Ines Primožič, magistrica kem. znanosti, asistentica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Đurđica Težak, doktorica kem. znanosti, izvanredna profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Program rada i rezultati na temi:

Istraživanjem mehanizama međudjelovanja iona, molekula u osnovnom i pobuđenom stanju i slobodnih radikala u jednostavnim modelnim sustavima nastoji se postići bolje razumijevanje procesa u složenim sustavima od važnosti za biokemiju, kemijsku tehnologiju i zaštitu okoliša. Izbor modelnih sustava određen je zanimanjem za (i) istraživanje fizičko-kemijskih svojstava, kinetike i reakcijskih mehanizama slobodnih radikala i molekula u pobuđenom stanju u otopinama, (ii) istraživanje sustava s površinski aktivnim tvarima (PAT) (supramolekularno i molekularno organiziranje u vodenim otopinama, termički fazni prijelazi u čvrstom stanju, nukleacija i starenje biominerala iz otopina PAT) i (iii) istraživanje ponašanja metala u okolišu (topljivost, pokretljivost) pomoću novih i jednostavnih modelnih sustava. Istraživanja uključuju i razvoj novih analitičkih metoda. Prema glavnim pravcima istraživanja postignuti su slijedeći rezultati: Ad (i) Oksidativna degradacija halogeniranih aromata, najzastupljenijih zagađivala u okolišu, studirana je na primjeru 2,4,5-triklorofenola metodom radiolize u vodenim otopinama. Nađeno je da se hidroksilni radikali adiraju na aromatsku jezgru stvaranjem dvaju međuprodukata (C-6 i C-3 adukti) koji se znatno razlikuju u svojim redukcijskim potencijalima. Određen im je optički spektar, prinos i reaktivnost prema standardnom akceptoru elektrona. U nastavku istraživanja mehanizma dekarboksilacije amino kiselina mjerene su apsolutne konstante brzina reakcija i kinetički izotopni efekt za glicin, metilamin i etilni alkohol. Ad (ii) (a) Pripravljene su i karakterizirane nove generacije PAT; istražena su njihova svojstva samoorganiziranja u vodenim otopinama i adsorpcija na međupovršine. (b) Istraženo je nastajanje različitih faza i mezofaza u složenim sustavima s PAT. Variranjem koncentracije i molarnog udjela anionske i kationske komponente u smjesama suprotno nabijenih ionskih PAT, te ionska PAT i biopolimer suprotnog naboja, pripravljene su micelle i vezikule različitih oblika i veličina. (c) Istražena su strukturna i termička svojstva novih katanionskih PAT. Broj i vrsta faznih prijelaza određeni su elektrostatskim međudjelovanjima i geometrijskim parametrima. Ad (iii) Istraživanja utjecaja organskih liganada na otapanje minerala provedena su pomoću tankoslojne kromatografije organskih aromatskih molekula, koje sadrže karboksi i hidroksi skupine, na silikagelu impregniranom metalnim ionima i vodom kao razvijanjem. Sklonost kompleksiranja organskih liganada i metala sadržanog u modelnom mineralnom sloju iskazuje se u različitoj kromatografskoj pokretljivosti organske molekule na impregniranoj podlozi u odnosu na pokretljivost na neimpregniranom sloju. Istražena je pokretljivost metala (bakar, željezo, aluminij, kadmij, olovo) u biljci na modelnom sustavu koji oponaša staničnu stijenu biljnog ksilema. Istražen je utjecaj organskih kiselina, koje izlučuje korijen biljke, na pokretljivost metalnih iona kod različitih pH vrijednosti primjenom kromatografskih modelnih sustava. Rezultati dobiveni u ovakvim modelnim sustavima ukazuju na sličnost s rezultatima dobivenim u istraživanjima provedenim *in vivo*.

Research programme and results:

Investigation of interaction mechanisms between ions, molecules in ground and excited states and free radicals in simple model systems aims at gaining better understanding of processes taking part in more complex systems relevant for biochemistry, chemical technology and environmental protection. The main activities are focused on three subjects; (i) investigations of physico-chemical properties, kinetics and reaction mechanisms of free radicals and molecules in excited states in solutions, (ii) investigations of systems containing surfactants (supramolecular and molecular organization in aqueous solutions, thermal phase transitions in the solid state, nucleation and aging of biominerals from surfactant aqueous solutions), and (iii) investigations of metal states in nature (solubility, mobility) using new and simplified models. Investigations include also development of new analytical methods. According to the main areas of interest the following results have been obtained: Ad (i) Oxidative degradation of halogenated aromatics, the major environmental pollutants, has been studied on 2,4,5-trichlorophenol as a model compound by means of radiolysis of aqueous solutions. It has been found that hydroxyl radicals add to the aromatic nucleus by forming two transients (C-6 and C-3 adducts) that considerably differ in their reduction potentials. The transients were defined by their optical spectra, yields and reactivity toward a

standard electron acceptor. Investigation of the amino acids decarboxylation mechanism has been continued by measuring absolute rate constants and kinetics isotope effects for glycine, methylamine and ethyl alcohol. Ad (ii) (a) Novel surfactants were synthesized and characterized; their association behavior in aqueous solutions and adsorption at the interfaces were investigated. (b) Formation and coexistence of several phases and mesophases in complex systems with surfactants were examined. Differently shaped micelles and vesicles were prepared by varying the concentration and molar ratio of components in mixtures of oppositely charged surfactants, and surfactants and oppositely charged biopolymers. (c) Investigation of structural and thermal properties of novel catanionic surfactant crystals revealed that the number and type of phase transitions are determined by electrostatic and geometric factors. Ad (iii) Influence of organic ligands on the solubility of minerals was investigated by thin layer chromatography of aromatic compounds containing functional groups such as hydroxy and carboxy on silica gel impregnated with metal ions and tap water as eluent. The complexation ability of organic ligands with metal ions present in a model mineral layer is measured by their mobility capability on impregnated vs. non-impregnated layer. The investigations of metal ions mobility (copper, iron, aluminium, cadmium, lead) were performed on model system imitating cell wall of a plant xylem. Organic acids, such as malic, citric, and oxalic released from the plant roots are complexing agents for many essential and toxic metal ions and their influence on the mobility of metal ions has been also examined by paper chromatography in the tap water as mobile phase. Results obtained on model systems are comparable with those obtained *in vivo*.

REAKTIVNOST I REAKCIJSKI MEHANIZMI REACTIVITY AND REACTION MECHANISMS

Voditelj teme: dr. sc. Leo Klasinc

Tel. ++385 1 46 80 096 e-mail: klasinc@joker.irb.hr

Suradnici na temi:

Vjera Butković, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Snježana Kazazić, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Leo Klasinc, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Branka Kovač, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Marko Rožman, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak

Tehnički suradnici:

Robert Žegarac, tehničar

Lidija Prežec, peračica laboratorijskog suđa

Suradnici iz drugih ustanova:

Jasna Lovrić, doktorica kem. znanosti, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Igor Novak, doktor kem. znanosti, National University of Singapore, Singapore

Program rada i rezultati na temi:

Tema istražuje homogene kemijske reakcije u tekućoj i plinovitoj fazi te heterogene reakcije u plinovito/čvrstim i plinovito/tekućim fazama koje su od posebne važnosti za biološku aktivnost, kemijsku proizvodnju i istraživanje okoliša. Cilj teme bio je pronaći u kojem se opsegu nekom reakcijom može upravljati mijenjanjem uvjeta, odnosno koji dio zavisi isključivo o reaktantima.

Research programme and results:

The theme deals with homogeneous chemical reactions with an unknown reaction mechanism in liquid and gaseous phase and heterogeneous reactions in gas/solid and gas/liquid phases which are very important for biological activity, chemical production and environmental research. The main aim was to find to which extent a reaction can be

governed by changing conditions; in other words, which part depends exclusively on the reactants.

ISTRAŽIVANJE STATIČKIH I DINAMIČKIH SVOJSTAVA MOLEKULA RESEARCH ON STATIC AND DYNAMIC PROPERTIES OF MOLECULES

Voditelj teme: dr. sc. Aleksandar Sabljčić

Tel. ++385 1 45 61 089 e-mail: sabljic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Duje Bonacci, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak

Slobodan Bosanc, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Nađa Došlić, doktorica fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Ivan Ljubić, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak

Goran Kovačević, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak

Aleksandar Sabljčić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Tomislav Živković, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Program rada i rezultati na temi:

Napravljen je klasični relativistički račun dinamike elektrona u elektromagnetskom ravnom valu, koji uključuje reakcijsku silu zračenja. Sila postaje značajna za jaka polja, a kao posljedica masa mirovanja elektrona se mijenja. To se opaža kao jako nepravilan spektar zračenja elektrona. Istraživana je i kontrola prijelaza u sustavima s mnogo vlastitih stanja te je nađena efikasna metoda za kontrolu prijelaza. Razvijen je opći matematički formalizam za tretiranje interakcije proizvoljnog konačnog kvantnog sustava s proizvoljnim konačnim ali poznatim kvantnim sustavom. Taj formalizam daje točan rezultat i za jake interakcije, a može se primjeniti kako na opisivanje statičkih tako i na opisivanje dinamičkih svojstava sustava u interakciji. Formalizam bi trebao omogućiti detaljnu analizu i opis interakcije molekule s elektromagnetskim poljem, molekule s površinom kristala ili čvrstog tijela, molekule koja se nalazi u otopini s otapalom, itd. Modernim multikonfiguracijskim metodama (CASSCF i CASPT2) određeni su struktura i elektronska svojstva reaktanata, pred-reakcijskih kompleksa, prijelaznih stanja i produkata za reakcije ozona s etilenom, fluoretilenom i kloretilenom te termodinamički parametri tih reakcija. Dobro slaganje izračunatih s izmjerenim vrijednostima pokazuje da se predloženom metodologijom mogu točno izračunati termodinamički i kinetički parametri za reakcije koje uključuju multikonfiguracijske molekularne sustave. Tijekom 2002. godine istraživana su i spektroskopija i dinamika intramolekularne vodikove veze u malonaldehidu i acetilacetonu. Izračunati teorijski vibracijski spektri ukazuju na snažno sprežanje nisko frekventnih modova koji uključuju istezanje vodikove veze i visoko frekventnog istezanja OH (OD) veze.

Research programme and results:

Classical relativistic calculation of dynamics of the electron in the electromagnetic plane wave was investigated, including radiation reaction force. The impact of the force is important for very strong field, and the result is the change of the rest mass of the electron. This is manifested as highly irregular spectrum of radiation that is produced by the electron. Control of transitions in the systems with many eigenstates was investigated, and a method was found that enables to move their population in almost arbitrary way. A general mathematical formalism is developed for describing interaction of an arbitrary finite quantum system with an arbitrary finite but known quantum system. This formalism is exact, produces correct results even for strong interaction between the two systems, and can be applied to describe static and dynamical properties of a system subject to such interaction. This formalism should enable a detailed description of the interaction of a molecule with electromagnetic field, a molecule with the surface or a solid state, a molecule in a solution with the solvent, etc. *Ab initio* multiconfigurational methods are used to study the reaction mechanisms and kinetics of ozone additions to ethene, fluoroethene, and chloroethene up to the formation of

primary ozonides. Reaction paths were optimized at the CASSCF/cc-pVTZ level and the electron energies are refined by the CASPT2 method. The calculated rate constants and kinetic parameters are in close agreement with the experimental values. The theoretical spectra calculated for the intramolecular hydrogen bonds in malonaldehyde and acetylacetone show a strong coupling between low-frequency hydrogen bond stretching and the high-frequency hydroxyl group stretching modes.

RAZVOJ I PRIMJENA MODELA U KEMIJI DEVELOPMENT AND APPLICATION OF MODELS IN CHEMISTRY

Voditelj teme: akademik Nenad Trinajstić

Tel. ++385 1 46 80 095 e-mail: trina@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Darko Babić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Halka Bilinski, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Stanislav Frančišković-Bilinski, magistar oceanologije, asistent, znanstveni novak
Ante Graovac, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Bono Lučić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Sonja Nikolić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Iva Marija Tolić-Nørrelykke, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Ivana Vlah, profesorica kemije i biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Vanjski suradnik na temi:

Nenad Trinajstić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik, u mirovini

Suradnici iz drugih ustanova:

Dragan Amić, doktor kemijskih znanosti, izvanredni profesor, Poljoprivredni fakultet, Sveučilište u Osijeku, Osijek
Yoganand Balagurunathan, doktor matematičkih znanosti, Department of Electrical Engineering, Texas A&M University, College Station, Texas, SAD
Subhash Basak, doktor kemijskih znanosti, redoviti profesor, Natural Resources Research Institute, University of Minnesota, Duluth, Minnesota, SAD
Edward R. Dougherty, doktor matematičkih znanosti, redoviti profesor, Department of Electrical Engineering, Texas A&M University, College Station, Texas, SAD
Darko Hanžel, doktor fizičkih znanosti, "Jožef Štefan" Institute, Ljubljana, Slovenija
Károly Heberger, doktor kemijskih znanosti, Central Research Institute for Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences, Budimpešta, Mađarska
Alan R. Katritzky, doktor kemijskih znanosti, redoviti profesor, Center for Heterocyclic Compounds, Department of Chemistry, University of Florida, Gainesville, Florida, SAD
Istvan Lukovits, doktor kemijskih znanosti, Central Research Institute for Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences, Budimpešta, Mađarska
Alenka Mertelj, doktorica fizičkih znanosti, "Jožef Štefan" Institute, Ljubljana, Slovenija
Marjana Novič, doktorica kemijskih znanosti, znanstvena savjetnica, National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenija
Lionello Pogliani, doktor kemijskih znanosti, redoviti profesor, Department of Chemistry, University of Calabria, Rende, Italija
Milan Randić, doktor fizičkih znanosti, redoviti profesor, Department of Mathematics and Computer Science, Drake University, Des Moines, Iowa, SAD
Darko Tibljaš, doktor geoloških znanosti, docent, Mineraloško-petrografski zavod, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb
Marjan Vračko, doktor fizičkih znanosti, viši znanstveni suradnik, National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenija

Program rada i rezultati na temi:

Algoritam za izbor najznačajnijih varijabli/deskriptora, koji je razvijen tijekom rada na ovom projektu, nadograđen je i poboljšan uključanjem razvijenih podprograma za vanjsku provjeru modela. Razvijeni su jednostavni modeli za predviđanje kancerogenosti, toksičnosti i viskoznosti molekula. Uvedeni su i provjereni u primjenama u studijama odnosa strukture i svojstva novi molekularni deskriptori koji se računaju na temelju međusobnih udaljenosti atoma u molekulama. Istražene su mogućnosti pregradnje fullerenskih struktura. Uvedena je definicija planarne pregradnje kao transformacije pri kojoj ne dolazi do križanja veza koje pucaju i onih koje nastaju. Planarne pregradnje podijeljene su u podvrste i razmatrana su njihova osnovna svojstva. Mjerena su detaljna polja sila kojima žive stanice djeluju na svoju okolinu te je ispitana hipoteza o tensegričnosti stanice. Ispitivano je ponašanje žive u vodenom stupcu u estuariju rijeke Krke, te u sedimentima Kaštelanskog zaljeva i estuarijskim sedimentima rijeka Krke i Öre (sjeverna Švedska). Rezultati mjerenja zagađenja uspoređeni su s podacima za Trščanski zaljev i Minamata zaljev. Dovanjen je rad na manganu na dvije lokacije u Arizoni i Japanu.

Research programme and results:

Algorithm for selection of most important variables/descriptors developed in this project was upgraded and improved through inclusion of subroutines for external validation of models. Simple models for evaluation of carcinogenicity, toxicity and viscosity of molecules were generated. Some novel distance-related molecular descriptors were introduced and tested through their use in QSPR studies. Fullerene rearrangements were studied by introduction of planar rearrangement in which forming and breaking bonds do not cross each other. Planar rearrangements were subdivided and their basic properties were considered. Detailed maps of traction forces that living cells exert on their surroundings have been measured and cellular tensegrity hypothesis has been tested. Examining of mercury behavior in the water column of Krka River estuary and in sediments of Kaštela Bay and estuarine sediments of Krka River and Öre River (Northern Sweden) was performed. Results of measurements of pollution were compared with data for the Gulf of Trieste and Minamata Bay. The work on manganese is completed on two locations in Arizona and Japan.

**STRUKTURA I BIOAKTIVNOST ORGANSKIH I ORGANOMETALNIH SPOJEVA
STRUCTURE AND BIOACTIVITY OF ORGANIC AND ORGANOMETALLIC COMPOUNDS**

Voditeljica teme: dr. sc. Ljerka Tušek-Božić

Tel. ++385 1 45 71 217 e-mail: tusek@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Manda Ćurić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Dejan Plavšić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Ljerka Tušek-Božić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Vanjska suradnica na temi:

Henrika Meider, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, u mirovini

Suradnici iz drugih ustanova:

Ivanka Matijašić, doktorica kem. znanosti, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Milan Šoškić, doktor kem. znanosti, Agronomski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Istraživanja u okviru teme obuhvaćaju sintezu i karakterizaciju novih organskih i organometalnih spojeva od biološke i farmakološke važnosti. Kombinacijom eksperimentalnih i teorijskih istraživanja ispituje se utjecaj pojedinih strukturnih parametara na fizičko-kemijska svojstva i biološku aktivnost liganada i kompleksa. Provedena su planirana istraživanja biološki zanimljivih organskih liganada, kao što su različiti

organofosforni i makrociklički spojevi, te njihovih kompleksa s alkalnim i prijelaznim metalima. Dobiveni rezultati korišteni su za određivanje odnosa struktura-svojstvo/aktivnost spojeva i modeliranje tih odnosa molekulskim opisivačima. Predložen je novi indeks složenosti molekule koji uzima u obzir ne samo povezanost u molekuli i njoj bliske strukturne odlike već i simetriju molekule kao osnovu za razdiobu komponenata molekule na kojima se osniva mjera složenosti.

Research programme and results:

The research programme of the theme comprises synthesis and characterization of the novel organic and organometallic compounds of biological and pharmacological importance. A combination of experimental and theoretical investigations is applied to determine the influence of certain structural parameters on the physicochemical properties and biological activity of the ligands and their metal complexes. The planned investigations on the biological interesting organic ligands, such as various organophosphorus and macrocyclic compounds, as well as their complexes with alkali and transition metals, have been performed. The obtained results are applied for determination of structure-property/activity relationships and their modelling by the molecular descriptors. We put forward a new index of molecular complexity taking into account not only the connectivity and the closely associated structural features of molecular structure but also the symmetry of a molecule as the basis for the partitioning of molecular components considered for construction of the complexity measure of a graph.

STRUKTURA I SVOJSTVA (BIO)MOLEKULA STRUCTURE AND PROPERTIES OF (BIO)MOLECULES

Voditeljica teme: dr. sc. Biserka Kojić-Prodić

Tel. ++385 1 46 80 126 e-mail: kojic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Snježana Antolić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Branimir Bertoša, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak

Marija Herceg, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Biserka Kojić-Prodić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Ivana Leščić, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Marija Luić, doktorica geol. znanosti, viša znanstvena suradnica

Zoran Štefanić, dipl. inž. fizike, mlađi asistent

Sanja Tomić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Aleksandar Višnjevac, doktor kem. znanosti, viši asistent

Suradnice iz drugih ustanova:

Zrinka Banić-Tomišić, doktorica kem. znanosti, Istraživački institut Pliva, Zagreb

Jasenska Pigac, doktorica biotehnoških znanosti, Prehrambeno-biotehnoški fakultet,

Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Metodama rendgenske difrakcije i računalne kemije, molekularne kompjutorske grafike, te spektroskopije kao i primjenom bioloških testova, prati se odnos molekularne strukture i ponašanja biološki aktivnih spojeva i njihovih analoga. Prepoznavanje biološki aktivnih molekula (molecular recognition) na temelju karakterističnih strukturnih parametara, posebno aktivnog mjesta u molekuli ili njene (bio)aktivne konformacije, uz poznavanje njihovih fizičko-kemijskih svojstava, koristi se kao doprinos razumijevanju bioloških procesa na molekularnoj razini. Detaljno poznavanje molekularne strukture spojeva u kristalu i otopini omogućava praćenje i objašnjenje mehanizama kemijskih i bioloških reakcija realnih i modelnih sustava. Molekularno (kompjutorsko) modeliranje, uključujući metode molekularne dinamike koje služe oponašanju eksperimentalnih uvjeta ili/i realnih uvjeta *in vivo*, čini sastavni dio pristupa

molekularnog prepoznavanja; rabi se u izučavanju dinamike konformacijskih promjena molekula i vezivanja supstrata u aktivno mjesto bakterijskih lipaza. Veoma koncentrirano se radi na uvođenju metoda proteinske kristalografije i pratećih analitičkih metoda potrebnih za čišćenje proteina kao i složenih računskih pristupa za studij međudjelovanja supstrata i enzima i predviđanja enantioselektivnosti bakterijskih lipaza. Kako je novi projekt planiran u studenom 2001. godine i predan putem natječaja Ministarstvu znanosti i tehnologije, te prihvaćen u srpnju 2002, istraživanje je tijekom 2002. teklo u skladu s planom novog projekta. Naša istraživanja zacrtana su prema određenom cilju i planu te su se prema njemu odvijala kako je detaljno opisano u tekstu vezanom za novi projekt.

Research programme and results:

In structure-activity relationship studies of biologically active molecules and their analogues, X-ray diffraction analysis, computational chemistry methods, molecular computer graphics, spectroscopic methods and bioassays have been used. Molecular recognition approach, based on the characteristic structural parameters, particularly of the active site or bioactive conformations together with physico-chemical properties of the molecules studied have been used in study of biological processes at the molecular level. Detailed molecular architecture in the crystalline state and in solution has been used to understand chemical and biological reactions of real and model systems. Molecular (computer) modelling, including methods of molecular dynamics which can simulate experimental conditions and/or real parameters *in vivo*, is one of the elements of molecular recognition approach. Molecular dynamics simulations have been used to study conformational stability and substrate binding to the active site of bacterial lipases. The efforts have been concentrated on implementations of protein crystallography methods and required procedures for purification and characterisation of proteins, and complex computational approaches essential for studying enzyme-substrate interactions and predictions of enantioselectivity of bacterial lipases.

The new research project was planned in November 2001 and submitted to the Ministry of Science and Technology for evaluation, and accepted in July 2002; the research during 2002 was performed according to the new plan. Our research is focused towards the given plan described in the text for the new project.

SPEKTROSKOPSKA ISTRAŽIVANJA LIPOPROTEINA SPECTROSCOPIC STUDIES OF LIPOPROTEINS

Voditeljica teme: dr. sc. Greta Pifat-Mrzljak

Tel. ++385 1 45 61 127 e-mail: pifat@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Marina Ilakovac-Kveder, doktorica fiz. znanosti, znanstvena suradnica

Anita Kriško, dipl. inž. molekularne biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Greta Pifat-Mrzljak, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Suradnici iz drugih ustanova:

Jasminka-Brnjas Kraljević, doktorica fiz. znanosti, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Slavko Pečar, doktor kem. znanosti, Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana, Ljubljana, Slovenija

Milan Schara, doktor fiz. znanosti, "Jožef Štefan" Institute, Ljubljana, Slovenija

Program rada i rezultati na temi:

Proučavana su dinamička svojstva lipida na površini čestica lipoproteina velike gustoće (HDL) putem redukcije nitroksida askorbinskom kiselinom u spinski označenim česticama HDL₁ i HDL₃ metodom EPR-a. Pokazano je da su u tim procesima HDL₂ efikasnije od HDL₃ čestica što se može povezati sa njihovim protektivnim ulogama u aterogenezi.

Research programme and results:

The dynamic properties of surface lipids in high density lipoproteins (HDL) have been investigated by nitroxide reduction with ascorbic acid in spin labeled human HDL₂ and HDL₃ using EPR spectroscopy. It has been found that HDL₂ subfraction is more efficient in this reaction kinetics than HDL₃ which could be related to the difference in atherogenic protection between these two HDL particles.

**RELAKSACIJSKI PROCESI FERROELEKTRIKA I SUPRAVODIČA
RELAXATION PROCESSES OF FERROELECTRICS AND SUPERCONDUCTORS**

Voditelj teme: dr. sc. Boris Rakvin

Tel. ++ 385 1 46 80 194 e-mail: rakvin@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Dalibor Merunka, magistar fiz. znanosti, asistent, znanstveni novak
Boris Rakvin, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Antonije Dulčić, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Nadica Maltar Strmečki, dipl. inž. fizike, mlađa asistentica, Veterinarski fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Dalibor Paar, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Miroslav Požek, doktor fiz. znanosti, docent, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Program rada i rezultati na temi:

Program je bio orijentiran prema istraživanju magnetskih i mikrovalnih svojstava visoko temperaturnih supravodiča i istraživanju dinamike kristalne rešetke magnetskih feroelektričnih i ostalih modelnih sistema.

U proteklom razdoblju razvijen je novi model koji opisuje fazni prijelaz u KH₂PO₄-tipu feroelektrika. Istraživane su promjene u dinamici kristalne rešetke (kristala s vodikovom vezom) koje nastaju u okolini paramagnetskog centra. Dobiveni su dinamički parametri koji upućuju na razlike u dinamici CH₃ grupe vezane na paramagnetski centar u odnosu na grupe susjednih neoštećenih molekula. Razvijana je metoda za precizno mjerenje Q-faktora i rezonantne frekvencije mikrovalne šupljine.

Research programme and results:

The project was oriented toward investigation of magnetic and microwave properties of high temperature superconductors and crystal lattice dynamics of magnetic, ferroelectric and other model systems.

The new model for description dynamic properties of the phase transition based on the strong coupling model in the KH₂PO₄-type ferroelectric has been proposed. The change of the crystal lattice dynamics in the vicinity of a paramagnetic center was investigated. The obtained dynamic parameters for CH₃ motions clearly show difference in motional dynamics between the CH₃ group at the center and the groups in the vicinity of the center. The AC method for the precise measurement of Q-factor and resonance frequency of a microwave cavity has been developed.

**ISTRAŽIVANJE POLIMERA METODAMA MAGNETSKIH REZONANCIJA
STUDY OF POLYMERS BY MAGNETIC RESONANCE METHODS**

Voditeljica teme: dr. sc. Zorica Veksli

Tel. ++385 1 45 61 127 e-mail: veksli@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Mladen Andreis, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Jelena Čulin, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Srećko Valić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Zorica Veksli, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, u mirovini

Tehnička suradnica:

Liana Hölbling, viša tehničarka

Program rada i rezultati na temi:

Uporabom metoda magnetske rezonancije (ESR, NMR, metode probe) istraživana je dinamička i strukturna heterogenost polimera, kopolimera, polimernih mreža i smjesa na segmentnoj razini. Rezultati su omogućili razumijevanje složenog odnosa polimerne morfologije, faznog razdvajanja, faznih prijelaza i molekulske dinamike sa svojstvima polimera.

Određene su strukturne promjene polimernih mreža u ovisnosti o stupnju umreženja i uvjetima starenja. Ustanovljeno je kako nastajanje domenskih (nano) struktura u statističkim kopolimerima ovisi o sastavu kopolimera i mikrostrukтури lanca. U smjesama funkcionalnih polimera struktura i dinamička heterogenost i mješljivost komponenata kontrolirana je koncentracijom funkcionalnih skupina u širokom temperaturnom području.

Research programme and results:

Structural and motional heterogeneity of polymers, copolymers, polymer networks and polymer mixtures were investigated by magnetic resonance methods (ESR, NMR-molecular probe methods) at the segmental level. The results contributed to the understanding of a complex correlation between polymer morphology, phase transitions, phase separations and molecular dynamics and its properties.

Structural changes of polymer networks were determined depending on the extent of crosslinking and the aging conditions. The occurrence of domain structures on a nanoscale length of statistical copolymers was established and correlated with the copolymer composition and chain microstructure. In the functionalized polymer mixtures motional and structural heterogeneity and polymer-polymer interactions were controlled by the functional group concentrations in a wide temperature range.

STUDIJ MEĐUDJELOVANJA BIOMEMBRANA S AMINO KISELINAMA, TRIPEPTIDIMA I PEPTIDOGLIKANOM METODAMA ELEKTRONSKE PARAMAGNETSKE REZONANCIJE NA VIŠE FREKVENCIJA**INTERACTIONS BETWEEN BIOMEMBRANES AND AMINO ACIDS, TRIPEPTIDES AND PEPTIDOGLYCAN STUDIED BY ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE METHODS AT DIFFERENT FREQUENCIES**

Voditeljica teme: dr. sc. Vesna Nöthig-Laslo

Tel. +385 1 45 61 136 e-mail: laslo@faust.irb.hr

Suradnici na temi:

Krunoslav Miroslavljević, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak
Vesna Nöthig-Laslo, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Suradnici iz drugih ustanova:

Ruža Frkanec, magistrica kemijskih znanosti, Odsjek za radioimunologiju i razvoj, Odjel za istraživanje i razvoj, Imunološki zavod d.d., Zagreb
Nevenka Paulić-Balestrin, doktorica kem. znanosti, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

Rebecca Pogni, doktorica kem. znanosti, Department of Chemistry, University of Siena, Siena, Italija

Jasmina Sabolović, doktorica kem. znanosti, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

Marjeta Šentjerc, doktorica fiz. znanosti, EPR-centar, "Jožef Štefan" Institute, Ljubljana, Slovenija

Program rada i rezultati rada na temi:

Lipozomi s ugrađenim farmakološki aktivnim molekulama koriste se za prijenos kroz krv do ciljanih stanica. Za razvoj novih efikasnih metoda prijenosa od primarnog je značaja proučavanje fizikalno-kemijske prirode međudjelovanja lipozoma i odabranih biomolekula (peptidoglikan monomera, adamantiltripeptida, i bakrovih kompleksa s amino kiselinama, potencijalnim mimeticima za enzim superoksid dizmutazu, SOD). Za proučavanje tako kompleksnih sustava korištena je metoda elektronske paramagnetske rezonancije. U okviru zajedničkog istraživanja bakrovih kompleksa, potencijalnih mimetika za superoksid dizmutazu s grupom dr. Jasmine Sabolović (Instituta za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb) te s prof. R. Pogni (Odjel za kemiju, Univerzitet Siena, Siena, Italija) objavljeni su radovi:

1. J. Sabolović and V. Nöthig-Laslo, "The influence of amino acid side chains on water binding to the copper(II) in bis[N,N-dimethyl-L- α -isoleucinato]-copper(II): an EPR and molecular mechanics study", *Cellular and Molecular Biology Letters* 7 (2002) 151-154.
2. V. Nöthig-Laslo, N. Paulić, R. Basosi, R. Pogni, " Role of apically bound water molecule on aliphatic-aliphatic sidechain interactions in bis[N,N-dimethyl-L- α -isoleucinato]-copper(II) studied by EPR spectroscopy" *Polyhedron* 21 (2002) 1643-1649.

Research programme and results:

Liposomes with incorporated drugs are used as a delivery system to the targeted cells. In order to develop new and efficient delivery methods it is of special interest to study the physical and chemical nature of interactions between liposomes and biomolecules (peptidoglycan monomer, adamantiltripeptides, and copper(II) complexes, potential mimetics for the enzyme superoxide dismutase, SOD). The method of choice for the study of such complex systems is electron paramagnetic resonance spectroscopy. The study of copper(II) complexes with potential superoxide dismutase activity is in progress in collaboration with the group of dr. Jasmina Sabolović (Institute for medical research and occupational health, Zagreb).and in collaboration with prof. R. Pogni (Department of Chemistry, University of Siena, Siena, Italy). The papers were published:

1. J. Sabolović and V. Nöthig-Laslo, "The influence of amino acid side chains on water binding to the copper(II) in bis[N,N-dimethyl-L- α -isoleucinato]-copper(II): an EPR and molecular mechanics study", *Cellular and Molecular Biology Letters* 7 (2002) 151-154.
2. V. Nöthig-Laslo, N. Paulić, R. Basosi, R. Pogni, " Role of apically bound water molecule on aliphatic-aliphatic sidechain interactions in bis[N,N-dimethyl-L- α -isoleucinato]-copper(II) studied by EPR spectroscopy" *Polyhedron* 21 (2002) 1643-1649.

Nakon 1.7.2002. u Zavodu za fizičku kemiju provodila su se istraživanja u okviru slijedećih znanstvenoistraživačkih projekata:

SVOJSTVA I PONAŠANJE ATMOSFERSKIH MIKROKONSTITUENATA PROPERTIES AND BEHAVIOUR OF ATMOSPHERIC MICROCONSTITUENTS

Voditelj projekta: dr. sc. Tomislav Cvitaš

Tel. ++385 1 46 80 232 e-mail: cvitas@joker.irb.hr

Suradnici na projektu:

Vjera Butković, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica (50%)
Tomislav Cvitaš, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Katja Džepina, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (do 1.8.2002.)
Nenad Kezele, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Leo Klasinc, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik (30%)

Tehnički suradnici:

Elena Vukoša, tehničarka (50%)
Robert Žegarac, tehničar (50%)

Suradnici iz drugih ustanova:

Ana Alebić-Juretić, doktorica kem. znanosti, Zavod za javno zdravstvo, Rijeka
Zvezdana Klaić, doktorica fiz. znanosti, docentica, Geofizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Elvira Kovač, profesor kemije i biologije, mlađi asistent, Pedagoški fakultet, Osijek
Sasha Madronich, doktor kem. znanosti, National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado, SAD (konzultant)
Sean P. McGlynn, doktor kem. znanosti, Louisiana State University, Baton Rouge, Louisiana, SAD (konzultant)
Hrvojka Šunjić, magistrica biol. znanosti, Ministarstvo za zaštitu okoliša i prostorno uređenje, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Projekt istražuje sastav zraka s obzirom na mikrokonstituente te njihova svojstva, transformacije i transport u atmosferi nad različitim područjima Hrvatske: kontinentalnim krajevima daleko od velikih izvora (npr. Medvednica) i primorskim krajevima (npr. Srđ). Ispitivat će se strukturna, kinetička i termodinamička svojstva spojeva koji ulaze u atmosferu ili sudjeluju u izmjeni zrak–tlo ili zrak–voda. Istraživano je stvaranje, razgradnja i transport ozona i fotooksidansa na raznim lokacijama Hrvatske. Razrađivane su metode analize mikrosastojaka zraka, kompjutorske i statističke metode obrade rezultata, interpretacije mjerenja posebno u svezi s meteorološkim podacima i visinskim i daljinskim transportom. Istraživane su reakcije ligacije metalnih iona policikličkim aromatskim ugljikovodicima i/ili njihovim heterocikličkim analogima u plinskoj fazi. Fourierova transformacija (FT) primijenjena je na 12 europskih EUROTRAC/TOR postaja u analizi dugoročnih ozonskih podataka. FT analiza pokazuje inače teško prepoznatljive pravilnosti u dugom nizu podataka ozonskih mjerenja. Dobiveni su prvi rezultati za ozon u Osijeku. Postignuća su objavljena u znanstvenim časopisima s međunarodnom recenzijom koje pokriva Current Contents. Neki su radovi objavljeni u knjigama s međunarodnih znanstvenih skupova.

Research programme and results:

The project involves investigation of trace constituents of air, their properties, transformation and transport in the atmosphere over the different regions of Croatia: continental remote regions (e.g. Medvednica) and coastal areas (e.g. Srđ). Structural, kinetic and thermodynamic properties are investigated for compounds that enter the atmosphere and contribute in air–soil and air–water exchange. Formation, destruction and transport of ozone and photooxidants in different locations in Croatia have been investigated. Methods of analysis of trace constituents of air were worked out, together with computer and statistical method for analysis and interpretation of measurements in relation to meteorological data, and to high altitude and remote transport.

Fourier transformation was performed in analysis of long term ozone data for 12 European EUROTRAC/TOR stations.

FT analysis reveals regularities over the investigated period of time which are otherwise hard to discern in terms of frequencies *i.e.* repeating events. First ozone results from Osijek are obtained.

Results are published in international referred scientific journals quoted in Current Contents. Some articles are published in books from international scientific meetings.

POVRŠINSKI AKTIVNE TVARI, PROCESI U OTOPINAMA I NA MEĐUPOVRŠINAMA SURFACTANTS, PROCESSES IN SOLUTIONS AND INTERFACES

Voditeljica projekta: dr. sc. Nada Filipović-Vinceković

Tel. ++385 1 45 61 074 e-mail: filipovic@rudjer.irb.hr

Suradnice na projektu:

Marija Bonifačić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Nataša Brajenović, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Nada Filipović-Vinceković, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Maja Sikirić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Vlasta Tomašić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Maja Tonković, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Tehničke suradnice:

Nevenka Nekić, viša tehničarka

Lidija Prežec, peračica laboratorijskog suđa (25%)

Danijela Grabovac, dipl.inž. kemije

Suradnici iz drugih ustanova:

David A. Armstrong, doktor kem. znanosti, profesor emeritus, University of Calgary, Calgary, Kanada

Dieter-Klaus Asmus, doktor kem. znanosti, redovni profesor, University of Notre Dame, Notre Dame, SAD

Marija Bujan, doktorica kem. znanosti, docentica, Zavod za kemiju, Agronomski fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Helga Füredi-Milhofer, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, Casali Institute of Applied Chemistry, The Hebrew University of Jerusalem, Jerusalem, Israel

Drago Škrtić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik, National Institutes of Health, Washington DC, SAD

Đurđica Težak, doktorica kem. znanosti, izvanredni profesor, Fizičko-kemijski zavod, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Program rada i rezultati na projektu:

Interdisciplinarnim pristupom istražuju se površinski aktivne tvari (PAT), procesi u otopinama i na međupovršinama radi boljeg razumijevanja i predviđanja ponašanja složenih kemijskih, bio- i ekosustava. Istraživanja kemije PAT su usmjerena na studiranje odnosa strukture molekula i dinamike samoorganiziranja u supramolekule (monosloj, micle, vezikule, liotropni tekući kristali) u vodenim otopinama, te na određivanje strukturnih i termičkih svojstava kristala PAT (polimorfizam, termotropni tekući kristali). Istraživanja kemije slobodnih radikala obuhvaćaju istraživanje fizičko-kemijskih svojstava, kinetiku i reakcijske mehanizame procesa u kojima se pojavljuju slobodni radikali kao međuprodukti. Dio istraživanja obuhvaća studiranje esencijalnih i toksičnih metala u modelnim sustavima relevantnim za procese u biljkama. Prema glavnim pravcima istraživanja postignuti su slijedeći rezultati: (i) studiran je odnos strukture molekule i supramolekularno samoorganiziranje u vodenim otopinama nove generacije dimernih PAT (asimetrični PAT-blizanci). Najvažniji parametri koji određuju strukturu supramolekule PAT-blizanaca su priroda i duljina poveznika. Porastom duljine

hidrofobnog poveznika struktura supramolekule se mijenja od crvolikih do sferoidnih micela. Rezultati su objašnjeni bimodalnom raspodjelom ionskih grupa na međupovršini micela/otopina. Postavljen je mehanizam međudjelovanja u smjesama površinski aktivnih tvari i biopolimera suprotnog naboja. Jaka elektrostatska i hidrofobna međudjelovanja uzrokuju lamelarno uređenje kompleksa monomera PAT i biopolimera, te nastajanje velikih vezikula. Istraživanje amfotropnih svojstva pokazala su kompleksna termička svojstva katanionskih PAT; broj i vrsta faznih prijelaza ovise o elektrostatskim međudjelovanjima i geometriji molekula kationske i anionske PAT. (ii) mehanizmi reakcija oksidacije amina i amino kiselina u kojima sudjeluju radikali istražuju se u ovisnosti o njihovoj strukturi (napr. α - vs. β -alanin) i prirodi oksidirajućeg agensa (hidroksilni radikal, oksid radikal anion, antrakinon triplet). Predložena je nova metoda određivanja oksidativne stabilnosti biljnih ulja koja koristi *trans*- β -karoten kao indikator. Ispituju se reduktivni organski radikali kao sredstva za degradaciju halogeniranih aromata. (iii) istraživanja pokretljivosti metala u biljkama pokazala su da pokretljivost metala znatno ovisi o strukturi kompleksirajućeg liganda i kiselosti medija. Statističkom analizom sastava bubrežnih kamenaca pokazano je da su karakteristike urolitijaze u Hrvatskoj slične onima u razvijenim zemljama.

Research programme and results:

An interdisciplinary approach has been used to investigate surfactants, processes in solutions and at the interfaces for better understanding and predicting behavior of complex chemical, bio- and ecosystems. The part of the research concerning surfactants chemistry is primarily focused on the relation between surfactant molecular structure and supramolecular organization (monolayers, micelles, vesicles, lyotropic liquid crystals) in aqueous solutions. Some of our efforts are directed toward investigations of the structure and thermal phase transitions of surfactant crystals (polymorphism, thermotropic liquid crystals). The part of the research concerning free radical chemistry investigates physico-chemical properties, kinetics and reaction mechanisms of processes involving free radicals and excited molecules as intermediates. One part of the research comprises investigations of essential and toxic metals mobility in model systems relevant for processes in plants.

According to the main areas of interest the following results have been obtained: (i) Investigation of the relation between surfactant molecule structure and supramolecular selforganization has been performed on a novel generation of surfactants (the dissymmetric gemini surfactants). The most important parameters in determining the structure of gemini supramolecules are the nature and length of the spacer. The increase of the hydrophobic spacer length tends to change the supramolecular structure from wormlike to spherical micelles. The results can be ascribed to the bimodal distribution of head groups at the micelle/solution interface. Investigations of mixed oppositely charged surfactant and biopolymers have provided new insight into the multistep mechanism of interactions. Both, strong electrostatic and hydrophobic interactions are important for inducing lamellar ordering and giant vesicles formation. Investigations of amphotropic surfactant properties revealed complex thermal behavior of catanionic surfactants; the number and nature of phase transitions depend on the electrostatic effects and geometry of both, cationic and anionic surfactant molecules. (ii) We are studying the mechanisms of radical induced amines and amino acids oxidation reactions as a function of their molecular structure (e.g. α - versus β -alanin) as well as the nature of the oxidizing agent (hydroxyl radicals, oxide radical ion, anthraquinone triplet). A new method for the oxidative stability of vegetable oils determination has been proposed, which is using *trans*- β -carotene as an indicator. Reductive organic radicals are probed as agents for halogenated aromatic compounds degradation. (iii) Investigation of metals mobility in plants revealed the strong influence of the nature of the metal-ligand complexes and pH of medium. Statistic analysis of urinary stones has shown that the occurrence of urolithiasis in Croatia is similar to that in developed countries.

REAKTIVNOST I REAKCIJSKI MEHANIZMI REACTIVITY AND REACTION MECHANISMS

Voditelj projekta: dr. sc. Leo Klasinc
Tel. ++385 1 46 80 096 e-mail: klasinc@joker.irb.hr

Suradnici na projektu:

Vjera Butković, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica (50%)
Saša Kazazić, magistar kem. znanosti, asistent
Snježana Kazazić, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Leo Klasinc, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik (70%)
Branka Kovač, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Marko Rožman, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak
Dunja Srzić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehnički suradnici:

Elena Vukoša, tehničarka (50%)
Robert Žegarac, tehničar (50%)
Lidija Prežec, peračica laboratorijskog suđa (25%)

Vanjski suradnik na projektu:

Mato Orhanović, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik, u mirovini (konzultant)

Suradnici iz drugih ustanova:

Andreja Bakač, doktorica kem. znanosti, Iowa State University, Ames, Iowa, SAD
(konzultantica)
Jasna Lovrić, doktorica kem. znanosti, docentica, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu
(konzultantica)

Program rada i rezultati na projektu:

Projekt istražuje homogene kemijske reakcije u tekućoj i plinovitoj fazi te heterogene reakcije u plinovito/čvrstim i plinovito/tekućim fazama koje su od posebne važnosti za biološku aktivnost, kemijsku proizvodnju i istraživanje okoliša, a za koje reakcijski mehanizam nije poznat. Za mnoge se važne kemijske reakcije koje se odvijaju u raznim fazama (medijima) pretpostavlja na temelju kinetičkih i termodinamičkih parametara da imaju isti mehanizam. Obično je takav mehanizam slijed velikog broja koraka, elementarnih kemijskih reakcija, od kojih su samo neke posljedice prirodnog svojstva reaktanata tzv. intrinzičke reaktivnosti, a ostale ovise o uvjetima u kojima se reakcija događa. Cilj projekta je pronaći u kojem se opsegu nekom reakcijom može upravljati mijenjanjem uvjeta, odnosno koji dio zavisi isključivo o reaktantima.

U okviru projekta istražuju se:

kinetika i mehanizmi odabranih reakcija, spektroskopske i kompjutorske metode za praćenje vremenski zavisnih procesa te povezanost elektronske strukture i reaktivnosti.

A. Istraživane su kinetike i mehanizmi sljedećih reakcija:

1. ligacije metalnih iona policikličkim aromatskim ugljikovodicima i/ili njihovim heterocikličkim analogima u plinskoj fazi i mogućnost određivanja kinetičkih parametara;
2. reakcije organskih kompleksa kobalta i kroma s alifatskim radikalima u vodenoj otopini;
3. protoniranje i protonski afinitet dušikovih oksida i njihovih konjugiranih kiselina u plinskoj fazi;
4. nastajanja, raspada i transporta ozona u laboratorijskim uvjetima i u prizemnoj atmosferi na odabranim lokacijama u Hrvatskoj i drugim dijelovima Europe.

B. Razvijene su sljedeće metode:

(i) račun spinske gustoće radikala flavonoida i usporedba ESR spektara i antioksidansne aktivnosti tih spojeva. U posljednje vrijeme težište interesa se proteže i na generiranje, svojstva i reakcije radikal aniona prirodnih spojeva antioksidansnih svojstava (posebice flavonoida) i pokušaje da se antioksidansna aktivnost objasni uz pomoć kvantno kemijskih računa spinske gustoće u njima;

(ii) metoda za određivanje konstanti brzina reakcije u Fourier transformiranom spektrometru masa primijenjena je na reakcije jednostruko nabijenih kationa metala u plinskoj fazi;
(iii) izmjereni su spektri masa i određen je sastav niza prirodnih polimernih spojeva i njihovih sastavnih dijelova.

C. Metodom fotoelektronske spektroskopije te na temelju kvantno kemijskih računa za različite klase organskih spojeva dobivene su važne informacije o njihovoj elektronskoj strukturi. Ova se metoda uspješno rabi pri proučavanju intramolekulskih interakcija u velikim molekulama, poslužimo li se i usporedbom sa spektrima sličnih molekula. Uspješnost ove metode pri proučavanju fizikalnih svojstava relativno malih molekula iz skupine prirodnih spojeva pokazala se na primjeru seskviterpena. U kombinaciji s teorijskim računima moguće je povezati molekulsku i elektronsku strukturu s njihovom fiziološkom aktivnošću. Uporaba Hel i Hell fotoelektronskih spektara od velike je važnosti pri asignaciji elektronskih sustava. Pokazalo se to i pri proučavanju halogen-halogen interakcija u halometanima, posebno između različitih geminalnih atoma halogena. Opaženo cijepanje sustava koji potječu iz ionizacije orbitala slobodnih elektronskih parova broma, klora i joda posljedica su spin-orbit sprega i prostornih interakcija orbitala lokaliziranih na različitim halogenima i/ili različitih sigma-veznih orbitala. Drugi primjer uporabe Hel/Hell spektara odnosio se na proučavanje elektronske strukture polijodobenzena. Diazabiciklononani, koje možemo smatrati bitnim dijelom važnih alkaloida poput sparteina, važni su i kao mogući bidentatni ligandi. Stoga je nužno utvrditi njihovu konformaciju i intramolekulske interakcije. Spektri bispidina i bisbispidinskog makrocikla mogu se sa sigurnošću pripisati samo najstabilnijoj strukturi, dok sustav niske ionizacijske energije u N,N'-dimetil-bispidinu jasno pokazuje prisutnost smjese dvaju konformera u plinovitoj fazi.

Postignuća su objavljena u znanstvenim časopisima s međunarodnom recenzijom koje pokriva Current Contents.

Research programme and results:

The project deals with homogeneous chemical reactions with an unknown reaction mechanism in liquid and gaseous phase and heterogeneous reactions in gas/solid and gas/liquid phases which are very important for biological activity, chemical production and environmental research. For many important chemical reactions which take place in different phases the same mechanism is supposed on the basis of kinetic and thermodynamic parameters. Usually, this mechanism is a series of many steps, elementary chemical reactions, and only a few of them are the consequence of intrinsic reactivity, while others depend on reaction conditions. The main aim is to find to which extent a reaction can be governed by changing conditions; in other words, which part depends exclusively on the reactants.

Within this project following problems are investigated:

Kinetics and mechanism of selected reactions, spectroscopic and computer methods for time dependent processes and connection between electronic structure and reactivity.

A. Following reactions kinetics and mechanisms were investigated:

1. Reactions of metal ions with polycyclic aromatic hydrocarbons and/or their heterocyclic analogues in gaseous phase and possibility of kinetic parameters determination.
2. Reactions of cobalt and chromium organic complexes with aliphatic radicals in water solution.
3. Protonation and proton affinity of nitrogen oxides.
4. Formation, degradation and transport of ozone in the laboratory and in the boundary layer atmosphere on selected locations in Croatia and other parts of Europe.

B. Following methods were developed:

(i) Computations of spin densities for radical flavonoids and comparison of their ESR spectra and antioxidant activity. In the last time we extend our investigations to the generating, properties and reactions of natural compounds radical anions with antioxidant property (especially flavonoids) and we attempt to explain their antioxidant activity through quantum chemical calculations;

(ii) A method for determination of reaction rate constants in a Fourier transform mass spectrometry has been proposed and applied to reaction of unipositive metal ions in gas phase;

(iii) We have also measured the mass spectra of a large number of natural polymer compounds and their constitutional parts.

C. Using photoelectron spectroscopy and quantum chemical calculations for the different classes of organic compounds we have obtained important informations about their electronic structure. This method can be used successfully for studying intramolecular interactions in large molecules provided appropriate comparisons are made with the spectra of related compounds. This method was shown to be successful in characterization of physical properties of small natural product molecules such as sesquiterpenes. The results of combined spectroscopic and theoretical methods suggest the possibility of relating molecular and electronic structure to their physiological activity. The importance of using HeII in addition to HeI photoelectron spectra has shown its merit when assigning the electronic systems. One of the examples deals with halogen-halogen interactions in halomethanes, especially between different geminal halogens. The observed splittings in the bromine, chlorine and iodine lone pair ionizations reflect both the spin-orbit coupling and the spatial interactions between orbitals localized on different halogens and/or various sigma-bonding orbitals. Another example of HeI/HeII PE spectra included the analysis of electronic structure of polyiodobenzenes. Diazabicyclononanes, which can be considered an intrinsic part of important alkaloids such as sparteine, are important as bidentate ligands. Thus it is important to investigate their conformational arrangements and intramolecular interactions. The spectra of bispidine and bis-bispidine macrocycle can assuredly be interpreted in terms of their most stable structure. Instead, the low energy band of N,N'-dimethyl-bispidine provides clear evidence for the presence of a mixture of two conformers in the gas-phase. Results are published in internationally refereed scientific journals quoted in Current Contents.

ISTRAŽIVANJE KEMIJSKIH REAKTIVNOSTI I FEMTOSEKUNDNIH PROCESA INVESTIGATION ON CHEMICAL REACTIVITY AND ULTRAFast PROCESSES

Voditelj projekta: dr. sc. Aleksandar Sabljčić

Tel. ++385 1 456 10 89 e-mail: sabljic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Nađa Došlić, doktorica fiz. znanosti, znanstvena suradnica

Ivan Ljubić, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak

Goran Kovačević, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak

Aleksandar Sabljčić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehnička suradnica:

Biserka Špoljar, viša tehničarka

Suradnica iz druge ustanove:

Sanja Sekušak, doktorica kem. znanosti, PLIVA d.d., Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Danas je moguće primjenom naprednih metoda kvantne-kemije i kvantne-dinamike direktno istraživati ultrabrze intermolekularne procese i kemijske reakcije. Modernim multikonfiguracijskim metodama (CASSCF i CASPT2) određeni su struktura i elektronska svojstva reaktanata, predreakcijskih kompleksa, prijelaznih stanja i produkata za reakcije ozona s etilenom, fluoretilenom i kloretilenom te termodinamički parametri tih reakcija. Primjenom Eyring-ove teorije prijelaznog stanja izračunate su i konstante brzina reakcija za široko temperaturno područje ovih važnih troposferskih procesa. Dobro slaganje izračunatih s izmjerenim vrijednostima pokazuje da se predloženom metodologijom mogu točno

izračunati termodinamički i kinetički parametri za reakcije koje uključuju multikonfiguracijske molekularne sustave. Tijekom 2002. godine istraživana su i spektroskopija i dinamika intramolekularne vodikove veze u malonaldehidu i acetilacetonu. Izračunati teorijski vibracijski spektri ukazuju na snažno sprezanje nisko frekventnih modova koji uključuju istezanje vodikove veze i visoko frekventnog istezanja OH (OD) veze. Položaj, struktura i intenzitet vrpce OH istezanja u oba spoja posljedica su ovog sprezanja. Nadalje, rađeno je na analitičkom oblikovanju multirezonantnih laserskih pulseva namjenjenih kontroli prijenosa populacije u općenitim kvantnim sustavima. Specifično, postignuto je dobro slaganje između analitički i numerički optimiziranih pulseva u kontroli populacije HF rovibratora u osnovnom elektronskom stanju.

Research programme and results:

Today, it is feasible to study the ultrafast intramolecular processes and chemical reactions directly by the application of advanced quantum-chemical and quantum-dynamic methods. Ab initio multiconfigurational CASSCF and CASPT2 methods were employed to study the reaction mechanisms and kinetics of the gas-phase ozone additions to ethene, fluoroethene, and chloroethene up to the formation of the primary addition products (primary ozonides). Reactants, transition-state structures, and products were optimized, and harmonic vibrational frequencies were calculated at the CASSCF/cc-pVTZ level. For kinetic calculations, the electron energies of all the stationary points were further refined by utilizing the CASPT2 method with the optimized CASSCF/cc-pVTZ wave functions taken as the zeroth order. The rate constants and Arrhenius kinetic parameters were finally calculated in terms of the conventional transition-state theory. For all the reactions thus studied, close agreement is found with the experimental kinetics, which makes the future use of the same approach very promising. We have also investigated the spectroscopy and dynamics of the intramolecular hydrogen bond in malonaldehyde and acetylacetone. The theoretical spectra show evidence of strong inter-mode coupling. The position, shape and intensity of the OH (OD) bands in both compounds are consequences of the strong coupling between low-frequency modes that involve stretching of the hydrogen bond and the high-frequency OH (OD) stretching mode. Furthermore, we have initiated an in-depth analytical investigation on design of specific type of multiresonant laser pulses that can be used to achieve very precise and complete population transfer between two arbitrary states connected by a cascade of dipole transitions in the general quantum system. We have numerically investigated and confirmed our analytical results on the HF rovibrator in ground electronic state.

**RAZVOJ I PRIMJENA MODELA U KEMIJI I BIOINFORMATICI
DEVELOPMENT AND APPLICATION OF MODELS IN CHEMISTRY AND
BIOINFORMATICS**

Voditelj projekta: akademik Nenad Trinajstić
Tel. ++385 1 46 80 095 e-mail: trina@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Bono Lučić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Sonja Nikolić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Iva Marija Tolić-Nørrelykke, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Vanjski suradnik na projektu:

Nenad Trinajstić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik, u mirovini

Suradnici iz drugih ustanova:

Dragan Amić, doktor kem. znanosti, izvanredni profesor, Poljoprivredni fakultet, Sveučilište u Osijeku, Osijek
Subhash Basak, doktor kem. znanosti, redoviti profesor, Natural Resources Research Institute, University of Minnesota, Duluth, Minnesota, SAD

Ivan Bašić, doktor kem. znanosti, programer-informatičar, Istraživačko informacijski centar, PLIVA d.d., Zagreb
Karoly Heberger, doktor kem. znanosti, Central Research Institute for Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences, Budimpešta, Mađarska
Alan R. Katritzky, doktor kem. znanosti, redoviti profesor, Center for Heterocyclic Compounds, Department of Chemistry, University of Florida, Gainesville, Florida, SAD
Istvan Lukovits, doktor kem. znanosti, Central Research Institute for Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences, Budimpešta, Mađarska
Ante Miličević, dipl. inž. kemije, Zagreb, volonter
Damir Nadramija, magistar biokem. znanosti, rukovoditelj odjela, Istraživačko informacijski centar, PLIVA d.d., Zagreb
Marjana Novič, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenija
Milan Randić, doktor fiz. znanosti, redoviti profesor, Department of Mathematics and Computer Science, Drake University, Des Moines, Iowa, SAD
Takahiro Suzuki, doktor kem. znanosti, Research Laboratory of Resources Utilization, Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan
Marjan Vračko, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik, National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenija

Program rada i rezultati na projektu:

Dosadašnji rad na razvoju molekularnih deskriptora i računalnih programa za učinkovito modeliranje (izbor deskriptora) u kemiji i bioinformatičarstvu bit će objedinjen s radovima drugih istraživača u području računanja deskriptora i pronalaženje modela (programi CODESSA, DRAGON, Cerius2). Očekujemo da će objedinjavanje tih postupaka i njihova provjera i primjena rezultirati u povećanju učinkovitosti QSAR/QSPR (quantitative structure-activity/property relationships) postupaka. Metode razvijene u području kemijskog modeliranja bit će primijenjene i na probleme iz bioinformatike u modeliranju veze između primarne strukture proteina (slijeda aminokiselinskih ostataka u proteinu) i sekundarne i tercijarne strukture, funkcije, udjela sekundarne strukture i strukturalne klase u koju spada pojedini protein (alfa, beta ili miješana klasa). Pri tome će se koristiti velike baze proteinskih struktura kojima je poznata struktura, a na temelju tih baza računat će se deskriptori (frekvencije pojavljivanja aminokiselina, sličnost među proteinima, autokorelacija u pojavljivanju pojedinih aminokiselinskih ostataka). Izbor modela bit će proveden s programima za izbor malog broja najznačajnijih deskriptora. Podjela genetskog materijala na razini stanice i ispravna stanična dioba ovisi o ispravnom staničnom obliku i poziciji organela unutar stanice. Proučavat ćemo mehaniku stanične diobe i mehanizme kojima se stanica prostorno organizira. Algoritam za izbor najznačajnijih varijabli/deskriptora u linearne i nelinearne mnogoregresijske modele, nadograđen je, poboljšana i uspoređena s metodom temeljenom na genetskim algoritmima i metodama za postupni izbor deskriptora. Prethodno razvijeni modeli za predviđanje viskoznosti i topljivosti molekula i za predviđanje udjela sekundarne strukture u topljivim proteinima značajno su pojednostavljeni i poboljšani uključivanjem i linearnih i nelinearnih deskriptora. Istraživana je mogućnost optimizacije nekolicine topoloških deskriptora. Uvedeni su i provjereni u primjenama u studijama odnosa strukture i svojstva novi molekularni deskriptori koji se računaju na temelju međusobnih udaljenosti atoma u molekulama. Mjerena su viskoelastična svojstva stanica i kretanje organela unutar stanice uz pomoć "optičke pincete".

Research programme and results:

Results thus far achieved on the development of molecular descriptors and computer programs for efficient modeling (selection of descriptors) in chemistry and bioinformatics will be combined with achievements of other researchers in the field of computing descriptors and developing models (CODESSA, DRAGON, Cerius2). We expect that combination of these methods and their application will improve the efficiency of QSAR/QSPR (quantitative structure-activity/property relationship) methodology. Methods developed in the area of

chemical modelling will be applied to problems in bioinformatics related to the connection between the protein primary structure (the order of amino acid residues in the protein) and the secondary and tertiary structures, functions, secondary structure contents and structural class to which a particular protein belongs (alpha, beta or mixed class). Based on large database of proteins with known structures, data sets of descriptors will be computed (frequency of appearance of amino acid residues, similarity among proteins, positional autocorrelation of appearance of a certain amino acid residues). Development of models will be performed by computer programs for selection of small sub-set of the most important descriptors. At the level of single cells, segregation of genetic material and a correct cell division relies on proper cell shape and position of organelles inside the cell. We will study the mechanics of cell division and the mechanisms by which the cell organizes itself spatially. Algorithm for selection of most important variables/descriptors in linear and nonlinear multiregression models, was upgraded, improved and compared with genetic function approximation method and stepwise selection method. Previously developed models for calculating viscosity and solubility of molecules and for prediction of protein secondary structure content in soluble proteins were significantly simplified and improved by inclusion of both linear and nonlinear descriptors. Possibility of optimising several topological molecular descriptors was investigated. Some novel distance-related molecular descriptors were introduced and tested through their use in QSPR studies. Viscoelastic properties of living cells and the movement of cell organelles have been investigated using optical tweezers.

STRUKTURNA I BIOLOŠKA ISTRAŽIVANJA NOVIH KOMPLEKSNIH SPOJEVA STRUCTURAL AND BIOLOGICAL INVESTIGATIONS OF NEW COMPLEX COMPOUNDS

Voditeljica projekta: dr. sc. Ljerka Tušek-Božić

Tel. ++385 1 45 71 217 e-mail: tusek@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Manda Ćurić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Dejan Plavšić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Ljerka Tušek-Božić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehnička suradnica:

Lidija Prežec, peračica laboratorijskog suđa (25%)

Vanjska suradnica na projektu:

Henrika Meider, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, u mirovini (konzultantica)

Suradnici iz drugih ustanova:

Ivanka Matijašić, doktorica kem. znanosti, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, Hrvatska (konzultantica)

Milan Šoškić, doktor kem. znanosti, Agronomski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, Hrvatska (konzultant)

Erik De Clercq, doktor med. znanosti, Rega Institute for Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven, Belgija (konzultant)

Ariella Furlani, doktor farmaceutskih znanosti, Dipartimento di Scienze Biomediche, Università degli Studi di Trieste, Trst, Italija (konzultantica)

Antonin Lyčka, doktor kem. znanosti, Research Institute for Organic Synthesis, Pardubice, Češka (konzultant)

Ljiljana Paša-Tolić, doktor kem. znanosti, Pacific Northwest National Laboratory, Richland WA, SAD (konzultantica)

Program rada i rezultati na projektu:

Program rada obuhvaća istraživanja novih kompleksnih spojeva s određenim strukturnim i biološkim svojstvima, i usmjerena su ponajprije na ispitivanje interakcije iona alkalnih (Na^+ ,

K^+) i prijelaznih (Cu^{2+} , Zn^{2+} , Pd^{2+} , Pt^{2+}) metala s esterima aminofosfonskih kiselina te različitih makrocikličkih i heterocikličkih spojeva koji mogu poslužiti kao modeli za biološke i biološki aktivne molekule. Istraživanja obuhvaćaju sintezu polidentatnih organskih liganada koji sadrže N i O donorne atome i njihovih kompleksa, ispitivanje kemijskih i strukturnih svojstava tih spojeva te mehanizma reakcija kompleksiranja i stabilnosti kompleksa u otopini, krutom i plinovitom stanju. U tu svrhu koriste se različite spektroskopske metode (IR, UV/VIS, NMR, MS), rendgenska strukturna analiza te termička, magnetska i konduktometrijska mjerenja. Biološka svojstva organskih liganada i kompleksa ispituju se određivanjem njihove *in vitro* antitumorske i antivirusne aktivnosti na različitim staničnim kulturama ljudskog i životinjskog podrijetla. Dobiveni rezultati koriste se za određivanje modela odnosa strukture i fizičkih svojstava, strukture i kemijske reaktivnosti te strukture i biološke aktivnosti molekula. Posebna pozornost usmjerena je na istraživanje kompleksnih spojeva s potencijalnom biološkom aktivnošću kao što su kompleksni spojevi paladija(II) s različitim dialkil i monoalkil esterima aminofosfonskih kiselina, te kompleksi bakra(II), cinka(II) i paladija(II) s 3-supstituiranim 1,4-benzodiazepinima. Pripravljene su i ispitivane monoalkil esteri anilinobenzilfosfonskih kiselina, njihove natrijeve soli te mononuklearni i binuklearni metalociklički kompleksi paladija(II). Ispitivanja kemijskih i strukturnih svojstava tih spojeva provedena su analizom njihovih infracrvenih spektara te 1H , ^{13}C i ^{31}P spektara nuklearne magnetske rezonancije. Istraživanja antitumorske aktivnosti tih spojeva na različitim staničnim kulturama su pokazala da su slobodni monoesteri i natrijeve soli neaktivni spojevi, dok većina pripremljenih paladijevih kompleksa pokazuje *in vitro* antitumorsku aktivnost prema stanicama karcinoma kože kod ljudi te stanicama leukemije kod miša. Razvijene su analitičke metode za određivanje fosfora i paladija u različitim tipovima neutralnih i ionskih biološki aktivnih paladijevih kompleksa. Započeta su istraživanja na sintezi novih anilinokinolin i aminokinolin fosfonatnih liganada te kompleksnih spojeva platine(II) s kinolilmetilfosfonatima, s ciljem dobivanja novih biološki aktivnih spojeva. Istražuje se mogućnost numeričkog karakteriziranja velikih molekula, kao što je npr. DNA, ili njihovih segmenata od kemijskog i biološkog interesa. U tijeku su istraživanja na konstrukciji novih numeričkih opisivača cijelih mapa staničnih proteinskih smjesa, koji će omogućiti kvantitativnu poredbu mapa, koje se često uspoređuju samo vizualno, kvalitativno. Dio istraživanja u okviru projekta ostvaruje se u suradnji s više laboratorija našeg Instituta, Prirodoslovno-matematičkog i Agronomskog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, te kroz suradnju sa znanstvenim institucijama u inozemstvu.

Research programme and results:

The research programme comprises investigations of the novel complex compounds with specific structural and biological properties. Special attention is directed to the study of interactions of alkali (Na^+ , K^+) and transition (Cu^{2+} , Zn^{2+} , Pd^{2+} , Pt^{2+}) metal ions with derivatives of aminophosphonic acids as well as various macrocyclic and heterocyclic compounds, which are used as models for biological and biologically active molecules. The investigations include preparation of the polydentate organic ligands with N and O donor atoms as well as their complexes, determination of chemical and structural properties of these compounds and studying the mechanism of complexation reactions and stability of complexes in solution, gas and solid phase. Various spectroscopic methods (IR, UV/VIS, NMR, MS), X-ray structure analysis and thermal, magnetic and conductometric measurements are applied for these investigations. The biological properties of organic ligands and their complexes are examined by evaluation of their *in vitro* antitumor and antiviral activity on different assay systems including human and animal cell lines. The obtained results are employed to develop models for relationships between structure and physical properties, structure and chemical reactivity as well as structure and biological activity of molecules. Special interest is focused on complex compounds with potential biological activity such as palladium(II) complexes of various dialkyl and monoalkyl esters of aminophosphonic acids as well as copper(II), zinc(II) and palladium(II) complexes of 3-substituted 1,4-benzodiazepines. Monoalkyl esters of anilinobenzylphosphonic acids, their sodium salts and mononuclear and binuclear metallocyclic palladium(II) complexes were

prepared and examined. The chemical and structural properties of these compounds were investigated by analysis of their infrared as well as ^1H , ^{13}C and ^{31}P nuclear magnetic resonance spectra. The antitumor activity of all the compounds was evaluated on different assay systems. It was found that free monoesters and their sodium salts are inactive compounds, while most of the prepared palladium compounds exhibit antitumor activity against epidermoid human carcinoma and murine leukaemia cell lines. Analytical methods for determination of phosphorus and palladium in various types of neutral and ionic biological active palladium complexes have been developed. In order to get new active compounds, preparation of new aminoquinoline- and anilinoquinoline-based phosphonates as well as investigations of platinum(II) complexes of quinolylmethylphosphonates has been initiated. The possibility of numerical characterization of macromolecules, for example DNA, or their segments of chemical and biological interest is examined. Construction of the novel descriptors of proteomics maps making possible quantitative comparison of the maps is in progress.

A part of investigations in the frame of the project has been carried out in cooperation with some groups from the Ruđer Bošković Institute, University of Zagreb (Faculty of Science and Faculty of Agriculture) and some international scientific institutions.

STRUKTURA I SVOJSTVA (BIO)MOLEKULA STRUCTURE AND PROPERTIES OF (BIO)MOLECULES

Voditeljica projekta: dr. sc. Biserka Kojić-Prodić

Tel. ++385 1 46 80 126 e-mail: kojic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Snježana Antolić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja do 31.11. 2002.

Branimir Bertoša, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak

Marija Herceg, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Biserka Kojić-Prodić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Ivana Leščić, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Marija Luić, doktorica geol. znanosti, viša znanstvena suradnica

Zoran Štefanić, dipl. inž. fizike, mlađi asistent

Sanja Tomić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Aleksandar Višnjevac, doktor kem. znanosti, viši asistent

Dušica Vujaklija, doktorica bioteh. znanosti, znanstvena suradnica (konzultantica)

Tehnička suradnica:

Lidija Prežec, peračica laboratorijskog suđa (25%)

Suradnici iz drugih ustanova:

Zrinka Banić-Tomišić, doktorica kem. znanosti, Istraživački institut Pliva, Zagreb

Jasenska Pigac, doktorica bioteh. znanosti, Prehrambeno-biotehnoški fakultet, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Metodama rendgenske difrakcije i računalne kemije, molekularne kompjutorske grafike, te spektroskopije kao i primjenom bioloških testova, prati se odnos molekularne strukture i ponašanja biološki aktivnih spojeva i njihovih analoga. Prepoznavanje biološki aktivnih molekula (molecular recognition) na temelju karakterističnih strukturnih parametara, posebno aktivnog mjesta u molekuli ili njene (bio)aktivne konformacije, uz poznavanje njihovih fizičko-kemijskih svojstava, koristi se kao doprinos razumijevanju bioloških procesa na molekularnoj razini. Detaljno poznavanje molekularne strukture spojeva u kristalu i otopini omogućava praćenje i objašnjenje mehanizama kemijskih i bioloških reakcija realnih i modelnih sustava. Molekularno (kompjutorsko) modeliranje, uključujući metode molekularne dinamike koje služe oponašanju eksperimentalnih uvjeta ili/i realnih uvjeta *in vivo*, čini sastavni dio pristupa

molekularnog prepoznavanja; rabi se u izučavanju dinamike konformacijskih promjena molekula i vezivanja supstrata i inhibitora u aktivno mjesto bakterijskih lipaza. Sustavno se priređuju podaci za QSAR analizu biljnog hormona rasta auksina (indol-3-octene kiseline) i njegovih analoga. Na temelju sličnosti interakcijskih polja auksina (matematički pristup temeljen na sposobnosti auksinskih molekula da učestvuju u neveznim interakcijama s potencijalnim proteinskim receptorom) i srodnih molekula i predviđenih $\log P$ vrijednosti razlikuju se aktivne od neaktivnih molekula. U suradnji s Grupom za genetiku i dinamiku bioaktivnih molekula objašnjeni su nekonzistentni literaturni podaci o auksinskoj aktivnosti 2-metilindol-3-octene kiseline i 2-etil homologa: biološki testovi su pokazali auksinsku aktivnost metil-homologa dok su etil-homolog zabilježili kao inaktivan. Naša su strukturna istraživanja pokazala da su autori radili biološke testove na 3-(3-metilindol-2-il)propionskoj kiselini misleći da imaju 2-etilindol-3-octenu kiselinu. Priredili smo i karakterizirali 2-etil i 2-propil-homologe i potvrdili njihovu biološku aktivnost i time otklonili nejasnoću u literaturi. Ovaj primjer jasno ukazuje na važnost jednoznačne strukturne karakterizacije supstancija koje se podvrgavaju biološkim testovima. Samo vjerodostojni biološki testovi mogu biti svrsishodan temelj QSAR pristupu. Na temelju bioloških testova i analizom sličnosti interakcijskih polja utvrđeno je da su ovi auksinski analozi na granici između slabih i jakih auksina. U svakom slučaju 2-alkil supstitucija smanjuje auksinsku aktivnost; rezultati konformacijske analize izvedeni iz kvantno-kemijskih računa i simulacija molekularne dinamike ukazuju da alkilna supstitucija u položaju 2 indol-3-octene kiseline utječe na rotaciju CH_2COOH skupine i time možda utječe na biološku aktivnost. Pripravljen je i strukturno karakteriziran peracetilirani β -muramil laktam-(1 \rightarrow 4)-GlcNAc disaharid; njegov nezaštićeni analog je sastavni dio peptidoglikana bakterijske spore. Izvedena je konformacijska analiza disaharida u kristalu i otopini metodama rendgenske difrakcije, NMR spektroskopije i molekularnog modeliranja. Rezultati pokazuju da je opažena relativno slobodna gibljivost oko glikozidne veze, koja omogućava laku prilagodbu receptoru, što je u skladu s opažanjima drugih autora na raznim prirodnim β -(1 \rightarrow 4) disaharidima. Ovim istraživanjem zaključen je bogat znanstveni ciklus dr. D. Keglević. Metodom rendgenske difrakcije izučava se skupina retropeptida s oksalilnim mostom. Analizom složenih sistema vodikovih veza u sustavno modificiranoj seriji spojeva, odgovornih za stvaranje supramolekularnih tvorevina, pokušava se objasniti nastajanje gelova i njihova organizacija na molekularnoj razini. Tijekom studija enzimske aktivnosti lipaza, u suradnji s nekoliko istraživačkih skupina u zemlji i inozemstvu, izolirana je i biokemijski karakterizirana ekstracelularna lipaza iz bakterije *Streptomyces rimosus*. Uspješno kloniranje omogućilo je dobivanje obimnije količine enzima i time opsežnije biokemijsko istraživanje i eksperimente kristalizacije proteina. Razvijen je kvantitativni model za predviđanje enzimske enantioselektivnosti temeljen na usporedbi energije vezanja COMBINE analizom. Izučavan je utjecaj kristalografski određene molekule vode (u blizini aktivnog mjesta enzima) na predviđanje enantioselektivnosti lipaze. Model je primijenjen na testiranje enantioselektivnosti lipaze bakterije *Burkholderia cepacia* prema racematima 3-(ariloksi)-1,2-propandiola u postupku aciliranja. Postignuti rezultati u području proteinske kristalografije i modeliranja omogućavaju korištenje metoda u izučavanju različitih bioloških sustava. U suradnji s Prof. W. Sängonom sa Sveučilišta u Berlinu, ispitan je utjecaj otvorenog i zatvorenog oblika aktivnog centra purin nukleozid fosforilaze (iz *E. coli*) na katalitički mehanizam. Poznavanje strukture ovog enzima i njegovih kompleksa s inhibitorima presudno je u iznalaženju efikasne terapije tumorskih, virusnih i parazitskih oboljenja kao i bolesti imunološkog sustava. Izložen interdisciplinarni pristup istraživanja daje temelj za pripremu novih spojeva unaprijed zadanih svojstava, efikasnih biokatalizatora, i doprinosi razumijevanju bioloških procesa na molekularnoj razini. Takav interdisciplinarni pristup moguć je zahvaljujući uspješnoj znanstvenoj suradnji s više laboratorija našeg Instituta i Istraživačkog instituta Plive kao i međunarodnoj suradnji. Rendgenska strukturna analiza uspješno je primijenjena u određivanju trodimenzionalne strukture novih supramolekularnih, organskih i kompleksnih spojeva. Pripravljeni su kompleksni spojevi Cu(II), Pd(II) i Zn(II) s 3-supstituiranim 5-(2'piridil)-1,4-benzodiazepin-2-onima i karakterizirani spektroskopskim metodama i rendgenskom strukturnom analizom. U suradnji sa Zavodom za organsku kemiju

Fakulteta za kemijsko inženjerstvo i tehnologiju izučavane su fotokemijske transformacije supstituiranih 2,2'-(1,2-fenilendivinilen)-dipirola.

Research programme and results:

In structure-activity relationship studies of biologically active molecules and their analogues, X-ray diffraction analysis, computational chemistry methods, molecular computer graphics, spectroscopic methods and bioassays have been used. Molecular recognition approach, based on the characteristic structural parameters, particularly of the active site or bioactive conformations together with physico-chemical properties of the molecules studied have been used in study of biological processes at the molecular level. Detailed molecular architecture in the crystalline state and in solution has been used to understand chemical and biological reactions of real and model systems. Molecular (computer) modelling, including methods of molecular dynamics which can simulate experimental conditions and/or real parameters *in vivo*, is one of the elements of molecular recognition approach. Molecular dynamics simulations have been used to study conformational stability and substrate binding to the active site of a receptor. Systematic analysis of data on auxins and analogues required for QSAR has been performed. Classification of auxin related compounds based on similarity of their interaction fields (a mathematical approach based on the capability of auxin molecules to participate in non-bonding interactions with a receptor protein) and $\log P$ prediction was performed. In the collaboration with the Group for genetics and dynamics of bioactive molecules inconsistent literature data related to auxin activity of 2-methylindole-3-acetic acid and its 2-ethyl homologue were clarified. Biological tests revealed the auxin activity of methyl-homologue whereas 2-ethyl homologue was assigned as inactive. Our structural investigation revealed that the authors performed bioassays on 3-(3-methylindol-2-yl)propionic acid instead on 2-ethylindole-3-acetic acid. 2-Ethyl and 2-propyl analogues were prepared and characterised, their biological activity was verified. This example clearly exemplifies the importance of unambiguous structural characterisation of compounds prior to bioassays. Only reliable biological tests can serve in the QSAR approach. According to bioassays and the results of interaction similarity analysis this class of auxins is along the border line between strong and weak auxins. Actually, the 2-alkyl substitution reduces the auxin activity; conformational analysis based on quantum-mechanical calculations and molecular dynamics simulations revealed some rotational preferences of CH_2COOH group caused by nearby substituent that might be one of the reasons for reducing plant growth activity. Peracetylated β -muramyl lactam-(1 \rightarrow 4)-GlcNAc disaccharide was prepared and structurally characterised; its unprotected analogue is a building block of peptidoglycan bacterial spore cortex. Detailed conformational analysis of disaccharide was performed in a crystal and a solution using X-ray diffraction, NMR spectroscopy and molecular modelling. Observed relative conformational freedom about glycosidic bond enables an easy accommodation to a given receptor; the result obtained is in agreement with the observation of other authors on some natural β -(1 \rightarrow 4)-disaccharides. The very rich scientific opus of dr. Dina Keglević was completed by this research. X-ray diffraction was used to analyse retropeptides with oxalyl bridges. The analysis of the complex hydrogen bonding systems of systematically modified compounds, responsible for supramolecular aggregation, has been employed to explain gel formation and their internal organisation. In cooperation with several research teams, research on isolation and biochemical characterisation of extracellular lipase from *Streptomyces rimosus* is completed. Successful cloning experiments produced significant amount of enzyme and enabled detailed biochemical characterisation and crystallisation experiments. A derived quantitative model for prediction of enantioselectivity of an enzyme has been based on comparative binding energy, COMBINE analysis. The influence of crystallographically defined water molecule (close to the enzyme active site) on predictability of lipase enantioselectivity was analysed. The model was tested on enantioselectivity of *Burkholderia cepacia* lipase towards racemates of 3-(aryloxy)-1,2-propanediols during acylation. The results achieved in protein crystallography and molecular modelling enable the methods to be applied for studies of various biological systems. In the collaboration with prof. W. Sängler, Freie Universität Berlin, an influence of an open and

closed forms of the active site of purine nucleoside phosphorylase (from *E. coli*) on biocatalysis was examined. Knowledge of the enzyme structure and its complexes with the inhibitors is essential in search for efficient therapy of tumors, viruses, parasitic diseases, and immuno-diseases. Above described interdisciplinary approach has been used in chemical design of novel compounds of predicted properties, efficient biocatalysts and contributes to understanding of biological processes at molecular level. These results have been achieved due to the successful collaboration with some laboratories of our Institute, Research Institute Pliva, and international cooperation. X-ray structure analysis was successfully used in determination of three-dimensional structures of novel supramolecular, organic and metal complexes. Metal complexes of Cu(II), Pd(II), and Zn(II) with 3-substituted 5-(2'-pyridyl)-1,4-benzodiazepin-2-on as the ligands were prepared and characterised by X-ray structure analysis and spectroscopic methods. In collaboration with the Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical Engineering and Technology, University of Zagreb photochemical transformations of substituted 2,2'-(1,2-phenylenedivinylene)-dipyrroles were studied.

BIOFIZIKA MEĐUDJELOVANJA LIPOPROTEINA I AKTIVNIH TVARI BIOPHYSICS OF LIPOPROTEIN INTERACTIONS WITH ACTIVE SUBSTANCES

Voditeljica projekta: dr. sc. Greta Pifat-Mrzljak

Tel. ++ 385 1 45061 127 email: pifat@rudjer.irb.hr

Suradnice na projektu:

Marina Ilakovac-Kveder, doktorica fiz. znanosti, znanstvena suradnica

Greta Pifat-Mrzljak, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Anita Kriško, dipl. inž. mol. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Suradnici iz drugih ustanova:

Jasminka Brnjas-Kraljević, doktorica fiz. znanosti, Medicinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Slavko Pečar, doktor kem. znanosti, Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana, Slovenija

Milan Schara, doktor fiz. znanosti, "Jožef Štefan" Institute, Ljubljana, Slovenija

Program rada i rezultati na projektu:

U okviru ovog projekta studira se međudjelovanje ljudskih lipoproteina s biološki aktivnim tvarima na molekularnoj osnovi upotrebom spektroskopskih metoda EPR, FTIR i fluorescencije. Kako struktura lipoproteina kao supramolekulskih kompleksa nije razlučena na atomskom nivou, karakterizacija promjena u organizaciji čestica zbog djelovanja endo- i egzogenih tvari u cirkulaciji pripomoći će razumjevanju patologije metabolizma lipoproteina kod ateroskleroze i dijabetesa. Naglasak je stavljen na lipoproteine male gustoće (LDL) čija oksidacijska modifikacija sudjeluje u stvaranju aterosklerotičnih plakova. Studiran je utjecaj gangliozida na fizikalna svojstva čestica u oksidaciji LDL-a *in vitro* budući da je nađeno da serumi aterosklerotičnih pacijenata sadrže povišene koncentracije gangliozida. Promjene lipidne i proteinske komponente LDL-a kod blage oksidacije praćene su fluorescentnom spektroskopijom čime je pokazano da vezanje gangliozida na LDL uzrokuje sporiju razgradnju triptofanske fluorescencije i supresira vezanje aktivnih grupa proteina i produkata lipidne peroksidacije. Ta protektivna uloga gangliozida može se pripisati njihovom djelovanju na lipid-protein međudjelovanje što može biti od važnosti za održavanje antioksidativnog statusa plazme *in vivo*.

Research programme and results:

In the frame of this project we propose to study the interaction of lipoproteins and active substances on the molecular basis applying spectroscopic methods EPR, FTIR and fluorescence. Since the structure of lipoproteins as supramolecular complexes is still not solved at the atomic resolution, the characterization of changes in the organization of the particle due to the binding of endogenous and exogenous substances in the circulation helps

in the basic understanding of medical indications interconnecting lipoproteins, diabetes and coronary diseases. In the focus of our interest are low density lipoproteins (LDL) as it is supposed that uncontrolled uptake of LDL from the circulation via macrophages is related to the oxidative modification of the particle resulting in atherosclerotic plaques formation. Therefore, the influence of gangliosides on the physical properties of particles in the model of LDL oxidation *in vitro* will be investigated as it has been observed that the sera of atherosclerotic patients contain an increased concentration of gangliosides. The changes in the protein and lipid component were followed using fluorescence spectroscopy. The results indicate that binding of gangliosides to LDL causes slower destruction of tryptophan fluorescence and suppresses crosslinking between the reactive groups of the protein and the products of lipid peroxidation. The protective role of gangliosides could be assigned to their interference with the lipid-protein interaction in the LDL particle which might be important for the maintenance of the native plasma antioxidant status *in vivo*.

ELEKTRONSKA SPINSKA REZONANCIJA U SUSTAVIMA S PARAMAGNETSKIM ČESTICAMA

ELECTRON SPIN RESONANCE IN SYSTEMS WITH PARAMAGNETIC PARTICLES

Voditelj projekta: dr. sc. Boris Rakvin

Tel. ++ 385 1 46 80 194 e-mail: rakvin@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Mladen Andreis, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Jelena Čulin, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Dalibor Merunka, magistar fiz. znanosti, asistent, znanstveni novak
Boris Rakvin, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Srećko Valić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik (40%)
Zorica Vekšli, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, u mirovini
Dijana Žilić, dipl. inž. fizike, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Liana Hölbling, viša tehničarka

Suradnica iz druge ustanove:

Nadica Maltar-Strmečki, magistrica fiz. znanosti, asistentica, Veterinarski fakultet, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Temeljni cilj projekta je istraživanje paramagnetskih defekata i njihove uporabe kao paramagnetskih proba u ispitivanju dinamike kristalne rešetke feroelektričnih i magnetskih sustava, te sintetičkih makromolekula. Primijenit će se metoda elektronske spinske rezonancije (ESR) koja omogućuje istraživanja različitih tipova defekata u molekulskim strukturama te pruža uvid u dinamičku sliku samog centra i okolnih atomskih i molekulskih skupina. Time je omogućeno dobro poznavanje mikroskopskih parametara koje je od temeljnog značaja za razumijevanje i predviđanje makroskopskih svojstava molekulskih sustava s uređenjem kratkog i dugog dosega. U feroelektricima s vodikovim vezama proučavana je mikroskopska osnova za detaljno razumijevanje faznog prijelaza između feroelektričnog i paraelektričnog stanja i fluktuacije polarizacije u paraelektričnoj fazi. U tu svrhu korišten je novo predloženi model faznog prijelaza za opis dinamičkih fluktuacija u blizini samog prijelaza (D. Merunka and B. Rakvin, *Phys. Rev.B*, 66 (2002), 17; 4101). U organskim kristalima biološki važnih molekula, u kojima također dominira višedimenzionalna vodikova veza, istraživana je lokalna dinamika različitih grupa koje sadrže više vodikovih atoma (metilna, amino itd.), a koje mogu imati presudni utjecaj na pojedina karakteristična svojstva materijala. Izučavana je relaksacija stabilnog paramagnetskog centra u najjednostavnijoj amino kiselini l-alaninu sa svrhom poboljšanja detekcije tih defekata radi poboljšanja dozimetrijskih svojstava alanina (N. Maltar-Strmečki, B. Rakvin, P. Cevc and D.

Arčon, *Appl. Magn. Reson.* 22, (2002) 551). U dijelu projekta koji je vezan za proučavanje dinamike paramagnetskih proba u kopolimerima u ovisnosti o konfiguraciji i omjeru monomernih komponenata, istraživana je dinamička heterogenost blok-kopolimera u ovisnosti o duljini blokova i tipu otapala te polimernih smjesa temeljenih na komponentama modificiranim funkcionalnim skupinama koje omogućuju stvaranje vodikovih veza (J. Čulin, S. Frka, M. Andreis, I. Šmit, Z. Veksli, A. Anžlovar and M. Žigon, *Polymer.* 43 (2002) 3891).

Research programme and results:

The objective of this project is to investigate paramagnetic defects and their usage as paramagnetic probes in the study of dynamics of the crystal lattice of ferroelectric and magnetic systems as well as synthetic macromolecules. Electron spin resonance (ESR) method which provides investigation of various types of defects in molecular structures and enables an insight into the dynamics of observed center including surrounding atomic and molecular groups will be used. By using this method a better understanding of microscopic parameters important for the prediction of macroscopic properties of molecular systems with short and long range order will be achieved. The new theoretical model for phase transition, which was suggested earlier, was employed to better describe microscopic origin of ferroelectric-paraelectric phase transition (D. Merunka and B. Rakvin, *Phys. Rev.B*, 66 (2002), 17; 4101). The investigation also includes dynamics of multidimensional hydrogen bonds as well as the local dynamics of various groups containing several hydrogen atoms (methyl, amino etc.) that may have crucial influence on some properties of biologically important molecules. The relaxation of stable paramagnetic centers in the simplest amino acid L-alanine has been investigated and microscopic mechanism responsible for improved detection of ionic radiation (dosimeter properties of L-alanine) has been revealed (N. Maltar-Strmečki, B. Rakvin, P. Cevc and D. Arčon, *Appl. Magn. Reson.* 22, (2002) 551). In the part of the research program which is focused on the study of structural and dynamical heterogeneity of polymers, copolymers, polymer mixtures and interpenetrating polymer networks by the use of paramagnetic probes the motional heterogeneity of segmented polyurethane-polymethacrylate copolymers has been studied (J. Čulin, S. Frka, M. Andreis, I. Šmit, Z. Veksli, A. Anžlovar and M. Žigon, *Polymer.* 43, (2002) 3891).

MODELIRANJE NOVIH UGLJIKOVIH MATERIJALA MODELLING OF NOVEL CARBON MATERIALS

Voditelj projekta: dr. sc. Ante Graovac

Tel. ++385 1 4561 013 e-mail: graovac@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Ante Graovac, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Ivana Vlah, prof. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Suradnici iz drugih ustanova:

Istvan Lukovits, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik, Chemistry Research Center, Budapest, Mađarska

Tomaž Pisanski, doktor matematike, redovni profesor, IMFM, Ljubljana, Slovenija

Janez Žerovnik, doktor matematike, redovni profesor, Strojniška fakulteta, Univerza v Mariboru, Maribor, Slovenija

Program rada i rezultati na projektu:

Topologija umreživanja ugljikovih atoma u fullerene, nanocjevčice i srodne sustave uvelike određuje strukturu i svojstva ovih spojeva. Topološki postupci mogu se primjeniti u odabiru najplauzibilnijih izomera nanostruktura (među enormnim brojem njihovih izomera) te određivanju njihovih geometrija. Dijelom smo riješili problem određivanja geometrija primjenom tzv. AME (Adjacency Matrix Eigenvectors) postupka. Studirali smo također "leapfrog" i srodne operacije u toroidalnim fulerenima. Jedna mjera stabilnosti nanocjevčica,

posebno onih čisto heksagonalnih, je broj njihovih Kekuleovih struktura, pa smo za određivanje ovih razvili metodu njihovog prebrojavanja. Što se tiče drugih protežnih sustava kao što su to konjugirani polimeri, razvili smo algoritam za prebrojavanje Szeged indeksa, deskriptora korisnog u opisu molekularnih svojstava u tim sustavima. Szeged index je usko vezan uz tzv. Wienerov indeks kojeg smo studirali u trnovitim grafovima, novom modelu za opis dendrimera. Što se tiče temeljnih matematičkih istraživanja, studirali smo 10-kaveze i uz njih vezane konfiguracije koje smo imenovali Balabanovim konfiguracijama.

Research programme and results:

Basic factors determining structure and properties of fullerenes, nanotubes and similar carbon cages is their topology, i.e. how carbon atoms are connected to build these structures. The topological methods could be also applied to select the most plausible isomers (among an enormous number of possible isomers) and to determine their geometry. The problem of geometry determination is partially solved by applying the so called AME (Adjacency Matrix Eigenvectors) Method. Leapfrog and related operations in toroidal fullerenes have been also studied. A measure of stability of nanotubes, especially those purely hexagonal, is the number of their Kekule structures, and we have developed a procedure for their enumeration. Regarding other extended systems like conjugated polymers, we have developed an algorithm to enumerate their Szeged index, a descriptor useful in describing molecular properties. The Szeged index is closely related to the so called thorn graphs which represent a novel model to describe dendrimers. Regarding purely mathematical topics we have studied 10-cages and derived configurations which we have named the Balaban configurations.

**MEĐUDJELOVANJE BIOMEMBRANA S AMINO KISELINAMA I PEPTIDIMA
INTERACTIONS OF BIOMEMBRANES WITH AMINO ACIDS AND PEPTIDES**

Voditeljica projekta: dr. sc. Vesna Nöthig-Laslo
Tel. ++385 1 4561 136 e-mail: laslo@faust.irb.hr

Suradnici na projektu:

Krunoslav Miroslavljević, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak
Vesna Nöthig-Laslo, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Andreja Lesac, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica (konzultantica)

Suradnici iz drugih ustanova:

Ruža Frkanec, magistrica kem. znanosti, znanstveni asistent, Odsjek za radioimunologiju i razvoj, Odjel za istraživanje i razvoj, Imunološki zavod, d.d., Zagreb.
Nevenka Paulić-Balestrin, doktorica kem. znanosti, u mirovini
Rebecca Pogni, doktorica kem. znanosti, Department of Chemistry, University of Siena, Siena, Italija
Jasmina Sabolović, doktorica fiz. znanosti, znanstveni suradnik, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb.
Marjeta Šentjunc, doktorica fiz. znanosti, Institut "Jožef Stefan", Ljubljana, Slovenija
Jelka Tomašić, doktorica kem. znanosti, znanstveni savjetnik, Odsjek za radioimunologiju i razvoj, Odjel za istraživanje i razvoj, Imunološki zavod, d.d., Zagreb.

Program rada i rezultati na projektu:

Lipozomi s ugrađenim biomolekulama koriste se za prijenos farmakološki aktivnih tvari kroz krv do ciljanih stanica. Za razvoj efikasnih metoda prijenosa od primarnog je značaja proučavanje fizikalno-kemijske prirode međudjelovanja farmakološki aktivnih biomolekula, amino kiselina, peptida i njihovih bakrovih kompleksa s lipozomima. Za proučavanje tako kompleksnih supramolekularnih sustava korištena je EPR spektroskopija.

Metodama EPR spektroskopije na više frekvencija kao i molekulske mehaničkim metodama proučavan je utjecaj pokrajnjih lanaca alifatskih amino kiselina na vezanje molekule vode na bakar (II) u kompleksima bis[N,N-dimetil-L- α -aminoacido]bakar(II).

Potvrđena je hipoteza da vezanje ili otpuštanje molekule vode s bakrovog iona uzrokuje promjenu konformacije alifatskih pokrajnjih lanaca u bakrovim kompleksima s alifatskim amino kiselinama.

Razvijena je pulsna EPR metoda (ESEEM) za proučavanje permeabilnosti lipozoma za molekule vode.

Metodama spinskog označavanja proučavani su peptidi imunomodulatorske aktivnosti, peptidoglikan monomer i adamantil tripeptidi ugrađeni u liposome. Međudjelovanje s lipozomima detektirano je u slučaju adamantil tripeptida ugrađenih u liposome.

Research programme and results:

Liposomes with incorporated drugs are used as a delivery system for pharmacologically active molecules to the targeted cells. The study of physical and chemical nature of interactions of the pharmacologically active molecules, amino acids, peptides and their copper(II) complexes with liposomes is of special interest for development of the efficient delivery methods. EPR spectroscopy was used for the study of such complex supramolecular systems.

Methods of EPR spectroscopy at different frequencies as well as the molecular mechanics were used for the study of the role of apically bound water molecule on aliphatic side-chain interactions in bis[N,N-dimethyl-L- α -aminoacido]copper(II). The hypothesis that binding or release of the apical water molecule from copper(II) ion is related to changes of the conformation of the aliphatic amino acid side chains in the copper(II) complexes was confirmed.

EPR pulsed method (ESEEM) for the study of the permeability of liposomes for water molecules was developed.

Peptides with immunomodulator activities incorporated into liposomes were studied by spin labelling methods. Interactions with liposomes were detected only in the adamantil tripeptides incorporated into liposomes.

MULTIDISCIPLINARNA SEDIMENTOLOŠKA ISTRAŽIVANJA MULTIDISCIPLINARY SEDIMENTOLOGICAL INVESTIGATIONS

Voditeljica projekta: dr. sc. Halka Bilinski

Tel. ++ 385 1 45 61 081 e-mail: bilinski@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Halka Bilinski, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Stanislav Frančičković-Bilinski, magistar oceanol. znanosti, asistent, znanstveni novak

László Horvath, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Darko Tibljaš, doktor geol. znanosti, izvanredni profesor, Mineraloško-petrografski zavod Prirodoslovno-matematičkog fakulteta, Zagreb.

Darko Hanžel, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik, "Jožef Štefan" Institute, Ljubljana, Slovenija.

Yoganand Balagurunathan, doktor matem. znanosti, viši asistent, Texas A&M University, Texas, SAD.

Edward R. Dougherty, doktor matem. znanosti, redovni profesor, Texas A&M University, Texas, SAD.

Daoxian Yuan, doktor geol. znanosti, redovni profesor, akademik, Institute of Karst Geology, Guilin, Kina.

Akira Usui, doktor geol. znanosti, redovni profesor, Geological survey of Japan, Ibaraka, Tsukubi, Japan.

Staffan Sjöberg, doktor kem. znanosti, redovni profesor, Umeå University, Švedska.

Program rada i rezultati na projektu:

U okviru projekta 0098041, tijekom njegovog trajanja predvidjeli smo sljedeća istraživanja:

- Primijeniti metodu morfološke granulometrije publiciranu u zajedničkom radu (Y. Balagurunathan i sur., 2001.) na prirodne estuarijske i morske sedimente, u suradnji s Y. Balagurunathan i E. R. Dougherty, SAD i N. Vdović, ZIMO, IRB;
- Nastavit ćemo laboratorijska istraživanja kompleksa aluminijske i silicijске s organskim ligandima od geokemijskog interesa;
- Ispitivat ćemo na sedimentima s različitih lokacija, produkte trošenja stijena drenažnog područja. Posebno ćemo istraživati reakcije povezane s ciklusom CO₂;
- Ispitivat ćemo sastav elemenata u tragovima u sedimentima i sedrama, što može doprinijeti poznavanju njihovog geokemijskog ciklusa. Ovdje ćemo obuhvatiti različite geografske lokacije na kojima sedimenti imaju različiti mineraloški sastav, u suradnji s D. Tibljaš, MPZ, PMF i Yuan Daoxian, Guilin, Kina;
- Nadopunit ćemo preliminarne rezultate mjerenja totalne žive i metil-žive u sedimentima Kaštelanskog zaljeva, koje smo referirali na kongresu o živi u Portorožu (H. Bilinski i sur., 2001.). Uz zagađene sedimente želimo prikazati mjerenja u čistim estuarijskim sedimentima. U kasnijoj fazi ćemo nastaviti eksperimente, kojima želimo doprinijeti razjašnjenju ciklusa toksične metil-žive, koji još u svijetu nije riješen, u suradnji s M. Branica i Ž. Kwokal, ZIMO, IRB;
- Ostavljamo mogućnost za ispitivanje nekih drugačijih procesa u zagađenim sedimentima, u kojima ćemo amorfnе spojeve željeza studirati metodom Mössbauerove spektroskopije, u suradnji s D. Hanžel, IJS (Ljubljana) i A. Usui, Japan.
- Preliminarni rezultati o primjeni metode morfološke granulometrije, čiji je teoretski dio publiciran (Y. Balagurunathan i sur., 2001.) bili su referirani na kongresu MATH/CHEM/COMP'2002. u Dubrovniku. Rad na ovoj problematici se nastavlja, a rukopis za CC časopis je u fazi pripreme.
- Završena su laboratorijska istraživanja modelnih spojeva aluminijske i ftalata u prisustvu silikatne kiseline, kao i pretraživanje relevantne literature, a pisanje rada za CC časopis je u tijeku.
- Istraživanja riječnih sedimenata, s osobitim naglaskom na trošenje stijena i na utjecaje zagađenja, su u tijeku na više lokacija. Provodi se intenzivni terenski i laboratorijski rad, te je u tijeku izrada doktorske disertacije (S. Frančišković). Rezultate dobivene u borealnom području smo referirali na MATH/CHEM/COMP'2002 u Dubrovniku. Rad je predan u *Croatia Chemica Acta*. Preliminarne rezultate iz Celjske regije (Vogljajna, Savinja, Slivniško jezero) referirali smo na Prvom slovenskom geološkom kongresu u Črnoj na Koroškem, a rad na engleskom jeziku je prihvaćen u slovenskom časopisu s recenzijom, *Geologija*.
- Rad na sedrama iz autonomne pokrajine Guilin (Kina), u suradnji s prof. Yuan Daoxianom iz Kine, te Nadom Horvatinčić i Delkom Barišićem (IRB) je u tisku u CC časopisu. Rad na sedrama iz Hrvatske se nastavlja, s posebnim težištem na geokemijska istraživanja i usporedbu sa sedrama iz Kine.
- Dovršili smo rad o usporedbi žive u zagađenom Kaštelanskom zaljevu i u čistim estuarijima Krke (Hrvatska) i Öre (Švedska). Rad je u suradnji sa Željkom Kwokalom i Markom Branicom (ZIMO, IRB), te je objavljen u CC časopisu.
- Dovršen je i objavljen rad u CC časopisu na manganu na kojem smo radili nekoliko godina u okviru projekta SAD-Hrvatska i Hrvatska-Slovenija, a uz suradnju s Rudolfom Giovanolijem iz Švicarske i Akirom Usuiem iz Japana.

Research programme and results:

Within the project 0098041, during its duration, following research is planned:

- To apply the method of morphological granulometry published in the joint work (Y. Balagurunathan *et al.*, 2001.), on natural estuarine and marine sediments in collaboration with Y. Balagurunathan and E. R. Dougherty, USA and N. Vdović, ZIMO, IRB;

- We shall continue laboratory research of complexes of aluminium and silicon with organic ligands, of geochemical significance;
- We shall investigate sediments from different locations, also weathering products of rocks from different drainage basins. Especially, we shall investigate reactions connected with CO₂ cycling;
- We shall determine trace elements in sediments and tufa, what can contribute to understanding of their geochemical cycles. Different geographic locations will be comprised, where sediments show different mineralogical composition, all in collaboration with D. Tibljaš MPZ, PMF, Zagreb, Croatia and Yuan Daoxian, Guilin, China;
- We shall complete preliminary results of total mercury and of methylmercury measurements in sediments of Kaštela Bay, which have been reported at the workshop on mercury in Portorož (H. Bilinski *et al.*, 2001.). Besides the polluted sediments, we want to present measurements in pure estuarine sediments. In the later phase we shall continue experiments in collaboration with M. Branica and Ž. Kwokal, ZIMO, IRB, which will bring to clarification of methylmercury cycling which is not yet solved anywhere in the world;
- We leave possibility of investigation of some other processes in polluted sediments. Amorphous compounds of iron will be studied by Mössbauer spectra in collaboration with D. Hanžel, IJS, Ljubljana, Slovenia and A. Usui, Japan.
- Preliminary results on application of method of morphological granulometry, which theoretical part is published (Y. Balagurunathan *et al.*, 2001.), were referred at MATH/CHEM/COMP'2002 conference in Dubrovnik. Work on this problem is in progress and manuscript for CC journal is in preparation.
- Laboratory investigations of model compounds of aluminum and phthalate in presence of silicic acid were finished, also collecting of relevant literature and writing of paper for CC journal is in progress.
- Investigation of river sediments, with special emphasize on weathering of rocks and on pollution influence, are in progress on several locations. Intensive field and laboratory work is performed, and Ph.D. thesis is in progress (S. Frančišković). Results from boreal region were referred at MATH/CHEM/COMP'2002 in Dubrovnik. Paper is submitted in *Croatia Chemica Acta*. Preliminary results from Celje region, Slovenia (Voglajna, Savinja, Slivniško lake) we reported at the First Slovenian geological congress in Črna na Koroškem, Slovenia, and paper in English language is published in *Geologija*, Ljubljana, an internationally refereed scientific journal (ISSN 0016-7789).
- Paper on tufa from Guangxi autonomous region (China) in collaboration with Prof. Yuan Daoxian from China, and Nada Horvatinić and Delko Barišić (Institute "Rudjer Bošković") is in press in CC journal. Work on tufa from Croatia is continuing, with special emphasize on geochemical research and comparison with tufa from China.
- Work on comparison of mercury in polluted Kaštela Bay and in pristine estuaries of Krka River (Croatia) and Öre (Sweden). Paper is in collaboration with Željko Kwokal and Marko Branica (Center for marine and environmental research, Institute "Rudjer Bošković"), and is published in CC journal.
- Paper on manganese is finished and published in CC journal; this work was done within project USA-Croatia and Croatia-Slovenia, in collaboration with Rudolf Giovanoli from Switzerland and Akira Usui from Japan.

MATERIJA U EKSTREMNIM UVJETIMA MATTER UNDER EXTREME CONDITIONS

Voditelj projekta: dr. sc. Slobodan Bosanac

Tel. ++ 385 1 45 61 038 email: danko.bosanac@irb.hr

Suradnici na projektu:

Duje Bonacci, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak
Slobodan Bosanac, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Program rada i rezultati na projektu:

U istraživanju nisko energijskih sudara atoma i molekula potencijal za Ar-HF sustav bio je proučavan budući da ne postoje pouzdani podaci za njega. Mogućnost točnijeg računa potencijala diskutirana je s Dr. T. Wrightom sa University of Sussex, koji je razvio metode vrlo točnih računa potencijala za velike i male molekule. Računi s klasičnim stazama na približnim potencijalima pokazali su da se stvaraju jako dugo živuća-stanja, a posljedica je izuzetno velika teškoća održavanja numeričke točnosti. Slični se problemi očekuju u kvantnim računima, na kojima se radi.

Klasični relativistički računi dinamike elektrona u elektromagnetskom ravnom valu je napravljen, koji uključuje reakcijsku silu zračenja. Kao što se očekivalo sila postaje značajna za jaka polja, a kao posljedica masa mirovanja elektrona se mijenja. To se opaža kao jako nepravilan spektar zračenja elektrona, umjesto pravilnog kada sila zračenja nije uključena. Radi se na članku koji bi trebao opisati rezultate. Kontrola prijelaza u sustavima s mnogo vlastitih stanja je istraživana i nađena je metoda kojom se to može izvršiti s vrlo velikom efikasnošću. Članak koji opisuje rezultate je u pripremi.

Research programme and results:

In the research of low energy collisions of atom and molecule the potential for Ar-HF system was investigated because there are not very reliable data on it. A possibility to recalculate it was discussed with Dr. T. Wright from Sussex University, who is doing very accurate studies of potentials for large and small systems. Calculation with classical trajectories was undertaken for the less accurate potentials, but it showed that very long lived states are formed and as the result, great difficulties were encountered in the numerical stabilities. Similar problems are expected in quantum calculations, which are being set up.

Classical relativistic calculation of dynamics of the electron in the electromagnetic plane wave was investigated, including radiation reaction force. As expected the impact of the force is important for very strong field and the result is the change of the rest mass of the electron. This is manifested as highly irregular spectrum of radiation that is produced by the electron, instead of very regular when the force is not included. A paper is being written. Control of transitions in the systems with many eigenstates was investigated, and a method that enables to move their population in almost arbitrary way was found. A paper is in preparation to report results.

**OPIS I PONAŠANJE KVANTNIH SISTEMA U INTERAKCIJI
DESCRIPTION AND BEHAVIOR OF QUANTUM SYSTEMS IN INTERACTION**

Voditelj projekta: dr. sc. Tomislav Živković

Tel. ++ 385 1 45 61 146 email: zivkovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Tomislav Živković, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Program rada i rezultati na projektu:

Polazeći od metode perturbacije niskog ranga (T.P. Živković Theor. Chim. Acta, 76 (1989) 331-351; J. Math. Chem., 9 (1992) 55-57; ibid. 28 (2000) 267-285, 287-312) program rada je razvoj općeg pristupa za opis interakcije kvantnih sustava. Cilj je razviti matematički formalizam za efikasan opis statičkih i dinamičkih svojstava kvantnog sustava A koji ima diskretne energetske nivoe i koji se nalazi u interakciji sa poznatim kvantnim sustavom B. Sistem B može biti kako konačan tako i beskonačan. Formalizam bi trebao omogućiti detaljnu analizu i opis interakcije molekule (sustav A) s elektromagnetskim poljem (sustav B), molekule koja se nalazi na površini nekog kristala ili općenito čvrstog tijela (sustav A) s tim kristalom, molekule koja se nalazi u otopini (sustav A) s otopinom (sustav B), itd. Takovi i slični sustavi se standardno opisuju mnogim drugim poznatim metodama od kojih je najčešća metoda perturbacije. Predloženi pristup bi trebao dati kvalitativno novi formalizam za opis takvih sustava. Standardne perturbacijske metode daju rezultat u obliku perturbacijskog

razvoja i efikasnost tih metoda ovisi o veličini perturbacije. Ako je perturbacija suviše jaka i ukoliko nema neki poseban oblik (koji u nekim slučajevima omogućuje djelomično ili čak potpuno sumiranje članova perturbacijskog razvoja), standardni perturbacijski pristup je numerički kompleksan, a kod jakih interakcija često i nemoguć, jer perturbacijski razvoj divergira. Metoda perturbacije niskog ranga nema tih problema, jer kompleksnost rješenja ne ovisi o veličini perturbacije. Ta metoda daje uvijek točan rezultat, bez obzira na to koliko je perturbacija velika. Stoga se očekuje da će taj pristup dati novi uvid u mehanizam interakcije kvantnih sustava, novo objašnjenje nekih poznatih fenomena, numerički efikasniju obradu nekih drugih fenomena, kao i predviđanje novih fenomena. Potencijalno to može rezultirati širokom primjenom u mnogim oblastima kako kvantne kemije tako i fizike.

U okviru projekta do sada je razvijen opći matematički formalizam za tretiranje interakcije proizvoljnog konačnog kvantnog sustava A s proizvoljnim konačnim, ali poznatim kvantnim sustavom. Za razliku od standardnog perturbacijskog pristupa, taj formalizam ne sadrži nikakav razvoj u red potencija. Stoga taj formalizam daje točan rezultat i u slučaju proizvoljno jake interakcije sustava A i B, a može se primijeniti kako na opisivanje statičkih tako i na opisivanje dinamičkih svojstava kvantnog sustava A koji interagira s poznatim konačnim kvantnim sustavom B. Također je dobiveno djelomično rješenje šireg problema interakcije s beskonačnim sustavom B. Taj problem je riješen za slučaj interakcije izoliranog energetskog nivoa (sustav A) s beskonačnim sustavom B koji posjeduje jednu jednoparametarsku energetsku vrpcu. Treba naglasiti da je interakcija s poznatim beskonačnim sustavom B od suštinskog teoretskog interesa. Primjer jednog takvog beskonačnog sustava je elektromagnetsko polje. Taj je sustav u suštini poznat i sastoji se (pojednostavljeno) od ravnih valova koji predstavljaju fotone.

Research programme and results:

Using low rank perturbation method (T.P. Živković, *Theor. Chim. Acta*, 76 (1989) 331-351; *J. Math. Chem.*, 9 (1992) 55-73; *ibid.* 28 (2000) 267-285, 287-312) program is to develop a general approach for the description of the interaction of quantum systems. The goal is to develop a mathematical formalism for the efficient description of statical and dynamical properties of quantum system A that has discrete energy levels and that interacts with a known quantum system B. System B can be finite as well as infinite. This formalism should enable a detailed description of the interaction of a molecule (system A) with electromagnetic field (system B), molecule that is situated on the surface of a solid state (system A) with this solid state, molecule in a solution (system A) with this solution (system B), etc. Such and similar systems are usually described by many other known methods, the most important being the perturbation method. Suggested approach should give qualitatively new formalism for the description of such systems. Standard perturbation method gives the solution in terms of the power series expansion, and its efficiency highly depends on the perturbation magnitude. If the perturbation is too strong and if it does not have some special form (which in some cases enables partial or even complete summation of the expansion terms), standard perturbation approach is numerically complex, and in the case of strong interactions even impossible, since perturbation expansion diverges. Low rank perturbation method does not have such problems, irrespective of the strength of the perturbation. Therefore, it is expected that this approach will provide a new insight into the mechanism of the interaction of quantum systems, new explanation of some known phenomena, numerically more efficient treatment of some other phenomena, as well as a prediction of some new phenomena. Potentially, this may result in a wide range of applications in many fields of quantum chemistry and physics.

Within this project until now general mathematical formalism for the treatment of the interaction of an arbitrary finite quantum system A with an arbitrary finite but known quantum system B is developed. Unlike standard perturbation approach, this formalism is exact and it involves no power series expansion. Accordingly, it produces correct results also in the case of an arbitrary strong interaction between systems A and B, and it can be applied for the description of statical as well as dynamical properties of a system A subject to such an interaction. Partial solution for the analogous problem of the interaction of a system A with an

infinite system B is also obtained. This solution treats the problem of the interaction of a single eigenvalue level (system A) with a known system B containing a single one-parameter eigenvalue band. It should be emphasized that the problem of the interaction with the known infinite system B is of essential theoretical interest. An example of such an infinite system is the electromagnetic field, which can be considered as an infinite system which is essentially known (plane waves representing photons).

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Amić, Dragan; Basak, S. C.; Lučić, Bono; Nikolić, Sonja; Trinajstić, Nenad. Structure-water solubility modeling of aliphatic alcohols using the weighted path numbers. // SAR & QSAR in environmental research. 13 (2002), 2; 281-295.
2. Babić, Darko; Bosanac, Slobodan Danko; Došlić, Nađa. Proton transfer in malonaldehyde: a model three-dimensional study. // Chemical physics letters. 358 (2002), 3-4; 337-343.
3. Babić, Darko; Klein, Douglas, J.; Lukovits, Istvan; Nikolić, Sonja; Trinajstić, Nenad. Resistance-distance matrix: a computational algorithm and its application. // International journal of quantum chemistry. 90 (2002), 1; 166-176.
4. Banić-Tomišić, Zrinka; Kujundžić, Nedjeljko; Bukvić Krajačić, Mirjana; Višnjevac, Aleksandar; Kojić-Prodić, Biserka. Molecular structures of new ciprofloxacin derivatives. // Journal of molecular structure. 611 (2002) 73-81.
5. Basarić, Nikola; Marinić, Željko; Višnjevac, Aleksandar; Kojić-Prodić, Biserka; Griesbeck, Axel; Šindler-Kulyk, Marija. Photochemical transformations of 2,2'-(1,2-phenylenedivinylene)dipyrroles. // Photochemical and photobiological sciences. 1 (2002), 12; 1017-1023.
6. Bilinski, Halka; Giovanoli, Rudolf; Usui, Akira; Hanžel Darko. Characterization of Mn oxides in cemented streambed crusts from Pinal Creek, Arizona, U.S.A., and in hot-spring deposits from Yuno-Taki Falls, Hokkaido, Japan. // American mineralogist. 87 (2002) 580-591.
7. Bors, Wolf; Kazazić, Snježana P.; Michel, Christa; Kortenska, Vessela D.; Stettmaier, Kurt; Klasinc, Leo. Methoxyphenols-antioxidant principles in food plants and spices: pulse radiolysis, epr spectroscopy, and density functional theory calculations. // International journal of quantum chemistry. 90 (2002) 969-979.
8. Brajenović, Nataša; Tonković, Maja. Chromatographic mobility of metals on paper impregnated with some components of the plant cell walls. // Journal of liquid chromatography and related technology. 25 (2002), 12; 1855-1862.
9. Brajenović, Nataša; Tonković, Maja. The effect of citrate and phosphate ions on the mobility of metals. // Journal of liquid chromatography and related technology. 25 (2002), 3; 409-414.
10. Butković, Vjera; Cvitaš, Tomislav; Džepina, Katja; Kezele, Nenad; Klasinc, Leo. Long-term ozone data analysis. // Croatica chemica acta. 75 (2002), 4; 927-933.

11. Butler, James P.; Tolić-Norrelykke, Iva Marija; Fabry, Ben; Fredberg, Jeffrey J. Traction fields, moments, and strain energy that cells exert on their surroundings. // *American journal of physiology - cell physiology*. 282 (2002), 3; c595-c605.
12. Čulin, Jelena; Frka, Sanja; Andreis, Mladen; Šmit, Ivan; Veksli, Zorica; Anžlovar, Alojz; Žigon, Majda. Motional heterogeneity of segmented polyurethane-polymethacrylate mixtures: an influence of functional groups concentration. // *Polymer*. 43 (2002), 14; 3891-3899.
13. Došlić, Nađa; Stare, Jernej. Dissipative state selective vibrational excitation in picolinic acid N-oxide. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 1; 59-75.
14. Galasso, V; Goto, K; Miyahara, Y; Kovač, B; Klasinc, L. On the structure and spectroscopic properties of bispidine, N,N'-dimethylbispidine and a bis-bispidine macrocycle. // *Chemical physics*. 277 (2002) 229-240.
15. Gil, A.M.; Alberti, E.; Parreira, C.; Goodfellow, B.J.; Rakvin, Boris. A fast MAS 1H NMR study of amino acids and proteins. // *Journal of molecular structure*. 602-603 (2002) 357-366.
16. Kazazić, Saša; Kazazić, P. Snježana; Klasinc, Leo; McGlynn, Sean P.; Pryor, William A. Proton affinities of N-O anions and their protonated forms. // *Journal of physical organic chemistry*. 15 (2002) 728-731.
17. Klasinc, Leo; von Knop, Jan; Ivaniš, Sanja; Nikolić, Sonja. Computing the variable vertex-connectivity index. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 2; 651-661.
18. Koellner, Gertraud; Bzowska, Agnieszka; Wielgus-Kutrowska, Beata; Luić, Marija; Steiner, Thomas; Saenger, Wolfram; Stepinski, Janusz. Open and closed conformation of the E. coli purine nucleoside phosphorylase active center and implications for the catalytic mechanism. // *Journal of molecular biology*. 315 (2002), 3; 351-371.
19. Kwokal, Željko; Frančišković-Bilinski, Stanislav; Bilinski, Halka; Branica, Marko. A comparison of anthropogenic mercury pollution in Kaštela Bay (Croatia) with pristine estuaries in Öre (Sweden) and Krka (Croatia). // *Marine pollution bulletin*. 44 (2002), 10; 1150-1155.
20. Ljubić, Ivan; Sabljic, Aleksandar. Theoretical study of mechanism and kinetics of the gas-phase ozone additions to ethene, fluoroethene and chloroethene: a multireference approach. // *Journal of physical chemistry A*. 106 (2002), 18; 4745-4757.
21. Lučić, Bono; Bašić, Ivan; Nadramija, Damir; Miličević, Ante; Trinajstić, Nenad; Suzuki, Takahiro; Petrukhin, Ruslan; Karelson, Mati; Katritzky, Alan R. Correlation of liquid viscosity with molecular structure for organic compounds using different variable selection methods. // *ARKIVOC*. IV (2002) 45-59.
22. Lučić, Bono; Miličević, Ante; Nikolić, Sonja; Trinajstić, Nenad. Harary index - twelve years later. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 4; 847-868.
23. Lukovits, Istvan; Graovac, Ante; Kalman, Erika; Kaptay, Gyoergy; Nagy, Peter; Nikolić, Sonja; Sytchev, Jaroslav; Trinajstić, Nenad. Nanotubes: number of kekule structures and aromaticity. // *Journal of chemical information and computer sciences*.

- 43 (2003) 609-614.
24. Lukovits, István; Nikolić, Sonja; Trinajstić, Nenad. On relationship between vertex-degrees, path-numbers and graph valence-shells in trees. // *Chemical physics letters*. 354 (2002) 417-422.
25. Maltar-Strmečki, Nadica; Rakvin, Boris; Cevc, Pavle; Arčon Denis. Relaxation mechanism in gamma-ray-irradiated L-alanine studied by transfer saturation EPR and pulse EPR. // *Applied magnetic resonance*. 22 (2002) 551-560.
26. Merunka, Dalibor; Rakvin, Boris. Molecular dynamics simulation of the soft mode for hydrogen-bonded ferroelectrics. // *Physical review B*. 66 (2002) 174101-174109.
27. Mikšić, Vesna; Pivac, Branko; Rakvin, Boris; Zorc, Hrvoje; Corni, F.; Tonini, R.; Ottaviani, G. DLTS and EPR study of defects in H implanted silicon. // *Nuclear instruments & methods in physics research B*. 186 (2002) 36-40.
28. Murrell, J. N.; Wright, T.G.; Bosanac, Slobodan. A search for bound levels of the van der waals molecules: H-2(a(3)Sigma+(+)(u)), HeH(X-2 Sigma(+)), LiH(a(3)Sigma(+)) and LiHe(X-2 Sigma(+)). // *Theochem - journal of molecular structure*. 591 (2002) 1-9.
29. Nöthig-Laslo, Vesna; Paulić, Nevenka; Basosi, Riccardo; Pogni, Rebecca. Role of apically bound water molecule on aliphatic-aliphatic side-chain interactions in bis[N,N-dimethyl-L-a-isoleucinato]copper(II) studied by EPR spectroscopy. // *Polyhedron*. 21 (2002) 1643-1649.
30. Novak, I.; Li, D. B.; Kovač, B. Electronic structure of poly-iodobenzenes. // *Journal of physical chemistry A*. 106 (2002) 2850-2854.
31. Novak, I.; Li, D. B.; Potts, A. W.; Shareef, A.; Kovač, B. Halogen-halogen interactions in halomethanes. // *Journal of organic chemistry*. 67 (2002) 3510-3513.
32. Novak, Igor; Kovač, Branka. Electronic structure of coumarins. // *Spectrochimica acta A*. 58 (2002); 1483-1488.
33. Novak, Igor; Kovač, Branka; Kovačević, Goran. Structure and stability of common sesquiterpenes. // *Spectrochimica acta A*. 58 (2002) 2223-2226.
34. Pivac, Branko; Rakvin, Boris; Tonini, R.; Corni, F.; Ottaviani, G. Reply to comments on 'EPR study of He-implanted Si' by P. Pivac, B. Rakvin, R. Tonini, F. Corni, G. Ottaizani, published in *Mater. sci. eng. B73* (2000) 60-63 - written by M. Kakazey, M. Vlasova, and J.G. Gonzalez-Rodriguez - Reply to discussion. // *Materials science and engineering b - solid state materials for advanced technology*. 90 (2002), 1-2; 211-212.
35. Randić, Milan; Plavšić, Dejan. On the concept of molecular complexity. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 1; 107-116.
36. Sikirić, Maja; Primožić, Ines; Nada Filipović-Vinceković. Adsorption and association in aqueous solutions of dissymmetric gemini surfactant. // *Journal of colloid and interface science*. 250 (2002) 221-229.
37. Stamenović, Dimitrije; Mijailovich, Srboľjub M.; Tolić-Norrelykke, Iva Marija; Chen, Jianxin; Wang, Ning. Cell prestress. II. contribution of microtubules. // *American*

- journal of physiology - cell physiology. 282 (2002), 3; C617-C624.
38. Stiplošek, Zdenka; Šindler-Kulyk, Marija; Jakopčić, Krešimir; Višnjevac, Aleksandar; Kojić-Prodić, Biserka. On the photochemical dimerization of some 5-substituted 2-styryl-4-pyrones. the effect of 5-hydroxy-/5-methoxy- substitution. // Journal of heterocyclic chemistry. 39 (2002), 1; 37-44.
 39. Tolić-Norrelykke, Iva Marija; Butler, J. P.; Chen, J. X.; Wang, N. Spatial and temporal traction response in human airway smooth muscle cells. // American journal of physiology - cell physiology. 283 (2002), 4; C1254-C1266.
 40. Tomašić, Vlasta; Tomašić, Ana; Filipović-Vinceković, Nada. Interactions between dodecylammonium chloride and jota-carrageenan. // Journal of colloid and interface science. 256 (2002) 462-471.
 41. Tomić, Mirjana; Kovačević, Miće; Antolić, Snježana; Kojić-Prodić, Biserka. Synthesis, structure elucidation and reactivity of novel azetidinone-oxiranes. // Croatica chemica acta. 75 (2002), 1; 211-224.
 42. Tušek-Božić, Ljerka. Infrared spectra of monoalkyl (α -anilino-N-benzyl)phosphonates, their sodium salts and dipalladium(II) metallocyclic complexes. // Vibrational spectroscopy. 28 (2002), 2; 235-241.
 43. Tušek-Božić, Ljerka; Lyčka, Antonin. ^1H , ^{13}C and ^{31}P NMR spectral analysis of monoalkyl α -anilinobenzylphosphonates and their dipalladium(II) metallocyclic complexes. // Magnetic resonance in chemistry. 40 (2002), 3; 175-181.
 44. Tušek-Božić, Ljerka; Meider, Henrika. Determination of palladium and phosphorus in biologically active palladium(II) complexes of aminophosphonic acid derivatives. // Annali di chimica. 92 (2002), 11-12; 1165-1169.
 45. Višnjevac, Aleksandar; Avdagić, Amir; Kojić-Prodić, Biserka. 3(S)-acetoxymethyl-7-chloro-1,3-dihydro-1-methyl-5-phenyl-2H-1,4-benzodiazepin-2-one. // Acta crystallographica section E : Structure reports online. 58 (2002), 2; 148-150.
 46. Višnjevac, Aleksandar; Basarić, Nikola; Kojić-Prodić, Biserka; Šindler-Kulyk, Marija. E-5-methyl-2-(2-methylstyryl)pyrrole. // Acta crystallographica E : Structure reports online. 58 (2002) 909-910.
 47. Višnjevac, Aleksandar; Tušek-Božić, Ljerka; Majerić-Elenkov, Maja; Hameršak, Zdenko; Kooijman, Huub; De Clercq, Erik; Kojić-Prodić, Biserka. Synthesis, structural characterisation and biological activity of Zn(II) and Pd(II) complexes of 3-substituted 5-(2'-Pyridyl)- 1,4-benzodiazepin-2-one derivatives. // Polyhedron. 21 (2002), 25-26; 2567-2577.
 48. Vujaklija, Dušica; Schroeder, Werner; Abramić, Marija; Zou, Peijian; Leščić, Ivana; Franke, Peter; Pigac, Jasenka. A novel streptomyces lipase: cloning, sequencing and high-level expression of the streptomyces rimosus GDS(L)-lipase gene. // Archives of microbiology. 178 (2002), 2; 124-130.
 49. Wang, Ning; Tolić-Norrelykke, Iva Marija; Chen, Jianxin; Mijailovich, Srbojub M.; Butler, James, P.; Fredberg, Jeffrey, J.; Stamenović, Dimitrije. Cell prestress. I. Stiffness and prestress are closely associated in adherent contractile cells. // American journal of physiology - cell physiology. 282 (2002), 3; C606-C616.

50. Živković, Tomislav P. Interaction of a single state with a known infinite system containing one-parameter eigenvalue band. // *Journal of mathematical chemistry*. 32 (2002), 2; 99-158.
51. Živković, Tomislav P. On the interaction of two finite dimensional quantum systems. // *Journal of mathematical chemistry*. 32 (2002), 1; 39-71.
52. Živković, Tomislav P. On the vibrational interlacing rule in linear and planar molecules. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 4; 945-956.

Knjige i poglavlja u knjigama:

1. Filipović-Vinceković, Nada; Tomašić, Vlasta. Solid-phase transitions of ionic surfactants // *Encyclopedia of Surface and Colloid Chemistry / Hubbard, Arthur (ur.)*. Santa Barbara: Marcel Dekker, 2002. 4718-4736.
2. Klein, Douglas, J.; Babić, Darko; Trinajstić, Nenad. Enumeration in chemistry // *Chemical modelling: applications and theory, vol. 2 / A. Hinchliffe (ur.)*. London: The Royal Society of Chemistry, 2002. 56-95
3. Magnus, Volker; Kojić-Prodić, Biserka. Auxins (indole auxins) // *Encyclopedia of agrochemicals, volume 1 / Plimmer, Jack R. (ur.)*. New York : Wiley Interscience, 2002. 99-121.
4. Nikolić, Sonja; Trinajstić, Nenad; Tolić, Iva, Marija; Rücker, G.; Rücker, C. On molecular complexity indices // *Complexity - introduction and fundamentals / Bonchev, D.; Rouvray, D. H. (ur.)*. London : Taylor & Francis, 2002. 23-76.
5. Trinajstić, Nenad. 100 hrvatskih kemičara. Zagreb : Školska knjiga, 2002.
6. Trinajstić, Nenad. Quantum theory in chemistry // *Hundred years of quantum theory / Tadić, Dubravko (ur.)*. Zagreb : Croatian Academy of Sciences and Arts, 2002. 55-66.

Ostali radovi u časopisima:

1. Amić, Dragan; Trinajstić, Nenad. Antioksidacijska aktivnost vina. // *Gazophylacium*. VII (2002) 88-93.
2. Frančišković-Bilinski, Stanislav; Bilinski, Halka; Tibljaš, Darko; Hanžel, Darko; Mertelj, Alenka. Characterization of sediments from Voglajna and Savinja rivers - preliminary results. // *Geologija*. 45 (2002), 2; 367-372.
3. Graovac, Ante. Foreword: math/chem/comp 2001 session on philosophy of chemistry, Inter-university center, Dubrovnik, Croatia, June 25-30, 2001. // *Kemija u industriji*. 51 (2002), 9; I.
4. Graovac, Ante; Pokrić, Biserka; Vikić-Topić, Dražen. Foreword: proceedings of the 16th Dubrovnik international course & conference MATH/CHEM/COMP 2001. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 4; VII-VIII.
5. Jokić, Maja; Andreis, Mladen; Klaić, Branimir. Pedeset godina Kemije u industriji- bibliometrijski i scientometrijski prikaz. // *Kemija u industriji*. 51 (2002), 3; 116-122.
6. Kojić-Prodić, Biserka. U spomen: Max F. Perutz, OM FRS (1914.-2002.): "Science is not a quiet life". // *Kemija u industriji*. 51 (2002), 6; 301-307.

7. Lukovits, István; Miličević, Ante; Nikolić, Sonja; Trinajstić, Nenad. On walk counts and complexity of general graphs. // *Internet electronic journal of molecular design*. 1 (2002) 388-400.
8. Nikolić, Sonja; Trinajstić, Nenad. Milan Randić — life and work. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 3; 319-327.
9. Sabolović, Jasmina; Noethig-Laslo, Vesna. The influence of amino acid side chains on water binding to the copper(II) in bis(N,N-dimethyl-L-a- isoleucinato)-copper(II): an EPR and molecular mechanics study. // *Celular & molecular biology letters*. 7 (2002), 1; 151-153.
10. Sikirić, Maja; Černy, Tajana; Posavac, Jasna; Homen, Biserka. Sustavi kontrole kakvoće u mješavinama stočne hrane. // *Krmiva*. 44 (2002) 267-275.
11. Tomić, Sanja; Kojić-Prodić, Biserka. A quantitative model for predicting enzyme enantioselectivity: application to burkholderia cepacia lipase and 3-(aryloxy)-1,2-propanediol derivatives. // *Journal of molecular graphics and modelling*. 21 (2002), 3; 241-252.
12. Tonković, Maja. Analize kamenaca mokraćnog sustava - povezanost sustava sa spolom, mjestom stanovanja i starosti oboljelih. // *Kemija u industriji*. 51 (2002), 7-8; 329-336.
13. Trinajstić, Nenad; Gutman, Ivan. Mathematical chemistry. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 3; 329-356.
14. Veksli, Zorica; Čulin, Jelena. Primjena elektronske spinske rezonancije u istraživanju polimera (application of electron spin resonance spectroscopy in polymer research). // *Polimeri*. 23 (2002), 4-5; 83-102.
15. Višnjavec, Aleksandar; Kojić-Prodić, Biserka. Cambridge structural database - zlatni rudnik znanja. // *Kemija u industriji*. 51 (2002), 10; 425-430.

Znanstveni radovi u tisku:

1. Topić, Mladen; Valić, Srećko; Gallot, Yves; Musić, Svetozar. Investigation of relaxations in polystyrene-polyoxyethylene copolymer by thermally stimulated current. // *Thermochimica Acta*.

Doktorske disertacije:

1. Sikirić, Maja. Utjecaj poveznika na fizičko-kemijska svojstva asimetričnih dimernih surfaktanata. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 16.7.2002., 158 str., voditelj: Filipović-Vinceković, Nada.
2. Tolić-Norrelykke, Iva Marija. Stanice kao tensegrične strukture. Polja sila i citoskeletna napetost izmjereni u pojedinačnim glatkim mišićnim stanicama. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 8.4.2002., 131 str., voditelj: Trinajstić, Nenad.

Magistarski radovi:

1. Maltar-Strmečki, Nadica. Dinamika metilnih skupina u okolini stabilnog paramagnetskog centra u L-alaninu. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 27.3.2002., 78 str., voditelj: Rakvin, Boris.

2. Vuković, Slavko. Komparativne teorijske studije molekule C60. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 18.2.2002., 122 str., voditelj: Graovac, Ante.

Diplomski radovi:

1. Dokić, Andrej. Konzervatorsko-restauratorska dijagnoza stanja i analitičke metode u restauriranju slike Menci Clement Crnčić "Makovi". Zagreb : Likovna akademija, 27.9.2002., 100 str., voditelji: Horvat-Kurbegović, Šefka; Kojić-Prodić, Biserka; Biffel, Josip.
2. Grbelja, Marko. Pristupi rekonstrukciji grba grada na kužnom pilu presvetog Trojstva u Požegi. Zagreb : Likovna akademija, 22.5.2002., 126 str., voditelji: Horvat-Kurbegović, Šefka; Kojić-Prodić, Biserka.
3. Lenac, Tihana. Kristalna struktura lipaze u kompleksu s inhibitorom. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 21.2.2002, 60 str., voditelji: Luić, Marija; Weygand-Đurašević, Ivana.
4. Lončar, Božena. Dobivanje fullerena i nanocjevčica. Split : Fakultet prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja, 4.6.2002., 46 str., voditelj: Graovac, Ante.
5. Marinc, Sabina. Termički fazni prijelazi alkilamonijevih kolata. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 5.11.2002., 65 str., voditelji: Tomašić, Vlasta; Vicković, Ivan
6. Matrakoska, Violeta. Stabilnost nekih podstruktura fullerena. Zagreb : Farmaceutsko-biokemijski fakultet, 18.7.2002, 52 str., voditelj: Kronja, Olga.
7. Močilac, Pavle. Modeliranje biološke aktivnosti molekula s pomoću 1D, 2D i 3D deskriptora. Zagreb : Farmaceutsko-biokemijski fakultet, 20.3. 2002., 81 str., voditelji: Lučić, Bono; Medić-Šarić, Marica.
8. Pekić, Nada. Izomeri fullerena. Split : Fakultet prirodoslovno-matematičkih znanosti i odgojnih područja, 9.11.2002., 60 str., voditelj: Graovac, Ante.
9. Piližota, Teuta. Modeliranje općih svojstava strukture proteina izborom najznačajnijih varijabli. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 20.6.2002., 64 str., voditelj: Lučić, Bono.
10. Pleadin, Mirela. Adsorpcija i asocijacija u smjesama površinski aktivnih tvari i polisaharida. Zagreb: Prehrambeno-biotehnološki fakultet, 10.6.2002., 46 str., voditelji: Ciković, Nada; Tomašić, Vlasta.
11. Tomašić, Ana. Međudjelovanje Jota-karagenana i dodecilamonijevog klorida u vodenim otopinama. Zagreb : Prehrambeno-biotehnološki fakultet, 10.1.2002., 47 str., voditelji: Ciković, Nada; Filipović-Vinceković, Nada.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

- Mijušković, M.: Arhealne aminoacil-tRNA sintetaze, 16.1.2002.
Brnjas- Kraljević, J.: Izvješće s konferencije u Kyotu; "4. International Conference on Biological Physics" (održane 3.7.-3.8.2001.), 23.1.2002.
Kriško, A.: Heparin vezujući proteini, 30.1.2002.
Miloš, I.: Proteomix i sistemi za analizu proteina tvrtke Biorad, 6.2.2002.
Muačević-Katanec, D.: Terapijski ciljevi u liječenju hiperglikemije, 20.2.2002.
Vukić, N.: Klinička ispitivanja povezanosti lipidnog metabolizma i kardiovaskularnih bolesti, 6.3.2002.
Raguž, M.: Fluorescencija u biološkim sustavima, 13.3.2002.

- Domijan, D., Sveučilište u Rijeci, Filozofski fakultet, Odjel za psihologiju: Neuronske mreže za modeliranje kognitivnih i perceptivnih procesa, Zajednički kolokvij Hrvatskog biofizičkog društva, Hrvatskog društva za neuroznanosti i Grupe za teorijsku kemiju povodom Tjedna istraživanja mozga, 15.3.2002.
- Čalić, V.: LDL i heparin, 20.3.2002.
- Kveder, M.: LDL i gangliozidi, 3.4.2002.
- Černe, D.: Proučavanje povezanosti količine sijalične kiseline u lipoproteinima male gustoće i razvitka ateroskleroze srčanih i karotidnih arterija, 17.4.2002.
- Ljubić, I.: Solvacijski modeli u kvantnoj kemiji, Kolokvij grupe za teorijsku kemiju, 18.4.2002.
- Kriško, A.: Heparin i LDL, 24.4.2002.
- Kezele, N.: Analiza dugoročnih mjerenja ozona u troposferi, nastupno predavanje, 7.5.2002.
- Tomašić, V.: Amfotropna svojstva površinski aktivnih tvari, nastupno predavanje, 17.5.2002.
- Antolić, S.: Izazov-kristalizacija ribosoma, nastupno predavanje, 20.5.2002.
- Pifat-Mrzljak, G., Brnjas-Kraljević, J.: Izvještaj sa Svjetskog biofizičkog kongresa u Argentini, 22.5.2002.
- Lukovits, I., Institute of Chemistry, Chemical Research Center, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Mađarska: Enumeration of Kekule structures in nanotubes, Kolokvij grupe za teorijsku kemiju, 20.6.2002.
- Zrinski-Topić, R.: Novosti u dijagnostici hiperlipoproteinemija, 10.7.2002. Armstrong, D.A., Department of Chemistry, University of Calgary, Calgary, Kanada: The role of trimers in thermal electron capture by HCl: an Ab initio study, Zajednički kolokvij Zavoda za fizičku kemiju i Zavoda za kemiju materijala, 9.9.2002.
- Bonifačić, M.: Kemija slobodnih radikala, nastupno predavanje, 16.10.2002.
- Kriško, A.: Interakcije aromata u stabilizaciji strukture proteina, 16.10.2002.
- Raguž, M.: Fluorescencija prodana u ovisnosti o različitim koncentracijama HDL-a i alkohola, 6.11.2002.
- Ilakovac-Kveder, M.: Gašenje fluorescencije nitroksilnim radikalima, 13.11.2002.
- Kriško, A.: O konferenciji "Lipids and biomembranes; new technologies", 20.11.2002.
- Kriško, A.: Metode istraživanja membranskih proteina, 28.11.2002.
- Čavić, D.: Indol-3-octena kiselina i fluorescentna svojstva njezinih derivata, 4.12.2002.
- Bonifačić, M.: Kemija slobodnih radikala, Seminar Grupe za lipoproteine, 18.12.2002.
- Tomić, S.: Biološka aktivnost kao funkcija strukture: molekularno modeliranje i 3D QSAR, nastupno predavanje, 23.12.2002.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

- Graovac, A.: Teorija grupa sa primjenama u fizici i kemiji, Seminar iz reprezentacije grupa, Prirodoslovno-matematički fakultet, Matematički odjel, Zagreb, 15.1.2002.
- Došlić, N.: Proton transfer dynamics in malonaldehyde, Free University Berlin, Berlin, Njemačka, 24.1.2002.
- Pifat-Mrzljak, G.: Joint international laboratories, 1.Croatian-Austrian science days, Zagreb, 4.2.-5.2.2002.
- Pifat-Mrzljak, G.: Current scientific and educational corporation in the field of biophysics, 1. Croatian-Austrian science days, Zagreb, 4.2.-5.2.2002.
- Klasinc, L.: Gas phase synthesis of metal (+) complexes in FTMS, University of North Texas, Denton, Texas, SAD, 15.2. 2002.
- Klasinc, L.: Gas phase reactions of metal ions with PAH, Sveučilište za tehnologiju i ekonomiju, Budimpešta, Mađarska, 21.3. 2002.
- Pifat-Mrzljak, G.: Međudjelovanja lipoproteina i biološki aktivnih tvari, Hrvatski liječnički zbor i Hrvatsko društvo za homeostazu i trombozu, Zagreb, 5.5.2002.
- Živković, T.: Matematički opis kvantnih sistema u interakciji – jednostavan model interakcije molekule s površinom kristala, Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti, Zagreb, 4. 6. 2002.
- Leščić, I.: Bakterijske lipaze: sekvencija→3D struktura→funkcija, Hrvatsko biokemijsko društvo, Zagreb, 1.7.2002.

Pifat-Mrzljak, G.: Protein-lipid interactions in lipoproteins, COST D 22 working group, Molecular interactions of the lipid-protein interface, University of Calabria, Arcavacata di Rende, Italija, 5-7.7.2002.

Tomić, S.: Classification of auxin related compounds based on similarity of their interaction fields and logP prediction, European Media Laboratory, Heidelberg, Njemačka, 8.7.2002.

Tolić-Nørrelykke, I.M.: From subdiffusion to superdiffusion in living cells, Niels Bohr Institute, Copenhagen, Danska, 27.11.2002.

Pifat-Mrzljak, G.: Regional postgraduate/doctoral studies- International summer school on biosciences, 2. Croatian-Austrian science days, Zagreb, 28-30.11.2002.

Klasinc, L.: Trend and frequency analysis of surface ozone data over Europe, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, SAD, 16.12.2002.

Pigac, J.: Novi tip lipaze kod Streptomiceta, 372. kolokvij Hrvatskog genetičkog društva, Zagreb, 18.12.2002.

Sikirić, M.: Influence of hydrophobic spacer length on the properties of dissymmetric dimeric surfactants, Casali Institute of Applied Chemistry, The Hebrew University of Jerusalem, Jerusalem, Izrael, 31.12.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

Tolić-Nørrelykke, I. M., Niels Bohr Institute, Copenhagen, Danska, 1.1.-31.12.2002.

Antolić, S., Institut für Molekularbiologie und Biophysik, ETH, Zürich, Švicarska, 1.8.2000.-31.11.2002.

Sikirić, M., Casali Institute of Applied Chemistry, The Hebrew University of Jerusalem, Jerusalem, Izrael, 20.8.-31.12.2002.

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje:

Klasinc, L., Louisiana State University, Baton Rouge, SAD, 26.1-19.3.2002.

Valić, S., Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, Orsay, Francuska, 8-26.7. i 9-27.9.2002.

Rakvin, B., Florida State University, Tallahassee, SAD, 9.7.-10.8.2002.

Bonifačić, M., Universität Leipzig, Fakultät für Chemie und Mineralogie, Interdisziplinäre Arbeitsgruppe "Zeitaufgelöste Spektroskopie", Leipzig, Njemačka, 28.10.-26.11.2002.

Klasinc, L., Louisiana State University, Baton Rouge, SAD, 22.11-20.12.2002

Sudjelovanja na kongresima:

WORKSHOP ON THEORETICAL CHEMISTRY: DENSITY FUNCTIONAL-THEORY, TIME INDEPENDENT AND TIME DEPENDENT

Mariapfarr, Austrija, 19.2.-22.2.2002.

Sudionik: Kovačević, G.

EUROTRAC-2 SYMPOSIUM 2002

Garmisch Partenkirchen, Njemačka, 11.3.-15.3.2002.

Sudionici: Butković, V.; Cvitaš, T.; Džepina, K.; Kezele, N.; Klasinc, L.

Prilozi:

Butković, V.; Cvitaš, T.; Džepina, K.; Kezele, N.; Klasinc, L. Boundary layer ozone measurements in Croatia, poster.

Cvitaš, T.; Kezele, N.; Klasinc, L.: Ozone data FT analysis from the TOR-2 network, poster.

9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE CRYSTALLIZATION OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES

Jena, Njemačka, 23.3.-28.3.2002.

Sudionica: Leščić, I.

Prilog:

Leščić, I.; Vujaklija, D.; Pigac, J.; Abramić, M.: Extracellular lipase from bacterium

Streptomyces rimosus: cloning, expression and purification for crystallization, poster.

MUSTAFA KEMAL UNIVERSITY-INTERNATIONAL ORGANIC CHEMISTRY MEETING
Antakya, Hatay, Turska, 25.3.-28.3.2002.

Sudionica: Nikolić, S.

Prilog:

Lučić, B.; Miličević, A.; Nikolić, S.; Trinajstić, N.: Improved QSAR modeling of acute aquatic toxicity of benzene derivatives, pozvano predavanje.

THE 19TH GENERAL CONFERENCE OF THE CONDENSED MATTER DIVISION OF THE
EUROPEAN PHYSICAL SOCIETY HELD JOINTLY WITH CMMP 2002 CONDENSED
MATTER AND MATERIALS PHYSICS CONFERENCE OF THE INSTITUTE OF PHYSICS
Brighton, Engleska, 7.4.-11.4.2002.

Sudionik: Merunka, D.

Prilog:

Merunka, D.; Rakvin, B.: Polarization dynamics in KDP and DKDP according to the modified strong dipole-proton coupling model, poster.

223RD ACS NATIONAL MEETING ORLANDO

Florida, SAD, 7.4.-11.4.2002.

Sudionik: Ramsey, C. M.

Prilog:

Ramsey, C.M.; Rakvin, B.; Cage, B.; Dalal, N.S.; Hillard, E.A.; Cotton, F.A. Spin frustration in an equilateral copper triangle investigated through EPR spectroscopy, poster.

NUCLEAR TUNNELING IN MALONALDEHYDE: A MODEL THREE DIMENSIONAL STUDY
Dresden, Njemačka, 14.4.-19.4.2002.

Sudionica: Došlić, N.

Prilog:

Babić, D.; Bosanac, S.; Došlić, N.: Nuclear tunneling in malonaldehyde: a model three dimensional study, poster.

9. MEĐUNARODNI SASTANAK VAKUUMSKA ZNANOST I TEHNIKA

Trakošćan, 15.5.2002.

Sudionica: Grozdanić, D.

Prilog:

Grozdanić, D.; Rakvin, B.; Pivac, B.; Slaoui, A.; Monna, R.: Study of paramagnetic defects in RTCVD polycrystalline silicon, poster.

HRSMC COURSE: MOLECULAR MODELLING

Amsterdam, Nizozemska, 27.5.-7.6.2002.

Sudionik: Bertoša, B.

CROATIAN, HUNGARIAN AND SLOVENIAN SYMPOSIUM ON INDUSTRIAL
MICROBIOLOGY AND MICROBIAL ECOLOGY

Opatija, Hrvatska, 7.6.-9.6.2002.

Sudionici: Leščić, I.; Pigac, J.; Vujaklija, D.

Prilog:

Vujaklija, D.; Abramić, M.; Leščić, I.; Pigac, J.: The third lipolytic-family in *Streptomyces*, represented by the novel GDS(L) lipase from *S. rimosus*, pozvano predavanje.

I. HRVATSKI KONGRES ZA MOLEKULARNE BIOZNANOSTI UZ MEĐUNARODNO
SUDJELOVANJE

Opatija, Hrvatska, 9.6.-13.6.2002.

Sudionici: Leščić, I.; Luić, M.; Magnus, V.; Tomić, S.

Prilozi:

Antolić, S., Dolušić, E.; Bertoša, B.; Kojić-Prodić, B.; Magnus, V.; Salopek-Sondi, B.; Tomić, S.: Molecular recognition of auxins - a rational approach to plant growth regulation, pozvano predavanje.

Leščić, I.; Vujaklija, D.; Pigac, J.; Abramić, M.: Protein sequence analysis of *Streptomyces rimosus* extracellular lipase, poster.

Luić, M.: The crystal structure of *Burkholderia cepacia* lipase with bound substrate analogues of 1-phenoxy-2-butanol, pozvano predavanje.

Tomić, S.: Molecular modelling and 3D QSAR approach to molecular recognition, poster

14TH SIS SURFACTANTS IN SOLUTION SYMPOSIUM

Barcelona, Španjolska, 9.6.-14.6.2002.

Prilozi:

Sikirić, M.; Primožić, I.; Talmon, I.; Filipović-Vinceković, N.: Effect of the spacer carbon numbers on the adsorption and association of dissymmetric gemini surfactants, poster.

Sikirić, M.; Šmit, I.; Tušek-Božić, Lj.; Primožić, I.; Filipović-Vinceković, N.: Solid state transitions of dissymmetric gemini surfactants, poster.

Tomašić, V.; Tomašić, A.; Filipović-Vinceković, N.: Interaction of hydrophilic polyelectrolyte and oppositely charged surfactants in aqueous solutions, poster

4th CONGRESS OF THE INTERNATIONAL SOCIETY FOR THEORETICAL CHEMICAL PHYSICS (ICTCP-IV)

Marly-le-Roi, Francuska, 9.6.-16.6.2002.

Sudionik: Klasinc, L.

Prilozi:

Kazazić, S. P.; Klasinc, L.; McGlynn, S.P.; Pryor, W.A.: Proton affinities of nitrogen oxyradicals, poster.

Wood, D.M.; Hochmann, P.; Klasinc, L.; McGlynn, S.P.: Vibronic intensities in diatomic molecules, pozvano predavanje.

MATH/CHEM/COMP 2002., THE 17th DUBROVNIK INTERNATIONAL COURSE & CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCES

Dubrovnik, Hrvatska, 24.6.-29.6.2002.

Sudionici: Došlić, N.; Klasinc, L.; Nikolić, S.; Plavšić, D.; Živković, T.

Prilozi:

Babić, D.; Bosanac, S.; Došlić, N.: Nuclear tunneling in malonaldehyde: a model three dimensional study, poster.

Boben, M.; Orbanić, A.; Pisanski, T.; Graovac, A.: Pattern matching of colored point set in 3D, poster.

Brodnik, A.; Graovac, A.; Nilsson, A.; Pisanski, T.: Application of resource allocation problem to the analysis of spectra, predavanje.

Diudea, M. V.; Balaban, S. T.; Primorac, M.; Graovac, A.: Energetics and topology of polyhex nano tubes, predavanje.

Frančišković-Bilinski, S.; Bilinski, H.; Tibljaš, D.; Hanžel, D.; Meretelj, A.: Estuarine sediments from boreal region - an indication of weathering, poster.

Frančišković-Bilinski, S.; Bilinski, H.; Vdović, N.; Balagurunathan, Y.; Dougherty, E. R.: Application of image-based granulometry to siliceous and calcareous estuarine and marine sediment, predavanje.

Kazazić, S. P.; Klasinc, L.; McGlynn, S. P.; Pryor, W. A.: Proton affinities of N-O radicals, poster

Lučić, B.; Miličević, A.; Nikolić, S.; Trinajstić, N.: On modified Zagreb indices, poster.

Orbanić, A.; Pisanski, T.; Boben, M.; Graovac, A.: Drawing methods for 3-connected planar graphs, poster.

Randić, M.; Plavšić, D.: On characterization of molecular complexity, poster.

Trinajstić, N.: On the work of professor Milan Randić, predavanje.
Živković, T.: Interaction of an eigenstate with the one-parameter eigenvalue band, predavanje.

ELEVENTH SLOVENIAN-CROATIAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING

Bohinj, Slovenija, 27.6.-30.6.2002.

Sudionici: Herceg, M.; Štefanić, Z.; Višnjevac, A.

Prilozi:

Herceg, M.; Trinajstić, N.: Croatian-slovenian crystallographic meetings and their echo in *Croatica chemica acta*, predavanje.

Štefanić, Z.; Kojić-Prodić, B.; Makarević, J.; Jokić, M.; Žinić, M.: Supramolecular aggregation via hydrogen bonds in the series of (SS)-phthaloyl-bis-(amino acid methyl ester), predavanje.

Višnjevac, A.; Milovac, S.; Šimunić-Mežnarić, V.; Kojić-Prodić, B.; Vančik, H.: Dimerisation and oxygen loss upon crystallisation of nitroso compounds, predavanje.

SECOND INTERNATIONAL CONFERENCE ON PORPHYRINS AND PHTHALOCYANINES

Kyoto, Japan, 30.6.-5.7.2002.

Sudionici: Srzić, D.

Prilog:

Srzić, D.; Kazazić, S.; Klasinc, L.: Gas-phase reaction of Fe⁺ ions with porphyrine and 9-azaphenanthrene in a laser desorption/ionization Fourier-transform mass spectrometry experiment, poster.

20TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON THE ORGANIC CHEMISTRY OF SULFUR

Flagstaff, Arizona, SAD, 14.7.-20.7.2002.

Sudionici: Bonifačić, M.

Prilog:

Asmus, K.-D.; Bonifačić, M.: Formation and redox reactions of some S-N and Se-N three-electron-bonded intermediates, predavanje.

XIX CONGRESS AND GENERAL ASSEMBLY OF THE INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY

Ženeva, Švicarska, 6.8.-15.8.2002.

Sudionici: Kojić-Prodić, B.; Štefanić, Z.

Prilozi:

Kojić-Prodić, B.; Magnus, V.; Tomić, S.; Antolić, S.; Salopek-Sondi, B.; Dolušić, E.; Bertoša, B.: Molecular recognition of the plant hormone auxin is still a puzzle, poster.

Štefanić, Z.; Jokić, M.; Makarević, J.; Žinić, M.; Kojić-Prodić, B.: Hydrogen bonded molecular assemblies in crystals and gels of chiral bis(aminoalcohol) oxalamides, poster.

BRIJUNI CONFERENCE : SPACE, TIME AND LIFE

Brijuni, Hrvatska, 26.8.-30.8.2002

Sudionici: Bosanac, D.; Došlić, N.; Graovac, A.; Klasinc, L.; Kovačević, G.; Ljubić, I.; Nikolić, S.; Pifat-Mrzljak, G.; Plavšić, D.; Sabljic, A.; Trinajstić, N.; Vlah, I.; Živković, T.

Prilozi:

Butković, V.; Kazazić, S.; Kezele, N.; Klasinc, L.: Measurement and modelling of radical scavenging by flavonoids, poster.

Kovačević, G.; Matanović, I.; Došlić, N.: Prijenos protona u acetilacetonu, *ab-initio* pristup, poster.

Lukovits, I.; Nikolić, S.; Trinajstić, N.: Nanotubes - number of Kekulé structures and aromaticity, poster.

Ljubić, I.: CASSCF/CASPT2 study of the mechanism and kinetics of the gas-phase ozone additions to ethene, fluoroethene and chloroethene, poster.

Nöthig-Laslo, V.; Cevc, P.; Arcon, D.; Šentjurs, M.: A spin labelling study of the hydrophobic barrier in liposomes, predavanje.

Plavšić, D.; Šoškić, M.; Lerš, N.; Frkanec, L.: Modelling of boiling points of benzenoid hydrocarbons revisited, poster.

1ST CENTRAL EUROPEAN CONFERENCE "CHEMISTRY TOWARDS BIOLOGY"

Portorož, Slovenija, 8.9.-12.9.2002.

Sudionici: Bertoša, B.; Luić, M.; Kojić-Prodić, B.; Tušek-Božić, Lj.

Prilozi:

Abramić, M.; Leščić, I.; Vujaklija, D.; Pigac, J.: Extracellular lipase from *Streptomyces rimosus*: an unusual bacterial lipolytic enzyme, pozvano predavanje

Bertoša, B.; Tomić, S.; Ramek, M.; Wade, R.; Kojić-Prodić, B.: New classification procedure for biologically active compounds based on similarity of their molecular interactions and logP prediction, poster.

Keglević, D.; Kojić-Prodić, B.; Banić-Tomišić, Z.: Synthesis and conformational analysis of the repeating units of bacterial spore peptidoglyca, poster.

Luić, M.; Leščić, I.; Lenac, T.; Kojić-Prodić, B.: Molecular basis of enantioselectivity of *Burkholderia cepacia* lipase toward secondary alcohols, poster.

Tušek-Božić, Lj.; Meider, H.; Scarcia, V.; Furlani, A.: Platinum(II) complexes of 2-quinolylmethylphosphonates, synthesis, characterization and cytostatic activity, poster.

EUROTRAC-TOR-2 TROPOSPHERIC OZONE RESEARCH WORKSHOP

Moskva, Rusija, 8.9.-12.9.2002

Sudionici: Kezele, N.; Klasinc, L.

Prilozi:

Cvitaš, T.; Kezele, N.; Klasinc L.: Spectral analysis of boundary layer ozone data from the TOR network, predavanje.

Kezele, N.; Klasinc L.: Spectral analysis of boundary layer ozone data from the TOR network, predavanje.

14TH EUROPEAN SYMPOSIUM ON QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS - DESIGNING DRUGS AND CROP PROTECTANTS: PROCESSES PROBLEMS AND SOLUTIONS

Bournemouth, Velika Britanija, 8.9.-13.9.2002.

Sudionici: Tomić, S.

Prilog:

Tomić, S.: Enantioselectivity of *Burkholderia cepacia* lipase towards primary and secondary alcohols: molecular modelling and 3D QSAR analysis, poster

XV INTERNATIONAL ROUND TABLE, NUCLEOSIDES, NUCLEOTIDES AND NUCLEIC ACIDS

Leuven, Belgija, 10.9.-14.9.2002.

Sudionik: De Clercq, E.

Prilog:

Tušek-Božić, Lj.; Balzarini, J.; De Clercq, E.: Synthesis, cytostatic and antiviral activity of dialkyl 2-and 3-quinoline-substituted alpha-aminophosphonates, poster.

4TH MEDITERRANEAN BASIN CONFERENCE ON ANALYTICAL CHEMISTRY

Portorož, Slovenija, 15.9.-20.9.2002.

Sudionik: Klasinc, L.

ANNUAL SCIENTIFIC MEETING OF THE COST D19 ACTION OF THE EUROPEAN COMMISSION - "NANOCHEMISTRY"

Beč, Austrija, 26.9.-28.9.2002.

Sudionici: Nöthig-Laszlo, V.

Prilog:

Nöthig-Laszlo, V.; Kralj, D.; Brečević, Lj.: A study of ion and molecule interactions with calcium

carbonate polymorphs using Mn^{2+} ions as a paramagnetic probe, poster.

KEMOMETRIA '02

Tatai Edzötábor, Mađarska, 29.9.-1.10.2002.

Sudionica: Nikolić, S.

Prilog:

Lukovits, I.; Miličević, A.; Nikolić, S.; Vračko, M.; Trinajstić, N.: A comparative QSAR study for structure-carcinogenicity relationship of compounds from the carcinogenic potency database, poster.

THE 2nd HVAR SCHOOL ON STRONGLY CORRELATED ELECTRONS

Hvar, Hrvatska, 3.10.-8.10.2002.

Sudionik: Graovac, A.

MACROMOLECULES IN THE 21ST CENTURY

Beč, Austrija, 7.10.-9.10.2002.

Sudionica: Vekslj, Z.

1. SLOVENSKI GEOLOŠKI KONGRES

Črna na Koroškem, Slovenija, 9.10.-11.10.2002.

Sudionici: Frančišković-Bilinski, S.; Bilinski, H.

Prilog:

Frančišković-Bilinski, S.; Bilinski, H.; Tibljaš, D.; Hanžel, D.; Mertelj, A.: Characterization of sediments from Voglajna and Savinja rivers, poster.

THE 7TH ANNUAL MEETING OF THE WORKING PARTY "BIOTRANSFORMATIONS"

Zürich, Švicarska, 9.10.-11.10.2002.

Sudionica: Kojić-Prodić, B.

Prilog:

Abramić, M.; Leščić, I.; Luić, M.; Kojić-Prodić, B.; Pigac, J.; Vujaklija, D.: A novel type of extracellular lipase from *Streptomyces rimosus*: isolation, (bio)chemical characterisation, cloning and crystallisation, poster.

FIRST WORKSHOP OF THE COST CHEMISTRY ACTION D 27 ON PREBIOTIC CHEMISTRY AND EARLY EVOLUTION

Ravello, Italija, 17.10.-20.10.2002.

Sudionica: Nöthig-Laszlo, V.

Prilozi:

Nöthig-Laszlo, V.; Cevc, P.; Arcon, D.; Šetjunc, M.: A spin labelling study of the hydrophobic barrier in liposomes, poster.

Nöthig-Laszlo, V.; Kralj, D.; Brečević, Lj.: A study of ion and molecule interactions with calcium carbonate polymorphs using Mn^{2+} ions as a paramagnetic probe, poster.

THIRTY-FIRST YEAR OF THE TOPOLOGICAL INDEX Z

Tokyo, Japan, 28.10.-29.10.2002.

Sudionik: Graovac, A.

Prilozi:

Graovac, A.: Application of graph drawing algorithms to molecular geometry determination, pozvano predavanje.

Graovac, A.; Plavšić, D. Graphical bond orders: calculation of Hosoya-like molecular descriptors Z'/Z, poster.

HUMBOLDT RESEARCH CONFERENCE ON COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Veliko Trnovo, Bugarska, 30.10.-3.11.2002.

Sudionici: Bertoša, B.; Kovačević, G.; Vlah, I.

Prilozi:

Bertoša, B.; Tomić, S.; Kojić-Prodić, B.: New classification procedure for biologically active compounds based on similarity of their molecular interactions and logP prediction, poster.
Kovačević, G.; Matanović, I.; Došlić, N.: Prijenos protona u acetilacetonu, *ab-initio* pristup, poster.

ACS SOUTHWEST REGIONAL MEETING 2002

Austin, Texas, SAD, 3.11.-6.11.2002.

Sudionik: Klasinc, L.

Prilog:

Wood, D. M.; Hochmann, P.; Klasinc, L.; McGlynn, S. P.: Vibronic intensities in diatomic molecules, poster.

MODERN EPR SPETROSCOPY, EPR-SUMMER SCHOOL

Belgija, 1.12.-8.12.2002.

Sudionica: Maltar-Strmečki, N.

Prilog:

Maltar-Strmečki, N.; Rakvin, B.: Motional dynamics of CD₃ group in l-alanine-d₇ studied by CW and pulse EPR, poster.

FIFTH COST-D11 WORKSHOP ON SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY

Sigtuna, Sweden, 5.12.-8.12.2002.

Sudionica: Nöthig-Laszlo, V.

Prilog:

Nöthig-Laslo, V.; Tomašić, J.; Šentjerc, M.; Pogni, R.: Interactions of biomembranes with amino acids, peptides and other biomolecules by electron paramagnetic resonance spectroscopy, predavanje.

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija:

Cvitaš, T.: predsjednik Međuoedsječke komisije za nomenklaturu i simbole (ICTNS) u Međunarodnoj uniji za čistu i primijenjenu kemiju (IUPAC).

Graovac, A.: Nacionalni predstavnik u "International Society for Theoretical Chemical Physics".

Ilakovac-Kveder, M., Kriško, A.: sudionice COST D22 Actions; Workshop D22; "Nanotechnology opportunities from membrane mimetic systems", Graz, Austrija, 11-12.10.2002.

Kezele, N.: Priprema prijedloga novog projekta pod nazivom: The Eastern Mediterranean, Black and Caspian Seas (Seas of the Old World) Network (SOWNET), Institute of Marine Sciences (IMS-METU), Erdemli, Turska, 30-31.5.2002.

Klasinc, L.: Europska znanstvena fundacija, izrada prijedloga programa za FP-6, Birmingham, Velika Britanija, 10-13.4.2002.

Klasinc, L.: IUPAC, Titularni član Odsjeka za kemiju i okoliš.

Klasinc, L.: sastanak Odsjeka za kemiju i okoliš IUPAC-a, Basel, Švicarska, 2-3.8.2002.

Noethig-Laslo, V.: član Management Committee COST D 27 akcije "Origin of Life and Early Evolution", 1th Workshop of the COST Chemistry Action D27, "Origin of Life and Early Evolution", Ravello, Italija, 17-20.10.2002.

Noethig-Laslo, V.: član Management Committee COST D11 akcije "Supramolecular Chemistry", koordinator radne grupe: WG D11/0020/01 "Interactions of biomembranes with amon acids, peptides and other biomolecules by Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy" (V. Noethig-Laslo, J. Tomašić, M. Šentjerc, R. Pogi), 5th Workshop of the COST Chemistry Action D11, "Supramolecular Chemistry", Sigtuna, Švedska, 5-8.12.2002.

Pifat-Mrzljak, G.: član Managing Committee COST D22 Action and Workshop "Molecular interactions of the lipid-protein interface", Arcavacata di Rende, Calabria, Italija, 4-7.7.2002.

- Pifat-Mrzljak, G.: član Managing Committee COST D22 Actions; Workshop D22; "Nanotechnology opportunities from membrane mimetic systems", Graz, Austrija, 11-12.10.2002.
- Pifat-Mrzljak, G.: sudionik Österreichische Roundtables Zentraleurope, Wien, Austrija, 1-7.9.2002.
- Pifat-Mrzljak, G.: član Subcommision of IUPAB for subcellular macromolecular biophysics, Buenos Aires, Argentina, 26.4.-5.5.2002.
- Sabljić, A.: član Federation of European Chemical Societies (FECS), Division of Chemistry and the Environment.
- Sabljić, A.: član International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), Division for Chemistry and the Environment.

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

- Bilinski, H.; Frančičković-Bilinski, S.; Trojko, R.; Tibljaš, D.; Hanžel, D.; Mertelj, A.: Multidisciplinarna sedimentološka istraživanja od interesa za ekologiju i zaštitu okoliša, bilateralni hrvatsko-slovenski projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Instituta "Jožef Stefan", Ljubljana (putem MZT RH).
- Bonifačić, M.: Oksidativna degradacija aminokiselina inducirana radikalima, Department of Chemistry, University of Calgary, Calgary, Kanada.
- Bonifačić, M.: Oksidativna degradacija aminokiselina inducirana radikalima, Adam-Mickiewicz-University, Poznan, Poljska.
- Bonifačić, M.: OW metoda u određivanju oksidativne stabilnosti biljnih ulja, Laser Photoacoustic Laboratory, Division of Biophysics, Agrotechnology and Food Sciences, Wageningen University and Research Centre, Wageningen, Nizozemska.
- Bonifačić, M.: Reduktivna degradacija halogeniranih fenola organskim radikalima, Institute of Environmental Catalysis, Northwestern University, Evanston, SAD.
- Bonifačić, M.: Vremenski razlučena FT EPR istraživanja dekarboksilacije aminokiselina inducirane tripletima, Interdisciplinary Research Group "Time Resolved Spectroscopy", Faculty of Chemistry and Mineralogy, University of Leipzig, Leipzig, Njemačka.
- Filipović-Vinceković, N.: Supramolekularno organiziranje u smjesama kationskih i anionskih površinski aktivnih tvari, Fizičko-kemijski zavod, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb, Hrvatska.
- Filipović-Vinceković, N.: Svojstva faza u smjesama suprotno nabijenih površinski aktivnih tvari i biopolimera, Zavod za kemiju, Agronomski fakultet, Zagreb, Hrvatska.
- Graovac, A.: Novi ugljikovi materijali, suradnja Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti, Zagreb, i Mađarske akademije znanosti, Budimpešta, Mađarska (putem Instituta Ruđer Bošković).
- Klasinc, L.: Suradnja s Gesellschaft für Strahlenforschung, München, Njemačka.
- Klasinc, L.: Suradnja s kemijskim odjelom Louisiana State University, Baton Rouge, SAD.
- Kojić-Prodić, B.: Funkcionalna organizacija nekovalentnih kompleksa bakterijskih lipaza, bilateralni hrvatsko-austrijski projekt Instituta "Ruđer Bošković" i Instituta za analitičku kemiju Sveučilišta u Beču, Austrija, 2002/2003. (putem MZT RH).
- Kojić-Prodić, B.: Molekularni temelji biokatalize mikrobnih lipaza, bilateralni hrvatsko-njemački projekt Instituta "Ruđer Bošković" i Instituta za molekularnu enzimsku tehnologiju Istraživačkog centra, Jülich, Njemačka, 2002/2003. (putem MZT RH).
- Kojić-Prodić, B.: Struktura i svojstva (bio)molekula, bilateralni hrvatsko-slovenski projekt Instituta "Ruđer Bošković" i Instituta "Jožef Stefan", Ljubljana, Slovenija, 2001./2002. (putem MZT RH).
- Lučić, B.; Novič, M.; Trinajstić, N.; Zupan J.: Istraživanje odnosa između toksičnosti i kancerogenosti organskih molekula na žive organizme u okolišu i njihove strukture metodama umjetne inteligencije, bilateralni hrvatsko-slovenski projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Nacionalnog instituta za kemiju, Ljubljana, (putem MZT RH).
- Nikolić, S.; Heberger, K.: QSAR: razvoj i primjena, bilateralni hrvatsko-mađarski projekt između Instituta "Ruđer Bošković", Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Središnjeg istraživačkog instituta za kemiju Mađarske akademije znanosti, Budapest, Mađarska.

- Nikolić, S.; Vračko, M.: QSAR/QSPR modeliranje, bilateralni hrvatsko-slovenski projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Nacionalnog instituta za kemiju, Ljubljana, (putem MZT RH).
- Nöthig-Laslo V., Sabolović, J. Paulić-Balestrin N.: Međudjelovanje L- α -aminoacidato bakar(II) kompleksa s lipidnim dvoslojem membrana metodama elektronske paramagnetske rezonancije na više frekvencija, bilateralni hrvatsko-slovenski projekt između Instituta "Ruđer Bošković", Zagreb, Hrvatska, i Instituta "Jožef Stefan", Ljubljana, Slovenija (putem MZT RH).
- Pifat-Mrzljak, G.: Međudjelovanje lipoproteina i biološki aktivnih tvari, bilateralni ugovor Hrvatska-Slovenija između IRB-a i Instituta Jožef Štefan s Farmaceutsko-biokemijskim Fakultetom u Ljubljani (putem MZR RH).
- Pifat-Mrzljak, G.: Međudjelovanje lipoproteina i biološki aktivnih tvari, bilateralna veza Hrvatska-Austrija, između IRB-a i Institut für Medicinische Chemie und Pregl Laboratorium, Karl-Franzens Universität, Graz, Austrija (putem MZT RH).
- Sikirić, M.: Organsko-anorgansko miješane prevlake za metalne usadke, Casali Institute of Applied Chemistry, The Hebrew University of Jerusalem, Jeruzalem, Israel.
- Tomić, S.: Kombinirani pristup ab initio, molekularnom mehanikom, molekularnom dinamikom i QSAR-om biljnim hormonima auksinskog tipa, bilateralni projekt Instituta "Ruđer Bošković" i Instituta za fizikalnu i teorijsku kemiju Tehničkog Sveučilišta u Grazu, Austrija, 2002./2003. (putem MZT RH).
- Tomić, S.: Predviđanje selektivnosti, regulacije i inhibiranja enzima putem COMBINE analize, bilateralni hrvatsko-njemački projekt Instituta "Ruđer Bošković" i "European Media Laboratory", Heidelberg, Njemačka, 2002./2004. (putem MZT RH).
- Trinajstić, N.; Lučić, B.: Inteligentni programski sustav za QSAR (IQ QSAR Engine), projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i PLIVA-e d. d.
- Trinajstić, N.; Lukovits, I.: Particijski koeficijenti i invarijante grafova, bilateralni hrvatsko-mađarski projekt između Instituta "Ruđer Bošković", Hrvatske akademije znanosti i u mjetnosti i Središnjeg istraživačkog instituta za kemiju Mađarske akademije znanosti, Budapest, Mađarska.
- Tušek-Božić, Lj.: Metalni kompleksi od biološkog i farmakološkog značaja, Dipartimento di Scienze Biomediche, Università degli Studi di Trieste, Trst, Italija.
- Tušek-Božić, Lj.: Suradnja s Consiglio Nazionale delle Ricerche, Area della Ricerca di Padova, Padova, Italija.
- Tušek-Božić, Lj.: Suradnja s Institute for Organic Synthesis, Pardubice-Rybitvi, Češka.
- Tušek-Božić, Lj.: Suradnja s Rega Institute for Medical Research, Katholieke Universiteit Leuven, Leuven, Belgija.
- Valić, S.: Lokalno uređenje i dinamika molekula u semikristaliničnim blok polimerima studij pomoću NMR-a., Coopération franco-croate, projet 12812, CNRS, Laboratoire de Physique des Solides, Orsay, Francuska.

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

- Schara Milan, Jožef Štefan Institut, Ljubljana, Slovenija, 15.3.2002. i 19.10.2002.
- Pečar Slavko, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Ljubljana, Slovenija, 15.3.2002. i 19.10.2002.
- Möller Detler, Brandenburgische Technische Universität, Berlin, Njemačka, 25-28.3.2002.
- Černe Darko, Sveučilišna klinika Ljubljana, Slovenija, 14.4.2002.
- Ramek Michael, Technische Universität Graz, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Graz, Austrija, 8-10.4.2002.
- Von Knop Jan, Universität Düsseldorf, Düsseldorf, Njemačka, 20.5.2002.
- Paša-Tolić Ljiljana, Pacifik Northwest National Laboratory, Richland, SAD, 5-10.6.2002.
- Lukovits Istvan, Central Research Institute for Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Mađarska, 19-21.6.2002.
- Ruščić Branko, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, SAD, 10.7.2002.
- Armstrong David A., Department of Chemistry, University of Calgary, Calgary, Kanada, 2-11.9.2002.
- Wang Ting, European Media Laboratory, Heidelberg, Njemačka, 23-31.10.2002.

Wade C. Rebecca, European Media Laboratory, Heidelberg, Njemačka, 24-27.10.2002.
Šentjerc, Marjeta, Institut "Jožef Stefan", Ljubljana, Slovenija, 26-27.11.2002.
Plavec Janez, NMR center, National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenija, 19.12.2002.

Znanstveni skupovi u organizaciji Instituta Ruđer Bošković:

PRVI AUSTRIJSKO-HRVATSKI ZNANSTVENI DANI (zajedno sa MZT i Hrvatsko-austrijskim društvom)
Zagreb, Hrvatska, 4.5.-5.5.2002.

MATH/CHEM/COMP 2002-THE 17th DUBROVNIK INTERNATIONAL COURSE AND CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATHEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCES
Dubrovnik, Hrvatska, 24.6.-29.6.2002.

BRIJUNI CONFERENCE, "SPACE, TIME AND LIFE"
Brijuni, Hrvatska, 26.8.-30.8.2002.

DRUGI AUSTRIJSKO-HRVATSKI ZNANSTVENI DANI "TOWARDS THE EUROPEAN UNIVERSITY NETWORKS, TRENDS AND CHALLENGES IN HIGHER EDUCATION", (zajedno sa Hrvatsko-austrijskim društvom)
Zagreb, Hrvatska, 28.11.-30.11.2002.

[Http://www.irb.hr/zokb.html](http://www.irb.hr/zokb.html)

**ZAVOD ZA ORGANSKU KEMIJU I BIOKEMIJU
DEPARTMENT OF ORGANIC CHEMISTRY AND BIOCHEMISTRY**

Dr. sc. Vitomir Šunjić, predstojnik Zavoda
Tel. ++385 1 46 80 108, fax. ++385 1 46 80 195

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za stereoselektivnu katalizu i biokatalizu, dr. sc. Vitomir Šunjić, voditelj laboratorija
Laboratorij za sintetsku organsku kemiju, dr. sc. Kata Majerski, voditeljica laboratorija
Laboratorij za supramolekularnu i nukleozidnu kemiju, dr. sc. Mladen Žinić, voditelj laboratorija
Laboratorij za kemiju ugljikohidrata, peptida i glikopeptida, dr. sc. Štefica Horvat, voditeljica laboratorija
Laboratorij za celularnu biokemiju, dr. sc. Marija Abramić, voditeljica laboratorija
Laboratorij za fizikalno-organsku kemiju, dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić, voditeljica laboratorija
Laboratorij za molekulsku spektroskopiju, dr. sc. Goran Baranović, voditelj laboratorija
Grupa za kvantnu organsku kemiju, dr. sc. Zvonimir Maksić, voditelj laboratorija
Tajništvo, Barica Baborsky, tajnica

U okviru Zavoda do 30. 6. 2002. provodila su se istraživanja na programima trajne istraživačke djelatnosti:

Selektivni procesi na molekulskoj i supramolekularnoj razini
Elektronska struktura i dinamika organskih molekula

**SELEKTIVNI PROCESI NA MOLEKULSKOJ I SUPRAMOLEKULSKOJ RAZINI
SELECTIVE PROCESSES ON MOLECULAR AND SUPRAMOLECULAR LEVEL**

Direktor programa: dr. sc. Vitomir Šunjić

Teme u sastavu programa:

Stereoselektivni katalitički i biokatalitički procesi, dr. sc. Vitomir Šunjić, voditelj teme
Molekularni receptori s policikličkim jedinicama, dr. sc. Kata Majerski, voditeljica teme
Projektiranje i sinteza supramolekularnih sustava, dr. sc. Mladen Žinić, voditelj teme
Razvoj receptor-selektivnih analoga bioaktivnih peptida i studij Maillardove reakcije na endogenim i egzogenim opioidima, dr. sc. Štefica Horvat, voditeljica teme
Hidrolitički enzimi: izolacija, svojstva, struktura, funkcija, dr. sc. Ljubinka Vitale, voditeljica teme

Programa rada:

U okviru Programa profilirala su se istraživanja na nekim specifičnim područjima organske kemije i biokemije, kao što su; kombinirane računske i spektroskopske studije, u prvom redu NMR spektroskopija, zatim dizajn novih molekularnih struktura, posebno onih s proširenim p-sustavima, razvoj receptor-selektivnih analoga biološki aktivnih peptida i glikopeptida, studij djelovanja i strukture hidrolitičkih enzima, kemija gelirajućih sustava, posebno skupine fotoinducirajućih gelova, supramolekularna kemija spojeva sa specifičnim biološkim djelovanjem (interkalatori DNK, molekularni receptori sa policikličkim jedinicama), te katalitičkim djelovanjem (makrociklički ligandi za katalitičke organometalne komplekse). U zaključku treba istaknuti najznačajnija dostignuća Programa u 2002 godini. To su u prvom redu objavljeni znanstveni radovi, među kojima se ističu rad dr. M. Žinića i sur. u vodećem svjetskom časopisu J. Am. Chem. Soc. i rad veće skupine autora objavljen u Eur. J. Inorg. Chem. u koji su uključeni članovi dva laboratorija koja vode dr. M. Žinić i dr. V. Šunjić. U okviru tema obuhvaćenih Programom u 2002. godini napravljena su 2 diplomatska rada, 3 disertacije, te je objavljeno 22 rada u Current Contents časopisima. Članovi Zavoda iz

laboratorija obuhvaćenih Programom imali su 22 učešća na konferencijama, u što ulaze 4 pozvana predavanja, 4 predavanja i 14 postera.

Research programme:

Research on the specific fields of organic chemistry and biochemistry has been profiled within this Program, such as combined computational and spectroscopic studies of new molecular structures, in particular those with extended π -electronic systems, primarily by NMR spectroscopy, study of the receptor-selective peptides and glycopeptides, study of the structure and function of hydrolytic enzymes, chemistry of the gelating systems, specifically the group of photoinducible gels, supramolecular chemistry the compounds with specific biological activities (DNA intercalators, molecular receptors with polycyclic units), and with catalytic properties (macrocyclic ligands for catalytic organometallic complexes). The scientific results are published in 22 original papers, 2 diploma works and 4 dissertations. The members of laboratories which are the part of this Program have had 22 participations at conferences, what included 4 invited lectures, 4 oral presentations and 14 posters.

**STEREOSELEKTIVNI KATALITIČKI I BOKATALITIČKI PROCESI
STEREOSELECTIVE CATALYTIC AND BIOCATALYTIC PROCESSES**

Voditelj teme: dr. sc. Vitomir Šunjić

Tel. ++385 1 680 108 e-mail: sunjic@irb.hr

Suradnici na temi:

Zdenko Hameršak, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Darko Kontrec, doktor kem. znanosti, viši asistent
Goran Landek, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak
Andreja Lesac, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Edina Ljubović, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Maja Majerić Elenkov, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Davorka Moslavac, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Sanja Narančić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Zlata Raza, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Marin Roje, magistar kem. znanosti, asistent, znanstveni novak
Vitomir Šunjić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Vladimir Vinković, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnici:

Davor Forjan, tehničar
Katica Barišić, peračica suđa (50% radnog vremena)

Vanjski suradnici:

Dragan Šepac, doktor kem. znanosti, umirovljeni invalid Domovinskog rata
Snježana Kolarić, doktorica kem. znanosti, Bioanalitika d.d., Centar za transfer tehnologija, Zagreb
Ivica Cepanec, doktor kem. znanosti, BELUPO lijekovi i kozmetika d.d., Služba za razvoj sinteze, Zagreb
Mladen Litvić, magistar kem. znanosti, BELUPO lijekovi i kozmetika d.d., Služba za razvoj sinteze, Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Program rada je predviđao primjenu stereoselektivnih metoda, katalitičkih, biokatalitičkih i dr., u sintezi enantiomerno (optički) čistih produkata, i posebno studij stereoselektivnosti tih reakcija. Naznačeni program na temi predviđao je i studij svojstava novih optički aktivnih materijala, često dobivenih jednom od metoda razvijenih u okviru prvog projekta, a posebno pripremu kiralnih stacionarnih faza za kromatografiju visokog razlučivanja.

Od posebnog znanstvenog i komercijalnog značenja je studij optički aktivnih materijala kao kiralnih selektora u stacionarnim fazama za kromatografsku enantioseparaciju, te studij ovih materijala kao ferroelektrika, tj. tekućih kristala zasnovanih na kiralnim molekulama. Rezultati ovih bazičnih istraživanja i njihove komercijalne primjene postavljeni su od strane eksperata Svjetske Banke na prvo mjesto između svih prijavljenih projekata iz Hrvatske.

Iz laboratorija CATBIO je u 2002 god. objavljeno i poslano u objavu četiri rada na području kromatografske enantioseparacije provedene na originalnim, u svijetu patentno zaštićenim kiralnim stacionarnim fazama. To je nastavak istraživanja koje je u periodu 1996-2002 rezultiralo sa preko 15 objavljenih radova CATBIO samo na tom području.

Ukupno je iz laboratorija CATBIO objavljeno u 2002 god. osam znanstvenih radova u međunarodnim časopisima, osam ih je primljeno za objavu, i dva su u fazi recenziranja.

U 2002 godini je realizirana ugovorna suradnja s tvrtkom Vischim s.p.a. (Milano, IT) na području sinteze metabolita jednog fungicida. U istoj godini potpisan je strateški ugovor o suradnji sa BIA d.d. (SLO) na razvoju novih kiralnih stacionarnih faza zasnovanih na polimernim materijalima koje razvija BIA d.d. i kiralnim selektorima koje razvija CATBIO.

Završena su istraživanja prema ugovoru sa PLIVA d.d. na području stereoselektivne sinteze PLD 118, novog lijeka u kliničkoj fazi istraživanja

Laboratorij CATBIO pozvan je 2002 god. od strane europskih grupa koje se bave kiralnim metodama da se priključi projektu Rational Design and Development of New Enantiomerically Pure Molecular Systems for Use in Enantiorecognition Processes", u okviru Framework VI. Predloženi program istraživanja CATBIO uključen je u taj Framework.

Research programme and results:

The Program has envisaged the application of stereoselective methods, catalytic, biocatalytic and others, in the synthesis of the enantiomerically (optically) pure products, in particular the study of stereoselective reactions. This program has also envisaged the study of the properties of the new optically active materials, frequently obtained by one of the methods developed in the frame of the former project, in particular preparation of chiral stationary phases for high resolution chromatography.

Study of the optically active materials as chiral selectors in the stationary phases for HPLC is of particular commercial importance, as it is the study of chiral materials as ferroelectrics, i.e. as the liquid crystals. The results of this basic research have been evaluated by the experts of the World Bank as the leading in Croatia among all examined projects.

From the CATBIO laboratory are published or submitted four papers on chiral chromatographic separations, completed on the original, world-wide patented chiral stationary phases. This is continuation of the research which in the period 1996-2002 has resulted with 15 published CATBIO papers on this field.

In 2002 for the Laboratory CATBIO are published eight papers, the other eight are accepted for publication, and two are submitted for publication.

In the year 2002 was completed contractual research with Vischim S.p.A. (Milano, IT), related to the synthesis of metabolite of the one kind of fungicide. In the same year was signed strategic contract with BIA d.d (SLO) on development of new chiral stationary phases, based on polymeric materials which are developed by BIA d.d. and on chiral selectors that are which are developed by CATBIO.

Contractual research on stereoselective synthesis of PLD 118 according to the contract with PLIVA d.d., are completed in 2002, and this drug is in clinical research.

Laboratory CATBIO was invited in 2002 by the European research centers that study chiral methods to join the project "Rational Design and Development of New Enantiomerically Pure Molecular Systems for Use in Enantiorecognition processes", in the Framework VI. Research proposal of CATBIO is included in this Framework.

MOLEKULARNI RECEPTORI S POLICIKLIČKIM JEDINICAMA MOLECULAR RECEPTORS WITH POLYCYCLIC UNITS

Voditeljica teme: dr. sc. Kata Majerski

Tel: ++385 1 4680 196

e-mail: majerski@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Lada Klaić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
 Goran Kragol, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
 Kata Majerski, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
 Dunja Šafar Cvitaš, magistrica kem. znanosti, asistentica
 Danko Škare, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
 Tatjana Šumanovac Ramljak, magistrica kem. znanosti, asistentica
 Jelena Veljković, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
 Marijana Vinković, doktorica kem. znanosti, asistentica (do 15.7.2002.)
 Ines Vujasinović, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 17.4.2002.)

Tehnički suradnici:

Renato Margeta, samostalni tehničar
 Dragica Petračija, peračica suđa (50% radnog vremena)

Program rada i rezultati na temi:

U okviru teme istraživani su problemi bitni za razumijevanje odnosa strukture i reaktivnosti organskih molekula te priprava novih policikličkih jedinica i njihova primjena u sintezi novih "host" molekula.

Pentaciklo[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,5}.0^{5,9}]undeka-8,11-dion te pentaciklički monoketon su upotrebljeni za studij monomer-dimer ravnoteže nitrozo derivata. Našli smo da nitrozo-dimeri mogu biti prevedeni fotokemijski u nitrozo-monomere.

Također smo razvili jednostavnu i efikasnu sintezu novih 1,3,7-trisupstituiranih biciklo[3.3.1]nonanskih derivata.

Dio našeg programa je bio nastavak istraživanja na sintezi novih makrocikličkih polietera koji sadrže policikličke molekule ugrađene u makrociklički prsten ili vezane kao dio pokrajnjeg lanca. Pripravili smo niz aza- i tia-krunastih etera koji sadrže adamantansku ili PCU-jedinicu i istraživali smo njihovu sposobnost kompleksiranja, bilo s eksperimentima ekstrakcije pikrata alkalijskih metala ili pak uporabom masene spektrometrije metodom ionizacije elektroraspršenjem. Našli smo da vrsta heteroatoma kao i prisutnost drugih supstituenata utječe na selektivnost kompleksiranja metalnih iona bilo da se radi u otopini metanol/kloroform bilo ekstrakcijom iz vodene otopine s makrociklima otopljenim u kloroformu.

Research programme and results:

Within the framework of this programme, the problems essential for understanding the structure-reactivity relationship of organic molecule and the development of new polycyclic building blocks and their application in the synthesis of novel class of "host" molecule have been examined.

Pentacyclo[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,5}.0^{5,9}]undec-8,11-dione as well as the pentacyclic monoketone were used in the studies of monomer-dimer equilibrium of their nitroso derivatives. It was found that nitroso dimers could be converted photochemically to nitroso monomers.

We have also developed the simple and efficient synthesis of several new 1,3,7-trisubstituted bicyclo[3.3.1]nonane derivatives.

Further work was a continuation of our investigation on the synthesis of novel macrocyclic polyethers, which contain polycyclic cage molecule incorporated into the macrocyclic framework or attached as a side chain. We have prepared a series of adamantane or PCU-functionalized aza- and thia-crown ethers and we have studied their complexation abilities by alkali metal picrate extraction experiments or by electrospray ionisation mass spectrometry. In homogeneous methanol/chloroform solutions as well as extractions of metals from aqueous solution by macrocycles in chloroform, it is found that the type of heteroatom (S, O, N) and presence of other substituents influence the metal selectivities.

**PROJEKTIRANJE I SINTEZA SUPRAMOLEKULSKIH SUSTAVA
DESIGN AND SYNTHESIS OF SUPRAMOLECULAR SYSTEMS**

Voditelj teme: dr. sc. Mladen Žinić

Tel: ++385 1 4680 217 e-mail: zinic@irb.hr

Suradnici na temi:

Vesna Čaplar, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Zoran Džolić, magistar kem. znanosti, mlađi asistent, znanstveni novak
Leo Frkanec, doktor kem. znanosti, viši asistent
Milan Jokić, doktor kem. znanosti, viši asistent
Darinka Katalenić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
Janja Makarević, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
Ivo Piantanida, doktor kem. znanosti, viši asistent
Tomislav Portada, dipl. inž. kemije, mlađi asistent
Marijana Radić Stojković, dipl. prof. kemije i biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Nataša Šijaković-Vujičić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica
Lidija-Marija Tumor, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Biserka Žinić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
Mladen Žinić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehničke suradnice:

Branka Budić, dipl. inž. kemije, tehničarka suradnica
Elizabeta Furić, samostalna tehničarka
Maja Pavišić, sanit. inž., samostalna tehničarka
Tamara Vraneša, peračica (1/3 radnog vremena)

Program rada i rezultati na temi:

Sintetizirani su fenatridinij-nukleobaza i porfirin-nukleobaza konjugati koji sadrže nukleobazu vezanu na aromatsku jedinicu preko fleksibilnih polimetilenskih mostova. Konjugati su pripremljeni s ciljem prepoznavanja komplementarnih nukleotida i polinukleotida sparivanjem baza vodikovim vezama. U vodenom mediju konjugati tvore sklopljene konformacije intramolekularnim interakcijama slaganja između nukleobaze i heteroaromske jedinice. Određivanjem i usporedbom konstanti stabilnosti kompleksa s komplementarnim i nekomplementarnim nukleotidima i polinukleotidima utvrđeno je da u pravilu ne dolazi do prepoznavanja komplementarne baze. Jedino je fenatridinij-adenin konjugat pokazao prepoznavanje poliU kao rezultat A-U specifičnih interakcija u kompleksu.

U sklopu istraživanja na prethodno osmišljenom konceptu supramolekularnog organometalnog katalizatora s heličnim reakcijskim prostorom provedena su detaljna strukturna i kiroptička istraživanja acikličkih i makrocikličkih 1,5-bisoksazolinskih liganada i njihovih Cu(I) i Ag(I) kompleksa. CD istraživanja su ukazala na suprotnu heličnost slobodnog liganada i njegovih kompleksa s navedenim kationima. Primjenom NMR i CD spektroskopije istražena su konformacijska svojstva acikličkih i makrocikličkih 1,5-bisoksazolinskih liganada i njihovih Pd(II) kompleksa te istražena njihova katalitička aktivnost u enantioselektivnim alilnim alkilacijama. Utvrđeno je da veličina makrocikličkog prstena ima slabo izraženi utjecaj na enantioselektivnost. Navedena istraživanja provedena su u suradnji s Laboratorijem CATBIO.

Istraživanjem molekularnog samoudruživanja bis(aminokiselinskih) oksalamidnih gelatora i svojstava nastalih gelova utvrđeno je da osim uobičajenih termoreverzibilnih gelova nastaju i gelovi izuzetne termičke stabilnosti s otapalima srednje i male polarosti. Ovi termostabilni gelovi mogu se zagrijati i na do 50 °C više temperature od vrelišta geliranog otapala. Ovo otvara mogućnost primjene termostabilnog gela kao kemijskog reaktora ili kristalizacijske posude posebnih svojstava. Dizajniran je fotoinducirani gelirajući sustav na osnovi fotokemijske cis-trans izomerizacije bis(amino kiselinskih) derivata amida maleinske i

fumarne kiseline. Praćenjem izomerizacije NMR spektroskopijom i elektronskom mikroskopijom (TEM, SEM) dokazano je da izomerizacija na molekularnom nivou rezultira pretvorbom na supramolekularnom nivou koja se očituje morfološkom transformacijom mikrosfera (maleinski derivat) u gelske niti (amid fumarne kiseline).

Research programme and results:

Phenathridinium-nucleic base and porphyrin-nucleic base conjugates having a nucleic base tethered on the aromatic unit by flexible polymethylene spacers of varying length have been designed to achieve recognition of complementary nucleotides and polynucleotides by Watson-Crick type of base pairing in the complexes. The conjugates form intramolecularly stacked conformations in aqueous media. The complexes with complementary and non-complementary nucleotides and ds-polynucleotides are of similar stability due to the lack of any base recognition. However, the phenanthridinium-adenine conjugate exhibited recognition of polyU indicating specific interactions between adenine and uracil in the complex.

Within the studies on the previously formulated concept of supramolecular organometallic catalyst with helical reaction space a structural and chiroptical properties of acyclic and macrocyclic 1,5-bis(oxazoline) ligands and their copper(I) and silver(I) complexes were assessed. CD studies revealed opposite helicity of a free and the complexed ligand. The NMR and CD conformational studies of the acyclic and macrocyclic 1,5-bis(oxazoline) Pd(II) complexes in solution were performed and their catalytic activities in enantioselective allylic alkylation determined. The results showed only moderate variation of enantioselectivity with the length and ring size of the ligand. This research is executed in close collaboration with CATBIO Laboratory.

Studies of supramolecular self-assembly and properties of organogels formed by bis(amino acid) oxalamide type of gelators revealed that in addition to common thermo-reversible gels also the gels of exceptional thermal stability could be formed with a solvents of medium and low polarity. The latter gels can be heated up to 50°C higher temperatures than the bp of the gelled solvent without apparent gel-to-sol transition. This opens an interesting possibility of using such thermo-stable gels as reaction or crystallization vessels with special properties. The aqueous photoinduced gelation system based on photoisomerization of bis(amino acid)-maleic acid amide into -fumaric acid amide have been prepared. In water, the maleic amide derivative forms microspheres which upon photoisomerization transfer into fibres forming gel network. Monitoring of these processes by NMR and electron microscopy (TEM, SEM) provided the clear-cut evidence that the photoisomerisation at molecular level leads to morphological transition at supramolecular level exemplified by the conversion of microspheres into gel fibres.

**RAZVOJ RECEPTOR-SELEKTIVNIH ANALOGA BIOAKTIVNIH PEPTIDA I STUDIJ MAILLARDOVE REAKCIJE NA ENDOGENIM I EGZOGENIM OPIOIDIMA
DEVELOPMENT OF RECEPTOR-SELECTIVE ANALOGS OF BIOACTIVE PEPTIDES AND STUDY OF THE MAILLARD REACTION ON ENDOGENOUS AND EXOGENOUS OPIOIDS**

Voditeljica teme: dr. sc. Štefica Horvat

Tel: ++385 1 4680 103 e-mail: shorvat@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Jaroslav Horvat, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Štefica Horvat, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Andreja Jakas, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Ivanka Jerić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Ina Nemet, dipl. inž. prehrambene tehnologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Maja Roščić, magistrica kem. znanosti, asistentica

Lidija Varga-Defterdarović, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Tehničke suradnice:

Katica Boršić, peračica suđa (50% radnog vremena)
Milica Perc, samostalna tehničarka

Vanjska suradnica Laboratorija za kemiju ugljikohidrata, peptida i glikopeptida:

Dina Keglević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica u mirovini

Program rada i rezultati na temi:

Program rada teme obuhvaća sintezu i analizu novih tipova peptidomimetika, receptor-selektivnih derivata opioidnih peptida i glikopeptida te ispitivanje procesa glikacije, reakcije poznate pod nazivom Maillardova reakcija.

Najznačajnija dostignuća u 2002. godini obuhvaćaju opsežna istraživanja koja su obuhvatila sintezu i analizu uporabom spektrometrije mase (MS) niza ugljikohidrat-peptid konjugata. Ustanovljeno je da se na temelju povećanja mase N- ili C-terminalnih peptidnih fragmenata pomoću MS može odrediti položaj šećera u priređenim glikokonjugatima. Karakteristika glikopeptidnih estera je eliminacija molekula vode i cijepanje šećernog prstena, kao i intramolekulska ciklizacija koja vodi nastajanju M+42 modificiranih peptidnih fragmenata. Suprotno tome, karakteristični fragmenti za Amadorijeve spojeve su M+108 i M+78 modificirani N-terminalni fragmenti.

Istraživanja na području Maillardove reakcije nastavljena su pripravom i NMR karakterizacijom metilglioksala, reaktivnog dikarbonilnog spoja koji pod fiziološkim uvjetima doprinosi patološkim stanjima kod dijabetesa i Alzheimerove bolesti. Utvrđeno je da je metilgliksal u organskom mediju u obliku kraćih polimernih jedinica, a u vodenoj otopini gotovo isključivo kao mono- i dihidrat.

Research programme and results:

The objective of the research in the Laboratory is focussed on the synthesis and analysis of novel type of peptidomimetics, receptor-selective derivatives of opioid peptides, glycopeptides and on glycation linked processes, collectively known as the Maillard reaction. Considering the research programme, electrospray ionization tandem mass spectrometry was used to establish the fragmentation behaviour of a range of sugar-peptide adducts as model compounds of widespread glycoprotein structures. The study showed that the position of the carbohydrate modification at the N- or C-terminus of a peptide can be deduced from the mass gain on the peptide fragment ions. It was shown that N-terminal M+108 and M+78 peptide modifications are characteristic of Amadori type of compounds whereas cyclic sugar-peptide structures generate M+42 modified peptide.

The research concerning the study of the Maillard reaction was continued by investigation of the spectroscopic properties of methylglyoxal, reactive dicarbonyl compound associated with complications in diabetes and in Alzheimer's disease. By using different NMR techniques it was established that in organic media methyl glyoxal exists in short polymeric units while in water mono- and dihydrate forms prevail.

**HIDROLITIČKI ENZIMI: IZOLACIJA, SVOJSTVA, STRUKTURA, FUNKCIJA
HYDROLYTIC ENZYMES: ISOLATION, PROPERTIES, STRUCTURE, FUNCTION**

Voditeljica teme: dr. sc. Ljubinka Vitale

Tel.: ++385 1 46 80 115 e-mail: vitale@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Marija Abramić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Jasminka Perašin, dipl. inž. prehramb. tehnol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Šumski Šimaga, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Ljubinka Vitale, doktorica bioteh. znanosti, znanstvena savjetnica, u mirovini
Bojana Vukelić, magistrica biokem. znanosti, asistentica

Tehnička suradnica:

Tamara Vraneša, peračica suđa (1/3 radnog vremena)

Program rada i rezultati na temi:

Program rada teme odnosio se na proučavanje različitih aspekata hidrolitičkih enzima bakterije *Streptomyces rimosus* s posebnim osvrtom na mogućnost njihove primjene i enzima stanica humane krvi s ciljem upoznavanja njihove fiziološke uloge te traženje enzima/proteina koji bi mogli biti biljezi za detekciju raznih patoloških stanja u ljudi, odnosno za razlikovanje sorti žitarica.

Tijekom prvog dijela 2002. godine dovršeni su radovi na određivanju specifičnosti metalopeptidaze izolirane iz filtrata kulture bakterije *S. rimosus* praćenjem hidrolize niza peptida poznate strukture. Pokazano je da se radi o novom tipu metalopeptidaze koji je vjerojatno svojstven streptomicetima. U istom mikroorganizmu proučavane su i aminopeptidaze (AP). Praćen je rast *S. rimosus* na nekoliko hranjivih podloga i uspoređene aktivnosti i neka svojstva ovih enzima u miceliju i filtratima kulture. Za prolil-AP utvrđeno je da je samo intracelularni enzim, dok leucil-AP dolazi u miceliju ali se i izlučuje u podlogu. Peptidaze kao potencijalni biljezi za sorte žitarica analizirane su u nekoliko domaćih sorti ječma. Određene su aktivnosti različitih aminopeptidaza u zrnu i sladu te uočene njihove promjene u procesu klijanja, ali bez značajnih razlike među ispitivanim sortama ječma. Domaće sorte ječma nisu se razlikovale ni prema elektroforetskim analizama ekstrahiranih proteina, iako je razlika od sorte uzete za standard bila uočljiva.

Research programme and results:

The research program was devoted to the study of different aspects of hydrolytic enzymes from the bacterium *Streptomyces rimosus*, with an emphasis on the possibility of their utilization, and the enzymes from human blood cells, with the aim to elucidate their physiological role. It also included a search for enzymes/proteins that could be used as markers for detection of various pathological states in humans, or as markers for differentiation of cultivars of cereals.

During the first part of the year 2002, specificity determination of metallopeptidase isolated from culture filtrate of *S. rimosus* was finalized by following the hydrolysis of peptides of known structure. It was shown that it belongs to the novel type of metallopeptidases possibly characteristic of streptomycetes. In the same microorganism aminopeptidases (AP) were studied. The growth of *S. rimosus* in several media was followed and the activities and some properties of APs from mycelia and culture filtrates were compared. It was found that prolil-AP is an intracellular enzyme as leucyl-AP comes in the mycelium and is excreted to the medium as well. Peptidases as potential markers for cereal strains discrimination were analyzed in domestic barley cultivars. Activities of various aminopeptidases were determined in the grain and malt and their changes during the germination process were noticed, but without significant differences among the analyzed strains. Domestic strains of barley did not differ according to their electrophoretic patterns of extracted proteins either, although the difference from the standard strain was obvious.

**ELEKTRONSKA STRUKTURA I DINAMIKA ORGANSKIH MOLEKULA
ELECTRONIC STRUCTURE AND DYNAMICS OF ORGANIC MOLECULES**

Direktorica programa: dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić

Teme u sastavu programa:

Elektronska struktura i kemijska reaktivnost, dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić, voditeljica teme
Izotopno obilježavanje i molekulske spektroskopije, dr. sc. Goran Baranović, voditelj teme
Elektronska struktura molekula i atomskih grozdova, dr. sc. Zvonimir Maksić, voditelj teme

Poticajni projekti znanstvenih novaka i asistenata u okviru tema:

Utjecaj otapala na kiselost benzocikloalkena, dr. sc. Zoran Glasovac, nositelj projekta
Spektroskopski studij pull-push stilbena, dr. sc. Vilko Smrečki, nositelj projekta
Teorijsko istraživanje protoniranih diimidnih kationa, mr. sc. Višnja Stepanić, nositeljica projekta
Oblikovanje i struktura organskih vodiča, mr. sc. Ines Despotović, nositeljica projekta

Program rada:

Završni izvještaj za Program podniet je Ministarstvu znanosti i tehnologije u 2001. god. te su rezultati istraživanja postignuti u okviru pojedinih tema Programa u cijelosti prikazani u izvještajima za projekte 0098056 (voditeljica: dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić), 0098057 (voditelj: dr. sc. Goran Baranović), 0098058 (voditelj: dr. sc. Zvonimir Maksić) i 0098059 (voditelj: dr. sc. Dražen Vikić-Topić).

Research programme:

The final report for research accomplished within the program was sent to Ministry of Science and Technology in 2001. Hence, the results of investigation performed in 2002 are incorporated in the reports of the projects: 0098056 (supervisor: dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić), 0098057 (supervisor: dr. sc. Goran Baranović), 0098058 (supervisor: dr. sc. Zvonimir Maksić) i 0098059 (supervisor: dr. sc. Dražen Vikić-Topić).

**ELEKTRONSKA STRUKTURA I KEMIJSKA REAKTIVNOST
ELECTRONIC STRUCTURE AND CHEMICAL REACTIVITY**

Voditeljica teme: dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić
Tel: ++385 1 4680 197 e-mail: mmaksic@emma.irb.hr

Suradnici na temi:

Ivana Antol, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Gordana Gadanji, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 13.5.2002.)
Mirjana Eckert-Maksić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Zoran Glasovac, doktor kem. znanosti, viši asistent
Davor Margetić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik (od 22.4.2002.)
Nana Novak Coumbassa, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Irena Zrinski, doktorica kem. znanosti, asistentica

Tehnički suradnici:

Dragica Petračija, peračica (50% radnog vremena)
Ante Pupačić, tehničar suradnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Ivica Ljubenkov, doktor kem. znanosti, SMS d.o.o., Split
Howard Maskill, doktor kem. znanosti, University of Newcastle upon Thyne, Newcastle upon Thyne, Velika Britanija

Program rada i rezultati na temi:

Završni izvještaj za Program podniet je Ministarstvu znanosti i tehnologije u 2001. god. te su rezultati istraživanja, postignuti u okviru teme, u cijelosti prikazani u izvještaju za projekt 0098056 (voditeljica: dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić).

Research programme and results:

The final report for research accomplished within the program was sent to Ministry of Science and Technology in 2001. Hence, the results of investigation performed in 2002 are incorporated in the report of the project: 0098056 (supervisor: dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić).

IZOTOPNO OBILJEŽAVANJE I MOLEKULSKE SPEKTROSKOPIJE ISOTOPIC LABELLING AND MOLECULAR SPECTROSCOPIES

Voditelj teme: dr. sc. Goran Baranović

Tel: ++385 1 4680 116 e-mail: baranovi@faust.irb.hr

Suradnici na temi:

Goran Baranović, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Nikola Biliškov, dipl. inž. kemije, znanstveni novak

Vilko Smrečki, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Višnja Stepanić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Dražen Vikić-Topić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Boris Zimmermann, dipl. inž. kemije, znanstveni novak

Tehnički suradnik:

Boris Sokač, tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Lahorija Bistričić, doktorica fiz. znanosti, docentica, Zavod za fiziku, Fakultet elektrotehnike i računarstva, Sveučilište u Zagrebu

Zlatko Meić, doktor kem. znanosti, redovni profesor, Zavod za analitičku kemiju, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Mladen Mintas, doktor kem. znanosti, redoviti profesor, Zavod za organsku kemiju, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu

Predrag Novak, doktor kem. znanosti, docent, Pliva d.d., Istraživanje i razvoj

Program rada i rezultati na temi:

Istraživani su kemijski procesi i struktura osnovnih i pobuđenih elektronskih stanja arilnih derivata stilbena, azobenzena, kao i nekih organometalnih kompleksa. Od procesa su najvažniji fotoizomerizacija i protoniranje, koji objašnjavaju mnoga svojstva navedenih spojeva, a osobito one pojave koje su zanimljive zbog razumijevanja nekih važnih transformacija (npr. izomerizacija) i ponašanja materijala. Ugradnjom stabilnih izotopa u strukturu, kombinacijom raznih molekularskih spektroskopija i rigoroznim kvantno-kemijskim proračunima strukture i spektara postiže se vrlo visoka razina istraživanja. S druge strane ekstenzivna primjena izotopnog obilježavanja daje mnogo eksperimentalnih podataka iz NMR spektara za točan proračun zasjenjenja jezgara i sprega spin-spin, kao i fundamentalnu interpretaciju izotopnih efekata. Provedeni su proračuni nuklearnog zasjenjenja ^1H i ^{13}C jezgara ab initio i DFT metodama za seriju krutih struktura izvedenih iz adamantana. Isto tako izučavan je utjecaj izotopa pri kompleksiranju teških metala, npr. žive. Poboljšanje postupaka za dobivanje protoniranih vrsta u točno definiranim uvjetima, što omogućuje snimanje infracrvenih, Ramanovih, ^{13}C , ^1H , ^2H i ^{15}N NMR spektara.

Provedena je vibracijska analiza konjugiranih kiselina trans- i cis-azobenzena upotrebom DFT metode te primjenom metode generaliziranog mješanja normalnih modova. Utvrđena je razlika u vibracijskoj dinamici u odnosu na neutralne molekule. Istražena je, također, mogućnost formiranja kompleksa sa vodikovom vezom između trans-azobenzena i HCl pri čemu dolazi do znantne promjene diedarskih kutova azobenzena. Na temelju kvantno-kemijskih računa (CIS metodom) i rezonantnih Ramanovih intenziteta perdeuteriranog cis-stilbena rekonstruirane su strukturne promjene kod prelaska u pobuđeno elektronsko stanje. S ciljem da se najinteresantnije svojstvo orto-terfenila (formiranje staklastu faze) poveže s njegovom molekularnom strukturom (dvije interne rotacije) proučena je eksperimentalno i teorijski vibracijska dinamika molekule i kristala na niskim temperaturama.

Research programme and results:

Chemical processes and structure of the ground and excited electronic states of aryl derivatives of stilbene, azobenzene, and some organo-metallic complexes are investigated. Photoionization and protonation are the most important processes which reveal many properties of the named compounds and in particular those phenomena which help us in understanding some important transformations (e.g. isomerization) and behaviour of materials. Introduction of stable isotopes into the structure, combination of different molecular spectroscopies and rigorous quantum chemical calculations result in a very high level of research. On the other hand, extensive application of isotopic labelling offers a lot of NMR data for calculation of nuclear shielding and spin-spin coupling, as well as fundamental interpretation of isotope effects. Calculations of proton and carbon nuclear shielding were performed by ab initio and DFT methods for a series of rigid molecular structures derived from adamantane. Influence of isotope substitution on complexation of heavy metals, e.g. Hg was investigated as well. Improved procedures for obtaining stable protonated species enable recording and interpretation of infrared, Raman, ^{13}C , ^1H , ^1H and ^{15}N NMR spectra. Vibrational analysis of the conjugated acids of trans- and cis-azobenzene has been made by empirical assignment and DFT calculations of force constants, and by using the method of generalized harmonic mode scrambling. It was found in what respect the vibrational dynamics of the conjugated acids differs from that of neutral molecules. The possibility of forming the hydrogen bond complex between azo-benzene and HCl in the gas phase has been investigated and great changes in the dihedral angles of azo-benzene were predicted. The structural changes upon transition into an excited singlet state of cis-stilbene molecule were explained by using ab initio CIS calculations and the observed resonant Raman intensities of per-deuterated cis-stilbene. The molecular and lattice vibrational dynamics at low temperatures of prototypical molecular glass former ortho-terphenyl were studied both experimentally and theoretically in order to find a relationship between the glass forming property and the flexible molecular structure (two internal rotations) of ortho-terphenyl.

**ELEKTRONSKA STRUKTURA MOLEKULA I ATOMSKIH GROZDOVA
ELECTRONIC STRUCTURE OF MOLECULES AND ATOMIC CLUSTERS**

Voditelj teme: dr. sc. Zvonimir Maksić

Tel: ++385 1 4561 117 e-mail: zmaksic@spider.irb.hr

Suradnici na temi:

Danijela Barić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Ines Despotović, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Borislav Kovačević, doktor kem. znanosti, asistent
Krešimir Kovačević, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Zvonimir Maksić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Robert Vianello, dipl. inž. kemije, mlađi asistent

Suradnik iz druge ustanove:

Miljenko Primorac, doktor fiz. znanosti, izv. profesor, Šumarski fakultet, Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Rezultati istraživanja postignuti u okviru teme u cijelosti su prikazani u okviru završnog izvještaja za Program 009808 podnesenog Ministarstvu znanosti i tehnologije u 2001. godini, te u izvještaju za projekt 0098058 (voditelj dr. sc. Zvonimir Maksić) 2002. godine.

Research programme and results:

Results of the research accomplished within this theme has been completely described in the final report for Program 009808 submitted to Ministry of Science and Technology in 2001,

and in the report made for project 0098058 (supervisor dr. sc. Zvonimir Maksić) in the year 2002.

Nakon 30.6.2002. u okviru Zavoda provodila su se istraživanja u okviru sljedećih znanstvenoistraživačkih projekata:

STEREOSELEKTIVNA SINTEZA I KATALIZA STEREOSELECTIVE SYNTHESIS AND CATALYSIS

Voditelj projekta: dr. sc. Vitomir Šunjić

Tel: ++385 1 4680 108 e-mail: sunjic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Zdenko Hameršak, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Edina Ljubović, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Maja Majerić Elenkov, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Zlata Raza, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Marin Roje, magistar kem., asistent, znanstveni novak
Vitomir Šunjić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehnički suradnici:

Davor Forjan, tehničar (50% radnog vremena)
Katica Barišić, peračica suđa (25% radnog vremena)

Vanjski suradnik:

Dragan Šepac, doktor kem. znanosti, umirovljeni invalid Domovinskog rata

Program rada i rezultati na projektu:

Osnovne istraživačke teme su; biokataliza lipazama u organskim otapalima, posebno aciliranje prekursora Cytoxazona i Isocytoxazona, istraživanja diastereoselektivne aldolske reakcije na heterociklički 1,4-benzodiazepinski supstrat, priprava i provjera acikličkih i makrocikličkih liganada u organometalnim kompleksima kataliziranim enantioselektivnim reakcijama nastajanja C-C veze (ciklopropanacija, aliina alkilacija), te priprava novih kiralnih stacionarnih faza za separaciju enantiomera kromatografijom visokog razlučivanja (engl. HRC), i studij odnosa između strukture kiralnih selektora i njihove sposobnosti enantioselekcije.

Research programme and results:

Main research topics were; biocatalysis by lipases in organic solvents, in particular acylation of the precursors of Cytoxazone and Isocytoxazone, study of diastereoselective aldol reaction on the heterocyclic 1,4-benzodiazepine substrate, synthesis and testing of acyclic and macrocyclic ligands in enantioselective reactions forming C-C bond (cyclopropanation, allylic alkylation), catalysed by organometallic complexes, then preparation of novel chiral stationary phases for separation of enantiomers by high resolution chromatography, and study of the relationship between structure of chiral selectors and their efficacy in enantioselection.

NOVI OPTIČKI AKTIVNI MATERIJALI NEW OPTICALLY ACTIVE MATERIALS

Voditelj projekta: dr. sc. Vladimir Vinković

Tel: ++385 1 4680 108 e-mail: vvink@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Darko Kontrec, doktor kem. znanosti, viši asistent
Goran Landek, dipl. inž. kemije, mlađi asistent, znanstveni novak
Andreja Lesac, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Davorka Moslavac, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Sanja Narančić, dipl. inž. kem., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Vladimir Vinković, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnici:

Davor Forjan, tehničar (50% radnog vremena)
Katica Barišić, peračica suđa (25% radnog vremena)

Suradnici iz drugih ustanova:

Snježana Kolarić, doktorica kem. znanosti, Bionalitika d.d., Centar za transfer tehnologija, Zagreb
Ivica Cepanec, doktor kem. znanosti, BELUPO lijekovi i kozmetika d.d., Služba za razvoj sinteze, Zagreb
Mladen Litvić, magistar kem. znanosti, BELUPO lijekovi i kozmetika d.d., Služba za razvoj sinteze, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Osnovne istraživačke teme bile su priprava novih kiralnih stacionarnih faza za separaciju enantiomera visokodjelotvornom tekućinskom kromatografijom (engl. high-performance liquid chromatography, HPLC), proučavanje odnosa između strukture kiralnih selektora i njihove sposobnosti enantioselekcije, te priprava supstancija sa svojstvima tekućih kristala.

U 2002 god. u okviru ovog projekta objavljene su 3 znanstvene publikacije u časopisima koje citira SCI, a 2 su prihvaćene za tisak. Suradnici su sudjelovali na ukupno 4 međunarodna skupa i to sa jednim plenarnim predavanjem i 3 posterska saopćenja.

U 2002 god. u okviru projekta izrađen jedan diplomski rad.

Suradnici CATBIO u okviru ovog projekta koautori su u dvije patentne prijave od kojih je jedna prihvaćena u SAD-u. Istovremeno je rađeno na nekoliko odvojenih suradnji sa sveučilištima u Exeteru (V. Britanija), Grazu (Austrija), Temišvaru (Rumunjska) i Trstu (Italija), te na ugovoru s PLIVA d.d., Istraživačko-razvojnim institutom. Ostvareni su kontakti i potpisani Ugovori o tajnosti sa tvrtkama Biaseparations (Ljubljana, Slovenija) i Celanese Ventures (Frankfurt na Majni, Njemačka) za pripravu novih kiralnih materijala za tekućinsku kromatografiju. Unutar suradnje s nekoliko znanstvenih grupa iz više zemalja (Italije, Španjolske, Portugala, Francuske i Poljske) ponuđen je projekt pri Europskom ESF Programu.

Pojedini suradnici djeluju kao znanstveni konzultanti sa PLIVA d.d. i Belupo d.d.

Research programme and results:

Main research topics were preparation of novel chiral stationary phases for separation of enantiomers by high-performance liquid chromatography (HPLC), study of the relationship between structure of chiral selectors and their efficacy in enantioselection, and synthesis of new substances with liquid crystal properties.

In the year 2002, 3 papers have been published in the journals cited by SCI, and 2 are accepted for publication. Collaborators of the laboratory have participated on 4 international scientific meetings, contributing with one plenary lecture and three posters.

In the year 2002 one diploma thesis was completed.

In the frame of this Project members of the laboratory are co-authors of two patent applications, one of them is protected in USA. In the same period we have work on several different collaborations with researchers from universities at Exeter (G. Britain), Timisoara (Romania), Graz (Austria) and Trieste (Italy). The contractual research with PLIVA Co. R&D Institute was continued, too. We have realized and signed the Secrecy agreements with

Biaseparations d.d. (Ljubljana, Slovenia) and Celanese Ventures GmbH (Frankfurt am Main, Germany) companies on the projects deal with preparation of new chiral materials for liquid chromatography. In the collaboration with few other research groups from different countries (Italy, Spain, Portugal, France and Poland) we have proposed a project to European ESF Programme.

Some members are active as scientific consultants for PLIVA Co. and Belupo Co.

SINTEZA, MOLEKULSKA STRUKTURA I FUNKCIJA POLICIKLIČKIH MOLEKULA SYNTHESIS, MOLECULAR STRUCTURE AND FUNCTION OF POLYCYCLIC MOLECULES

Voditeljica projekta: dr. sc. Kata Majerski

Tel: ++385 1 4680 196 e-mail: majerski@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Lada Klaić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Goran Kragol, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Dunja Šafar Cvitaš, magistrica kem. znanosti, asistentica

Danko Škare, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Tatjana Šumanovac Ramljak, magistrica kem. znanosti, asistentica

Jelena Veljković, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Ines Vujasinović, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnici:

Renato Margeta, samostalni tehničar

Dragica Petračija, peračica suđa (50% radnog vremena)

Program rada i rezultati na projektu:

Kao dio našeg interesa o vrstama i načinu povezivanja ugljikovih atoma, te odnosa strukture i reaktivnosti, naš rad je usmjeren na sintezu novih policikličkih sustava koji sadrže ugljikove atome netetraedrijske geometrije i/ili sadrže neobične C-C veze.

Nadalje, naša istraživanja su usmjerena na pripravu različitih krunastih etera i kriptanada koji su funkcionalizirani kavezastim molekulama. Ovi makrociklički spojevi su od interesa kao "host" sustavi za istraživanje "host-guest" interakcija [na primjer: molekulsko prepoznavanje i fenomen umetanja] ili općenito, za bolje razumijevanje samoorganiziranja.

U posljednje vrijeme područje istraživanja naše grupe uključuje i sintezu biološki aktivnih adamantanskih molekula, poglavito adamantanskih amino kiselina koje će biti upotrijebljene u sintezi peptida.

Research programme and results:

As a part of the general interest in bonding between carbon atoms and the structure-reactivity relationship, our work is directed towards the synthesis of new polycyclic systems that possess nontetrahedral carbon atoms and/or unusual carbon-carbon bonds.

Further work is directed towards the synthesis of various cage-functionalized crown ethers and cryptands. These macrocyclic compounds are of interest as the "host" systems for the study of "host-guest" interactions [i. e., molecular recognition and inclusion phenomena] or for the better understanding the molecular assemblies in general.

More recent area of investigation in our group include the synthesis of biologically active adamantane-containing molecules, particularly adamantane amino acids, which could be used as the building blocks in the synthesis of peptides.

**SUPRAMOLEKULARNA ORGANIZACIJA U GELOVIMA, MOLEKULSKO
PREPOZNAVANJE I KATALIZA**

SUPRAMOLECULAR ORGANISATION IN GELS, MOLECULAR RECOGNITION AND CATALISYS

Voditelj projekta: dr. sc. Mladen Žinić

Tel: ++385 1 4680 217 e-mail: zinic@irb.hr

Suradnici na projektu:

Vesna Čaplar, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Zoran Džolić, magistar kem. znanosti, mlađi asistent, znanstveni novak

Leo Frkanec, doktor kem. znanosti, viši asistent

Milan Jokić, doktor kem. znanosti, viši asistent

Darinka Katalenić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Janja Makarević, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Ivo Piantanida, doktor kem. znanosti, viši asistent

Tomislav Portada, dipl. inž. kemije, mlađi asistent

Marijana Radić Sojković, dipl. prof. kemije i biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Nataša Šijaković-Vujičić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica

Lidija-Marija Tumor, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Biserka Žinić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Mladen Žinić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehničke suradnice:

Branka Budić, dipl. inž. kemije, tehničarka suradnica

Elizabeta Furić, samostalna tehničarka

Maja Pavišić, inž., samostalna tehničarka

Tamara Vraneš, peračica (1/3 radnog vremena)

Program rada i rezultati na projektu:

Istraživanja na novom projektu 0098053 «Supramolekularna organizacija u gelovima, molekularno prepoznavanje i kataliza» nastavljaju se na prethodna istraživanja. Radi se na sintezi hibridnih molekula peptidnih nukleinskih kiselina (PNA) i interkalatora. Ove hibridne molekule će na peptidnom lancu izgrađenom od alternirajućih jedinica D- i L-serina imati naizmjenično vezane nukleo baze i jedinice interkalatora. Ovakve hibridne molekule bi se trebale snažno vezati na jednonačane polinukleotide i prepoznavati njihove kratke sekvence. Sintetiziraju se novi gelatori kombinacijom samo-komplementarnih oksalamidnih jedinica s dugačkim alifatskim lancima. Istražuje se sinteza silikatnih nano-cijevi polimerizacijom TEOS-a na gelskim nitima koje služe kao nano-dimenzijski kalup.

Research programme and results:

The work related to the new project 098053 "Supramolecular organization in gels, molecular recognition and catalysis" is started in two new directions. Synthesis of novel peptide nucleic acid (PNA's)-intercalator hybrid molecules is in progress. The hybrid molecules are constructed from alternating phenanthridinium and nucleic base units attached on a polypeptide backbone consisting of alternating D- and L-serines. Such hybrid molecules are expected to recognize and bind on short complementary sequences of ss-polynucleotides. New efficient gelators based on self-complementary oxalamide units and long aliphatic chains are being synthesized and their properties and self-assembly motifs studied. Synthesis of silicon nanotubes using gel fibres as organic template is under investigation.

DIZAJN I SINTEZA BIOAKTIVNIH PEPTIDA, GLIKOPEPTIDA I BIOMARKERA DESIGN AND SYNTHESIS OF BIOACTIVE PEPTIDES, GLYCOPEPTIDES AND BIOMARKERS

Voditeljica projekta: dr. sc. Štefica Horvat

Tel: ++385 1 4680 103 e-mail: shorvat@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Jaroslav Horvat, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Štefica Horvat, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Andreja Jakas, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Ivanka Jerić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Ina Nemet, dipl. inž. prehrambene tehnologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Maja Roščić, magistrica kem. znanosti, asistentica
Lidija Varga-Defterdarović, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Tehničke suradnice:

Katica Boršić, peračica suđa (50% radnog vremena)
Milica Perc, samostalna tehničarka

Suradnica iz druge ustanove:

Zdenka Turk, doktorica kem. znanosti, Sveučilišna klinika Vuk Vrhovac, Zagreb
(konzultantica)

Vanjska suradnica Laboratorija za kemiju ugljikohidrata, peptida i glikopeptida:

Dina Keglević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica u mirovini

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj predloženih istraživanja su sinteze, strukturna karakterizacija i bioevaluacija novih spojeva iz reda ugljikohidrata, peptida i glikopeptida koji posjeduju specifična biološka svojstva s konačnim ciljem: (a) dobivanja novih bioaktivnih spojeva specifičnih osobina i uvođenja novih sintetskih postupaka i rješenja od interesa za kemijsku i farmaceutsku industriju, zdravstvo i gospodarstvo općenito; (b) stjecanje novih spoznaja o procesima neenzimске glikacije i glikooksidacije endogenih peptida i proteina in vivo. U skladu s naznačenim ciljem istraživanja započete su sinteze glikopeptida u kojima je pentapeptidni endogeni opioidni čimbenik rasta N-alkiliran s dvije različite ketoheksoze. Nadalje s ciljem pripreme novih bioaktivnih peptida s alifatskom prenosnicom sintetizirane su odgovarajuće zaštićene aminokiseline.

Research programme and results:

The objective of the proposed research is synthesis, structural characterization and bioevaluation of the novel compounds belonging to the class of carbohydrates, peptides and glycopeptides. Research tasks include: (a) synthesis of the novel bioactive compounds of interest for chemical and pharmaceutical industry by using new synthetic approaches; (b) studies of the non-enzymatic glycations and glycooxydations of endogenous peptides and proteins.

Considering the research programme we started the synthesis of glycopeptides in which opioid growth factor has been N-alkylated with two different keto-sugars. Next, N-protected amino acids have been prepared as starting compounds for the synthesis of novel bioactive peptides with rigid aliphatic hinge region.

**HIDROLAZE – OD IZOLACIJE DO FUNKCIJE
HYDROLASES – FROM ISOLATION TO FUNCTION**

Voditeljica projekta: dr. sc. Marija Abramić

Tel.: ++385 1 45 61 111/1205 e-mail: abramic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Marija Abramić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Šumski Šimaga, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Jasminka Špoljarić, dipl. inž. prehr. tehnologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Ljubinka Vitale, doktorica bioteh. znanosti, znanstvena savjetnica, u mirovini
Bojana Vukelić, doktorica biomed. znanosti

Tehnička suradnica:

Tamara Vraneša, peračica suđa (1/3 radnog vremena)

Vanjska suradnica:

Jasenska Pigac, doktorica bioteh. znanosti, znanstvena savjetnica u mirovini (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Istraživanja su djelomično nastavak istraživanja započetih u okviru teme "Hidrolitički enzimi: izolacija, svojstva, struktura, funkcija". Program rada je usmjeren na izučavanje odabranih predstavnika dviju podgrupa hidrolaza, peptidaza sisavaca i mikrobnih lipaza, sa ciljem unapređenja znanja o njihovoj biokatalitičkoj i fiziološkoj funkciji i strukturi, i utvrđivanja aplikativne vrijednosti dobivenih spoznaja, u kliničkoj dijagnostici, organskoj sintezi i biotehnologiji. Zato se planira uvođenje dviju novih metoda, kapilarne elektroforeze i dvodimenzionalne gel-elektroforeze visokog razlučivanja.

Veliki znanstveni interes za peptidaze sisavaca potječe od saznanja da ti enzimi danas spadaju u glavne terapijske ciljeve, jer se 14% od oko 400 ljudskih peptidaza poznate primarne strukture ispituje u svrhu ciljne terapije. Naše istraživanje ćemo usmjeriti na razjašnjavanje topografije aktivnog mjesta, te, još uvijek nedovoljno poznate (predvidivo regulatorne), fiziološke uloge dipeptidil-peptidaze III (DPP III) sisavaca, prateći kinetiku hidrolize biološki aktivnih peptida katalizirane ovim enzimom, modulaciju njegove aktivnosti izazivanjem staničnog stresa, i tkivnu distribuciju u normalnim i patološkim uvjetima.

Lipaze mikroorganizama već su našle široku primjenu u industrijskim produktima i procesima, zbog sposobnosti katalize transformacija velikog broja supstrata u vodenom mediju i organskim otapalima. Mi smo u prethodnim istraživanjima biokemijski karakterizirali termofilnu i alkalofilnu lipazu osobite supstrate specifičnosti iz industrijski važnog mikroorganizma *Streptomyces rimosus*. Izučavanje je nastavljeno kroz interdisciplinarnu suradnju sa kolegama iz Zavodâ za molekularnu genetiku i fizičku kemiju IRB, iz FU Berlin i EMBL Hamburg Outstation (Njemačka), a rezultiralo je u određivanju i publiciranju primarne strukture ove hidrolaze. Analizom sekvencije aminokiselina ustanovljeno je da se radi o novom proteinu koji ne pokazuje značajnu sličnost primarne strukture niti sa jednom od poznatih lipaza čije su strukture pohranjene u bazama podataka, već sa esterazama iz *Streptomyces diastatochromogenes* i *Aspergillus terreus*, i sa dvije, dosad još nekarakterizirane, hidrolaze iz *S. coelicolor*. U primarnoj strukturi lipaze iz *S. rimosus* uočen je karakteristični motiv, tetrapeptid GDS(L), prema kojem je ova lipaza svrstana u porodicu II bakterijskih lipolitičkih enzima, dotad nepoznatu u bakterijama roda *Streptomyces*.

Research programme and results:

Research programme is partly continuation of a previous one ("Hydrolytic enzymes: isolation, properties, structure, function"). It is directed towards investigation of selected representatives of two subgroups of hydrolases, mammalian peptidases and microbial lipases, in order to obtain the data on their biocatalytical and physiological function and structure, and to establish the applicative value of obtained cognitions in clinical diagnostics, organic synthesis and biotechnology. Therefore, introduction of new methods, capillary electrophoresis and high resolution two-dimensional gel electrophoresis is planned.

Mammalian peptidases are in the research focus due to the realization that these enzymes are among major therapeutic targets: 14% of 400 human peptidases of known primary structure are under investigation as drug targets. For elucidation of unknown active site topography, and yet insufficiently known (presumably regulatory) physiological role of mammalian dipeptidyl peptidase III (DPP III), the research will be directed to kinetics of hydrolysis of biologically active peptides, modulation of DPP III activity under cellular stress, and tissue distribution and expression of this enzyme in normal and pathological conditions.

Microbial lipases are broadly applied in industrial products and processes, due to their ability to catalyze various transformations of a wide range of substrates in aqueous media and organic solvents. We have characterized previously an thermophilic and alkalophilic lipase of unique substrate specificity originating from industrially important microorganism *Streptomyces rimosus*. The study continued in collaboration with colleagues from RBI Departments of Molecular Genetics and Physical Chemistry, from FU Berlin and EMBL Hamburg Outstation, and resulted in determination and publication of the complete amino acid sequence of this hydrolase. Sequence analysis revealed that it is a novel protein showing no overall similarity to other lipases in data bases, but to esterases from *Streptomyces diastatochromogenes* and *Aspergillus terreus*, and to two putative hydrolases derived from the genome sequencing data of *Streptomyces coelicolor* (66%, and 33% identity, resp). Finding of important GDS(L)-like motif in the primary structure, enabled the classification of *S. rimosus* lipase to family II of bacterial lipolytic enzymes, previously unrecognized in genus *Streptomyces*.

REAKCIJSKI MEĐUPRODUKTI U OSNOVNOM I POBUĐENOM STANJU REACTIVE INTERMEDIATES IN THE GROUND AND EXCITED STATES

Voditeljica projekta: dr. sc. Mirjana Eckert-Maksić

Tel: ++385 1 4680 197 e-mail: mmaksic@emma.irb.hr

Suradnici na projektu:

Ivana Antol, magistrica kem znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Gordana Gadanji, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 13.5.2002.)
Mirjana Eckert-Maksić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Zoran Glasovac, doktor kem. znanosti, viši asistent
Davor Margetić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik (od 22. 4.2002.)
Nana Novak Coumbassa, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Irena Zrinski, doktorica kem. znanosti, asistentica

Tehnički suradnici:

Dragica Petračija, peračica (50% radnog vremena)
Ante Pupačić, tehničar suradnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Ivica Ljubenkov, doktor kem. znanosti, SMS d.o.o., Split
Howard Maskill, doktor kem. znanosti, University of Newcastle upon Thyne, Newcastle upon Thyne, Velika Britanija

Program rada i rezultati na projektu:

Težište istraživanja na projektu je na ispitivanju odnosa elektronske strukture i reaktivnosti organskih i organometalnih spojeva u osnovnom i elektronski pobuđenim stanjima. Razumijevanje tih fundamentalnih aspekata fizikalno-organske kemije preduvjet je racionalnom planiranju sinteze nove generacije molekularnih materijala. Istraživanje mehanizma kemijskih reakcija, identifikacija ključnih reakcijskih međuprodukata i poznavanje njihovih intrinzičnih svojstava, kao i utjecaja supstituenata i otapala, primjenom eksperimentalnih i računalnih metoda posebno su korisne u tom smislu. Tijekom 2002. godine naša su istraživanja obuhvatila slijedeće specifične teme: (a) pripremu modelnih spojeva i određivanje kiselosti odabranih derivata ciklobutena u plinskoj fazi, te ispitivanje utjecaja otapala na stabilnost iz njih dobivenih aniona; (b) istraživanje međuprodukata u kiselu-kataliziranoj hidrolizi nitrozohidroksilamina primjenom rigoroznih ab initio računa. Iste su metode primijenjene i u studiju elektronske strukture piramidaliziranih olefina i njihove interakcije s ionima metala; (c) istraživanje strukturnih i energetskih svojstava polarnih organometalnih međuprodukata u reakciji metalacije derivata ciklopropena; (d) studij 1,3-dipolarnih adicija i reakcija izomerizacije pri visokom tlaku; (e)

ispitivanje utjecaja fotopobude na protoniranje modelnih spojeva s peptidnom vezom primjenom MR-CI i MRAQCC računa.

Research programme and results:

Research within this project is focused on investigation of electronic structure of organic and organometallic compounds and its impact on reactivity in the ground and electronically excited states. Understanding of these fundamental facets of physical-organic chemistry is prerequisite for more effective control over chemical syntheses, product selectivity and chemical reactivity in general. Elucidating reaction mechanisms, investigation of the solvation and substituent effects, identifying relevant short-lived intermediates and analysis of their intrinsic properties with experimental and quantum mechanical methods are of special interest in this respect.

Our activity in 2002. has been concerned with the following subjects: (a) synthesis of model compounds and determining gas-phase acidities of selected cyclobutene derivatives. We are currently exploring effect of solvation on the acidity of these species; (b) ab initio studies of acid catalysed decomposition of nitrosohydroxylamines and electronic structure of pyramidalized olefines and their interaction with metal ions; (c) investigation of structural and energetic properties of the polar organometallic intermediates in metallation of cyclopropene derivatives; (d) application of high pressure to 1,3-dipolar cycloadditions and isomerisation reactions; (e) evaluation of the effect of photoexcitation on acid-base properties of model molecules containing functional group(s) present in peptides and proteins using MR-CI and MRAQCC computational approaches. We are currently exploring photoprotonation of formamide as the smallest representative in this series.

PROŠIRENI PI-SISTEMI I MOLEKULARNE SPEKTROSKOPIJE EXTENDED PI- SYSTEMS AND MOLECULAR SPECTROSCOPIES

Voditelj projekta: dr. sc. Goran Baranović

Tel. ++385 1 468 0116 e-mail: baranovi@irb.hr

Suradnici na projektu:

Darko Babić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Nikola Biliškov, dipl. inž. kemije, znanstveni novak

Kata Majerski, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica (konzultantica)

Višnja Stepanić, doktor kem. znanosti, znanstvena novakinja (do 15.12.2002.)

Vesna Svetličić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica (konzultantica)

Boris Zimmermann, dipl. inž. kemije, znanstveni novak

Suradnici iz drugih ustanova:

Srećko Valić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik, Medicinski fakultet Sveučilišta u Rijeci

Zlatko Meić, red. profesor, Zavod za analitičku kemiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu

Program rada i rezultati na projektu:

Opći ciljevi istraživanja su (1) omogućiti efikasnu upotrebu vibracijske spektroskopije u razumijevanju relacije između strukture i vibracijskih prijelaza osnovnog elektronskog stanja makrocikličkih oligo(fenilacetilena) i oligo(fenildiacetilena) koji su mogući prekursori fullerena i podstrukture neprirodnih alotropa ugljika (graf-ina i graf-di-ina) i (2) pomoću kvantno-kemijskih metoda izučiti njihova prva pobuđena elektronska stanja. To su, naime, materijali za koje se očekuje da će imati izražena nelinearna optička svojstva, da će biti luminiscentni i pokazivati električnu vodljivost (što je i glavni motiv njihovog istraživanja u svijetu) te im je, sa fundamentalnog stajališta, svojstvena elektronska interakcija kroz veze i prostor. Prema tome su, dakle, posebno važne karakteristike takvih materijala (1) mala razlika energija HOMO-LUMO koja odgovara energetskom procijepu između valentne i vodljive vrpce kod

makromolekula (nanostruktura) i (2) velika hiperpolarizabilnost. Svrha istraživanja je da, poznavajući relaciju između strukture i vibracijskih prijelaza, posebno istežanja trostruke $C\equiv C$ veze, olakšamo uspješno dijagnosticiranje niza međuprodukata i konačnog produkta u sintezi makrocikličkih oligo(fenilacetilena) i oligo(fenildiacetilena), kao i produkata koji nastaju njihovim naknadnim transformacijama, a što je važno kada se istražuju njihova fizičko-kemijska svojstva. Ciklički dimer i trimer 4,5-dibutil i 4,5-didecil derivata 1,2-dietinilbenzena su sintetizirani. Njihovi vibracijski spektri su snimljeni u čvrstom stanju i otopini te interpretirani pomoću DFT računa (B3LYP). Pri tome su također korišteni vlastiti rezultati na srodnom, jednostavnijem sistemu difenildiacetilenu. Vibracijska infracrvena spektroskopija je korištena za praćenje polimerizacije tih derivata na višim temperaturama (do 200 °C.). Dimer doživljava brzu polimerizaciju na 100-125 °C. Geometrijske i elektronske strukture osnovnog i prvih pobuđenih stanja difenilacetilena studirane su metodama funkcionala gustoće (B3LYP) te ab initio metodama (CIS, CISD i CAS). Na temelju usporedbe s eksperimentalnim rezultatima i teorijskim studijama drugih autora pokazana je promjena ravnotežne geometrije fenilacetilena na S_1 plohi. Također su odabrane metode za istraživanje oligo(fenilacetilena) i oligo(fenildiacetilena).

Research programme and results:

The general goal of the proposed research are (1) to enable efficient use of the vibrational spectroscopy in understanding the relationship between the structure and vibrational transitions of the ground electronic state of macrocyclic oligo(phenylacetylenes) and oligo(phenyldiacetylenes) which are possible precursors in the fullerene synthesis and substructures of non-natural carbon allotropes graphyne and graphdiyne and (2) by means of various quantum-chemical methods investigate their first electronic excited states. These systems are expected to have enhanced nonlinear optical properties, to exhibit luminescence and electrical conductivity (which is the main motif behind today's intensive exploration) and, from the fundamental point of view, they show electronic interaction through space and bonds. Therefore, important characteristics of these materials are (1) small HOMO-LUMO energy difference which corresponds to the energy gap between valence and conductive band in macromolecules (nanostructures) and (2) high hyperpolarizability. The purpose of the proposed research is to ease the successful identification of reaction products during the synthesis of macrocyclic oligo(phenylacetylenes) i oligo(phenyldiacetylenes), as well as the products into which they transform under various conditions. This is particularly important when their physical and chemical properties are investigated. The vibrational spectra of cyclic dimers (D) and trimers (T) of 4,5-dibutyl and 4,5-didecyl derivatives of 1,2-diethynylbenzene in the solid state and solutions are reported and the fundamental transitions assigned using the density functional theory. A comparison between the title compounds and respective diphenyldiacetylene is made. The D compound is known to suffer a rapid polymerization at 100-125 °C. The results of the vibrational study have been used to monitor the thermal behaviour of D and T above the room temperature. Geometry and electronic structure of the ground and first three singlet excited states of tolane (phenylacetylene) were investigated by using time-dependent density-functional approach and some ab initio methods (CIS, CISD and CAS). By comparison with available experimental results a change of geometry from linear to trans-bent on the S_1 surface has been demonstrated.

PROTONSKI AFINITETI I REAKCIJE PRIJENOSA PROTONA U KEMIJI PROTON AFFINITIES AND THE PROTON TRANSFER REACTIONS

Voditelj projekta: dr.sc. Zvonimir Maksić

Tel: ++385 1 45 61 117 e-mail: zmaksic@spider.irb.hr

Suradnici na projektu:

Danijela Barić, magistrica kem. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Ines Despotović, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Krešimir Kovačević, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Borislav Kovačević, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Zvonimir Maksić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Robert Vianello, dipl. inž. kemije, mlađi asistent

Suradnici iz drugih ustanova:

Manuel Yañez, doktor kem. znanosti, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, Španjolska
David Smith, doktor kem. znanosti, Ludwig-Maximilians-University, München, Njemačka
Miljenko Primorac, doktor fiz. znanosti, Šumarski fakultet, Zagreb
Zlatko Mihalić, doktor kem. znanosti, Prirodoslovno–matematički fakultet, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Dizajniran je niz izuzetno jakih organskih baza "in silico" korištenjem dva dominantna efekta: (1) aromatske stabilizacije, koja se širi duž protonirane baze poput domino vala i (2) djelovanja kooperativnih višestrukih intramolekularnih vodikovih veza. Postignut je dalji napredak u interpretaciji svojstava kiselosti i bazičnosti molekula, što će naći svoju korisnu primjenu u općem principu izgradnje organskih superkiselina i superbaza, te u konačnici dovesti do stapanja njihovih ljestvica. Interakcije superkiselina i superbaza dovest će do spontanog prijenosa protona i stvaranja ionskih parova. Pokazano je na vrlo visokoj razini teorije da elektronske korelacije molekula slijedi vrlo jednostavna pravila aditivnosti. Rezultati su objavljeni u deset radova tiskanih u vodećim svjetskim znanstvenim časopisima.

Research programme and results:

A number of powerful organic neutral superbases was designed "in silico" by using two dominant effects: (1) the aromatic stabilization propagated through the protonated base system in a domino fashion and (2) the enhanced cooperative multiple hydrogen bonding interaction upon protonation. An important progress in interpreting acidity and basicity of molecules is made, which will be implemented in the Aufbau principle for tailoring strong organic superacids and superbases. The latter will enable a construction of their unified ladder. Interactions between superacids and superbases will lead to a spontaneous proton transfer and formation of ion pairs. It is conclusively shown that the electron correlation in molecules follows a very simple additivity rule. Results are published in 10 papers, which appeared in the leading scientific journals.

**NUKLEARNA MAGNETSKA REZONANCIJA I PRORAČUNI BIOORGANSKIH MOLEKULA
NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE AND CALCULATIONS OF BIOORGANIC MOLECULES**

Voditelj projekta: dr. sc. Dražen Vikić-Topić
Tel: ++385 1 4560 961 e-mail: viki@irb.hr

Suradnici na projektu:

Željko Marinić, magistar kem. znanosti, stručni suradnik
Vilko Smrečki, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Dražen Vikić-Topić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Kristina Wolsperger, dipl. inž. kemije, stručna suradnica

Tehnički suradnik:

Boris Sokač, samostalni tehničar

Program rada i rezultati na projektu:

U okviru projekta istražuju se struktura, dinamika i interakcije malih bioorganskih molekula (peptida, kinolona, itd) spektroskopijom nuklearne magnetske rezonancije (NMR) i računskim metodama. Mjerenje NOE interakcija, izotopno obilježavanje i kompleksiranje koristi se za

utvrđivanje bioaktivnih konformacija. Relativno mali broj atoma u istraživanim spojevima omogućuje točne kvantno-kemijske proračune strukture i konformacije. Izračunani NMR parametri (kemijski pomaci, spin-spin sprega) koreliraju se s eksperimentalnim NMR podacima radi dobivanja što preciznijeg uvida u strukturu i prirodu interakcija ovih molekula u otopinama. Istraživanja su poduprta i s drugim spektroskopskim mjerenjima -infracrvena, uv/vis spektroskopija, spektrometrija masa, rentgenska analiza. Saznanja o strukturi, konformaciji i svojstvima bioorganskih molekula važna su za izučavanje biološki procesa strukturiranja proteina (foldinga), izomerizacije, interakcija ligand-receptor (intrinsic, extrinsic), vodikovih veza te za farmakokinetiku i dizajniranje lijekova. Sve se više pokazuje da organske molekule male i srednje veličine imaju daleko veću biološku važnost nego što se pretpostavljalo. Kratki peptidni fragmenti, veličine 5-13 aminokiselina mogu imitirati aktivnost čitavog peptida te čak biti aktivniji od cijele molekule. Značajno je da manji fragmenti, koji se više puta ponavljaju unutar molekule sami mogu biti korišteni kao lijekovi ili mogu poslužiti kao "vodeći spojevi" za razvoj lijekova.

Research programme and results:

The investigation of the structure, dynamics and interactions of small biomolecules (peptides, quinolones, etc.) has been performed using nuclear magnetic resonance spectroscopy and quantum chemical calculations. The conformations important for bioactivity are analyzed by NOE measurements, isotope labelling and complexation. Relatively small number of atoms in these molecules enable the precise quantum chemical calculations of their structure, conformation as well as their properties. Calculated NMR parameters (chemical shifts, spin-spin couplings) are correlated with the experimental NMR data for obtaining deeper insight into the structure and nature of interactions in solution. The investigations are supported by other spectroscopy measurements (IR, UV/VIS, mass spectrometry and X-ray analysis). The knowledge of the structure, conformation and properties of bioorganic molecules is helpful in studying bioprocesses: protein folding, isomerization, ligand-receptor interactions (intrinsic, extrinsic), hydrogen bonding as well as in pharmacokinetics and drug design. Short peptide fragments, 5 to 13 amino acids, can mimic activity of the whole peptide and sometimes they can be even more bioactive than the whole molecule. Small peptide fragments, which repeat many times in molecule, can be used themselves as a drug or can be the lead compounds for the development of classical drugs.

Projekt HITRA POTENCIJALNI ANTITUMORSKI LIJEKOVI POTENTIAL ANTITUMOR DRUGS

Voditeljica projekta: dr. sc. Štefica Horvat

Tel. ++385 1 4680 103 e-mail: shorvat@rudjer.irb.hr

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Abatangelo, A.; Zanetti, F.; Navarini, L.; Kontrec, Darko; Vinković, Vladimir; Šunjić, Vitomir. Enantiomerization of 3-carbomethoxy-1,4-benzodiazepin-2-one; combined chiral HPLC and spectroscopic study. // *Chirality*. 13 (2002); 12-17.
2. Antol, Ivana; Glasovac, Zoran; Hare, Michael; Eckert-Maksić, Mirjana; Kass, Steven. On the acidity of cyclopropanaphthalenes. Gas phase and computational studies. // *International journal of mass spectrometry*. 222 (2003), 1; 11-26.

3. Babić, Darko; Bosanac, Slobodan Danko; Došlić, Nađa. Proton transfer in malonaldehyde: a model three-dimensional study. // *Chemical physics letters*. 358 (2002), 3-4; 337-343.
4. Barić, Danijela; Maksić, Zvonimir B. The additivity of the correlation energy in organic 3D molecules. // *Journal of physical chemistry A*. 106 (2002); 1612-1618.
5. Bistričić, Lahorija; Pejov, Ljupčo; Baranović, Goran. A density-functional analysis of Raman and IR spectra of 2-adamantanone. // *Journal of molecular structure - Theochem*. 594 (2002); 79-88.
6. Eckert-Maksić, Mirjana; Antol, Ivana; Margetić, Davor; Glasovac, Zoran. syn-Sesquinorbornenyl carbocations and their boron analogues: an ab initio and DFT study. // *Journal of the chemical society Perkin transaction 2*. (2002), 12; 2057-2063.
7. Frkanec, Leo; Jokić, Milan; Makarević, Janja; Wolsperger, Kristina; Žinić, Mladen. Bis(PheOH) maleic acid amide-fumaric acid amide photoisomerization induces microsphere-to-gel fiber morphological transition: The photoinduced gelation system. // *Journal of the American chemical society*. 124 (2002), 33; 9718-9719.
8. Glasovac, Zoran; Eckert-Maksić, Mirjana; Dacres, Jelena E.; Kass, Steven R. Gas phase formation of 1-phenylcyclobuten-3-yl and 1-phenylallyl anions and a determination of the allylic C-H acidities and bond dissociation energies of 1-phenylcyclobutene and (E)-1-phenylpropene. // *Journal of the chemical society Perkin transaction 2*. (2002), 3; 410-415.
9. Hameršak, Zdenko; Roje, Marin; Hollosi, Miklos; Majer, Zsuzsa; Šunjić, Vitomir. CD Spectra of diastereomeric alfa-arylethylamides od (-)-camphanic acid. // *Spectroscopy Letters*. 35 (2002); 73-82.
10. Hameršak, Zdenko; Litvić, Mladen; Šepac, Dragan; Lesac, Andreja; Raza, Zlatica; Šunjić, Vitomir. Efficient synthesis of chiral amides of 2-(2'-carboxyphenyl)-4-hydroxyquinoline. // *Synthesis*. (2002); 2174-2176.
11. Hollosi, Miklos; Majer, Zuzsa; Vass, Egon; Raza, Zlata; Tomišić, Vjekoslav; Portada, Tomislav; Piantanida, Ivo; Žinić, Mladen; Šunjić, Vitomir. Structural and chiroptical properties of acyclic and macrocyclic 1, 4-bisoxazoline ligands and their copper (I) and silver (I) complexes. // *European journal of inorganic chemistry*. (2002); 1738-1748.
12. Juranović, Iva; Meić, Zlatko; Piantanida, Ivo; Tumir, Lidija-Marija; Žinić, Mladen. Interactions of phenanthridinium-nucleobase conjugates with polynucleotides in aqueous media. Recognition of poly U. // *Chemical communications*. (2002); 1432-3.
13. Jerić, Ivanka; Versluis, Cornelis; Horvat, Štefica; Heck, Albert J.R. Tracing glycoprotein structures: electron ionization tandem mass spectrometric analysis of sugar-peptide adducts. // *Journal of mass spectrometry*. 37 (2002); 803-811.
14. Klaić, Lada; Veljković, Jelena; Mlinarić-Majerski, Kata. Convenient synthesis of novel 1,3,7-trisubstituted bicyclo[3.3.1]nonane derivatives. // *Synthetic communications*. 32 (2002), 1; 89-97.
15. Kovačević, Borislav; Glasovac, Zoran; Maksić, Zvonimir B. The intramolecular hydrogen bond and intrinsic proton affinity of neutral organic molecule: N,N',N''-tris(3-aminopropyl)guanidine and some related systems. // *Journal of physical organic*

- chemistry. 15 (2002); 765-774.
16. Kovačević, Borislav; Liebman, Joel F.; Maksić, Zvonimir B. Nibbering's C₇H₇N: an ab initio study of the structure and electronic properties of benzaldimine and its protonated ion. // *Journal of chemical society Perkin Transactions 2.* (2002); 1544-1548.
 17. Kovačević, Borislav; Maksić, Zvonimir B.; Vianello, Robert; Primorac, Miljenko. Computer aided design of organic superbases - the role of Intramolecular Hydrogen Bonding. // *New journal of chemistry.* 26 (2002); 1329-1334.
 18. Kovačević, Borislav; Maksić, Zvonimir B. The proton affinity of the superbase 1,8-bis(tetramethylguanidino)naphthalene and some related compounds - a theoretical study. // *Chemistry - a European journal.* 8 (2002), 7; 1694-1702.
 19. Kragol, Goran; Hoffmann, R.; Chattergoon, A.M.; Lovas, S.; Cudic, M.; Bulet, P.; Condie, A.B.; Rosengren, K.J.; Montaner, L.J.; Otvos Jr, L. Identification of crucial residues for the antibacterial activity of the proline-rich peptide, pyrrocoricin. // *European journal of biochemistry.* 269 (2002); 4226-4237.
 20. Makarević, Janja; Jokić, Milan; Frkanec, Leo; Katalenić, Darinka; Žinić, Mladen. Gels with exceptional thermal stability formed by bis(amino acid) oxalamide gelators and solvents of low polarity. // *Chemical communications.* 2002 (2002), 19; 2238-2239.
 21. Maksić, Zvonimir B.; Vianello, Robert. Anionic vs. neutral protonation - an ab initio analysis with a triadic formula. // *ChemPhysChem.* (2002), 8; 696-700.
 22. Maksić, Zvonimir B.; Vianello, Robert. How good is Koopmans' approximation? - G2(MP2) study of the vertical and adiabatic ionization potentials of some small molecules. // *Journal of physical chemistry A.* 106 (2002); 6515-6520.
 23. Maksić, Zvonimir B.; Vianello, Robert. Quest for the origin of basicity: initial vs. final state effect in neutral nitrogen bases. // *Journal of physical chemistry A.* 106 (2002); 419-430.
 24. Maksić, Zvonimir B.; Glasovac, Zoran; Despotović, Ines. Predicted high proton affinity of poly-2,5-dihydropyrrolimines-the aromatic domino effect. // *Journal of physical organic chemistry.* 15 (2002), 8; 499-508.
 25. Malinovski, Vladimir; Tumir, Lidija; Piantanida, Ivo; Žinić, Mladen; Schneider, Hans-Jorg. New porphyrin-nucleobase hybrid compounds and their interaction with nucleosides and nucleic acids. // *European journal of organic chemistry.* (2002), 22; 3785-3795.
 26. Marchand, A.P.; Cal, D.; Mlinarić-Majerski, Kata; Ejsmont, K.; Watson, W.H. Cage-annulated thiacycrown ethers and thiacycrotands. // *Journal of chemical crystallography.* 32 (2002), 11; 447-463.
 27. Miljanić, Snežana; Cimerman, Zvezdana; Frkanec, Leo; Žinić, Mladen. Lipophilic derivative of rhodamine 19: characterization and spectroscopic properties. // *Analytica chimica acta.* 468 (2002), 1; 13-25.
 28. Mlinarić-Majerski, Kata; Šumanovac Ramljak, Tatjana. Synthesis and alkali metal binding properties of novel N-adamantylaza-crown ethers. // *Tetrahedron.* 58 (2002);

- 4893-4898.
29. Nigović, Biljana; Kujundžić, Nikola; Sanković, Krešimir; Vikić-Topić, Dražen. Complex formation between transition metals and 2-pyrrolidone-5-hydroxamic acid. // *Acta Chimica Slovenica*. 49 (2002), 3; 525-535.
 30. Ouillon, Robert; Pinan-Lucarre, Jean-Paul; Ranson, Pierre; Baranović, Goran. Low-temperature Raman spectra of nitromethane single crystal. Lattice dynamics and Davydov splitting. // *Journal of chemical physics*. 116 (2002), 11; 4611-4625.
 31. Pavlović, Gordana; Matijević-Sosa, Julija; Vikić-Topić, Dražen; Leban, Ivan. N-(3-chlorophenyl)-2-hydroxy-1-naphthaldimine at 200 K. // *Acta crystallographica E*. 58 (2002), 3; o317-o320.
 32. Planinić, Pavica; Rastija, Vesna; Širac, Siniša; Vojnović, Marija; Frkanec, Leo; Brničević, Nevenka; McCarley, Robert E. Nitrile cluster compounds [M₆X₁₂]₂(RCN)₄ (M = Nb, Ta; X = Cl, Br; R = Et, n-Pr, n-Bu). // *Journal of cluster science*. 13 (2002); 215-222.
 33. Roje, Marin; Hameršak, Zdenko; Šunjić, Vitomir. Efficient resolution of (plus/minus)-1-(9-Anthryl)ethylamine. // *Synthetic communication*. 32 (2002), 22; 3413-3417.
 34. Roje, Marin; Šunjić, Vitomir. Chemoenzymatic synthesis and properties of Schiff bases containing (R)-1-(9-anthryl)ethylamine. // *Chirality*. 14 (2002); 625-631.
 35. Šinko, Goran; Novak, Predrag; Žiher, Dinko; Vinković, Vladimir; Šunjić, Vitomir; Simeon-Rudolf, Vera. Separation, conformation in solution and absolute configuration of ethopropazine enantiomers. // *Enantiomer*. 7 (2002), 2-3; 149-156.
 36. Škare, Danko; Radić, Božica; Lucić, Ana; Perajica, Maja; Domijan, Ana-Marija; Milković-Kraus, Sanja; Bradamante, Vlasta; Jukić, Ivan. Adamantyl tenocyclidines - adjuvant therapy in poisoning with organophosphorus compounds and carbamates. // *Archives of toxicology*. 76 (2002); 173-177.
 37. Smith, David M.; Maksić, Zvonimir B.; Maskill, Howard. Designing aryl cations for direct observation in solution: ab initio MO calculations of UV Spectra. // *Journal of the chemical society Perkin transactions 2*. (2002); 906-913.
 38. Smrečki, Vilko; Novak, Predrag; Vikić-Topić, Dražen; Hrenar, Tomica; Meić, Zlatko. Deuterium isotope effects in C-13 NMR spectra of trans-N-salicylideneaniline isotopomers. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 1; 41-49.
 39. Tumir, Lidija-Marija; Piantanida, Ivo; Novak, Predrag; Žinić, Mladen. Interactions of novel phenanthridinium-nucleobase conjugates with complementary and non-complementary nucleotides in aqueous media. // *Journal of physical organic chemistry*. 15 (2002); 599-607.
 40. Vančik, Hrvoj; Šimunić-Mežnarić, Vesna; Čaleta, Irena; Meštović, Ernest; Milovac, Srđan; Mlinarić-Majerski, Kata; Veljković, Jelena. Solid state photochromism and thermochromism in nitroso monomer-dimer equilibrium. // *Journal of physical chemistry B*. 106 (2002); 1576-1580.
 41. Veljković, Jelena; Klaić, Lada; Mlinarić-Majerski, Kata. Carbens in polycyclic systems. Generation and fate of pentacyclo[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,10}.0^{5,9}]undecanylidene species. //

- Tetrahedron letters. 43 (2002); 7573-7575.
42. Vianello, Robert; Kovačević, Borislav; Maksić, Zvonimir B. In search for neutral organic superbases - iminopolyenes and their amino derivatives. // *New journal of chemistry*. 26 (2002); 1324-1328.
 43. Višnjevac, Aleksandar; Tušek-Božić, Ljerka; Majerić-Elenkov, Maja; Hameršak, Zdenko; Kooijman, Huub; De Clercq, Erik; Kojić-Prodić, Biserka. Synthesis, structural characterisation and biological activity of Zn(II) and Pd(II) complexes of 3-substituted 5-(2'-Pyridyl)-1,4-benzodiazepin-2-one derivatives. // *Polyhedron*. 21 (2002), 25-26; 2567-2577.
 44. Vladić, Anton; Horvat, Gordana; Vukadin, Stjepan; Sučić, Zvonimir; Šimaga, Šumski. Cerebrospinal fluid and serum protein levels of tumour necrosis factor-alpha (TNF-alpha), interleukin-6 (IL-6) and soluble interleukin-6 receptor (sIL-6R gp80) in multiple sclerosis patients. // *Cytokine*. 20 (2002), 2; 86-89.
 45. Volovšek, Vesna; Bistričić, Lahorija; Kirin, Davor; Baranović, Goran. Low-wavenumber lattice vibrations and dynamics of 4,4'-dibromobenzophenone. // *Journal of Raman spectroscopy*. 33 (2002), 10; 761-768.
 46. Vujaklija, Dušica; Schroeder, Werner; Abramić, Marija; Zou, Peijian; Leščić, Ivana; Franke, Peter; Pigac, Jasenka. A novel streptomycete lipase: cloning, sequencing and high-level expression of the *Streptomyces rimosus* GDS(L)-lipase gene. // *Archives of microbiology*. 178 (2002), 2; 124-130.
 47. Williams, S.M.; Brodbelt, J.S.; Marchand, A.P.; Cal, D.; Mlinarić-Majerski, Kata. Metal complexation of thiacrown ether macrocycles by electrospray ionization mass spectrometry. // *Analytical chemistry*. 74 (2002); 4423-4433.

Knjige i poglavlja u knjigama:

1. Bregovec, Ivo; Horvat, Štefica; Majerski, Kata; Rapić, Vladimir. Vodič kroz IUPAC-ovu nomenklaturu organskih spojeva / Rapić, Vladimir (ur.). Zagreb : Školska knjiga, 2002.
2. Jakas, Andreja; Horvat, Štefica. Study of degradation pathways in sugar-peptide Maillard model systems // *Peptides 2002* / Benedetti, Ettore; Pedone, Carlo (ur.). Napulj : Edizioni Ziino, 2002. 146.
3. Jerić, Ivanka; Roščić, Maja; Versluis, Cornelis; Heck, Albert J. R.; Horvat, Štefica. Glycopeptide mimetics as "puzzles" in understanding the biological phenomena // *Peptides 2002* / Benedetti, Ettore; Pedone, Carlo (ur.). Napulj : Edizione Ziino, 2002. 374.

Ostali radovi u časopisima:

1. Butula, Ivan; Škare, Danko. Kemija u industriji - uloga, razvitak i perspektive. // *Kemija u industriji*. 51 (2002); 123-126.
2. Eckert-Maksić, Mirjana; Ruasse, Marie-Francoise. Preface. // *Journal of physical organic chemistry*. 15 (2002.), 8; 429.
3. Graovac, Ante; Pokrić, Biserka; Vikić-Topić, Dražen. Foreword: Proceedings of the 16th Dubrovnik International Course & Conference MATH/CHEM/COMP

2001. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 4; VII-VIII.

4. Jadrijević-Mladar-Takač, Milena; Vikić-Topić, Dražen; Govorčinović, Tihana. FTIR and NMR spectroscopic structural studies of gentisamide isolated from biological material. // *European journal of pharmaceutical sciences*. 17S (2002); S47-S57.
5. Mlinarić-Majerski, Kata; Vinković, Marijana; Škare, Danko; Marchand, A.P. Experimental evidence in support of transannular interactions in diketones. // *ARKIVOC*. (2002), IV; 30-37. [Http://www.arkat-usa.org/ark/ARKIVOC/arcivoc_articles.htm](http://www.arkat-usa.org/ark/ARKIVOC/arcivoc_articles.htm)

Znanstveni radovi u tisku:

1. Barić, Danijela; Maksić, Zvonimir B. Nondynamical correlation energy of pi-electrons as an index of anti/aromaticity. // *Journal of physical organic chemistry*.
2. Barić, Danijela; Maksić, Zvonimir B.; Yanez, Manuel. Atomic additivity of the correlation energy in molecules - an ab initio MP4 and G3 study. // *Molecular physics*.
3. Čaplar, Vesna; Raza, Zlata; Katalenić, Darinka; Žinić, Mladen. Synthesis of amino alcohols and chiral C₂-symmetric bisoxazolines derived from O-alkylated R-4-hydroxyphenylglycine and S-tyrosine. // *Croatica chemica acta*.
4. Eckert-Maksić, Mirjana; Glasovac, Zoran; Maskill, Howard; Zrinski, Irena. Alkane- and arene-oxodiazonium ions: experimental results leading to an ab initio theoretical investigation. // *Journal of physical organic chemistry*.
5. Ferle-Vidović, Ana; Jukić, Ivan; Škare, Danko; Šuman, Lidija; Vuković, Lidija. Radioprotective and antitumor activity evaluation of newly synthesized adamantyl tenocyclidines. // *Cancer biotherapy & radiopharmaceuticals*.
6. Guthrie, J. P.; More O'Ferrall, R. A.; O'Donoghue, A. C.; Waghorne, E; Zrinski, Irena. Estimation of a pKa for protonation of dimethoxycarbene. // *Journal of physical organic chemistry*.
7. Hameršak, Zdenko; Gašo, Dajana; Kovač, Srebrenka; Vicković, Ivan; Šunjić, Vitomir. Convenient entry to alfa-amino beta-hydroxy-gama-methyl carboxylic acids. Diastereoselective formation and directed homogeneous hydrogenation of 3-(1'-Hydroxy-2'-methyl-3'-aryl)-propen-2'-yl-1,4-benzodiazepin-2-ones.. // *Helvetica chimica acta*.
8. Hameršak, Zdenko; Šepac, Dragan; Žiher, Dinko; Šunjić, Vitomir. CD spectra and absolute configuration of all stereoisomers of cytoxazone and isocytoxazone. // *Synthesis*.
9. Jakas, Andreja; Horvat, Štefica. Study of degradation pathways of Amadori compounds obtained by glycation of opioid pentapeptide and related smaller fragments: stability, reactions and spectroscopic properties. // *Biopolymers*.
10. Jerić, Ivanka; Horvat, Štefica. Glikokonjugati kao modeli u biomedicinskim istraživanjima. // *Kemija u industriji*.
11. Kojić-Prodić, Biserka; Perić, Berislav; Roščić, Maja; Novak, Predrag; Horvat, štefica. Novel carbohydrate induced modification of peptides: crystal structure and NMR analysis of ester-bridged bicyclic galactose-enkephalin adduct containing

- imidazolidinone moiety. // Journal of peptide science.
12. Kontrec, Darko; Vinković, Vladimir; Šunjić, Vitomir; Schuiki, B.; Fabian, W. M. F.; Kappe, C. O. Enantioseparation of racemic 4-aryl-3,4-dihydro-2(1H)-pyrimidones on chiral stationary phases based on 3,5-dimethylanilides of N-(4-alkylamino-3,5-dinitro)benzoyl L-alfa-amino acids. // Chirality.
 13. Lesac, Andreja; Nguyen, H. L.; Narančić, Sanja; Šunjić, Vitomir; Bruce, D. W. Bent-core mesogens based on flexible aliphatic spacers. // Liquid crystals.
 14. Marchand, A.P.; Hazlewood, A.; Huang, Z.; Kumar Vadlakonda, S.; Rocha, J.-D.; Power, T.D.; Mlinarić-Majerski, Kata; Klaić, Lada; Kragol, Goran; Bryan, J.C. Stabilization of a K⁺-(bis-cage-annulated 20-crown-6) complex by bidentate picrate. // Structural chemistry.
 15. Margetić, Davor; Warren, Ron W.; Eckert-Maksić, Mirjana; Antol, Ivana; Glasovac, Zoran. A DFT study of pyramidalized alkenes: 7-oxasesquinorbornenes and 7,7'-dioxasesquinorbornenes. // Theoretical chemistry accounts.
 16. Ranogajec, Ana; Kontrec, Darko; Vinković, Vladimir; Šunjić, Vitomir. Enantiomer separation and molecular recognition on new chiral stationary phases based on beta-aminoalcohols and 4-chloro-3,5-dinitrobenzoic acid amides of alfa alfa-arylethylamines. // Journal of liquid chromatography & related technology.
 17. Šafar Cvitaš, Dunja; Savin, Branka; Mlinarić-Majerski, Kata. Synthesis and separation of novel 1,4-disubstituted adamantane stereoisomers. // Synthetic communications.
 18. Šepac, Dragan; Marinić, Željko; Portada, Tomislav; Žinić, Mladen; Šunjić, Vitomir. Macrocyclic vs. acyclic derivatives of chiral bisoxazolines; conformation and enantioselectivity of their Pd(II) complexes in catalytic allylic alkylation. // Tetrahedron.
 19. Šepac, Dragan; Roje, Marin; Hameršak, Zdenko; Šunjić, Vitomir. 1,5-dinitrogen Schiff bases as potential ligands in palladium-catalyzed allylic alkylation. // Croatica chemica acta.
 20. Vujaklija, Dušica; Abramić, Marija; Leščić, Ivana; Maršić, Tereza; Pigac, Jasenka. Streptomyces rimosus GDS(L) lipase: production, heterologous overexpression and structure-stability relationship. // Food technology and biotechnology.

Radovi objavljeni u zbornicima skupova:

1. Mlinarić-Majerski, Kata. Povratak adamantanske kemije u Zagreb // Zbornik radova posvećenih 60. obljetnici Prelog-Seiwertove sinteze adamantana / Sunko, Dionis (ur.). Zagreb : Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti, 2002. 17-27
2. Strelec, Ivica; Pavlinić, Iva; Vitale, Ljubinka. Electrophoretic protein patterns of barley grain and aminopeptidase activities in germination phases. // Proceedings of International Congress FLOUR -BREAD '01 / Ugarčić-Hardi, Žaneta (ur.). Osijek : Faculty of Food Technology, University J.J. Strossmayer Osijek, 2002. 9-18.

Patenti:

1. Kontrec, Darko; Vinković, Vladimir; Šunjić, Vitomir; Mariotti, P.; Navarini, L. Chiral stationary phases based on derivatives of 4-amino-3,5-dinitrobenzoic acid. WO

02/070124 A1, 2002.

2. Mikuldaš, Hrvoje; Cepanec, Ivica; Vinković, Vladimir. Postupak pripreve enantiomerno čistog atenolola spomoću preparativne kromatografije na kiralnoj nepokretnoj fazi. Hrvatski patentni glasnik. P20020571, 2002.

Doktorske disertacije:

1. Despotović, Ines. Struktura i svojstva nekih polibenzenoidnih sustava. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 16.12.2002, 77 str., Voditelj: Maksić, Zvonimir.
2. Krizmanić, Irena. Sinteza novih sulfonilurea i sulfonamidnih derivata purinskih i pirimidinskih baza i nukleozida. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 12.2.2002, 164 str., Voditelj: Žinić, Mladen.
3. Šepac, Dragan. Sinteza kompleksa Pd(II) s kiralnim dušikovim ligandima i primjena u alilnim alkilacijama. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 16.5.2002, 109 str., Voditelj: Šunjić, Vitomir.
4. Vinković, Marijana. Sinteza i svojstva adamantanskih krunastih tioetera. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 22.3.2002, 76 str., Voditelj: Majerski, Kata.
5. Vukelić, Bojana. Izolacija i karakterizacija ekstracelularne amilaze, deoksiribonukleaze i metalopeptidaze bakterije *Streptomyces rimosus*. Zagreb : Farmaceutsko-biokemijski fakultet, 05.6.2002, 133 str., Voditelj: Vitale, Ljubinka.

Diplomski radovi:

1. Čiš, Marija. Priprava i spektroskopska karakterizacija novih derivata gvanidina. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 6.2.2002, 31 str., Voditelj: Eckert-Maksić, Mirjana.
2. Fabijanić, Ines. Priprava derivata 4-alkiloksibademove kiseline s potencijalnim mezogenim svojstvima. Zagreb : Prehrambeno-biotehnološki fakultet, 18.6.2002., 46 str., Voditelji: Lesac, Andreja; Rapić, Vladimir.
3. Gadanji, Gordana. Sinteza, spektri i elektronska struktura supstituiranih ciklobutenona. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 3.4.2002., 48 str., Voditelj: Eckert-Maksić, Mirjana.
4. Govorčinović, Tihana. Izolacija i spektroskopska karakterizacija metabolita salicilamida. Zagreb : Farmaceutsko-biokemijski fakultet, 15.11.2002, 44 str., Voditelj: Jadrijević-Mladar-Takač, Milena; Vikić-Topić, Dražen.
5. Hižak, Jurica. Brza vibracijska spektroskopija udarnih valova u molekularnim tekućinama. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 18.4.2002, 64 str., Voditelj: Baranović, Goran; Brant, Slobodan.
6. Lovrić, Dražen. Priprava novih trimetilsililnih derivata ciklopropena. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 28.1.2002., 29 str., Voditelj: Eckert-Maksić, Mirjana.
7. Matković, Marija. Organski gelatori male molekulske mase - fumaramidni derivati aminokiselina. Zagreb : Prirodoslovno-matematički, 10.10.2002, 59 str., Voditelj: Žinić,

Mladen; Tomić-Pisarović, Srđanka.

8. Palej, Ivana. Sinteza adamantanskih aminokiselina. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 18.9.2002, 65 str., Voditelj: Majerski, Kata.
9. Šepelj, Maja. Priprava 4-[(4-deciloksifenil)oksikarbonil]fenil-2-hidroksi-2- -(4-oktiloksifenil)acetata kao potencijalnog dopanta za feroelektrične materijale . Zagreb : Prehrambeno-biotehnološki fakultet, 10.7.2002., 54 str., Voditelj: Lesac, Andreja; Rapić, Vladimir.
10. Sović, David. Ravnoteža i struktura kompleksa u sustavu 5,6-fenantrolin - trikloroctena kiselina. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 28.10.2002, 61 str., Voditelj: Baranović, Goran; Meić, Zlatko.
11. Zafirova, Biljana. Priprava racemata izopropilnih estera N-benzoil-a-aminokiselina i njihova komparativna separacija na novim kiralnim nepokretnim fazama. Zagreb : Prehrambeno-biotehnološki fakultet, 08.3.2002, 53 str., Voditelj: Vinković, Vladimir.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

- Kragol, G.: Povezanost antibakterijske aktivnosti peptida pyrrococina sa specifičnim vezanjem na bakterijske DnaK proteine, 21.1.2002.
- Maksić, Z.: Organic Superbases Ex Machina, 19.2.2002.
- Barić, D.: Aditivnost MP2 korelacijske energije u nekim 3D organskim molekulama, Seminar iz molekularnih znanosti, 8.3.2002.
- Makarević, J.: Strukture i molekularno prepoznavanje, 11.3.2002.
- Kovačević, B.: Dizajniranje organskih superbaza primjenom kvantno kemijskih modela, 11.6.2002.
- Vianello, R.: U potrazi za uzrokom bazičnosti molekula: trihotomska formula, Seminar iz molekularnih znanosti, 2.7.2002.
- Vinković, V.: Načela i primjena kiralne tekućinske kromatografije, 14.10.2002.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

- Žinić, M.: Supramolekularna kemija. Samo-udruživanje (self-assembly) molekula u organogelovima, HAZU, Zagreb, Simpozij posvećen V. Prelogu, 6.1.2002.
- Eckert-Maksić, M.: 75 godina Hrvatskog kemijskog društva, Učiteljska akademija, Zagreb, 11.3.2002.
- Eckert-Maksić, M.: Acidity of Cycloalkarenes, Seminar's Day on Gas-Phase and Computational Chemistry, Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, Španjolska, 24.4.2002.
- Horvat, Š.: Nomenklatura ugljikohidrata i glikolipida, Društvo sveučilišnih nastavnika i ostalih znanstvenih radnika u Zagrebu, 14.5.2002.
- Šijaković-Vujičić N.: Organogelovi kao podloga za sintezu silikatnih nanocijevi, Institut za fiziku, Hrvatska, 9.12.2002.
- Maksić, Z.: Design of Neutral Organic Superbases ans Superacids Ex Machina, Slovenian Academy of Science and Arts, Ljubljana, Slovenija, 11.12.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

- Zrinski, I., postdoktorski studij, University College Dublin, Dublin, Irska, od 20.4.2002.

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje:

- Roje, M., izrada kotutorijalne doktorske disertacije, Laboratoire de Stereochemie organometallique au CNRS, Strasbourg, Francuska, 1.1.–31.8.2002.
- Maksić, Z., Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, Španjolska, 1.4.–30.4.2002.
- Eckert-Maksić, M., Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, Španjolska, 6.4.–30.5.2002.

Šepac, D., Znanstveni rad u okviru projekta Alpe-Adrija, Department of Science and Chemical Technologies, University of Udine, Italija, 1.9.–30.11.2002.
Margetić, D., Central Queensland University, Rockhampton, Australija, 19.9.-19.11.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

WISOR-11

Bressanone, Italija, 6-13.1.2002.

Sudionici: Klaić, L.

Prilog:

Klaić, L.; Veljković, J.; Mlinarić-Majerski, K. Generation and fate of dicarbene species, poster

IV. SUSRET MLADIH KEMIJSKIH INŽENJERA

Zagreb, Hrvatska, 21-22.2.2002.

Sudionici: Kragol, G.

Prilog:

Kragol, G.; Otvos Jr., L. Sinteza novih glikopeptidnih modula za selektivni prijenos bioaktivnih peptida, poster

EIGHT ELECTRONIC COMPUTATIONAL CHEMISTRY CONFERENCE (ECCC-8)

[Http://eccc8.cooper.edu/](http://eccc8.cooper.edu/), 6.3.-1.4.2002.

Prilog:

Margetić, D.; Warrenner, R.N.; Eckert-Maksić, M.; Antol, I.; Glasovac, Z. A DFT study of pyramidalized alkenes: 7-oxasesquinorbornenes and 7,7'-dioxasesquinorbornenes, rad prezentiran na elektronskoj konferenciji

SYMPOSIUM "MOLEKULARE ERKENNUNG"

Essen, Njemačka, 7–9.3.2002.

Sudionici: Piantanida, I.

Prilog:

Piantanida, I.; Tumor, L.-M.; Žinić, M.; Juranović, I.; Meić, Z. Interaktionen von Phenantridinium-Nucleobasen Konjugaten mit komplementären und nicht-komplementären Polynukleotiden im Wasser, poster

7TH EUROASIA CONFERENCE ON CHEMICAL SCIENCES

Karachi, Pakistan, 8-12.3.2002.

Sudionici: Mlinarić-Majerski, K.

Prilog:

Mlinarić-Majerski, K. Novel adamantane-containing crown ethers and cryptands: a new class of ionophores for selective ion complexation, pozvano predavanje

9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE CRYSTALLIZATION OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES

Jena, Njemačka, 23-28.3.2002.

Sudionici: Leščić, I.

Prilog:

Leščić, I.; Vujaklija, D.; Pigac, J.; Abramić, M. Extracellular lipase from bacterium *Streptomyces rimosus*: cloning, expression and purification for crystallization, poster

223RD AMERICAN CHEMICAL SOCIETY NATIONAL MEETING

Orlando, SAD, 7-11.4.2002.

Sudionici: Marchand, A.P.; Mlinarić-Majerski, K.

Prilog:

Brodbelt, J.S.; Williams, S.; Marchand, A.P.; Cal, D.; Mlinarić-Majerski, K.; Vinković, M.; Watson, W.H.; Ejsmont, K. Synthesis of novel, cage-annulated thiacyclopentane ethers and

thiacryptands. Evaluation of their ability to function as divalent metal ion complexants by electrospray ionization mass spectrometry, predavanje

17TH NMR VALTICE, CENTRAL EUROPEAN NMR DISCUSSION GROUPS

Valtice, Republika Češka, 8-10.4.2002.

Sudionici: Smrečki, V.

Prilog:

Smrečki, V.; Mueller, N. A density functional theory study of N-15 chemical shielding anisotropy tensors in peptides, predavanje

GAS PHASE AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Madrid, Španjolska, 24.4.2002.

Sudionici: Eckert-Maksić, M.; Maksić, Z.

Prilozi:

Maksić, Z.: Organic superbases ex machina, pozvano predavanje

Eckert-Maksić, M.: Acidity of cycloalkarenes, pozvano predavanje

CROATIAN, HUNGARIAN AND SLOVENIAN SYMPOSIUM ON INDUSTRIAL MICROBIOLOGY AND MICROBIAL ECOLOGY "POWER OF MICROBES IN INDUSTRY AND ENVIRONMENT"

Opatija, Hrvatska, 7-9.6.2002.

Sudionici: Špoljarić, J.; Vitale, Lj.; Vujaklija, D.; Vukelić, B.

Prilozi:

Špoljarić, J.; Vitale, Lj. Intracellular aminopeptidases from *Streptomyces rimosus*, poster

Vujaklija, D.; Abramić, M.; Leščić, I.; Pigac, J. The third lipolytic-family in *Streptomyces*, represented by the novel GDS(L) lipase from *S. rimosus*, pozvano predavanje

Vukelić, B.; Križaj, I.; Vitale, Lj. Extracellular metallopeptidase of *Streptomyces rimosus*, poster

1ST CROATIAN CONGRESS ON MOLECULAR LIFE SCIENCES WITH INTERNATIONAL PARTICIPATION

Opatija, Hrvatska, 9-13.6.2002.

Sudionici: Leščić, I.; Špoljarić, J.; Vitale, Lj.

Prilozi:

Leščić, I.; Vujaklija, D.; Pigac, J.; Abramić, M. Protein sequence analysis of *Streptomyces rimosus* extracellular lipase, poster

Špoljarić, J.; Vitale, Lj. Intracellular aminopeptidase from *Streptomyces rimosus*, poster

Vukelić, B.; Križaj, I.; Vitale, Lj. Extracellular metallopeptidase of *Streptomyces rimosus*, poster

MATH/CHEM/COMP 2002. THE 17TH DUBROVNIK INTERNATIONAL COURSE & CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATHEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCES

Dubrovnik, Hrvatska, 24-29.6.2002.

Sudionici: Marinić, Ž.; Šunjić, V.

Prilog:

Kontrec, D.; Vinković, V.; Šunjić, V. Experiments and models in enantio-recognition by chiral stationary phases, pozvano predavanje

Vikić-Topić, D.; Marinić, Ž. Deuterium isotope effects in C-13 NMR spectra, poster

ELEVENTH SLOVENIAN - CROATIAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING

Bohinj, Slovenija, 27-30.6.2002.

Sudionici: Štefanić, Z.

Prilog:

Štefanić, Z.; Kojić-Prodić, B.; Makarević, J.; Jokić, M.; Žinić, M. Supramolecular aggregation

via hydrogen bonds in the series of (SS)-phthaloyl-bis-(amino acid methyl ester), predavanje

19TH INTERNATIONAL LIQUID CRYSTAL CONFERENCE

Edinburgh, Velika Britanija, 30.6.–5.7.2002

Sudionici: Lesac, A.

Prilog:

Lesac, A.; Narančić, S.; Nguyen, H.-L.; Bruce, D.W.; Šunjić, V. Synthesis and mesogenic properties of dimeric bent-shaped molecules, poster

6TH WORLD CONGRESS OF THEORETICALLY ORIENTED CHEMISTS WATOC 2002

Lugano, Švicarska, 4-9.8.2002.

Sudionik: Maksić, Z.

Prilog:

Maksić, Z.; Vianello, R. How good is Koopmans Approximation? G2(MP2) study of the vertical and adiabatic ionization potentials of some small molecules, poster

XIX CONGRESS AND GENERAL ASSEMBLY OF THE INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY

Ženeva, Švicarska, 6-15.8.2002

Prilog:

Štefanić, Z.; Jokić, M.; Makarević, J.; Žinić, M.; Kojić-Prodić, B. Hydrogen bonded molecular assemblies in crystals and gels of chiral bis(aminoalcohol) oxalamides, poster

XVIIITH INTERNATIONAL CONFERENCE ON RAMAN SPECTROSCOPY

Budimpešta, Mađarska, 25-30.8.2002.

Sudionici: Baranović, G.

Prilog:

Baranović, G.; Babić, D. FT Raman microspectroscopy at high external pressure. Crystalline anthracene and trans-cinnamic acid, poster

BRIJUNI CONFERENCE "SPACE, TIME AND LIFE"

Brijuni, Hrvatska, 26-30.8.2002.

Prilog:

Plavšić, D.; Šoškić, M.; Lerš, N.; Frkanec, L. Modeling of boiling points of benzenoid hydrocarbons revisited, poster

27TH EUROPEAN PEPTIDE SYMPOSIUM

Sorrento, Italija, 31.8.-6.9.2002.

Sudionici: Jakas, A.; Horvat, Š.

Prilozi:

Jakas, A.; Horvat, Š. Study of degradation pathways in sugar-peptide Maillard model systems, poster.

Jerić, I.; Roščić, M.; Versluis, C.; Heck, A.R.J.; Horvat, Š. Glycopeptide mimetics as "puzzles" in understanding the biological phenomena, poster

SIXTH INTERNATIONAL ELECTRONIC CONFERENCE ON SYNTHETIC ORGANIC CHEMISTRY (ECSOC-6)

[Http://www.mdpi.org/ecsoc-6.htm](http://www.mdpi.org/ecsoc-6.htm), 1-30.9.2002.

Prilozi:

Margetić, D.; Butler, D.N.; Warrenner, R.N. Current status of synthesis of deprotected Tridents by substituent variations of aza-ACE reaction, rad prezentiran na elektronskoj konferenciji

Margetić, D.; Warrenner, R.N.; Butler, D.N. High-pressure facilitated cycloaddition of furan to 1,4-epoxynaphthalene, rad prezentiran na elektronskoj konferenciji

Margetić, D.; Warrenner, R.N.; Butler, D.N. The Photolysis of Fused Cyclobutanotriazolines: Part 2. N-ethyl-phthalimido and N-benzoyl Triazolines, rad prezentiran na elektronskoj

konferenciji

1ST CENTRAL EUROPEAN CONFERENCE "CHEMISTRY TOWARDS BIOLOGY"

Portorož, Slovenija, 8-12.9.2002.

Sudionici: Abramić, M.

Prilog:

Abramić, M.; Leščić, I.; Vujaklija, D.; Pigac, J. Extracellular lipase from *Streptomyces rimosus*: an unusual bacterial lipolytic enzyme, pozvano predavanje14TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON CHIRALITY

Hamburg, Njemačka, 8-12.9.2002.

Sudionici: Vinković, V.

Prilozi:

Merkaš, S.; Vinković, V.; Litvić, M.; Bartolinčić, A.; Capanec, I. Process for racemization of optically active benzylic alcohols, poster

Vinković, V.; Kontrec, D.; Zafirova, B.; Šunjić, V. New chiral stationary phases that combine N-3,5-dinitrobenzoyl amino acids and 4-chloro-3,5-dinitrobenzoic acid, poster

XV INTERNATIONAL ROUND TABLE - NUCLEOSIDES, NUCLEOTIDES NUCLEIC ACIDS

Leuven, Belgija, 10-14.9.2002

Sudionici: Žinić, B.

Prilog:

Glavaš-Obrovac, Lj.; Karner, I.; Krizmanić, I.; Žinić, M.; Žinić, B. Synthesis and antitumor activity of N-sulfonyl derivatives and sulfonamido nucleoside derivatives, poster

WORKSHOP ON CHEMICAL KINETICS

Kranjska Gora, Slovenija, 12-14.9.2002.

Sudionici: Eckert-Maksić, M.

Prilog:

Eckert-Maksić, M.: Quantum chemical study of reaction mechanisms, pozvano predavanje

ISCHIA ADVANCED SCHOOL OF ORGANIC CHEMISTRY

Napulj, Italija, 21-26.9.2002.

Sudionici: Portada, T.

Prilog:

Portada, T.; Roje, M.; Raza, Z.; Čaplar, V.; Žinić, M.; Šunjić, V. Synthesis and catalytic properties of new macrocyclic bisoxazolines, predavanje

7TH EUROPEAN CONGRESS OF PHARMACEUTICAL SCIENCES (EUFEPS 2002)

Stockholm, Švedska, 21-23.10.2002.

Sudionici: Govorčinović, T.; Jadrijević-Mladar-Takač, M.

Prilog:

Jadrijević-Mladar-Takač, M.; Vikić-Topić, D.; Govorčinović, T. FTIR and NMR spectroscopic structural studies of gentisamide isolated from biological material, poster

58TH SOUTHWEST REGIONAL MEETING OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Austin, SAD, 3.-6.11.2002.

Prilog:

Marchand, A.P.; Brodbelt, J.S.; Mlinarić-Majerski, K.; Watson, W.H. Cage annulated crown ethers and cryptands: New agents for selective cation complexation and for enantioselective recognition of chiral ammonium salts, poster

DIONIS E. SUNKO 80TH BIRTHDAY SYMPOSIUM

Zagreb, Hrvatska, 6.11.2002.

Sudionici: Eckert-Maksić, M.

Prilozi:

Eckert-Maksić, M. From norbornyl- to sesquinorbornyl- and related cations, pozvano predavanje

Maskill, H.; Eckert-Maksić, M.; Glasovac, Z.; Zrinski, I. Alkane- and arene-oxodiazonium ions: experimental and theoretical results, pozvano predavanje

More O'Ferrall, R.; Zrinski, I.; O'Donoghue, A.-M.; Keeffe, J. R.: Small and large oxygen substituent effects upon carbocation stability, pozvano predavanje

COST D30 WORKSHOP

Bruxelles, Belgija, 15.11.2002.

Sudionici: Eckert-Maksić, M.

Prilog:

Eckert-Maksić, M.: High pressure of polycyclic cages, pozvano predavanje

THIRD BRISBANE BIOLOGICAL AND ORGANIC CHEMISTRY SYMPOSIUM (BBOCS-3)

Brisbane, Australija, 29.11.2002.

Sudionici: Margetić, D.

Prilog:

Margetić, D.; Warrenner, R.N.; Butler, D.N. 1,3-dipolar cycloadditions to polycyclic aromatic hydrocarbons, predavanje

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija:

Šunjić, V.: član znanstvenog odbora ESOC (European Symposium on Organic Chemistry)

Šunjić, V.: član COST managementa za COST 12 akcija

Škare, D.: IUPAC Workshop: Impact of Scientific Developments on the Chemical Weapons Convention, Bergen, Norveška, 28.6.–4.7.2002.

Škare, D.: Šesti UN-UNMOVIC Training Course, Beč, Austrija, 10.10.–9.11.2002.

Škare, D.: Treći sastanak Mreže stručnjaka za zaštitu (Protection Network), Organisation for the Prohibition of Chemical Weapons (OPCW), Den Haag, 18–21.11.2002.

Škare, D.: Ministarstvo vanjskih poslova, Član nacionalnog povjerenstva za primjenu Konvencije o zabrani kemijskog oružja.

Eckert-Maksić, M.: ESOR Standing Committee, član.

Eckert-Maksić, M.: Management Committee, COST D30 Action, član.

Maksić, Z.: član COST D26 Management Committee

Žinić, M.: COST D11/0015/99 working group on "Low Molecular Weight Gelators of Organic Fluids and Water: Towards Engineered Supramolecular Gels for Advanced Applications", Commission Europeenne, Direction Generale Recherche.

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Šunjić, V.: Enantioselective transfer-hydrogenation using a new class of ruthenium(II) catalysts, projekt Alpe-Adrija, University of Udine, Italija

Šunjić, V.; Lesac, A.: Synthesis and characterisation of new chiral liquid-crystalline materials, zajednički projekt s University of Exeter, Exeter, Velika Britanija

Šunjić, V.; Vinković, V.: Bilateralna suradnja Lorand Eotves University, Budimpešta, Mađarska, i Svečilište u Zagrebu.

Majerski, K.: Synthesis of clenbuterol-type derivatives. TECNA s.r.l Area di Ricerca, Trst, Italija

Majerski, K.: University of North Texas, Denton, Texas, SAD, znanstvena suradnja

Eckert-Maksić, M.: University of Minnesota, Mineapolis, SAD znanstvena suradnja

Eckert-Maksić, M.: University Newcatle upon Tyne, Newcastle upon Tyne, Velika Britanija znanstvena suradnja

Eckert-Maksić, M.: Photoinduced proton transfer in biologically active molecules - theoretical investigation, bilateralna suradnja s Univesity of Vienna, Austrija

Maksić, Z.: The hydrogen bond and the spontaneous proton transfer between superacids and superbases, John von Neumann Institut für Computing, Jülich, Njemačka.

Maksić, Z.: Theoretical and experimental design of strong organic superbases, bilateralna suradnja između Hrvatske i Austrije, Karl-Franzens Universität, Graz, Austrija.

Žinić, M.: Binding of phenanthridinium and diazapyrenium compounds in RRE bulge of HIV-1 RNA, suradnja s University of California, San Diego, SAD.

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

Helmut Schwarz, Technische Universität Berlin, Berlin, Njemačka, 11-12.7.2002

Hans Lischka, University of Vienna, Austrija, 14-16.10.2002.

Howard Maskill, University of Newcastle upon Tyne, Velika Britanija, 7-10.11.2002.

Rory More O'Ferrall, University College Dublin, Irska, 7-8.11.2002.

Henry F. Schaefer III, Georgia University, Atlanta, SAD, 18-22.11.2002.

Joel Liebman, University of Maryland, Baltimore, SAD, 23.11.-2.12.2002.

**ZAVOD ZA KEMIJU MATERIJALA
DIVISION OF MATERIALS CHEMISTRY**

Dr. sc. Svetozar Musić, predstojnik Zavoda
Tel: ++385 1 4561 094, fax: ++385 1 4680 098

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za sintezu novih materijala, dr. sc. Boris Subotić, voditelj laboratorija
Laboratorij za procese taloženja, dr. sc. Ljerka Brečević, voditeljica laboratorija
Laboratorij za radijacijsku kemiju i dozimetriju, dr. sc. Dušan Ražem, voditelj laboratorija
Laboratorij za kemiju čvrstog stanja, dr. sc. Želimir Blažina, voditelj laboratorija
Laboratorij za kemiju kompleksnih spojeva, dr. sc. Nevenka Brničević, voditeljica laboratorija
Tajništvo, Vesna Picak i Josip Zrna

U okviru Zavoda do 30. 6. 2002. provodila su se istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

**ZNANOST I TEHNOLOGIJA MATERIJALA
SCIENCE AND TECHNOLOGY OF MATERIALS**

Direktor programa: dr. sc. Svetozar Musić

Teme u sastavu programa:

Istraživanje kritičnih procesa kristalizacije zeolita i procesa ionske zamjene, dr. sc. Boris Subotić, voditelj teme
Kinetika i mehanizmi procesa taloženja čvrste faze iz elektrolitnih otopina, dr. sc. Ljerka Brečević, voditeljica teme
Sinteza i mikrostruktura metalnih oksida i oksidnih stakala, dr. sc. Svetozar Musić, voditelj teme
Fizičko-kemijski učinci ionizirajućih zračenja, dr. sc. Dušan Ražem, voditelj teme
Sinteza, karakterizacija i modifikiranje polimera zračenjem, dr. sc. Franjo Ranogajec, voditelj teme
Intermetalni spojevi i metalni hidridi, dr. sc. Želimir Blažina, voditelj teme
Supravodljivi oksidi i metalni kompleksi, dr. sc. Nevenka Brničević, voditeljica teme

Poticajni projekti znanstvenih novaka i asistenata u okviru tema:

Utjecaj prave alumosilikatnog gela na kinetiku kristalizacije i svojstva zeolita, dr. sc. Tatjana Antičić, nositeljica projekta
Primjena tekućih membrana pri uklanjanju iona teških kovina iz kalcijeva sulfata, dr. sc. Jasminka Kontrec, nositeljica projekta
Fizičko-kemijska i strukturna svojstva ZrO_2 i HfO_2 , dr. sc. Goran Štefanić, nositelj projekta
Metalni hidridi, energetski i ekološki potencijal, dr. sc. Božica Šorgić, nositeljica projekta
Klasteri s poluvodičkim svojstvima, dr. sc. Marija Vojnović, nositeljica projekta

Program rada:

Program "Znanost i tehnologija materijala" dao je doprinos dugoročnim ciljevima znanosti i gospodarstva u Republici Hrvatskoj, (a) istraživanjem materijala, kao što su zeoliti, magnetski oksidi, supravodljivi oksidi, oksidna i metalna stakla, oksidne staklokeramike, polimeri, klasteri, intermetalni spojevi i metalni hidridi, (b) istraživanjem kinetike i mehanizama taložnih procesa, (c) razvojem teorijskih i eksperimentalnih metoda u znanosti o materijalima, (d) razvojem radijacijskih tehnologija, (e) suradnjom s hrvatskom industrijom i ustanovama, (f) sudjelovanjem suradnika Zavoda za kemiju materijala u visokoškolskoj nastavi i (g) izradbom diplomskih, magistarskih i doktorskih radova u laboratorijima Zavoda. Tijekom realizacije programa "Znanost i tehnologija materijala" u proteklom izvještajnom periodu ostvaren je niz novih spoznaja od kojih navodimo samo najvažnije. Razvijen je model populacijske ravnoteže kristalizacije zeolita koji uključuje brzinu zagrijavanja kristalizacijskog sustava od sobne temperature do temperature kristalizacije.

Valjanost razvijenog modela dokazana je izvrsnim slaganjem između izmjerenih i izračunatih kinetika rasta kristala i kristalizacije tijekom kristalizacije zeolita analcima iz bistrh alumosilikatnih otopina.

Istraživan je utjecaj temperature i kemijskog sastava (Na, Al i Si) reakcijske smjese na sintezu kristala zeolita A ($< 1 \mu\text{m}$) iz bistrh alumosilikatnih otopina u odsutnosti organskih templata. Na temelju rezultata istraživanja, definirano je kristalizacijsko polje kristalizacije čistog zeolita A s veličinom kristala ispod $1 \mu\text{m}$.

Kinetike procesa zamjene između iona natrija iz zeolita A i iona kadmija, bakra i nikla iz otopina koje su sadržavale različite količine natrijevih iona, istraživane su mjerenjem promjena koncentracija određenih kationa u tekućoj i čvrstoj fazi tijekom procesa zamjene. Analiza kinetičkih podataka je pokazala da je proces zamjene određen kemijskom reakcijom drugog reda. Ravnotežne vrijednosti zamjene specifičnih kationa iz otopine opadaju s porastom koncentracije iona natrija u tekućoj fazi, u skladu sa zakonom o akciji masa, izvedenom iz predloženog modela procesa ionske zamjene.

Ističemo poglavlja: B. Subotić, Nucleation and Crystal Growth of Zeolite Systems, i Lj. Brečević, Crystal Growth Kinetics and Mechanisms, objavljena u Encyclopedia of Surface and Colloid Science, A. Hubbard, ed. (Marcel Dekker Inc. 2002), te B. Subotić and J. Bronić, Theoretical and Practical Aspects of Zeolite Crystal Growth, Handbook of Zeolite Science and Technology (Marcel Dekker Inc., u tisku).

U proteklom su izvještajnom razdoblju završena sistematična istraživanja spontanog taloženja magnezijevih fosfata. Proučavan je učinak početnih uvjeta taloženja, kao što su koncentracija reaktanata, vrste reaktanata i temperatura. Dobiveni talozi su analizirani nizom fizikalno kemijskih metoda i tehnika. U širokom koncentracijskom području reaktanata taloži struvit ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$), dok se njuberit ($\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) javlja pri $\text{pH} < 6.5$ i pri relativno visokim koncentracijama magnezija. Određene su termodinamičke ravnotežne konstante otapanja struvita pri dvije temperature, kinetike otapanja dendritnih i štapićastih kristala struvita u vodi, kao i energije aktivacije tih procesa. Analiza kinetičkih podataka ukazuje na to da je brzina otapanja struvita, pri danim eksperimentalnim uvjetima, kontrolirana ili difuzijom konstitucijskih iona s površine kristala u otopinu ili procesom desorpcije iona iz adsorpcijskog sloja kristala. Istražena je kinetika transformacije bezvodnog kalcijeva sulfata u kalcijev sulfat dihidrat u vodenim otopinama. Proces transformacije zbiva se putom otopine, što je potkrijepljeno vlastito izrađenim matematičkim modelom. Model uzima u obzir eksperimentalno određene početne koncentracije kalcija u otopini, masene koncentracije čvrstih faza, te konstante brzina i mehanizme svih procesa uključenih u transformaciju: otapanje anhidrida, otapanje dihidrata i kristalni rast dihidrata. Vrijednosti dobivene za energije aktivacije podupiru pretpostavku, da su brzine procesa otapanja bezvodnog kalcijeva sulfata i rasta kalcijeva sulfata dihidrata kontrolirane jednim od procesa što se zbivaju na površini kristala, dok je proces otapanja dihidrata najvjerojatnije kontroliran difuzijom u otopini.

U sklopu teme "Sinteza i mikrostruktura metalnih oksida i oksidnih stakala" istraživani su odnosi između kemijske sinteze metalnih oksida i oksidnih stakala na jednoj strani i njihovih kemijskih, mikrostrukturnih i fizikalnih svojstava na drugoj strani. Ova istraživanja izvedena su primjenom nekoliko modelnih sustava. Motrena je termička razgradnja željezo kolin citrata ($\text{C}_{33}\text{H}_{57}\text{Fe}_2\text{N}_3\text{O}_{24}$) kvantitativnom rentgenskom difrakcijom i Mössbauerovom spektroskopijom, te FT-IR spektroskopijom. Navedeni kemijski spoj može poslužiti u sintezi nanokristalnog magnetita. Čestice SnO_2 nano veličine sintetizirane su sol-gel metodom, polazeći od Sn(IV) -izopropoksida otopljenog u izopropanolu. Vrlo fine čestice SnO_2 sintetizirane su također primjenom spore ili ubrzane hidrolize vodenih otopina SnCl_4 . Ovi eksperimenti trebali su utvrditi utjecaj sinteze na veličinu vrlo finih čestica SnO_2 . FT-IR i Ramanovi spektri pokazali su odstupanje od odgovarajućih spektara SnO_2 , predviđenih teorijom. Utjecaj kemijske sinteze na kristalizaciju i svojstva ZnO također je istraživano. Pronađena je nova metoda sinteze čestica ZnO nano veličine. Ova nova metoda sinteze metalnih oksida uspješno je primijenjena pri sintezi RnO_2 i štapićastog $\alpha\text{-FeOOH}$ pri $\text{pH} \sim 14$. Rodijevi oksidi i metalni rodij igraju veoma važnu ulogu u kemijskoj katalizi. Zbog navedenog, istraživane su reakcije nastajanja i faznih transformacija rodijevih oksida.

Dobiven je nanokristalni metalni rodij s veličinom kristala od 4 do 7 nm. Pomno su istraživani različiti faktori koji utječu na javljanje tetragonskog polimorfa ZrO_2 pri sobnoj temperaturi. Staklokeramike koje su sadržavale kristalni $Li_2Si_2O_5$, amorfnu matricu $Li_2Si_2O_5$ i malu količinu kristalne faze Li_3PO_4 također su istraživane.

Program rada također uključuje istraživanje prirode i sudbine reaktivnih kratkoživućih čestica nastalih radiolizom: elektrona, pozitivnih iona, uzbuđenih molekula i slobodnih radikala.

Istraživani su dozimetrijski sustavi koji se temelje na pojavi termoluminiscencije u krutim tvarima ili na trajnim kemijskim promjenama u otopinama. Ispitivane su određene biološki relevantne kemijske promjene u modelnim sustavima koji su bili izloženi ionizirajućem zračenju.

Pomoću laserske impulsne fotolize dobiveni su pouzdani kinetički podaci o reakciji iona $Fe(II)$ s t-butoksil radikalom, što je modelna situacija za reaktivnost iona prijelaznih metala s biološkim alkoksil radikalima. Dobiveni su kvantitativni pokazatelji o kompleksiranju iona $Fe(III)$ u nevodenim otopinama pogodnim za modeliranje kemizma slobodnih radikala u lipofilnim sredinama. U eksperimentima sa slobodnom difuzijom kisika u uzorak ukazano je na važnost pristupačnosti kisika u peroksidaciji nezasićenih masnih kiselina da bi se moglo ispravno zaključivati o kinetičkim parametrima kao što je oksidabilnost.

Reakcije radijacijskog modificiranja polimera pretežno se odvijaju u heterogenim sustavima, pa mehanizam procesa uz kemijske reakcije određuju strukturne i fazne promjene u sustavu tijekom reakcije. Cilj istraživanja jest na modelnom sustavu umreživanja nezasićenih poliesterskih smola steći nova saznanja o ulozi kemijskih i strukturnih faktora u procesu. Pretpostavljamo da se to može postići kombinacijom metode električne vodljivosti i kalorimetrije, koje su razvijene u našem laboratoriju, te metodom spektrofotometrije u bliskom infracrvenom području, koja treba dati podatke o prirodi prijelaza tekuće-tekuće koje smo uočili u nezasićenima poliesterskim smolama u temperaturnom području iznad staklastog prijelaza. U literaturi još postoje nedoumice o prirodi prijelaza tekuće-tekuće, pa naši rezultati stoga predstavljaju fundamentalni doprinos. Treba razjasniti utjecaj prijelaza tekuće-tekuće na reakciju umreživanja. Istraživalo se kako promjena strukture polimera, promjena sastava polimernih mješavina te modificiranje ionizirajućim zračenjem utječu na svojstva polimera.

Spektroskopija u bliskom infracrvenom području (NIR) pokazala se je kao pogodna metoda za istraživanje gornjeg prijelaza tekuće-tekuće, jer je osjetljiva na strukturne promjene, lakše razlikuje hidroksilnu skupinu u vodikovoj vezi od slobodne, a mogu se koristiti deblji uzorci nego u srednjem IR području što je vrlo važno kada su male koncentracije mjerenih grupa. Sintetizirani su novi intermetalni spojevi općeg sastava $RENi_{5-x}Ga_x$, (RE=rijetka zemlja) i istraživana je njihova reakcija s vodikom. Nađeno je da svi trokomponentni intermetalni spojevi reverzibilno reagiraju s vodikom, a ravnotežni tlak i količina apsorbiranog vodika smanjuju se s porastom količine galija u sustavu. Istraživane su relaksacije u $Li_2Si_2O_5$ metodom termički stimulirane struje depolarizacije.

Program rada obuhvaća postupke pripreme i istraživanje svojstava novih anorganskih sustava, uključujući heksanuklearne halogenidne klastere niobija, tantala, molibdena i volframa, te supravodljive okside. Za identifikaciju priređenih spojeva koriste se spektroskopske metode (IR, UV/VIS), rentgenske difrakcije na monokristalnim i polikristalnim uzorcima, te proučavanje magnetskih svojstava novih spojeva. Priređeni su novi klasteri tantala sastava $[Ta_6Br_{12}(H_2O)_6]X_2 \cdot trans-[Ta_6Br_{12}(OH)_4(H_2O)_2] \cdot 18H_2O$ (X = Cl, Br), te su riješene njihove kristalne strukture. Spojevi kristaliziraju u triklinskom kristalnom sustavu, prostornoj grupi $P\bar{1}$ i u svom sastavu sadrže dvije jedinice $[Ta_6Br_{12}]^{n+}$ različitog stupnja oksidacije (n = 2, 4). Spojevi su dobiveni iz vodenih otopina u prisutnosti iona bakra(II) koji katalizira djelomičnu oksidaciju $[Ta_6Br_{12}]^{2+}$ do $[Ta_6Br_{12}]^{4+}$. Mješovito-ligandni spojevi $[(M_6X_{12})X_2(RCN)_4]$ (M = Nb, Ta; X = Cl, Br; R = Et, n-Pr, n-Bu) sadrže atome halogenih elemenata zajedno s molekulama alifatskih nitrila u terminalnim oktaedarskim koordinacijskim položajima jedinki $[M_6X_{12}]^{2+}$. Spojevi čine malobrojnu skupinu klastera niobija i tantala koji kao ligande sadrže molekule s atomima dušika kao donorima. Poradi relativno niske energije kemijske veze nitrila u terminalnim koordinacijskim položajima jedinki $[M_6X_{12}L_6]^{n+}$, novopriređeni spojevi poslužit će kao prekursori u reakcijama heksanuklearnih

halogenidnih spojeva niobija i tantala u nevodenim sredinama s ligandima koji ne sadrže kisik kao donor.

Research programme:

In the frame of realization of the research programme "Science and technology of materials" a significant contributions to the fundamental knowledge in chemistry and physics have been made. A population balance model of crystallization of zeolites from clear aluminosilicate solutions which includes the warming up of the crystallizing system from the ambient temperature to crystallization one, has been developed. The validity of the developed model is evaluated by correlation of calculated kinetics of crystal growth and crystallization with the measured ones, during crystallization of analcime from clear aluminosilicate solution.

Influence of temperature and composition of the reaction mixture on the synthesis of pure, small crystals of zeolite A ($< 1 \mu\text{m}$) from clear aluminosilicate solutions, without the presence of organic templates was investigated. The crystallization field for the crystallization small crystals of zeolite A ($< 1 \mu\text{m}$) in pure form was defined on the basis of this investigation.

Kinetics of exchange processes between the sodium ions from zeolite A and cadmium, copper and nickel ions from solution containing different contents of sodium ions were studied by measuring the changes in the concentrations of relevant cations in the solid and the liquid phase during the exchange processes. Analysis of the kinetic data showed that a second-order chemical exchange is possible rate-determining step of the exchange process. The equilibrium uptake of the exchangeable cations from the solution decreases with the increasing concentration of sodium ions in the liquid phase in accordance with the mass action law derived from the proposed model of the exchange process.

We recommend the chapters: B. Subotić, Nucleation and Crystal Growth of Zeolite Systems, and Lj. Brečević, Crystall Growth Kinetics and Mechanisms, published in Encyclopaedia of Surface and Colloid Science, A. Hubbard, ed. (Marcel Dekker Inc. 2002), as well as B. Subotić, J. Bronić, Theoretical and Practical Aspects of Zeolite Crystal Growth (Marcel Dekker Inc., in press).

In the past period of time a systematic investigation of spontaneous precipitation of magnesium phosphates has been completed. The effect of different initial conditions, e.g. type of reactants, reactant concentrations and temperature, have been studied. Precipitates were characterized by means of a number of physical chemical methods and techniques. Struvite ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) was found to be the predominant phase formed in a wide range of reactant concentrations, while newberyite ($\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) appears only at $\text{pH} < 6.5$ and relatively high magnesium concentrations. The thermodynamic solubility products of struvite at two temperatures were calculated, the dissolution kinetics of dendritic and rod-like crystals of struvite in water were determined as well as the activation energies for these processes. Analysis of the kinetic data suggested the diffusion of constituting ions away from the surface of dissolving crystal or the desorption of ions from the crystal adsorption layer, as the possible rate determining mechanisms of struvite dissolution. The study of transformation kinetics of anhydrous calcium sulphate to calcium sulphate dihydrate in aqueous solutions has also been completed. The transformation process was found to be solution-mediated. This was supported by a proper mathematical model, which takes into account the experimentally determined initial solution calcium concentration and mass concentration of the solid phases as well as the rate constants and mechanisms of the processes involved in the transformation: dissolution of anhydrite, dissolution of dihydrate and crystal growth of dihydrate. The values of activation energies obtained, support the assumption that the anhydrite dissolution and the dihydrate growth were controlled by processes at the crystal surface and that the dihydrate dissolution was most probably a diffusion controlled process. In the frame of the project "Synthesis and microstructure of metal oxides and oxide glasses" the relations between the chemical synthesis of metal oxides and oxide glasses on the one side and the chemical, microstructural and physical properties on the other, were investigated. These investigations were performed using a several model systems. Thermal decomposition of iron choline citrate ($\text{C}_{33}\text{H}_{57}\text{Fe}_2\text{N}_3\text{O}_{24}$) has been investigated using X-ray powder diffraction, FT-IR and ^{57}Fe Mössbauer spectroscopies. Iron choline citrate was found

to be suitable for preparation of nanocrystalline magnetite. Very fine SnO_2 powders were produced by (a) slow and (b) forced hydrolysis of aqueous SnCl_4 solutions and (c) hydrolysis of tin(IV)-isopropoxide dissolved in isopropanol (sol-gel route) and then characterized by XRD, FT-IR and laser Raman spectroscopies, TEM and BET. The XRD patterns showed the presence of cassiterite structure. Very fine SnO_2 powders showed different features in the FT-IR spectra, depending on the route of their synthesis. The additional Raman band at 500, 435 and 327 cm^{-1} were recorded for nanosized SnO_2 particles produced by forced hydrolysis of SnCl_4 solutions. On the basis of aggregation differences of nanosized SnO_2 particles the phonon mode at 327 cm^{-1} was attributed to the confinement effect of the phonons in the 1D chain. The influence of synthesis procedure on the crystallization and properties of zinc oxide has been also investigated. A new method of the synthesis of nanosized ZnO_2 particles (~ 10 to 20 nm) was found. This new method of the synthesis of metal oxide particles was successfully applied in the synthesis of RuO_2 and acicular $\alpha\text{-FeOOH}$ at $\text{pH} \sim 14$. Rhodium has found important applications in the catalytic chemistry. In these applications, rhodium undergoes different oxidation/reduction reactions. In the frame of the present project the formation of rhodium oxides and the corresponding phase transformations were investigated. Noncrystalline metallic rhodium was produced, and the size of nanocrystallites varied between 4 and 7 nm. Various factors that influence the appearance of a tetragonal ZrO_2 polymorph at room temperature have been extensively investigated. Glass-ceramics containing mainly $\text{Li}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ and a small amount of Li_3PO_4 in crystalline phase were studied by integral and by partial thermally stimulated depolarization current (TSDC) in the temperature range, 173 to 373 K.

Physico-chemical effects of ionizing radiations in various model and real systems have been investigated. The investigations of the nature and fate of the reactive short-lived species formed by the radiolysis (electrons, positive ions, excited molecules and free radicals) were also performed. Dosimetry systems based on inducing thermoluminescence of solids or on inducing permanent chemical changes in solutions were investigated. Induction of certain biologically relevant chemical changes in simple model systems and technological applications of irradiation in pharmaceutical and medical materials and foods were also investigated.

Reliable kinetic data on the reaction between Fe(II) ion and t-butoxyl radical, the model reaction for the reactivity of transition metal ions with biological alcoxyl radicals, were obtained by laser flash photolysis. Quantitative data about the complexation of Fe(III) ion in non-aqueous solutions, which is a suitable model for free radical reactions in lipophilic media, were obtained. The experiments with free diffusion of oxygen into samples of unsaturated fatty acids pointed to the importance of availability of oxygen in order to arrive at correct kinetic parameters, such as oxidizability.

The experiences with the use of irradiation for microbial decontamination of botanical materials, of other natural substances which are used in cosmetics, as well as of the successful decontamination by irradiation of some complex final products, were described. In radiation modification of polymers, the reactions proceed in heterogeneous conditions mainly, and the mechanism of the process can be determined by chemical reactivity and structural and phase transitions of the system in the course of reaction. The goal of our investigation is to determine the role of chemical and structural factors in cross-linking of unsaturated polyester resins as a model system. A combination of different research methods was applied. In our laboratory the method of electrical conductivity and calorimetric method were developed. These methods would help following the course of cross-linking and NIR spectrophotometry was applied in order to investigate the nature of liquid-liquid transition observed in unsaturated polyester resins in investigated temperature range. We expect that our results may essentially contribute to the elucidation of controversy in literature concerning the role of liquid-liquid transitions. It is expected that the possible effect of liquid-liquid transition on cross-linking reaction could be explained. The effects of polymer structure, composition of polymer blends and effect of modification by ionizing radiation on polymer properties, are investigated.

New intermetallic compounds of the general composition $RENi_{5-x}Ga_x$ (RE=rare earth) were prepared and their interaction with hydrogen was studied. It was found that all ternary intermetallic compounds react reversibly with hydrogen, and the hydrogen equilibrium pressure and the amount of absorbed hydrogen decrease with the increased amount of gallium in the system. Relaxations in $Li_2Si_2O_5$ were studied by the method of thermally stimulated depolarization current.

The research programme is related to the synthesis and characterization of the new inorganic species comprising hexanuclear halide clusters of niobium, tantalum, molybdenum and tungsten, and the investigation of superconducting oxides. The new compounds are characterized by spectroscopic (IR, UV/VIS) and magnetic measurements, as well as by the use of X-ray diffraction on single crystals and polycrystalline samples. The new cluster compounds of the composition $[Ta_6Br_{12}(H_2O)_6]X_2 \cdot trans-[Ta_6Br_{12}(OH)_4(H_2O)_2] \cdot 18H_2O$ (X = Cl, Br) have been prepared. The complexes crystallize in the triclinic crystal system, space group $P\bar{1}$, and contain two $[Ta_6Br_{12}]^{n+}$ ($n = 2, 4$) units of different oxidation states in the same molecule. The complexes were obtained from aqueous solutions in the presence of copper(II) which catalyzes partial oxidation of $[Ta_6Br_{12}]^{2+}$ to $[Ta_6Br_{12}]^{4+}$. Mixed-ligand clusters of the $[(M_6X_{12})X_2(RCN)_4]$ ($M = Nb, Ta; X = Cl, Br; R = Et, n-Pr, n-Bu$) composition with nitrile molecules along with halogen atoms in terminal octahedral coordination sites of the $[M_6X_{12}]^{2+}$ units, have been prepared. The compounds belong to not numerous class of niobium and tantalum clusters containing N-donor molecules as ligands. With relatively low chemical bond energy of nitrile molecules in terminal octahedral coordination sites of the $[M_6X_{12}L_6]^{n+}$ units, the new species could be used as precursors for the reactions of these clusters in non-aqueous media with ligands not containing oxygen as donor atoms.

ISTRAŽIVANJE KRITIČNIH PROCESA KRISTALIZACIJE ZEOLITA I PROCESA IONSKE ZAMJENE

INVESTIGATION OF THE CRITICAL PROCESSES OF ZEOLITE CRYSTALLIZATION AND THE IONIC EXCHANGE PROCESSES

Voditelj teme: dr.sc. Boris Subotić

Tel: ++385 1 4680 123 e-mail: subotic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Boris Subotić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
 Tatjana Antonić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
 Biserka Biškup, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
 Sanja Bosnar, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
 Josip Bronić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
 Cleo Kosanović, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
 Ivan Krznarić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
 Ana Mužić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Višnjica Dekanić, peračica laboratorijskog posuđa

Program rada i rezultati na temi:

Istraživanje utjecaja izvora silikata nakemijski sastav amorfnih alumosilikatnih gelova je pokazalo da raspodjela Na, Al i Si između tekuće faze (matičnice) i amornog gela kao i stupanj polikondenzacije silikata u matičnici ne ovise o izboru izvora silikata. Opažene razlike u strukturnim i čestičnim svojstvima produkata (zeolita) kristaliziranih uporabom različitih izvora silikata objašnjene su na temelju kritičnih procesa kristalizacije zeolita (otapanje gela, nukleacija, rast kristala).

Analiza odnosa između koncentracijskih faktora $f(C) = f(C_{Al}, C_{Si})$ koji odgovaraju različitim modelima rasta kristala i brzine rasta kristala zeolita A je pokazala da se rast kristala zeolita

A odvija reakcijom monomernih i/ili nisko-molekulskih aluminatnih, silikatnih i aluminosilikatnih aniona iz tekuće faze na površini rastućih kristala zeolita.

Razvijen je model populacijske ravnoteže kristalizacije zeolita koji uključuje brzinu zagrijavanja kristalizacijskog sustava od sobne temperature do temperature kristalizacije. Valjanost razvijenog modela je dokazana izvrsnim slaganjem između izmjerenih i simuliranih (izračunatih) kinetika rasta kristala i kristalizacije tijekom kristalizacije zeolita analcima iz bistrih aluminosilikatnih otopina.

Istraživan je utjecaj temperature i kemijskog sastava (koncentracija Na, Al i Si) reakcijske smjese na sintezu vrlo malih kristala zeolita A ($< 1 \mu\text{m}$) iz bistrih aluminosilikatnih otopina u odsustvu organskih templata. Natemelju rezultata istraživanja, definirano je kristalizacijsko polje kristalizacije čistog zeolita A s veličinom kristala ispod $1 \mu\text{m}$.

Promjene strukturnih i čestičnih svojstava tijekom visoko-temperатурne obrade (NH_4 , Na)-zamijenjenih zeolita 4A, 13X i mordenita su istraživane metodama rendgenske difrakcije, Fourier-transform infracrvene spektroskopije, pretražne-elektronske mikroskopije i mjerenjem raspodjele veličina čestica. Termička obrada navedenih zamijenjenih zeolita je rezultirala nastajanjem amorfne faze pri temperaturama manjim od 1000°C odnosno kristalne faze mulita pri temperaturama iznad 1000°C . Amorfna faza i mulit dobiveni tijekom visoko-temperатурne obrade imaju istu morfologiju kao i početne čestice prekursora (zamijenjeni zeoliti 4A i 13X).

Kinetike izotermalne amorfizacije zeolita A i rekristalizacije amorfne faze u karnegieit su istraživane pri različitim temperaturama. Obje kinetike (amorfizacija i rekristalizacija) mogu se matematički opisati Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) kinetičkom jednačinom. Za oba procesa su određene energije aktivacije, a mehanizmi amorfizacije i rekristalizacije su definirani na temelju karakterističnih numeričkih vrijednosti konstanti JMAK modela.

Kinetike procesa zamjene između natrijevih iona iz zeolita A i kadmijevih, bakrenih i nikalnih iona iz otopina koje su sadržavale različite količine natrijevih iona, su istraživane mjerenjem promjena koncentracija relevantnih kationa u tekućoj i čvrstoj fazi tijekom procesa zamjene. Analiza kinetičkih podataka je pokazala da je proces zamjene određen kemijskom reakcijom drugog reda. Ravnotežne vrijednosti zamjene zamjenjivih kationa iz otopine opadaju s porastom koncentracije natrijevih iona u tekućoj fazi, u skladu sa zakonom o akciji masa, izvedenom iz predloženog modela procesa ionske zamjene.

Poglavlje: B. Subotić, Nucleation and Crystal Growth of Zeolite Systems je u 2002 godini objavljeno u knjizi Encyclopedia of Surface and Colloid Science (Marcel Dekker Inc.), a Poglavlje: B. Subotić and J. Bronić, Theoretical and Practical Aspects of Zeolite Crystal Growth u knjizi Handbook of Zeolite Science and Technology (Marcel Dekker Inc) je u postupku objavljivanja.

Research programme and results:

A study on the influence of silica source on chemical composition of amorphous aluminosilicate gel has shown that the distribution of Na, Al between the supernatant and amorphous gel phase as well as the degree of silicate polycondensation in supernatant are unaffected by the choice of silica source. The observable differences in particulate and structural properties of the products (zeolites) crystallized from different silica sources were explained in terms of critical processes of zeolite crystallization (gel dissolution, nucleation, and crystal growth).

Analysis of the relationship between the concentration factors $f(C) = f(C_{\text{Al}}, C_{\text{Si}})$ relevant for different growth models and the rate of crystal growth of zeolite A have shown that crystal growth of zeolite A is governed by the reaction of monomeric and/or low-molecular aluminate, silicate and aluminosilicate anions from the liquid phase on the surfaces of growing zeolite crystals.

A population balance model of crystallization of zeolites from clear aluminosilicate solutions which includes the warming up of the crystallizing system from the ambient temperature to crystallization one, is developed. The validity of the developed model is evaluated by correlation of simulated (calculated) kinetics of crystal growth and crystallization with the measured ones, during crystallization of analcime from clear aluminosilicate solution.

Influence of temperature and composition of the reaction mixture on the synthesis of pure, very small crystals of zeolite A ($< 1 \mu\text{m}$) from clear aluminosilicate solutions, without the presence of organic templates was investigated. The crystallization field for the crystallization of small crystals of zeolite A ($< 1 \mu\text{m}$) in the pure form was defined on the basis of this investigation.

Structural and particulate changes during high-temperature treatment of (NH_4, Na) -exchanged zeolites 4A, 13X and mordenite were studied by X-ray powder diffraction, Fourier transform infrared spectroscopy, scanning-electron microscopy and particle size distribution measurement. Thermal treatment of (NH_4, Na) -exchanged zeolites 4A, 13X resulted in the formation of an amorphous phase (below 1000°C) and a crystalline phase of mullite above 1000°C . The obtained intermediate (amorphous aluminosilicate) and the final product (mullite) have the same morphology as the precursor particles (exchanged zeolites 4A and 13X).

Kinetics of isothermal amorphization of zeolite A and recrystallization of the amorphous phase into low-carnegieite at three different temperatures were investigated. Both kinetics of amorphization and recrystallization can be mathematically described by the Johnson-Mehl-Avrami-Kolomogorov (JMAK) kinetic equation. Activation energies of both the processes were determined. The mechanisms of amorphization and recrystallization were discussed in the terms of the characteristic numerical values of the JMAK model constants. Kinetics of exchange processes between the sodium ions from zeolite A and cadmium, copper and nickel ions from solution containing different contents of sodium ions were studied by measuring the changes in the concentrations of relevant cations in the solid and the liquid phase during the exchange processes. Analysis of the kinetic data has shown that a second-order chemical exchange is possible rate-determining step of the exchange process. The equilibrium uptake of the exchangeable cations from the solution decreases with the increasing concentration of sodium ions in the liquid phases in accordance with the mass action law, derived from the proposed model of the exchange process.

The Chapter: B. Subotić, Nucleation and Crystal Growth of Zeolite Systems was published in Encyclopaedia of Surface and Colloid Science (Marcel Dekker Inc.), and the Chapter: B. Subotić and J. Bronić, Theoretical and Practical Aspects of Zeolite Crystal Growth (Marcel Dekker Inc.) is in the procedure of publication.

Poticajni projekt u okviru teme:

UTJECAJ PRIPRAVE ALUMOSILIKATNOG GELA NA KINETIKU KRISTALIZACIJE I SVOJSTVA ZEOLITA
INFLUENCE OF ALUMOSILICATE GEL PREPARATION ON THE KINETICS OF CRYSTALLIZATION AND THE PROPERTIES OF ZEOLITES
Nositeljica projekta: dr. sc. Tatjana Antonić

**KINETIKE I MEHANIZMI PROCESA TALOŽENJA ČVRSTE FAZE IZ ELEKTROLITNIH OTOPINA
KINETICS AND MECHANISMS OF SOLID PHASE PRECIPITATION FROM ELECTROLYTE SOLUTIONS**

Voditeljica teme: dr. sc. Ljerka Brečević
Tel: ++385 1 4561 004 e-mail: brecevic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Vesna Babić-Ivančić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Ljerka Brečević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Jasminka Kontrec, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Damir Kralj, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Branka Njegić, dipl. inž. kem., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Program rada i rezultati na temi:

Istraživanja su usmjerena na stjecanje novih spoznaja o čimbenicima koji utječu na nastajanje termodinamički metastabilnih i stabilnih čvrstih faza u procesu taloženja iz prezasićenih elektrolitnih otopina, o kinetikama i mehanizmima procesa koji sudjeluju u oblikovanju čvrstih faza, o svojstvima tih čvrstih faza i njihovom međudjelovanju sa stranim ionima i molekulama, te o mogućnosti pročišćavanja krutina onečišćenih anorganskim ionima.

Cilj je pronaći opća rješenja u rješavanju cijelog niza problema što se javljaju pri procesima taloženja, a koji su zajednički svim takvim procesima, bilo da nastaju pri taloženju u prirodnim sustavima ili pri raznim industrijskim i drugim postupcima.

Modelni sustavi predviđeni u ovim istraživanjima su slabo i umjereno topljive soli zanimljive u različitim područjima ljudske djelatnosti. U proučavanju interakcija čvrste faze sa stranim supstancama to su dvovalentni kovinski ioni i neke organske molekule.

U proteklom su izvještajnom razdoblju završena sistematična istraživanja spontanog taloženja magnezijevih fosfata. Proučavan je učinak početnih uvjeta taloženja kao što su koncentracija reaktanata, vrste reaktanata i temperatura. Dobiveni talozi su analizirani nizom fizikalno kemijskih metoda i tehnika. Nađeno je, da u širokom koncentracijskom području reaktanata taloži struvit ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$), dok se njuberit ($\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) pojavljuje pri $\text{pH} < 6.5$ i pri relativno visokim koncentracijama magnezija. Određene su termodinamičke ravnotežne konstante otapanja struvita pri dvije temperature, kinetike otapanja dendritnih i štapičastih oblika kristala struvita u vodi, kao i energije aktivacije za te procese. Analiza kinetičkih podataka ukazuje na to, da je brzina otapanja struvita, pri danim eksperimentalnim uvjetima, kontrolirana ili difuzijom konstitucijskih iona s površine kristala u otopinu ili procesom desorpcije iona iz adsorpcijskog sloja kristala.

Istražena je kinetika transformacije bezvodnog kalcijeva sulfata u kalcijev sulfat dihidrat u vodenim otopinama. Nađeno je, da se proces transformacije zbiva putom otopine, što je potkrijepljeno vlastito izrađenim matematičkim modelom. Model uzima u obzir eksperimentalno određene početne koncentracije kalcija u otopini, masene koncentracije čvrstih faza, te konstante brzina i mehanizme svih procesa uključenih u transformaciju: otapanje anhidrida, otapanje dihidrata i kristalni rast dihidrata. Vrijednosti dobivene za energije aktivacije, podupiru pretpostavku, da su brzine procesa otapanja bezvodnog kalcijeva sulfata i rasta kalcijeva sulfata dihidrata kontrolirane nekim od procesa što se zbivaju na površini kristala, dok je proces otapanja dihidrata najvjerojatnije kontroliran difuzijom u otopini.

U suradnji s drugim temama istraživani su gubitak mase kosti u pacijenata s urolitijazom. Kako je nađeno, gubitak mase prvenstveno ovisi o starosti pacijenta, hiperurikosuriji i smanjenom primanju kalcija prehranom, ali ne i povećanim izlučivanjem kalcija.

Research programme and results:

The proposed study is directed toward gaining new knowledge about: the factors influencing the formation of thermodynamically metastable and stable solid phases in precipitation processes from supersaturated electrolyte solutions; the kinetics and mechanisms of processes involved in the formation of solid phases; the characteristics of these solid phases and their interactions with foreign ions and molecules; and the possibilities of purification of solids contaminated with inorganic ions.

The objective is to develop generic solutions to a wide range of problems that involve precipitation processes, either these processes occur in natural systems or in industrial and other operations.

In these studies, model inorganic systems of slightly and moderately soluble salts interesting in different fields of human spheres of action, are anticipated. The interactions between the solid phase and the additive are planning to be investigated by using divalent metal ions and some organic molecules.

In the past period of time a systematic investigation of spontaneous precipitation of magnesium phosphates has been completed. The effect of different initial conditions, e.g. type of reactants, reactant concentrations and temperature, were studied. Precipitates were characterized by means of a number of physical chemical methods and techniques. Struvit

($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) was found to be the predominant phase formed in a wide range of reactant concentrations, while newberyite ($\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) appears only at $\text{pH} < 6.5$ and relatively high magnesium concentrations. The thermodynamic solubility products of struvite at two temperatures were calculated, the dissolution kinetics of dendritic and rod-like crystals of struvite in water were determined as well as the activation energies for these processes. Analysis of the kinetic data suggests the diffusion of constituting ions away from the surface of dissolving crystal or the desorption of ions from the crystal adsorption layer, as the possible rate determining mechanisms of struvite dissolution.

The study of transformation kinetics of anhydrous calcium sulphate to calcium sulphate dihydrate in aqueous solutions has also been completed. The transformation process was found to be solution-mediated. This was supported by a proper mathematical model, which takes into account the experimentally determined initial solution calcium concentration and mass concentration of the solid phases as well as the rate constants and mechanisms of the processes involved in the transformation: dissolution of anhydrite, dissolution of dihydrate and crystal growth of dihydrate. The values of activation energies obtained, support the assumption that the anhydrite dissolution and the dihydrate growth were controlled by processes at the crystal surface and that the dihydrate dissolution was most probably a diffusion controlled process.

In collaboration with the other projects, the bone mass reduction in patients with urolithiasis was investigated. It was found that the mass reduction was principally related to the age of patients, hyperuricosuria and calcium dietary restriction but not to increased calcium excretion.

Poticajni projekt u okviru teme:

PRIMJENA TEKUĆIH MEMBRANA PRI UKLANJANJU IONA TEŠKIH KOVINA IZ KALCIJEVA SULFATA

REMOVAL OF HEAVY METAL IONS FROM CALCIUM SULPHATE USING LIQUID MEMBRANES

Nositeljica projekta: dr. sc. Jasminka Kontrec

**SINTEZA I MIKROSTRUKTURA METALNIH OKSIDA I OKSIDNIH STAKALA
SYNTHESIS AND MICROSTRUKTURE OF METAL OXIDES AND OXIDE GLASSES**

Voditelj teme: dr. sc. Svetozar Musić

Tel: ++385 1 4561 094 e-mail: music@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Đurđica Dragčević, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Marijan Gotić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Biserka Gržeta, doktorica fiz. znanosti, znanstvena savjetnica

Stjepko Krehula, dipl. inž. kemije, znanstveni novak

Miroslava Maljković, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Svetozar Musić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Mira Ristić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Ivanka Salaj-Obelić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Ankica Šarić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Goran Štefanić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Jasmin Forić, tehničar

Vanjski suradnik:

Mladen Topić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik u mirovini

Suradnici iz drugih ustanova:

Davor Balzar, doktor fiz. znanosti, izvanredni profesor, University of Denver, Department of Physics and Astronomy, Denver, Colorado, SAD
 Stanko Popović, doktor fiz. znanosti, redoviti profesor, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Odsjek za fiziku, Zagreb
 Emilija Tkalčec, doktorica kem. znanosti, redoviti profesor, Institut für Neue Materialien, Saarbrücken, Njemačka

Program rada i rezultati na temi:

Projekt "Sinteza i mikrostruktura metalnih oksida i oksidnih stakala usmjeren je na dobivanje podataka o odnosima između kemijske sinteze metalnih oksida i oksidnih stakala na jednoj strani i njihovih kemijskih, mikrostrukturnih i fizikalnih svojstava na drugoj strani. Općenito, promjenom metode sinteze ili eksperimentalnih parametara moguće je mijenjati svojstva metalnih oksida i oksidnih stakala. U sklopu ovog projekta istraživano je nekoliko modelnih sustava.

Nastajanje nanokristalnog magnetita tijekom termičke razgradnje željezovog kolin citrata ($C_{33}H_{57}Fe_2N_3O_{24}$) istraživano je primjenom rentgenske difrakcije, FT-IR i ^{57}Fe Mössbauerove spektroskopije. Ovisno o eksperimentalnim uvjetima javljao se je i hematit. Parametar jedinične kristalne ćelije i magnetita smanjivao se je postepeno s povećanjem temperature termičke obrade početnog spoja bez obzira na postupak hlađenja. Veličina kristala magnetita mijenjala se je od 10(1) do 21(2) nm, a u slučaju hematita ta promjena je bila između 25(2) i 39(3) nm. Mössbauerovi spektri su pokazali podstehiometrijski magnetit, $Fe_{3-x}O_4$, a podstehiometrija je bila vrlo izražena u uzorcima dobivenim pri najvećim temperaturama obrade početnog spoja. Ti rezultati su u skladu s rezultatima rentgenske difrakcije. Vrlo fine čestice SnO_2 sintetizirane su (a) sporom i (b) ubrzanom hidrolizom vodenih otopina $SnCl_4$ i (c) hidrolizom $Sn(IV)$ -izopropoksida otopljenog u izopropanolu (sol-gel metoda). Dobivene čestice SnO_2 pokazale su razlike u FT-IR spektrima u ovisnosti i eksperimentalnim uvjetima njihove sinteze. Određeni uzorci pokazali su dodatne Ramanove vrpce koje nisu teorijski predviđene. Široka Ramanova vrpca pri 571 cm^{-1} pripisana je amorfnom $Sn(IV)$ - (hidro)oksidu, dok je vrpca pri 327 cm^{-1} pripisana agregacijskom efektu čestica u jednodimenzionalnom lancu čestica SnO_2 nano veličine.

Utjecaj kemijske sinteze na kristalizaciju i svojstva cinkovog oksida također je istraživano. Cinkov oksid nije kristalizirao u uvjetima hidrotermičke obrade otopine $Zn(NO_3)_2$ i uree. Hidrocinkit je dobiven kao jedini produkt reakcije do $160\text{ }^\circ\text{C}$, a koji je zagrijavanjem u zraku pri $300\text{ }^\circ\text{C}$ i više dao cinkov oksid. Naglim dodavanjem koncentrirane otopine NH_4OH u otopinu $Zn(NO_3)_2$ dobiven je talog za koji je pokazano da se može opisati općom formulom $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2(H_2O)_{2-x}(NH_3)_x$. Pronađena je nova i brza metoda sinteze čestica ZnO nano veličine (~ 10 do ~ 20 nm). Mikroforetska i mjerenja po BET-u povezana su sa mikrostrukturnim promjenama u česticama ZnO .

Pronađene su nove metode sinteze štapićastih čestica α - $FeOOH$ i čestica RuO_2 u jako lužnatom mediju (pH ~ 14). Motreno je nastajanje RuO_2 i Ru termičkom razgradnjom $Ru(III)$ -acetilacetona. Istraživani su uvjeti nastajanja rodijevih oksida termičkom obradom amornog radijevog (hidro)oksida. Pronađeni su uvjeti sinteze nanokristalnog metala rodija (4 do 7 nm). Istraživani su također faktori koji utječu na stabilnost niskotemperaturnog tetragonskog ZrO_2 . Staklokeramike koje su sadržavale $Li_2Si_2O_5$ i malu količinu Li_3PO_4 u kristalnom obliku istraživane su tehnikom termički stimulirane depolarizacijske struje pri temperaturi od 173 do 373 K.

Research programme and results:

The project "Synthesis and microstructure of metal oxides and oxide glasses" has been focused on the relation between the chemical synthesis of metal oxides and oxide glasses on one side and their chemical, microstructural and physical properties on the other side. Generally, by changing the synthesis methods it is possible to change the properties of metal oxides and oxide glasses. A several model systems has been investigated.

Formation of nanocrystalline magnetite by thermal decomposition of iron choline citrate ($C_{33}H_{57}Fe_2O_{24}$) has been investigated using X-ray powder diffraction, FT-IR and ^{57}Fe

Mössbauer spectroscopies. Final decomposition products were magnetite and hematite. The unit-cell parameter of the obtained magnetite decreased gradually with the increase in temperature of thermal treatment of the starting compound regardless of the cooling procedure. Crystallite size of magnetite varied from 10(1) to 21(2) nm, whereas the crystallite size of hematite varied between 25(2) and 39(3) nm. Mössbauer spectra showed substoichiometric magnetite, $\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$, which was very pronounced in samples produced at the highest temperatures, and this was in line with XRD measurements.

Very fine SnO_2 particles were produced by (a) slow and (b) forced hydrolysis of aqueous SnCl_4 solutions and (c) hydrolysis of Sn(IV) -isopropoxide dissolved in isopropanol (sol-gel route). Very fine SnO_2 particles showed different features in the FT-IR spectra, depending on the route of their synthesis.

Specific SnO_2 samples showed additional Raman bands, which are not predicted by group theory. The broad Raman band at 571 cm^{-1} was ascribed to amorphous Sn(IV) -hydrous oxide, whereas the phonon mode at 327 cm^{-1} was attributed to the confinement effect of the phonons in the 1D chains.

Influence of chemical synthesis on the crystallization and properties of zinc oxide has been also investigated. Zinc oxide did not crystallize upon hydrothermal treatment of $\text{Zn(NO}_3)_2$ aqueous solutions containing urea, up to $160\text{ }^\circ\text{C}$. Hydrozincite was formed instead and upon its calcination, ZnO was obtained. The precipitates obtained by abrupt adding of concentrated NH_4OH solution into $\text{Zn(NO}_3)_2$ solution corresponded to a complex compound with the general formula $\text{Zn}_5(\text{OH})_8(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_{2-x}(\text{NH}_3)_x$. A new method for an instantaneous synthesis of nanosized ZnO particles (~ 10 to ~ 20 nm) has been found. Microelectrophoretic and BET measurements were also related with the microstructure of ZnO particles.

A new methods of the synthesis of acicular α - FeOOH particles, as well as RuO_2 particles were also found. Formation of RuO_2 and Ru by thermal decomposition of ruthenium(III)-acetylacetonate was monitored. With a view to obtaining more information about the chemistry of rhodium oxides, we also focused on the formation of crystalline oxide phases by thermal treatment of amorphous rhodium hydrous oxide. The conditions for the formation of nanocrystalline metallic rhodium (4 to 7 nm) were found. Various factors that influence the stability of low temperature tetragonal ZrO_2 were investigated. Glass-ceramics containing mainly $\text{Li}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ and a small amount of Li_3PO_4 in crystalline phase was studied by integral and by partial thermally stimulated depolarization current (TSDC) in the temperature range 173-373 K.

FIZIČKO-KEMIJSKI UČINCI IONIZIRAJUĆIH ZRAČENJA PHYSICO-CHEMICAL EFFECTS OF IONIZING RADIATIONS

Voditelj teme: dr. sc. Dušan Ražem

Tel: ++385 1 4561 154 e-mail: razem@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Branka Kažušin-Ražem, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Knežević Željka, dipl. inž. kemije, znanstvena novakinja

Mihaljević Branka, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Miljanić Saveta, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Maria Ranogajec-Komor, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Dušan Ražem, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Branko Vekić, magistar kem. znanosti, asistent

Tehnički suradnici:

Milan Blažević, tehničar

Atlantis Cobalt, stručni suradnik

Ružica Jurić, tehničarka (od 1.3.2002.)

Program rada i rezultati na temi:

Karakterizacija fizičko-kemijskih učinaka ionizirajućih zračenja u raznim modelnim i realnim sustavima. Istraživanje prirode i sudbine reaktivnih kratkoživećih čestica nastalih radiolizom: elektrona, pozitivnih iona, uzbuđenih molekula i slobodnih radikala. Dozimetrijski sustavi koji se zasnivaju na pojavi termoluminiscencije u krutim tvarima ili na trajnim kemijskim promjenama u otopinama. Izazivanje određenih biološki relevantnih kemijskih promjena u jednostavnim modelnim sustavima. Tehnološke primjene zračenja u farmaceutskim i medicinskim materijalima i namirnicama.

Pomoću laserske impulsne fotolize dobiveni su pouzdani kinetički podaci o reakciji iona Fe(II) s t-butoksil radikalom, što je modelna situacija za reaktivnost iona prijelaznih metala s biološkim alkoksil radikalima. Dobiveni su kvantitativni pokazatelji o kompleksiranju iona Fe(III) u nevodnim otopinama pogodnim za modeliranje kemizma slobodnih radikala u lipofilnim sredinama. U eksperimentima sa slobodnom difuzijom kisika u uzorak ukazano je na važnost pristupačnosti kisika u peroksidaciji nezasićenih masnih kiselina, da bi se moglo ispravno zaključivati o kinetičkim parametrima kao što je oksidabilnost.

Novi materijali pogodni za osobnu dozimetriju karakterizirani su osobito obzirom na termičku prethistoriju te na vrstu, energiju i LET zračenja. Rezultati biološke dozimetrije uspoređeni su i dodatno kalibrirani s fizičkom dozimetrijom. Opisane su primjene dozimetrije u kliničkoj praksi, praćenju radioaktivnosti u okolišu, mjerenjima u miješanim poljima zračenja, te kod rukovanja snažnim nemedicinskim izvorima zračenja i u drugim primjenama. Popularizirana je filozofija zaštite od zračenja na stručnim sastancima i u stručnoj literaturi.

Opisana su iskustva s primjenama zračenja za mikrobiološku dekontaminaciju biljnih materijala, te drugih prirodnih tvari koje se rabe u kozmetici, kao i nekih kompleksnih gotovih proizvoda koji se mogu uspješno dekontaminirati pomoću zračenja.

Research programme and results:

Characterization of physico-chemical effects of ionising radiations in various model and real systems. The investigations of the nature and fate of the reactive short-lived species formed by the radiolysis: electrons, positive ions, excited molecules and free radicals. Dosimetry systems based on inducing thermoluminescence of solids or on inducing permanent chemical changes in solutions. Induction of certain biologically relevant chemical changes in simple model systems. Technological applications of irradiation in pharmaceutical and medical materials and foods.

Reliable kinetic data on the reaction between Fe(II) ion and t-butoxyl radical, the model reaction for the reactivity of transition metal ions with biological alcoxyl radicals, were obtained by laser flash photolysis. Quantitative data about the complexation of Fe(III) ion in non-aqueous solutions, which is a suitable model for free radical reactions in lipophilic media, were obtained. The experiments with free diffusion of oxygen into samples of unsaturated fatty acids pointed to the importance of availability of oxygen in order to arrive at correct kinetic parameters, such as oxidizability.

New materials suitable for personnel dosimetry were characterized especially with respect to thermal history, kind, energy and LET of the incident radiation. The results of biological dosimetry were compared to and additionally calibrated against physical dosimetry. Applications of dosimetry in clinical practice, environmental monitoring, dosimetry of mixed radiation fields, and handling of strong non-medical radiation sources were described. The philosophy of radiation protection was promoted in professional meetings and in the literature.

The experiences with the use of irradiation for microbial decontamination of botanical materials, of other natural substances which are used in cosmetics, as well as of the successful decontamination by irradiation of some complex final products, were described.

SINTEZA, KARAKTERIZACIJA I MODIFICIRANJE POLIMERA ZRAČENJEM SYNTHESIS, CHARACTERISATION AND MODIFICATION OF POLYMERS BY IONISING RADIATION

Voditelj teme: dr. sc. Franjo Ranogajec

Tel.: ++385 1 4561 070 e-mail: frano@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Irina Pucić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
Franjo Ranogajec, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Ivan Šmit, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnici:

Silvano Štoković, tehničar
Branko Štefulj, KV radnik

Program rada i rezultati na temi:

Reakcije radijacijskog modificiranja polimera pretežno se odvijaju u heterogenim sustavima, pa mehanizam procesa uz kemijske reakcije određuju strukturne i fazne promjene u sustavu tijekom reakcije. S toga cilj istraživanja jest na modelnom sustavu umreživanja nezasićenih poliesterskih smola steći nova saznanja o ulozi kemijskih i strukturnih faktora u procesu. Pretpostavljamo da se to može postići kombinacijom metode električne vodljivosti i kalorimetrije, koje su razvijene u našem laboratoriju, te metodom spektrofotometrije u bliskom infracrvenom području, koja treba dati podatke o prirodi prijelaza tekuće-tekuće koje smo uočili u nezasićenima poliesterskim smolama u temperaturnom području iznad staklastog prijelaza. U literaturi još postoje nedoumice o prirodi prijelaza tekuće-tekuće, naši rezultati stoga predstavljaju fundamentalni doprinos. Treba razjasniti utjecaj prijelaza tekuće-tekuće na reakciju umreživanja. Istraživalo se kako promjena strukture polimera, tako i promjena sastava polimernih mješavina, te modificiranje ionizirajućim zračenjem utječu na svojstva polimera.

Spektroskopija u bliskom infracrvenom području (NIR) pokazala se je kao pogodna metoda za istraživanje gornjeg prijelaza tekuće-tekuće, jer je osjetljiva na strukturalne promjene, lakše razlikuje hidroksilnu skupinu u vodikovoj vezi od slobodne i mogu se koristiti deblji uzorci nego u srednjem infracrvenom području, što je vrlo važno kada su koncentracije mjerenih grupa niske.

NIR spektri poli(1,6-heksandiol maleata) sa stirenom i poli(1,3 propilenglikol maleata) mjereni su na izabranim temperaturama. Značajna promjena intenziteta hidroksilnih i karboksilnih apsorpcija na 1430 nm i između 1900 nm i 2100 nm praćena pomacima valne duljine dogodila se na temperaturi gornjeg prijelaza tekuće-tekuće, dok su promjene ugljik-vodik apsorpcija bile neznatne. To potvrđuje našu pretpostavku da je prijelaz uzrokovan promjenom u vodikovim vezama.

Studiran je utjecaj sastava i ionizirajućeg zračenja na mehanička svojstva, faznu strukturu i morfologiju mješavina izotaktni polipropilen/poli(stiren-*b*-etilen-*co*-propilen) (iPP/SEP) i polipropilen/poli(stiren-*b*-butadien-*b*-stiren) blok kopolimer (iPP/SBS), te polipropilenskih kompozita iPP/talk i odgovarajućih punjenih mješavina PP/SEP/talk and PP/SBS/talk. Istraživan je utjecaj interaktivnosti među komponentama u mješavinama polieterski polyuretan/ metakrilni kopolimer (PU/PM) i izotaktni polipropilen/poli(stiren-*b*-etilen-*co*-propilen) (iPP/SEP) kao i u kompozitima poliakrilatnog kopolimera s diatomom (PA/diatom) na strukturu i faznu morfologiju.

Research programme and results:

In radiation modification of polymers, the reactions proceed in heterogeneous conditions mainly, and the mechanism of the process can be determined by chemical reactivity and structural and phase transitions of the system in the course of reaction. The goal of our investigation is to determine the role of chemical and structural factors in cross-linking of unsaturated polyester resins as a model system. A combination of different research methods was applied. In our laboratory the method of electrical conductivity and calorimetric method were developed. These methods would help following the course of cross-linking and NIR spectrophotometry was applied in order to investigate the nature of liquid-liquid transition observed in unsaturated polyester resins in investigated temperature range. We expect that

our results may essentially contribute to the elucidation of controversy in literature concerning the role of liquid-liquid transitions. It is expected that the possible effect of liquid-liquid transition on cross-linking reaction could be explained. The effects of polymer structure, composition of polymer blends and effect of modification by ionizing radiation on polymer properties, are investigated.

The NIR spectroscopy was chosen as a method of investigation of upper liquid-liquid transition (T_{lp}) because it is sensitive to structural changes, distinction between hydrogen bonded and non-bonded hydroxyl groups is easier and thicker samples can be used than in MID region what is very important when concentration of measured species is low. The spectra of poly(1,3-propylenglycol maleate) with styrene and poly(1,6-hexanediol maleate) were recorded at selected temperatures. Significant intensity changes of hydroxyl and carbonyl absorptions at 1430 nm and between 1900 nm and 2100 nm accompanied by wavelength shifts occurred at T_{lp} transition temperature while carbon-hydrogen absorptions showed only minor changes. That confirmed our assumption that transition was caused by changes in hydrogen bonding.

The effects of the composition and ionizing radiation on the mechanical properties and phase structure and morphology of isotactic polypropylene/ poly(styrene-*b*-ethylene-co-propylene) block copolymer (iPP/SEP) and polypropylene/poly(styrene-*b*-butadiene-*b*-styrene) block copolymer (iPP/SBS) blends, iPP/talc composites and correspond filled blends PP/SEP/talc and PP/SBS/talc are studied.

The effect of interaction between the components in polyether polyurethane/ methacrylic copolymer and isotactic polypropylene/poly(styrene-*b*-ethylene-co-propylene (iPP/SEP) blends, as well as in poly(acrylate) copolymer (PA)/diatom composites structure on the structure and phase morphology are investigated.

INTERMETALNI SPOJEVI I METALNI HIDRIDI INTERMETALLIC COMPOUNDS AND METAL HYDRIDES

Voditelj teme: dr. sc. Želimir Blažina

Tel.: +385 1 4561 084 e-mail: blazina@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Želimir Blažina, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Antun Drašner, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Goran Miletić, magistar kem. znanosti, asistent, znanstveni novak
Matija Paljević, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Božica Šorgić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Rudolf Trojko, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Tomislav Žic, viši tehničar

Vanjski suradnik:

Mladen Topić, doktor kemijskih znanosti, znanstveni savjetnik u mirovini

Program rada i rezultati na temi:

Sintetizirani su novi intermetalni spojevi općeg sastava $RENi_{5-x}Ga_x$, (RE=rijetka zemlja) a njihove strukture i fazne ravnoteže i istražene su metodom rendgenske difrakcije na prahu. Nađeno je da heksagonska struktura binarnog ishodnog spoja ($CaCu_5$ tip, prostorna grupa $P6/mmm$) ostaje sačuvana do sastava $RENi_3Ga_2$. Također je nađeno da svi trokomponentni intermetalni spojevi reverzibilno reagiraju s vodikom, a termodinamičke karakteristike sustava metal - vodik određene su iz desorpcijskih izoterma tlak-sastav. Ravnotežni tlak i količina apsorbiranog vodika smanjuju se s porastom količine galija u sustavu. Istraživane su relaksacije u $Li_2Si_2O_5$ metodom termički stimulirane struje depolarizacije.

Research programme and results:

New intermetallic compounds of the general composition $RENi_{5-x}Ga_x$ (RE=rare earth) were prepared and their structures and phase equilibria were studied by x-ray powder diffraction. It was found that the hexagonal structure of the binary prototype compound (CaCu₅ type, space group P6/mmm) is preserved up to the composition $RENi_3Ga_2$. It was also found that all ternary intermetallic compounds react reversibly with hydrogen. The thermodynamic features of the metal-hydrogen system were determined from the pressure composition desorption isotherms. The hydrogen equilibrium pressure and the amount of absorbed hydrogen decrease with the increased amount of gallium in the system. Relaxations in $Li_2Si_2O_5$ were studied by the method of thermally stimulated depolarization current.

Poticajni projekt u okviru teme:

METALNI HIDRID I, ENERGETSKI I EKOLOŠKI POTENCIJAL
METAL HYDRIDES, ENERGETIC AND ECOLOGICAL POTENTIAL
Nositeljica projekta: mr. sc. Božica Šorgić

SUPRAVODLJIVI OKSIDI I VIŠENUKLEARNI METALNI KOMPLEKSI
SUPERCONDUCTING OXIDES AND POLYNUCLEAR METAL COMPLEXES

Voditeljica teme: dr.sc. Nevenka Brničević

Tel.: +385 1 4561 189 e-mail: brnicevi@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Nevenka Brničević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Dražan Jozić, dipl. inž. kemijske tehnologije, mlađi asistent, znanstveni novak
Berislav Perić, magistar fiz. znanosti, asistent, znanstveni novak
Pavica Planinić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Marijana Šestan, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnik:

Ernest Sanders, tehničar

Program rada i rezultati na temi:

Program rada obuhvaća postupke pripreme i istraživanje svojstava novih sustava, s naglaskom na heksanuklearnim halogenidnim klasterima niobija i tantala. Za identifikaciju priređenih spojeva pretežno se koriste spektroskopske metode (IR, UV/VIS), te difrakcija rentgenskih zraka na monokristalnim i polikristalnim uzorcima.

Novi spojevi $[(M_6X_{12})X_2(RCN)_4]$ (M = Nb, Ta; X = Cl, Br; R = alkil) sadrže atome halogenih elemenata zajedno s molekulama alifatskih nitrila u terminalnim oktaedarskim koordinacijskim položajima jedinki $[M_6X_{12}]^{2+}$ i čine malobrojnu skupinu klastera niobija i tantala koji kao ligande sadrže molekule s atomima dušika kao donorima. Poradi relativno niske energije kemijske veze nitrila u terminalnim koordinacijskim položajima jedinki $[M_6X_{12}L_6]^{n+}$, novopriređeni spojevi poslužit će kao prekursori u reakcijama heksanuklearnih halogenidnih spojeva niobija i tantala u nevodenim sredinama s ligandima koji ne sadrže kisik kao donor.

Priređen je spoj $[(CH_3)_4N]_2[Ta_6Br_{12}(H_2O)_6]Br_4 \cdot 2H_2O$, koji kristalizira u monoklinskoj prostornoj grupi C2/c, a čija se struktura sastoji od dvije vrste kationa, $[(CH_3)_4N]^+$ i $[Ta_6Br_{12}(H_2O)_6]^{2+}$, te aniona Br^- i kristalno vezanih molekula vode. Spoj je zanimljiv stoga što sadrži atome broma koji nisu koordinirani na klasteru jedinku, budući da su do sada poznati spojevi s više od 12 halogenih atoma u molekuli sadržavali iste u koordinacijskoj sferi jedinki $[M_6X_{12}]^{n+}$ (n = 2, 3, 4).

Priređeni su novi klasteri tantala sastava $[Ta_6Br_{12}(H_2O)_6]X_2 \cdot trans-[Ta_6Br_{12}(OH)_4(H_2O)_2] \cdot 18H_2O$ (X = Cl, Br), te su riješene njihove kristalne strukture. Spojevi kristaliziraju u triklinskom kristalnom sustavu, prostornoj grupi $P\bar{1}$ i u svom sastavu sadrže dvije jedinke

$[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}]^{n+}$ različitog stupnja oksidacije ($n = 2, 4$). Spojevi su dobiveni iz vodenih otopina u prisutnosti iona bakra(II) koji katalizira djelomičnu oksidaciju $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}]^{2+}$ do $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}]^{4+}$. Priređen je spoj $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{Br}_{0.4}\text{Cl}_{1.6}) \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, koji također kristalizira u triklinjskoj prostornoj grupi $P\bar{1}$, a u strukturi sadrži dva kristalografski neovisna klusterska kationa istog sastava, $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$, koji prave različite slojeve paralelne s ravninom ab u jediničnoj ćeliji. Zanimljivo je da spoj ima istu konfiguraciju kao i dvosoli $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{X}_2 \cdot \text{trans}-[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2]\text{X}_2 \cdot 18\text{H}_2\text{O}$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$), bez obzira na razlike u kemijskom sastavu i naboju klusterskih jedinki. Ove se strukture mogu upotrijebiti kao polazni model, pri korištenju Rietveldove metode, za rješavanje struktura drugih spojeva iz ovoga niza, koji kristaliziraju u istoj prostornoj grupi i imaju slične vrijednosti parametara jedinične ćelije.

Research programme and results:

The research programme is related to the synthesis and characterization of the new species with the emphasis on the hexanuclear halide clusters of niobium and tantalum. The new compounds are mainly characterized by spectroscopic (IR, UV/VIS) measurements, and by the use of X-ray diffraction on single crystals and polycrystalline samples.

New clusters of the $[(\text{M}_6\text{X}_{12})\text{X}_2(\text{RCN})_4]$ ($\text{M} = \text{Nb}, \text{Ta}; \text{X} = \text{Cl}, \text{Br}; \text{R} = \text{alkyl}$) composition with nitrile molecules along with halogene atoms in terminal octahedral coordination sites of the $[\text{M}_6\text{X}_{12}]^{2+}$ units, have been prepared. The compounds belong to not numerous class of niobium and tantalum clusters containing N-donor molecules as ligands. With relatively low chemical bond energy of nitrile molecules in terminal octahedral coordination sites of the $[\text{M}_6\text{X}_{12}\text{L}_6]^{n+}$ units, the new species could be used as precursors for the reactions of these clusters in non-aqueous media with ligands not containing oxygen as donor atoms.

The compound $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]_2[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Br}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, crystallizing in the monoclinic space group $\text{C}2/c$ has been prepared. The structure consists of two different kinds of cations, $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]^+$ i $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$, Br^- anions and crystal water molecules. It is interesting that the four bromine atoms are out of the coordination sphere of the cluster entity, as in to date known clusters with more than 12 halogene atoms in one molecule, halogenes were coordinated to the cluster $[\text{M}_6\text{X}_{12}]^{n+}$ ($n = 2, 3, 4$).

The new cluster compounds of the $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{X}_2 \cdot \text{trans}-[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 18\text{H}_2\text{O}$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$) composition have been prepared. The complexes crystallize in the triclinic crystal system, space group $P\bar{1}$, and contain two $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}]^{n+}$ ($n = 2, 4$) units of different oxidation states in the same molecule. The complexes were obtained from aqueous solutions in the presence of copper(II) which catalyzes partial oxidation of $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}]^{2+}$ to $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}]^{4+}$.

The new compound $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{Br}_{0.4}\text{Cl}_{1.6}) \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ crystallizes in the triclinic space group $P\bar{1}$ as well. Its structure contains two crystallographically independent $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ cluster cations forming distinct layers parallel to the ab plane of the unit cell. The compound is isoconfigurational with the double salts $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{X}_2 \cdot \text{trans}-[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2]\text{X}_2 \cdot 18\text{H}_2\text{O}$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$), in spite of the difference in chemical composition and the charges of the cluster entities. These structures can be used as a starting model in Rietveld refinements for other compounds in this series which crystallize in the same space group and which have similar values of the unit-cell parameters.

Poticajni projekti u okviru teme:

KLASTERI S POLUVODIČKIM SVOJSTVIMA
CLUSTERS WITH SEMICONDUCTING PROPERTIES
Nositeljica projekta: dr. sc. Marija Vojnović

Nakon 31. 7. 2002. u okviru Zavoda provodila su se istraživanja u okviru sljedećih znanstvenoistraživačkih projekata:

ISRAŽIVANJE PROCESA KRISTALIZACIJE I UPORABE ZEOLITA RESEARCH OF THE CRYSTALLIZATION PROCESS AND USE OF THE ZEOLITES

Voditelj projekta: dr.sc Boris Subotić

Tel: ++385 1 46 80 123 e-mail: subotic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Tatjana AntoniĆ, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Biserka Biškup, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Sanja Bosnar, doktorica kem.znanosti, viša asistentica

Josip Bronić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Mirko Hadžija, doktor biomedicinskih znanosti, viši znanstveni suradnik (konzultant)

Cleo Kosanović, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Ivan Krznarić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Ana Mužić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Boris Subotić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Mladen Žinić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Tehnička suradnica:

Višnjica Dekanić, peračica laboratorijskog posuđa

Program rada i rezultati na projektu:

Faza I. Određivanje promjena strukturnih, kemijskih i čestićnih svojstava sustava tijekom: (a) nastajanja (alumo)silikatnih hidrogelova u različitim uvjetima i njihove hidrotermalne kristalizacije u odgovarajuće tipove zeolita, (b) kristalizacije zeolita iz bistrih alumo(silikatnih) otopina u različitim uvjetima, (c) nastajanja mezoporoznih molekularskih sita uporabom samoorganizirajućih organskih gelova kao templata, (d) visoko-temperaturnih transformacija različitih tipova zeolita u amorfne alumosilikate i sekundarne (ne-zeolte) kristalne faze i (d) diskontinuirane (šaržne) i kontinuirane (metodom tankog sloja) procese zamjene različitih kationa iz otopina s kationima iz zeolita. Faza II. Analiza eksperimentalnih rezultata i modeliranje procesa: Fizičko-kemijski i matematički modeli odgovarajućih procesa biti će načinjeni na temelju analize eksperimentalnih rezultata i teorijskih razmatranja (vlastitih i iz literature). Faza III. Provjera modela: Modeli (novi kao i modificirani/poboljšani postojeći modeli) biti će provjereni simulacijama procesa i usporedbom izračunatih (simuliranih) i mjerenih podataka. Ovisno o stupnju slaganja, biti će izvršena dodatna mjerenja i/ili modifikacija modela. Očekuje se da će predložena istraživanja rezultirati novim saznanjima o: (1) utjecaju kemijskog sastava i "structure" tekuće faze na kinetiku rasta kristala zeolita tijekom kristalizacije, (2) procesima nukleacije zeolita u bistrim (alumo)silikatnim otopinama, (3) mehanizmu visoko-temperaturnih transformacija zeolita i (4) mehanizmu ionske zamjene u tankim slojevima zeolita. Također se očekuje da će realizacija ovog projekta omogućiti modeliranje navedenih procesa i na taj način predviđanje i kontrolu tijekom sinteze i modifikacije sa ciljem dobivanja produkata željenih strukturnih, kemijskih i čestićnih svojstava značajnih za različite primjene.

Research programme and results:

Phase I. Determination of the changes in structural, chemical and particulate properties of the systems during: (a) formation of (alumino)silicate hydrogels under different conditions, and their hydrothermal crystallization into appropriate type(s) of zeolite(s), (b) crystallization of zeolites from clear (alumino)silicate solutions under different conditions, (c) formation of mesoporous molecular sieves using self-assembled organic gels as templates, (d) high-temperature transformations of different types of zeolites into amorphous aluminosilicates and secondary (non-zeolitic) crystalline phases and (e) discontinuous (batch method) and continuous (thin layer method) exchange of different cations from solutions with cations from zeolites and Phase II. Analysis of experimental results and modelling of processes: Physico-chemical and mathematical models of the relevant processes will be made on the basis of

the analysis of experimental results and theoretical considerations (proper and from literature). Phase III. Evaluation of the models: The models (new and/or modified/improved existing models) will be evaluated by simulation of the processes, and the results of simulation will be correlated with the measured values. Depending on the degree of correlation, additional measurements and/or modifications of the models will be performed. One expects that the proposed investigations will give new insights in: (1) influence of chemical composition and "structure" of the liquid phase on the kinetics of crystal growth of zeolites during crystallization, (2) processes of nucleation of zeolites in clear (alumino)silicate solutions, (3) mechanism of high-temperature transformations of zeolites and (4) mechanism of ion exchange in thin zeolite layers. In addition, one can expect that the realization of this project will enable modelling of the mentioned processes, and thus prediction and control of the courses of syntheses and modifications in order to obtain the products with desired structural, chemical and particulate properties relevant for different applications.

PROCESI I INTERAKCIJE U HETEROGENIM SUSTAVIMA ČVRSTO/TEKUĆE PROCESSES AND INTERACTIONS IN HETEROGENEOUS SOLID/LIQUID SYSTEMS

Voditeljica projekta: dr. sc. Ljerka Brečević

Tel: ++385 1 4561 004 e-mail: brecevic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Vesna Babić-Ivančić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Ljerka Brečević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Jasminka Kontrec, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Damir Kralj, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Branka Njegić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Program rada i rezultati na projektu:

Osnova je ovih istraživanja doći do novih spoznaja o uvjetima nastajanja i o fizikalno-kemijskim svojstvima termodinamički nestabilnih i stabilnih čvrstih faza iz prezasićenih elektrolitnih otopina. Isto je tako cilj saznati, što je moguće više o mehanizmima interakcija tih čvrstih faza sa stranim ionima i molekulama te o kinetikama i mehanizmima procesa koji u tome sudjeluju. Svrha je, također, istraživanjem dobro definiranih modelnih sustava, doći do novih i proširiti već postojeće temeljne spoznaje o mehanizmima procesa taloženja, što se posebno odnosi na teško i umjereno topljive ionske soli, interesantne u brojnim područjima ljudskog interesa (na pr. tehnologiji, ekologiji, geologiji, medicini,...), s posebnim naglaskom na proučavanje biomineralizacije. S tim su u svezi predviđena istraživanja interakcije čvrste faze sa sintetičkim i prirodnim makromolekulama.

Predložena istraživanja su nastavak i proširenje istraživanja na temi: Kinetika i mehanizmi procesa taloženja čvrste faze iz elektrolitnih otopina.

Slijedom toga, nastavljena su istraživanja ekstrakcije tekućim membranama (TM). Ova je tehnika primjenjena u odstranjivanju kadmija iz bezvodnog kalcijeva sulfata tijekom procesa njegove transformacije u kalcijev sulfat dihidrat. Pri tome je iskorištena već ranije utvrđena činjenica, da se taj proces zbiva putom otopine, t.j. otapanjem termodinamički nestabilne i taloženjem stabilne čvrste faze.

Nastavljena su i istraživanja djelovanja početnih uvjeta na transformaciju struvita u njuberit, a u tijeku su i istraživanja djelovanja umjetnih i prirodnih polipeptida na morfološka i kemijska svojstva polimorfa kalcijeva karbonata.

Započeta su istraživanja kinetike rasta polimorfa kalcijeva karbonata u uvjetima sličnim onima u prirodnim krškim vodama.

Research programme and results:

The basis of these investigations is to gain new knowledge about the factors influencing the formation and physical chemical properties of thermodynamically metastable and stable solid phases from the supersaturated electrolyte solutions. Likewise, the goal is to learn as much

as possible about the mechanisms of interaction between these solid phases and the foreign ions and molecules, and about the kinetics and mechanisms of the processes involved. The purpose of this project is to acquire new and to extend the existing basic knowledge about the mechanisms of precipitation processes of sparingly and moderately soluble salts, interesting in different fields of human scopes (e.g. technology, ecology, geology, medicine, etc.), by studying well defined model systems. A special attention is given to the study of biomineralization. In this connection, the study of interaction between the solid phase and the synthetic and natural macromolecules is anticipated.

The proposed studies are the continuation and expanding of previous research of the theme: Kinetics and mechanisms of solid phase precipitation from electrolyte solutions.

Thus, the study of liquid membrane (LM) extraction has been continued. This technique is applied for removal of cadmium from anhydrous calcium sulphate during its transformation to calcium sulphate dihydrate. A good use is made of the fact that the transformation process, as found earlier, is a solution-mediated process, i.e. the thermodynamically unstable solid phase dissolves and the stable one grows. The investigation of the influence of initial precipitation conditions on the transformation of struvite into newberyite has also been continued, as well as the study of the effects that synthetic and natural polypeptides have on the morphological and chemical properties of calcium carbonate polymorphs. The kinetic study of crystal growth of calcium carbonate polymorphs, under conditions similar to those in the natural Karst waters, has been started.

SINTEZA I MIKROSTRUKTURA METALNIH OKSIDA I OKSIDNIH STAKALA SYNTHESIS AND MICROSTRUKTURE OF METAL OXIDES AND OXIDE GLASSES

Voditelj teme: dr. sc. Svetozar Musić

Tel: ++385 1 4561 094 e-mail: music@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Đurđica Dragčević, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Marijan Gotić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Stjepko Krehula, dipl. inž. kemije, znanstveni novak

Miroslava Maljković, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Svetozar Musić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Mira Ristić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Ivanka Salaj-Obelić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Ankica Šarić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Goran Štefanić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Jasmin Forić, tehničar

Vanjski suradnik:

Mladen Topić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik u mirovini

Suradnici iz drugih ustanova:

Davor Balzar, doktor fiz. znanosti, izvanredni profesor, University of Denver, Department of Physics and Astronomy, Denver, Colorado, SAD

Stanko Popović, doktor fiz. znanosti, redoviti profesor, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Odsjek za fiziku, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

U sklopu projekta "Sinteza i mikrostruktura metalnih oksida i oksidnih stakala" istražuju se nanostrukturni materijali sa specifičnim magnetskim, optičkim, elektrokromatskim, feroelektričnim ili katalitičkim svojstvima. Zbog komercijalnih razloga posebno je važno poznavanje promjene kemijskih i/ili fizikalnih svojstava u ovisnosti o veličini čestice. Postoje

vrlo različite metode sinteze nanostrukturnih materijala. Sol-gel metoda dobiva sve više na značenju kada je u pitanju sinteza nanometarskih čestica metalnih oksida te mješovitih metlanih oksida. Istraživat će se sinteza nanometarskih čestica TiO_2 dopiranog s ionima željeza primjenom metode esterifikacije. Fotoaktivirane nanometarske čestice $\text{TiO}_2\text{-Fe}_2\text{O}_3$ bit će upotrebljene u studiji antikancerogenog djelovanja tih čestica na primjeru pločastih kancerogenih stanica. Rezultati tih istraživanja bit će komparirani s rezultatima dobivenim u sličnim eksperimentima, ali uz primjenu nanometarskih čestica nedopiranog TiO_2 ili čestica WO_3 . Cilj ovih eksperimenata je utvrditi mehanizam ubijanja pločastih kancerogenih stanica fotokatalitičkom aktivacijom nanometarskih čestica specifičnih metalnih oksida. Jedan od ciljeva ovog projekta je također istražiti magnetska svojstva nanometarskih čestica $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$. Mössbauerovom spektroskopijom istražiti će se magnetska i strukturna svojstva željeza(III)-hiroksida koji pokazuje amorfnu narav prema rentgenskoj difrakciji.

Research programme and results:

In the frame of the project "Synthesis and microstructure of metal oxides and oxide glasses" the nanostructured materials with specific magnetic, optical, electrochromatic, ferroelectric or catalytic properties will be investigated. Nanomaterial science is a new rapidly expanding area of materials research, which is devoted to understanding changes in fundamental material properties as a function of particle size. This is also very important from the commercial standpoint. There are very different methods of the synthesis of nanostructured materials. Sol-gel method is extremely important in the synthesis of nanometric particles of metal oxides and mixed metal oxides. The synthesis of nanometric particles of iron-doped TiO_2 particles will be investigated by using the esterification reaction. The nanometric $\text{TiO}_2\text{-Fe}_2\text{O}_3$ particles will be used in a study of photokilling of squamous cancerogene cells, *in vitro*. The results of this investigation will be compared with these obtained in similar experiments with undoped TiO_2 or WO_3 particles. The aim of this experiments is to establish the mechanism of killing of squamous cancerogene cells by photoactivation of specific nanometric metal oxide particles. One of the aims of this project is to investigate the magnetic properties of nanometric $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ particles. The magnetic and structural properties of iron(III)-hydroxide, which is amorphous according to X-ray powder diffraction, will be investigated by using Mössbauer spectroscopy.

FIZIČKO-KEMIJSKI UČINCI IONIZIRAJUĆIH ZRAČENJA PHYSICO-CHEMICAL EFFECTS OF IONIZING RADIATIONS

Voditelj: dr. sc. Dušan Ražem

Tel: ++385 1 4561 154 e-mail: razem@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Branka Kaćušin-Ražem, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Knežević Željka, dipl. inž. kemije, znanstvena novakinja

Mihaljević Branka, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Miljanić Saveta, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Maria Ranogajec-Komor, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Dušan Ražem, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Branko Vekić, magistar kem. znanosti, asistent

Tehnički suradnici:

Milan Blažević, tehničar

Atlantis Cobalt, stručni suradnik

Ružica Jurić, tehničarka (od 1.3.2002.)

Program rada i rezultati na projektu:

Karakterizacija fizičko-kemijskih učinaka ionizirajućih zračenja u raznim modelnim i realnim sustavima. Izbor sustava u kojima se promatraju fizičko-kemijski učinci ionizirajućih zračenja

određen je zanimanjem za razne vidove međudjelovanja zračenja i tvari u tim sustavima. Istraživanje prirode i sudbine reaktivnih kratkoživećih čestica nastalih radiolizom: elektrona, pozitivnih iona, uzbuđenih molekula i slobodnih radikala spada u temeljna istraživanja međudjelovanja zračenja i tvari. Ta istraživanja provode se u jednostavnim tekućim ili krutim sustavima. Fizičko-kemijski učinci ionizirajućih zračenja mogu se iskoristiti za mjerenje energije zračenja apsorbirane u nekom sustavu, koji time postaje dozimetrijski sustav. Primjereno rasponu mjerenih doza zračenja, predmet istraživanja su dozimetrijski sustavi koji se zasnivaju na pojavi termoluminiscencije u krutim tvarima ili na trajnim kemijskim promjenama u otopinama. Tako su razvoj i karakterizacija dozimetrijskih sustava za mjerenje doza u rasponu od 12 redova veličine također predmet ovog projekta. Predmet istraživanja također je izazivanje određenih biološki relevantnih kemijskih promjena u jednostavnim modelnim sustavima. Tako se pod kontroliranim uvjetima pokušavaju oponašati prirodni procesi u kojima sudjeluju reaktivne kratkoživeće čestice, npr. oksidacija bioloških molekula mehanizmom slobodnih radikala, prijenos elektrona, itd. Tehnološke primjene zračenja temelje se na biocidnom učinku koji ionizirajuće zračenje ima na mikroorganizme, kontaminante na farmaceutskim i medicinskim materijalima i namirnicama. Dok je učinak ozračenja na biološke kontaminante drastičan, fizičko-kemijski učinak na podlogu često je jedva zamjetljiv. Izazov za radijacijsku kemiju jest identificirati i pokušati kvantificirati te fizičko-kemijske učinke, što je također predmet istraživanja ovog projekta.

Research programme and results:

The project deals with the characterisation of physico-chemical effects of ionising radiations in various model and real systems. The selection of systems for the investigation of physico-chemical effects of ionising radiations is determined by the interest in various aspects of the interactions of radiation and matter. The investigations of the nature and fate of the reactive short-lived species formed by the radiolysis: electrons, positive ions, excited molecules and free radicals belong to the fundamental aspects of the interactions between radiation and matter. This research has been carried out in both simple liquid and solid systems. Physico-chemical effects of ionising radiations can be used for the measurements of the radiation energy absorbed in a system, which is then called a dosimetry system. According to the range of the doses measured, the subjects of the project are dosimetry systems based on inducing thermoluminescence of solids or on inducing permanent chemical changes in solutions. The development and characterisation of dosimetry systems capable for measuring doses over a range of 12 orders of magnitude are the subject of this project as well. The subject of the project is also the induction of certain biologically relevant chemical changes in simple model systems. In this way, natural processes with the participation of reactive short-lived species are mimicked under controlled conditions, e.g. oxidation of biological molecules by free radical mechanism, electron transfer, etc. Technological applications of irradiation are based on the biocidal effect of ionising radiation upon microorganisms, which happen to be contaminating pharmaceutical and medical materials and foods. While the biological effect of irradiation is dramatic, the physico-chemical effect is often hardly noticeable. It is a challenge for radiation chemistry to identify and quantify these physico-chemical effects, which is also the subject of this project.

SINTEZA, KARAKTERIZACIJA I MODIFICIRANJE POLIMERA ZRAČENJEM SYNTHESIS, CHARACTERISATION AND MODIFICATION OF POLYMERS BY IONISING RADIATION

Voditelj projekta: dr. sc. Franjo Ranogajec

Tel.: ++385 1 4561 070 e-mail: frano@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Irina Pucić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Franjo Ranogajec, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Ivan Šmit, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnici:

Silvano Štoković, tehničar
Branko Štefulj, KV radnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Dragutin Fleš, doktor kem. znanosti, redovni profesor, Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti (konzultant)
Goran Ungar, doktor fiz. znanosti, University of Sheffield (konzultant)
Željko Jelčić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik, Pliva d.d., Zagreb
Gregor Radonjič, doktor kem. znanosti, docent, Inštitut za tehnologiju, Univerza v Mariboru

Program rada i rezultati na projektu:

Iz znanstvene literature vidi se porast interesa za istraživanje strukturnih prijelaza u polimerima na temperaturama iznad staklastog prijelaza, prijelaza tekuće-tekuće (liquid-liquid transition), koji podrazumijevaju postojanje lokalne središnosti polimernih lanaca, koja nestaje na temperaturi tekućeg prijelaza, što se protivi Floryjevoj teoriji koja ne priznaje postojanje središnosti polimernih lanaca iznad staklastog prijelaza. Nakon što smo dokazali postojanje gornjeg tekućeg prijelaza (upper liquid-liquid transition) u nezasićenim poliesterskim smolama koji je uzrokovan unutar molekulskim vodikovim vezama istražit ćemo temperaturno područje nižeg tekućeg prijelaza (lower liquid-liquid transition) s namjerom da dokažemo njegovu međumolekulsku prirodu. Istraživat će se mogućnost postojanja tekućih prijelaza u drugim polimerima, u tekućim kristalima te usporediti sa prijelazima kad su tekući kristali dispergirani u polimeru kao nosaču (polymer dispersed liquid crystal, PDLC) za koje raste istraživački interes zbog njihove potencijalne primjene u elektro-optičkim uređajima. Utvrdit će se relacija između temperature staklastog prijelaza te temperature donjeg i gornjeg prijelaza. Očekujemo da ćemo time dati fundamentalni doprinos poznavanju strukturnih prijelaza u polimerima. Modificirani polimerni materijali, mješavine i kompoziti važni su jer pružaju uravnotežena svojstva materijala koja manjkaju izvornim komponentama. Dosadašnje spoznaje pokazuju da uvjeti pripreme, struktura izvornih komponenta i izbor kompatibilizatora utječu na strukturiranje polimernih mješavina i kompozita, na njihovu faznu morfologiju i time na svojstva. Zračenje djeluje na mehanička svojstva i neke strukturne karakteristike polimernih mješavina i kompozita, ali ne mijenja bitno njihovu morfologiju. Pri zračenju neke strukturne/morfološke karakteristike izvornih komponenti bitno utječu na mehanička svojstva ozračenih mješavina. Osnovni cilj je upotpuniti spoznaje odnosa struktura-svojstvo polimernih mješavina i kompozita s određivanjem utjecaja komponentnih sastava, uvjeta pripreme, vrste i sadržaja kompatibilizatora, te zračenja na strukturu i svojstva modificiranih polimernih materijala. Kao rezultat se očekuju razjašnjenja strukturiranja polimernih mješavina i kompozita na osnovi polipropilena, polietilena, poliuretana, poliakrilata i odnosa struktura-svojstvo i njihova objava u svjetskim časopisima. Istraživano je razdvajanje faza za vrijeme radijacijskog umreživanja nezasićenih poliesterskih smola. Utvrđeno je da interakcija između polieterskog poliuretana (PU) s najvećom koncentracijom karboksilnih funkcionalnih skupina i metakrilnog kopolimera (PM) s tercijarnim aminoskupinama u PU/PM 1:1 mješavini dezorganizira na mikroskopskoj razini domene tvrdih segmenata sa sferulitnom morfologijom u usporedbi sa središnom tvrdom fazom u odgovarajućem čistom PU uzorku. Uvođenje diatom punila visokog stupnja kristalnosti u sustav poliakrilatnog kopolimera (PA) utječe na restrukturizaciju matrice s promjenjenim omjerom intenziteta amorfnih difrakcijskih maksimuma matrice indicirajući porast nehomogenosti filma kompozita. (Prirodno diatom punilo je karakterizirano izvornom skeletnom građom s visokom „unutrašnjom“ poroznošću koja omogućuje penetraciju matrice u čestice i agglomerate punila u PA kompozitu. S druge strane, slaba interakcija između PA matrice i punila uzrokuje slabljenje kompozita s porastajućim udjelom punila.) Uvođenje talk punila u izotaktni polipropilen (iPP), te u iPP/SEP i iPP/SBS mješavine narušava krupnosferulitnu morfologiju iPP matrice i uzrokuje promjenu mehaničkih svojstava kompozita. Zračenje uzrokuje predominantno cijepanje lanaca u iPP matrici što vodi do

manjeg broja veznih molekula i do pogoršanja mehaničkih svojstava. Talk reducira efekte zračenja, te bi se u uvjetima zračenja mogli radije primijeniti iPP/talk kompoziti nego čisti iPP.

Research programme and results:

In scientific literature the increase of interest for investigation of the structural transitions in polymers above glass transition temperature, liquid-liquid transitions, is seen. Those transitions are caused by disintegration of local order in polymer what opposes to Flory's theory that no local order in polymers is possible above glass transition. After we have confirmed the existence of the upper liquid-liquid transition in unsaturated polyester resins and proved that it is caused by breaking of intramolecular hydrogen bonding, we shall investigate lower liquid-liquid transition with the aim to prove its intermolecular nature. Liquid-liquid transitions in other polymers, in liquid crystals and in polymer dispersed liquid crystals (PDLC) will be investigated and compared. The research interest for PDLC increases due to their applicability in electro-optical devices. The relations between glass-transition, lower- and upper liquid-liquid transitions will be determined. We expect that our results will be fundamental contribution to understanding the structural transitions in polymers. Modified polymeric materials, blends and composites, are important because they offer balanced properties compared to that of origin components. The attained knowledge and our previous results show that the preparation conditions, the structure of origin components and compatibilizer type affect the structure, phase morphology and, consequently, the properties of polymer blends and composites. The radiation influences mechanical properties and some structural characteristics of polymer blends and composites, but does not change significantly their morphology. The radiation effects on mechanical properties of polymer blends significantly depend on certain structural/morphological characteristics of origin components. Our basic goal is to get a full picture on structure-properties relationship of polymer blends and composites by determining the effects of component compositions, preparation conditions, type and amount of compatibilizer, as well as the radiation on the modified polymeric materials. We expect that the structure-properties relationship of structured polymer blends and composites on the basis of polypropylene, polyethylene, polyurethane, polyacrylate will be explained and the results will be published in leading scientific journals.

Phase separation during radiation crosslinking of unsaturated polyester resin was investigated. It was shown that the interaction between the polyether polyurethane (PU) with the highest carboxylic functional groups concentration and methacrylic copolymer (PM) with tertiary amine groups in PU/PM 1:1 mixture disorganizes hard segment domains with spherulitic character at the microscopic level as compared with the ordered hard phase in the corresponding pure PU sample. The incorporation of diatom filler with high crystallinity into poly(acrylate) (PA) copolymer system influences the matrix re-structurization by changing the intensity ratio of matrix amorphous halos indicating the increased composite film inhomogeneity. (The natural diatom filler is characterised by the original skeletal structure with high "inner" porosity which allows matrix penetration inside the filler particles and agglomerates in PA composite. On the other side, low interaction between PA matrix and diatom filler causes composite weakening with increasing filler fraction.) The incorporation of talc filler in isotactic polypropylene (iPP), iPP/SEP and iPP/SBS blends disturbs well-developed spherulitic morphology of iPP matrix and causes the change of mechanical properties of composites. Irradiation causes chains scission in iPP matrix predominantly, that leads to lesser number of tie molecules and to the deterioration of mechanical properties. Talc reduces the effects of radiation and iPP/talc composites could be used rather than pure iPP under the irradiation conditions.

INTERMETALNI SPOJEVI I METALNI HIDRIDI INTERMETALLIC COMPOUNDS AND METAL HYDRIDES

Voditelj projekta: dr. sc. Želimir Blažina
Tel.: +385 1 4561 084 e-mail: blazina@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Želimir Blažina, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Antun Drašner, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
Goran Miletić, magistar kem. znanosti, asistent, znanstveni novak
Matija Paljević, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Božica Šorgić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Rudolf Trojko, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Tomislav Žic, viši tehničar

Vanjski suradnik:

Mladen Topić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik u mirovini

Suradnik iz druge ustanove:

Mihajlo Firak, doktor stroj. znanosti, Laboratorij za energetska postrojenja, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Program rada obuhvaća sintezu i karakterizaciju novih intermetalnih spojeva i metalnih oksida. Cilj ovih istraživanja je dobivanje novih materijala koji se mogu primjeniti u energetici i katalizi. Osnovne metode istraživanja jesu rendgenska strukturna analiza metodom praha, računanje elektronske strukture, metalografija, magnetometrija, tenzimetrija, termičke metode analize (termogravimetrijska analiza, TGA, diferencijalna termička analiza, DTA, termički stimulirana struja depolarizacije, TSDC, diferencijalna pretražna kalorimetrija, DSC itd.).

Istraživana su magnetska svojstva intermetalnih spojeva općeg sastava $DyNi_{5-x}Al_x$. Nađeno je da su spojevi feromagnetski te da supstitucija nikla s aluminijem smanjuje Curievu temperaturu u onim spojevima koji kristaliziraju s $CaCu_5$ tip strukture (prostorna grupa $P6/mmm$). Nakon strukturnog prijelaza ($x \geq 2.5$) u strukturni tip YCo_3Ga_2 (prostorna grupa $P6/mmm$) Curieva temperatura opet raste. Efektivni Bohr magnetonski brojevi, p_{eff} , imaju vrijednosti koje se podudaraju s vrijednostima slobodnog Dy^{3+} iona, a momenti zasićenja praktički se ne mijenjaju sa sastavom. Nađeno je da su magnetska ponašanja povezana su s međuatomskim udaljenostima Dy-Dy i opaženim faznim prijelazom. U teoretskom dijelu istraživanja računata je elektronska struktura intermetalnih spojeva YNi_5 , YNi_4Al i YNi_3Al_2 ($CaCu_5$ tip strukture) i njihovih modelnih monohidrida YNi_5H , YNi_4AlH and YNi_3Al_2H . Korištena je TB-LMTO-ASA metoda (tight-binding version of the linear muffin-tin orbital method within the atomic sphere approximation). Stabilnost pojedinih intermetalnih spojeva istraživana je obzirom na mjesto supstitucije nikla s aluminijem. Nađeno je da je u spoju YNi_4Al energetski povoljniji položaj aluminija u kristalografskim položajima 3g, dok u spoju YNi_3Al_2 energetski je najstabilniji aluminija u 2c položajima. U modelnim monohidridima opažena je karakteristična struktura vezanja metal – vodik. S porastom količine aluminija ta se struktura se pomiče prema nižim energijama. Ovi računski rezultati slažu se s rezultatima dobivenim tenzimetrijskim mjerenjima kada je nađeno da stabilnost sustava intermetalni spoj-vodik raste s količinom aluminija. Nađen je novi postupak dobivanja supravodiča $Ag_5xPb_2O_{6-x}$ iz Bystrom-Evers faze $Ag_5Pb_2O_6$. Postupak se sastoji od napuštanja Bystrom-Evers faze u vakuumu i niskim pritiscima kisika na temperaturama 508-518 K uz istovremeni protok jake istosmjerne električne struje.

Research programme and results:

The research program includes synthesis and characterisation of new intermetallic compounds and metal oxides. The aim of these investigations is to select new materials for potential use for energetic and catalytic purposes. The basic methods of investigations are x-ray powder diffraction, electronic structure calculations, metallography, magnetometry,

pressure composition isotherm measurements, thermal methods of analysis (thermogravimetric analysis, TGA, differential thermal analysis, DTA, thermally stimulated depolarisation current, TSDC, and differential scanning calorimetry, DSC, etc.).

The magnetic properties of intermetallic compounds of general composition $\text{DyNi}_{5-x}\text{Al}_x$ were studied. It was found that these compounds are ferromagnetic materials and that substitution of aluminium for nickel decreases the Curie temperature in those compounds which crystallise with the CaCu_5 type of structure (space group $P6/mmm$). Beyond the phase transition into the YCo_3Ga_2 type of structure ($x \geq 2.5$) the Curie temperature increases again. The values of the effective Bohr magneton numbers, p_{eff} , are consistent with the free ion value of Dy^{3+} , and the saturation magnetic moments do not change with composition. It was found that the magnetic behaviour is related to the interatomic Dy-Dy distances and the observed phase transition.

In theoretical part of research the electronic structure of intermetallic compounds YNi_5 , YNi_4Al and YNi_3Al_2 (CaCu_5 type of structure) and their monohydrides YNi_5H , YNi_4AlH and $\text{YNi}_3\text{Al}_2\text{H}$ has been calculated. The TB-LMTO-ASA method (tight-binding version of the linear muffin-tin orbital method within the atomic sphere approximation) was used. The stability of particular intermetallic compounds has been studied with respect to substitution of aluminium for nickel at different sites within the unit cell. It was found that from energetic viewpoint the preferred position for aluminium in YNi_4Al are the crystallographic positions 3g, while in YNi_3Al_2 these are positions 2c. In the model monohydrides a characteristic metal – hydrogen bonding structure was observed. This structure is shifted to lower energies as the aluminium content increases. These results are in agreement with the results obtained by tensimetric measurements where it was found that the stability of the intermetallic compound-hydrogen system increases with the amount of aluminium.

A new method in preparing the $\text{Ag}_{5-x}\text{Pb}_2\text{O}_{6-x}$ superconductor from Bystrom-Evers phase $\text{Ag}_5\text{Pb}_2\text{O}_6$ was found. The method includes an annealing procedure of Bystrom-Evers phase in vacuum and low pressure of oxygen at 508-518 K accompanied with a strong flow of DC electrical current.

SUPRAVODLJIVI OKSIDI I VIŠENUKLEARNI METALNI KOMPLEKSI SUPERCONDUCTING OXIDES AND POLYNUCLEAR METAL COMPLEXES

Voditeljica projekta: dr. sc. Nevenka Brničević

Tel: ++385 1 4561 189 e-mail: brnicevi@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Nevenka Brničević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Dražan Jozić, dipl. inž. kemijske tehnologije, mlađi asistent, znanstveni novak
Berislav Perić, magistar fiz. znanosti, asistent, znanstveni novak
Pavica Planinić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Marijana Šestan, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnik:

Ernest Sanders, tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Marko Miljak, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik, Institut za fiziku, Zagreb (konzultant)
Robert E. McCarley, Ames Laboratory and Iowa State University, Iowa, SAD (konzultant)
Gerard Giester, Institut für Mineralogie und Kristallographie, Universität Wien, Beč, Austrija (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Program rada obuhvaća razradu postupaka pripreme i istraživanje strukturnih, spektroskopskih i magnetskih svojstava novih anorganskih sustava, uključujući heksanuklearne halogenidne klastere niobija, tantalala, molibdena i volframa, istraživanje

supravodljivih oksida te višenuklearnih visokospinskih kompleksa prijelaznih metala, koji bi posjedovali svojstva molekulskih magneta.

Istražuju se reakcije heksanuklearnih halogenidnih kompleksa tantala $[\text{Ta}_6\text{X}_{12}(\text{ROH})_6]\text{X}_2$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$; $\text{R} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5$) s halogenidima organskih kationa, R_4NX , u različitim eksperimentalnim uvjetima. U prisutnosti ograničene količine kisika iz zraka očekuju se paramagnetski spojevi $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]_4[(\text{Ta}_6\text{Cl}_{12})\text{Cl}_6]\text{Cl}$, odnosno $[(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{N}][\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Br}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, koji sadrže jedinice $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{3+}$, odnosno $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}]^{3+}$. U tijeku je određivanje kristalnih struktura, te detaljno istraživanje spektroskopskih i magnetskih svojstava.

Istražuju se metokso-kompleksi heksanuklearnih halogenidnih klastera molibdena i volframa. Priređene su polimerne vrste s metokso-skupinama u mostu između susjednih klusterskih jedinica, zatim spojevi koji sadrže metokso-skupine u terminalnim oktaedarskim koordinacijskim položajima, te oni koji sadrže metokso-skupine u mostu i u terminalnim koordinacijskim položajima istovremeno. Istražuju se spektralna svojstva, posebno fotoelektronski spektri koji daju informacije o načinu vezanja liganada. Određivanje kristalnih struktura za neke od spojeva u nizu za koje je bilo moguće prirediti pogodne monokristale je u tijeku. Svi su ovi spojevi osjetljivi na vlagu i zahtijevaju rad u inertoj atmosferi i visokom vakuumu.

U tijeku su istraživanja supravodljivih sustava $\text{RuSr}_2\text{RECu}_2\text{O}_8$ ($\text{RE} =$ elementi rijetkih zemalja), za koje je opažena koegzistencija supravodljivosti i slabog feromagnetizma. Sustavi s djelomičnom izmjenom atoma rutenija atomima nekih prijelaznih metala mogli bi otkriti nove zanimljive fenomene.

U okviru ovoga projekta započeta su istraživanja novih anorganskih sustava - molekulskih magneta (molecule-based magnets), tj. višenuklearnih (homo- i heteronuklearnih) metalnih kompleksa, koji posjeduju dva ili više paramagnetskih metalnih centara s nepopunjenim elektronskim orbitalama (open-shell systems). Ovi sustavi pobuđuju zanimanje poradi njihove moguće primjene pri izradi malih magnetskih memorijskih jedinica, magnetskih vrpca, magnetskih senzora ili čvrstih diskova.

Research programme and results:

The research programme is related to the development of preparation procedures and the investigation of structural, spectroscopic and magnetic properties of new inorganic systems, including hexanuclear halide clusters of niobium, tantalum, molybdenum and tungsten, superconducting oxides and polynuclear high-spin transition metal complexes that could act as molecule-based magnets.

Reactions of the hexanuclear halide complexes $[\text{Ta}_6\text{X}_{12}(\text{ROH})_6]\text{X}_2$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$; $\text{R} = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5$) with organic cations, R_4NX , have been investigated under various experimental conditions. In the presence of limited amount of air-oxygen the paramagnetic compounds $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]_4[(\text{Ta}_6\text{Cl}_{12})\text{Cl}_6]\text{Cl}$ and $[(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{N}][\text{Ta}_6\text{Br}_{12}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Br}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, containing $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{3+}$ and $[\text{Ta}_6\text{Br}_{12}]^{3+}$, respectively, are expected. The crystal structures determination as well as the investigation of spectroscopic and magnetic properties are in progress.

Methoxo complexes of hexanuclear halide clusters of molybdenum and tungsten have been investigated. Polymeric species with bridging methoxo groups, with bridging and terminal methoxo groups present simultaneously as well as monomeric species with methoxo groups in terminal octahedral coordination sites have been prepared. Spectroscopic properties including X-ray photoelectron spectra which give information on the mode of ligands bonding have been investigated. Crystal structure determination for some of the isolated species are in progress. All these compounds are moisture-sensitive so that inert-gas atmosphere and high-vacuum techniques were applied.

The investigation of superconducting systems $\text{RuSr}_2\text{RECu}_2\text{O}_8$ ($\text{RE} =$ rare-earth element) for which coexistence of superconductivity and weak-ferromagnetism has been noticed, are in progress. Systems with partial substitution of ruthenium atoms by some transition metal atoms might reveal interesting new phenomena.

Within this project the investigation of new inorganic systems – molecule-based magnets, i.e. polynuclear (homonuclear or polynuclear) transition metal complexes having two or more paramagnetic metal centres with unfilled electron orbitals (open-shell systems) has been just

started. The systems are interesting because of their possible application for manufacture of small magnetic memory storages, magnetic tapes, magnetic sensors or hard discs.

UTJECAJ DOPANADA NA STRUKTURU I SVOJSTVA MATERIJALA ZA TEHNIČKE PRIMJENE
INFLUENCE OF DOPANDS ON THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF MATERIALS FOR TECHNICAL APPLICATIONS

Voditeljica projekta: dr. sc. Biserka Gržeta

Tel: ++385 1 4561 120 e-mail: grzeta@rudjer.irb.hr

Suradnica na projektu:

Biserka Gržeta, doktorica fiz. znanosti, znanstvena savjetnica

Suradnica iz druge ustanove:

Emilija Tkakčec, doktorica kem. znanosti, redoviti profesor, Fakultet kemijskog inženjstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu

Program rada i rezultati na projektu:

U novije vrijeme niz istraživanja iz područja fizike i kemije okrenuto je prema istraživanju svojstava novih materijala, ali isto tako i iznalaženju postupaka kojima će već poznati materijali poboljšati neka svojstva i time postati interesantni za suvremene tehnologije. Pokazalo se da dopiranje materijala izabranim atomima često uzrokuje ovakve promjene, no mehanizam ugradnje atoma dopanda u svim slučajevima nije razjašnjen. Tematika ovog projekta je usmjerena na ispitivanje mehanizma i učinaka dopiranja u slučaju mulita, te u slučaju SnO_2 i In_2O_3 . Čvrste otopine iz sustava Al_2O_3 - SiO_2 određenog sastava poznate su pod nazivom mulit. U zadnjoj dekadi mulit je prepoznat kao izuzetno zanimljiv materijal za tehničke primjene na visokim temperaturama, jer ima veliku mehaničku čvrstoću, visoku kemijsku stabilnost, visok specifični električni otpor, transparentiju u IC području, mali koeficijent toplinskog rastezanja i veliku otpornost na puzanje čak i pri 1400°C . Dopiranje mulita prelaznim metalima još poboljšava ta svojstva, no mehanizam ugradnje dopanada još nije dobro poznat. S druge strane, u slučaju SnO_2 i In_2O_3 dopiranjem se postiže zanimljiv efekt promjene električne vodljivosti: transparentni poluvodiči SnO_2 i In_2O_3 dopiranjem sa Sb odnosno sa Sn postaju transparentni vodiči. Prevlake od takvih transparentnih vodiča koriste se kao transparentni grijači avionskih prozora, antistatičke prevlake prozora mjernih instrumenata, te u proizvodnji solarnih kolektora i solarnih ćelija, itd. Dok se optička i električna svojstva svakog novog transparentnog vodiča dobro istraže, ispitivanja strukture ostaju najčešće tek na fenomenološkom pristupu zbog činjenice da ih nije moguće prirediti u obliku monokristala. Međutim, upotreba Rietveldove metode za rješavanje kristalne strukture iz polikristalnog uzorka rješava taj problem. Isto vrijedi i za rješavanje strukture dopiranog mulita. No, radovi te vrste ipak nisu česti u literaturi. U okviru ovog projekta priredit će se niz polikristalnih (praškastih) uzoraka mulita dopiranih s Cr, Zn, Ni, Co, niz uzoraka SnO_2 dopiranog sa Sb, te niz uzoraka In_2O_3 dopiranog sa Sn. Uzorci će se prirediti posebno razređenim sol-gel postupcima. Za svaki uzorak će se riješiti struktura pomoću Rietveldove metode. U daljnjim istraživanjima izvršit će se mjerenja toplinske ekspanzije i električne vodljivosti priređenih uzoraka, te rezultati korelirati sa strukturom. Očekuju se nova saznanja o mehanizmima ugradnje dopanada.

U sklopu predviđenih istraživanja ispitana je kinetika kristalizacije mulita pri formiranju mulita iz dvofaznog gela u sistemu Al_2O_3 - SiO_2 . Pomoću rendgenske difrakcije (XRD) i transmisivne elektronske mikroskopije (TEM) ispitane su nastale faze i veličine prisutnih čestica (reda veličine nm). Ustanovljeno je da prvi nastaje mulit sastava 2:1 ($2\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$) pri temperaturi od $\sim 1200^\circ\text{C}$, koji na višim temperaturama postupno prelazi u sastav 3:2 ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$). Brzina prijelaza je veća što je veličina čestica prekursora manja.

Priređeni su uzorci mulita koji su sadržavali 2, 4, 6 i 8 mol% Cr_2O_3 . Uzorci su ispitani pomoću XRD. Rendgenska difrakcija je pokazala da su uzorci mulita dopirani kromom izostrukturni s

čistim mulitom, prostorne grupe *Pbam*. Parametri jedinične ćelije se povećavaju s količinom ugrađenog kroma. Struktura dopiranih uzoraka je određena pomoću Rietveldove metode. Ustanovljeno je da ioni Cr^{3+} supstitucijski zamjenjuju Al^{3+} u oktaedrima AlO_6 , a pored toga se ugrađuju i u intersticijska mjesta unutar strukture mulita. Mjerenja elektronske paramagnetske rezonancije (EPR) potvrdila su da se ioni Cr^{3+} ugrađuju u AlO_6 oktaedre i u oktaedrijska intersticijska mjesta u strukturnim kanalima duž osi *c*. Istražen je utjecaj dopiranja antimonom na strukturu SnO_2 . Priređeni su uzorci SnO_2 dopirani s 3.1, 6.2, 11.9 i 14 % Sb, koji su ispitani pomoću rendgenske difrakcije na prahu. Uzorci su bili nanokristalni. Svi su uzorci imali tetragonsku strukturu tipa rutila (TiO_2), prostorne grupe *P4₂/mnm*. Parametri jedinične ćelije povećavaju se s količinom ugrađenog antimona. Struktura uzoraka je određena pomoću Rietveldove metode. Kristalna struktura je pokazala da oba iona antimona, Sb^{3+} i Sn^{5+} , supstitucijski zamjenjuju Sn^{4+} u strukturi SnO_2 . U ispitivanim uzorcima količina Sb^{3+} iona bila je veća od količine Sb^{5+} iona. Mössbauer spektroskopija uzoraka potvrdila je rezultate XRD istraživanja, a također je ustanovljeno da konfiguracija oko mjesta Sb^{3+} uključuje prisustvo stereokemijski aktivnog slobodnog para elektrona.

Research programme and results:

Nowadays many investigations in the fields of physics and chemistry are aimed towards a research of the properties of new materials, but also towards discovering of new techniques which could improve the properties of the well known materials and make them interesting for a modern technology. It has been found that a doping of materials by selected atoms very often causes such improvements of material properties, but a mechanism of the doping process is not well understood in all cases. The subject of this project is an investigation of the doping mechanism and its effect to mullite, and effects to SnO_2 and In_2O_3 . Solid solutions in a specific range of the Al_2O_3 - SiO_2 system are known under the name mullite. During last decade mullite has been recognized as a very interesting material for technical applications at high temperature. It has a great mechanical firmness, high chemical stability, high electrical resistivity, infrared (IR) transparency, low coefficient of thermal expansion, and a great creep resistivity even at 1400°C. Doping of mullite with transition metals even improves these properties. On the other hand, doping of SnO_2 and In_2O_3 leads to the change in their electrical conductivity: transparent semiconductors SnO_2 and In_2O_3 become transparent conductors when doped with Sb and Sn respectively. Thin films of transparent conductors are used as transparent heating elements for aircraft windows, antistatic coatings for instrument windows, and in production of solar cells. While the optical and electrical properties of new transparent conductors are subjected to detailed investigations by many authors, very often it is not the case with the structure. This is so because such materials can not be prepared in a single crystal form. However, application of the Rietveld method for determination of the crystal structure of polycrystalline sample solves this problem. The same is valid for a doped mullite. Nevertheless, works of this kind are not frequent in the literature. In the scope of this project a series of powdered mullite samples doped with Cr, Zn, Ni, Co, a series of Sb doped SnO_2 samples, and a series of Sn doped In_2O_3 samples will be prepared by sol-gel techniques. Crystal structure of each sample will be solved by means of the Rietveld method. The measurements of thermal expansion and of electrical conductivity will be performed in the next stage of investigation, and the results will be correlated with the structure. The new fundamental knowledge about the doping mechanism is expected. In the scope of planned investigations the crystallization kinetics of mullite formation from diphasic gels in the system Al_2O_3 - SiO_2 have been examined. The phases present in the system and the particle sizes (of nm value) were studied using X-ray diffraction (XRD) and transmission electron microscopy (TEM). It was noticed that 2:1 mullite ($2\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$) is formed first, at ~ 1200 °C, which subsequently converts further into 3:2 mullite ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$) at higher temperatures. This process is faster in precursors with smaller particle sizes. The samples of mullite with 2, 4, 6 and 8 mol% Cr_2O_3 were prepared, and examined by XRD. The samples of chromium doped mullite were isostructural with pure mullite, space group

Pbam. The unit-cell parameters increased as the doping level increased. The Rietveld method was performed to refine the crystal structure of the doped samples. It was found that Cr^{3+} ions substitute for Al^{3+} in the AlO_6 octahedra, and also occupy specific interstitial sites in the mullite structure. Electron paramagnetic resonance measurements (EPR) of doped samples confirmed that Cr^{3+} ions substitute for Al^{3+} in the AlO_6 octahedra of mullite structure, and also incorporate in the octahedrally coordinated interstices in the structural channels along the *c*-axis.

The influence on antimony doping on the SnO_2 structure has been studied. A series of Sb-doped SnO_2 samples, with doping levels 3.1, 6.2, 11.9 and 14 at% Sb, has been prepared and characterized by XRD. The prepared samples were nanocrystalline. All samples were tetragonal, isostructural with TiO_2 (rutile), space group $P4_2/mnm$. Sb doping of SnO_2 causes the increase of unit-cell parameters. The structure of samples was refined by the Rietveld method. Crystal structure indicated that both Sb^{3+} and Sb^{5+} are substituted for Sn^{4+} in the SnO_2 structure, Sb^{3+} being dominant for the investigated doped samples. Mössbauer spectroscopy confirmed the XRD results, and also indicated that the configuration around the Sb^{3+} site includes the presence of the stereochemically active lone pair electrons.

**PROJEKT - HITRA
RAZVOJ ADAPTIVNOG TEHNOLOŠKOG POSTUPKA PRIPRAVE TALOŽNOG
KALCIJEVA KARBONATA
DEVELOPMENT OF AN ADAPTABLE TECHNOLOGICAL PROCEDURE FOR THE
PRODUCTION OF PRECIPITATED CALCIUM CARBONATE**

Voditelj projekta: dr. sc. Damir Kralj

Tel: ++385 1 4561 004 e-mail: kralj@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Vesna Babić-Ivančić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Ljerka Brečević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Jasminka Kontrec, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Damir Kralj, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Suradnici iz druge ustanove:

Jelena Perić, doktorica znanosti, redoviti profesor, Kemijsko-tehnološki fakultet, Sveučilište u Splitu

Nenad Kuzmanić, doktor znanosti, docent, Kemijsko-tehnološki fakultet, Sveučilište u Splitu

Joško Jelaska, viši laborant, Kemijsko-tehnološki fakultet, Sveučilište u Splitu

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj je predloženih istraživanja razviti postupak pripreme taložnog kalcijeva karbonata (TKK), korištenjem vapna i ugljikova dioksida kao osnovnih sirovina, u kojem bi, uz poznavanje kinetičkih, termodinamičkih i hidrodinamičkih čimbenika, te mijenjanjem procesnih parametara, bilo moguće kontrolirati fizikalno-kemijska svojstva taloga. Od tih svojstava svakako su najvažniji mineraloški sastav, raspodjela veličine čestica taloga i njihova morfologija. Predviđeno je primarna istraživanja obaviti u laboratorijskom mjerilu s kemikalijama analitičke čistoće, a u kasnijoj fazi prijeći na rad u većem mjerilu s prirodnim vapnencem i kemikalijama tehničke čistoće. U završnoj bi fazi vođenje procesa trebalo u najvećoj mogućoj mjeri automatizirati, a bude li to moguće, razviti i kontinuirani postupak. Započeti su eksperimenti u homogenom sustavu, $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-H}_2\text{CO}_3$, $20 < (t/^\circ\text{C}) < 100$, i suspenziji vapnenog mlijeka, $\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{s})\text{-CO}_2$, $20 < (t/^\circ\text{C}) < 100$, za izradu taložnih dijagrama kalcijeva karbonata.

Research programme and results:

The aim of the proposed investigations is to develop a procedure for preparation of precipitated calcium carbonate (PCC), in which, by using kinetic, thermodynamic and

hydrodynamic factors and by changing process parameters, the physical chemical properties of precipitate (mineralogical composition, particle size distribution and morphology) are controlled. The basic precipitation components will be lime and carbon dioxide. The initial investigations are anticipated to be held in the laboratory scale equipment using analytical grade chemicals and the later ones to involve higher laboratory scale equipment and the use of limestone and technical grade chemicals. In the final phase of the project, the introduction of automation in the process and, if possible, the development of a continuous process is anticipated.

The experiments in homogeneous system, $\text{Ca(OH)}_2\text{-H}_2\text{CO}_3$, $20 < (t/^\circ\text{C}) < 100$, and in slaked lime, $\text{Ca(OH)}_2(\text{s})\text{-CO}_2$, $20 < (t/^\circ\text{C}) < 100$, relating to the construction of calcium carbonate precipitation diagrams, have been started.

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Babić-Ivančić, Vesna; Kontrec, Jasminka; Kralj, Damir; Brečević, Ljerka. Precipitation diagrams of struvite and dissolution kinetics of different struvite morphologies. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 1; 89-106.
2. Bosnar, Sanja; Subotić, Boris. Kinetic analysis of crystal growth of zeolite A. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 3; 663-881.
3. Čulin, Jelena; Frka, Sanja; Andreis, Mladen; Šmit, Ivan; Veksli, Zorica; Anžlovar, Alojz; Žigon, Majda. Motional heterogeneity of segmented polyurethane-polymethacrylate mixtures: an influence of functional groups concentration. // *Polymer*. 43 (2002), 14; 3891-3899.
4. Cvijetić, Selma; Furedi-Milhofer, Helga; Babić-Ivančić, Vesna; Tucak, Antun; Galić, Josip; Dekanić-Ozegović, Darinka. Bone mineral density loss in patients with urolithiasis: a follow-up study. // *Archives of medical research*. 33 (2002), 2; 152-157.
5. Gržeta, Biserka; Ristic, Mira; Nowik, Israel; Music, Svetozar. Formation of nanocrystalline magnetite by thermal decomposition of iron choline citrate. // *Journal of alloys and compounds*. 334 (2002); 304-312.
6. Gržeta, Biserka; Tkalčec, Emilija.; Goebbrt, C.; Takeda, M.; Takahashi, M.; Nomura, K.; Jakšić, Milko. Structural studies of nanocrystalline SnO_2 doped with antimony: XRD and Mossbauer spectroscopy. // *Journal of physics and chemistry of solids*. 63 (2002); 765-772.
7. Gržeta, Biserka. Personal reflections on the past, the present and the future of crystallography on the occasion of the 125-year anniversary of *Zeitschrift für Kristallographie*. // *Zeitschrift für Kristallographie*. 217 (2002), 7-8; 313.
8. Knezević, Alena; Tarle, Zrinka; Meniga, Andrej; Šutalo, Jozo; Pichler, Goran; Ristić, Mira. Photopolymerization of composite resins with plasma light. // *Journal of oral rehabilitation*. 29 (2002), 8; 782-786.

9. Kontrec, Jasminka; Kralj, Damir; Brečević, Ljerka. Transformation of anhydrous calcium sulphate into calcium sulphate dihydrate in aqueous solutions. // *Journal of crystal growth*. 240 (2002); 203-211.
10. Kontrec, Jasminka; Svetličić, Vesna. The redox change and phase transformation in monolayer films of phenothiazines. // *Electrochimica acta*. 43 (1998), 5-6; 589-598.
11. Kosanović, Cleo; Subotić, Boris; Ristič, Alenka. Structural and morphological Transformations of the (NH₄, Na)-exchanged Zeolites 4A, 13X and Synthetic Mordenite by Thermal Treatment. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 3; 783-792.
12. Kovačević, Vera; Leskovac, Mirela; Lučić, Sanja; Perrot, Hew; Šmit, Ivan. Composites of poly(acrylate) copolymer, filled with diatomaceous earth; morphology and mechanical behavior. // *Materials research innovations*. 6 (2002.), 4; 206-213.
13. Krehula, Stjepko; Popović, Stanko; Musić, Svetozar. Synthesis of acicular α -FeOOH particles at a very high pH. // *Materials letters*. 54 (2002); 108-113.
14. Lambrick, David; Blažina, Želimir; Hoon, Stephen. On magnetic properties of the DyNi_{5-x}Al_x (x= 0, 1, 1.5, 2, 2.5, 3) intermetallics. // *Journal of materials science letters*. 21 (2002), 10; 807-809.
15. Miletić, Goran; Blažina, Želimir. The electronic structure of the YNi₅, YNi₄Al and YNi₃Al₂ intermetallic compounds and their model monohydrides. // *Journal of alloys and compounds*. 335 (2002); 81-90.
16. Musić, Svetozar; Dragčević, Đurđica; Maljković, Miroslava; Popović, Stanko. Influence of chemical synthesis on the crystalization and properties of zinc oxides. // *Materials chemistry and physics*. 77 (2002), 2; 521-530.
17. Musić, Svetozar; Popović, Stanko; Maljković, Miroslava; Dragčević, Đurđica. Influence of synthesis procedure on the formation and properties of zinc oxide. // *Journal of alloys and compounds*. 347 (2002), 1-2; 324-332.
18. Musić, Svetozar; Popović, Stanko; Maljković, Miroslava; Furić, Krešimir; Gajović, Andreja. Influence of synthesis procedure on the formation of RuO₂. // *Materials letters*. 56 (2002), 5; 806-811.
19. Musić, Svetozar; Popović, Stanko; Maljković, Miroslava; Furić, Krešimir; Gajović, Andreja. Formation of RuO₂ and Ru by thermal decomposition of ruthenium(III)-acetylacetonate. // *Journal of materials science letters*. 21(14):1131-1134, 2002 Jul 15.. 21 (2002), 14; 1131-1134.
20. Planinić, Pavica; Rastija, Vesna; Širac, Siniša; Vojnović, Marija; Frkanec, Leo; Brničević, Nevenka; McCarley, Robert E. Nitrile cluster compounds [M₆X₁₂]₂(RCN)₄ (M = Nb, Ta; X = Cl, Br; R = Et, n-Pr, n-Bu). // *Journal of cluster science*. 13 (2002); 215-222.
21. Ražem, Dušan; Katušin-Ražem, Branka. Dose requirements for microbial decontamination of botanical materials by irradiation. // *Radiation physics and chemistry*. 63 (2002); 697-701.

22. Ristić, Mira; Ivanda, Mile; Popović, Stanko; Musić, Svetozar. Dependence of nanocrystalline SnO₂ particle size on synthesis route. // *Journal of non-crystalline solids*. 303 (2002), 2; 270-280.
23. Šarić, Ankica; Popović, Stanko; Musić, Svetozar. Formation of crystalline phases by thermal treatment of amorphous rhodium hydrous oxide. // *Materials letters*. 55 (2002); 145-151.
24. Štefanić, Goran; Musić, Svetozar. Factors influencing the stability of low temperature tetragonal ZrO₂. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 3; 727-767.
25. Tarle, Zrinka; Meniga, Andrej; Knežević, Alena; Šutalo, Jozo; Ristić, Mira; Pichler, Goran. Composite conversion and temperature rise using a conventional, plasma arc, and an experimental blue LED curing unit. // *Journal of oral rehabilitation*. 29 (2002), 7; 662-667.
26. Topić, Mladen; Musić, Svetozar; Ristić, Mira. Study of relaxation in Li₂Si₂O₅ by thermal stimulated depolarization current. // *Materials chemistry and physics*. 76 (2002), 3; 145-151.
27. Vojnović, Marija; Brničević, Nevenka; Bašić, Ivan; Planinić, Pavica; Giester, Gerald. The cocrystallization of the cubic [Ta₆Br₁₂(H₂O)₆][CuBr₂X₂]₁₀H₂O and triclinic [Ta₆Br₁₂(H₂O)₆]X₂trans-[Ta₆Br₁₂(OH)₄(H₂O)₂]₁₈H₂O (X = Cl, Br, NO₃) phases with the coexistence of [Ta₆Br₁₂]²⁺ and [Ta₆Br₁₂]⁴⁺ in the latter. // *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. 628 (2002); 401-408.
28. Vojnović, Marija; Jozić, Dražan; Giester, Gerald; Perić, Berislav; Planinić, Pavica; Brničević, Nevenka. Bis(tetramethylammonium)hexaaquadodeca-μ-bromo-octahydro-hexatantalum tetrabromide dihydrate. // *Acta crystallographica C*. C58 (2002); m219-m220.
29. Vojnović, Marija; Perić, Berislav; Planinić, Pavica; Giester, Gerald; Brničević, Nevenka. Hexaaquadodeca-μ-bromo-octahydro-hexatantalum bromide chloride octahydrate. // *Acta crystallographica C*. C58 (2002); i71-i73.
30. Vuković, Radivoje; Fleš, Dragutin; Šmit, Ivan; Karasz, Frank; Waddon, Allan. Smectic ordering in poly(4-maleimidocholesteryl-benzoate), poly(6-maleimidocholesteryl-hexanoate) and alternating copolymers with styrene, alpha- and beta-methylstyrene and phenylvinyl ethyl ether. // *Polymer bulletin*. 38 (1997), 3; 347-351.

Knjige i poglavlja u knjigama:

1. Brečević, Ljerka. Crystal growth kinetics and mechanisms // *Encyclopedia of Surfaces and Colloid Science* / Hubbard, Arthur (ur.). New York : Marcel Dekker, 2002. 1289-1299.
2. Ivanda, Mile; Tonejc, Anđelka; Đerđ, Igor; Gotić, Marijan; Musić, Svetozar; Mariotto, Gino; Montagna, Maurizio. Determination of nanosized particles distribution by low frequency Raman scattering: Comparison to electron microscopy // *Nanoscale Spectroscopy and its implication to Semiconductor Research* / Watanabe, Y. et al.

- (ur.).Heidelberg : Springer, 2002. 16-27.
3. Proceedings of the IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe: radiation protection and health / Obelić, Bogomil; Ranogajec-Komor, Maria; Miljanić, Saveta; Krajcar Bronić, Ines (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002.
 4. Ranogajec-Komor, Maria; Vekić, Branko. Osobna dozimetrija // Radijacijske ozljede - dijagnostika i liječenje / Dodig, D.; Ivančević, D.; Popović, S. (ur.). Zagreb : Medicinska naklada, 2002. 53-61.
 5. Strohal, Petar. Međunarodni aspekti radijacijskih ozljeda. // Radijacijske ozljede - dijagnostika i liječenje / Dodig, D.; Ivančević, D.; Popović, S. (ur.). Zagreb : Medicinska naklada, 2002. 131-134.
 6. Subotić, Boris. Nucleation and crystal growth of zeolite systems // Encyclopedia of Surfaces and Colloid Science / Hubbard, Arthur T. (ur.). New York : Marcel Dekker, 2002. 3726-3737.
 7. Vekić, Branko. Granice doza zračenja. // Radijacijske ozljede - dijagnostika i liječenje / Dodig, D.; Ivančević, D.; Popović, S. (ur.). Zagreb : Medicinska naklada, 2002. 119-124.

Ostali radovi u časopisima:

1. Garaj-Vrhovac, Vera; Kopjar, Nevenka; Ražem, Dušan; Vekić, Branko; Miljanić, Saveta; Ranogajec-Komor, Maria. Application of the alkaline comet assay in biodosimetry: assessment of in vivo DNA damage in human peripheral leukocytes after a gamma radiation incident. // Radiation protection dosimetry. 98 (2002), 4; 407-416.
2. Miljanić, Saveta; Ranogajec-Komor, Maria; Knežević, Željka; Vekić, Branko. Main dosimetric characteristics of some tissue-equivalent TL detectors. // Radiation protection dosimetry. 100 (2002), 1-4; 437-442.
3. Turković, Aleksandra; Radmanović, Kristijan; Pucić, Irina; Crnjak Orel, Zorica. Impedancijska, IR, Ramanova spektroskopija i diferencijalna pretražna kalorimetrija nanokompozitnog (PEO)₈ZnCl₂ polielektrolita. // Strojarstvo. 44 (2002) 3-6;203-209.

Radovi u zbornicima skupova:

1. Garaj-Vrhovac, Vera; Kopjar, Nevenka; Ražem, Dušan; Vekić, Branko; Miljanić, Saveta; Ranogajec-Komor, Maria. Application of the alkaline Comet assay and the analysis of structural chromosome aberrations in assessment of genetic damage after accidental exposure to ionising radiation. // Proceedings of IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe - Radiation Protection and Health / Obelić, B. et al. (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002. 3p-15.
2. Knežević, Željka; Miljanić, Saveta; Ranogajec-Komor, Maria; Vekić, Branko; Štuhec, Matjaž; Lakovič, Gorazd; Martinčić, Rafael. Response of new TLDs to medium and low energy X-rays. // Proceedings of IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe - radiation protection and health / B. et al. (ur.). Zagreb :

- Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002. 7p-09.
3. Kontrec, Jasminka; Kralj, Damir; Brečević, Ljerka. Removal of metal ion impurities from calcium sulphate using liquid membranes // Chemical engineering transactions. Volume 1. Industrial crystallization '02 / Chianese, Angelo (ur.). Milano : AIDIC Servizi S.r.l., 2002. 1293-1298
 4. Kralj, Damir; Kontrec, Jasminka; Brečević, Ljerka. Precipitation of calcium carbonate from calcium hydroxide and carbonic acid solutions // Chemical engineering transactions. Volume 1. Industrial crystallization '02 / Chianese, Angelo (ur.). Milano : AIDIC Servizi S.r.l., 2002. 287-291
 5. Kraljević, Petar; Šimpraga, Miljenko; Miljanić, Saveta; Vilić, Marinko. Effect of low dose gamma radiation upon some biochemical indicators in blood plasma of chickens. // Proceedings of IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe - radiation protection and health / Obelić, B. et al. (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002. 3p-12.
 6. Landek, Goran; Pucić, Irina; Matošević, Erle. Otpuštanje pigmenata iz obojenih PVC filmova u toluenu // Polimerni materijali i dodatci polimerima / Čatić, Igor (ur.). Zagreb : Društvo za plastiku i gumu, 2002. 75-81
 7. Milković, Đurđica; Ranogajec-Komor, Maria; Žagar, Leo; Žagar, Iva; Zrinjšćak, I. Protocol of radiographic examination of children in order to improve the radiation protection. // Proceedings of IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe - radiation protection and health / Obelić, B. et al. (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002. 4p-01.
 8. Radonjić, Gregor; Šmit, Ivan. Modifikacija izotaktičnega polipropilena z blokkopolimerom SEP // Zbornik referatov s posvetovanja/ Slovenski kemijski dnevi 2002, 1. del / Glavič, Peter; Brodnjak-Vončina, Darinka (ur.). Maribor, Slovenija : Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2002. 355-362.
 9. Ranogajec-Komor, Maria; Klemic, Gladys; Uray, Istvan. Thermoluminescence dosimetry in environmental monitoring. // Proceedings of IRPA Regional Congress on Radiation Protection in Central Europe - radiation protection and health / Obelić, B. et al. (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2002. 7c-o1u.
 10. Ranogajec-Komor, Maria; Vinceković, Marko; Knežević, Željka; Miljanić, Saveta. Infuence of thermal annealing on the characteristics of different Al₂O₃ thermoluminescence dosimeters. // Towards harmonisation of radiation protection in Europe / D'Alberti, Francesco; Osimani, Celso (ur.). Firenze : AIRP, IRPA, EC, 2002. P222-1-10.
 11. Subotić, Boris; Aiello, Rosario; Bronić, Josip; Testa, Flaviano. Modeling of crystal growth at early stages of analcime synthesis from clear solutions // Impact of zeolites and other porous materials on the new technologies at the beginning of the new millenium - Proceedings of the 2nd FEZA (Federation of the European Zeolite Associations) Conference: studies in surface science and catalysis, Vol. 142A / Aiello, Rosario; Giordano, Girolamo; Testa, Flaviano (ur.). Amsterdam: Elsevier, 2002. 423-430

Diplomski radovi:

1. Krpan, Katarina. Ovisnost odziva termoluminescentnih dozimetara o energiji rentgenskog zračenja. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 29.10.2002., 62 str., Voditelj: Vojković, Vlasta.
2. Landek, Goran. Otpuštanje pigmenata iz obojenih PVC filomva u toluenu. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 26.4.2002., 56 str., Voditelj: Veksli, Zorica.
3. Vinceković, Marko. Utjecaj termičke obrade na svojstva različitih Al₂O₃ termoluminescentnih detektora. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 21.5.2002., 50 str., Voditelj: Vojković, Vlasta.

Magistarski radovi:

1. Miletić, Goran. Međudjelovanje Hauckeovih intermetalnih spojeva i vodika. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 7.2.2002, 68 str., Voditelj: Blažina, Želimir.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

Šorgić, B.: Impresije iz Japana, Seminar Zavoda za kemiju materijala, 18.1.2002.
Trojko, R.: Identifikacija spojeva termičkim metodama analize, 24.5.2002.
Pucić, I.: Umrežavanje i tekući prijelazi u nezasićenim poliesterskim smolama, 27.5.2002.
Šorgić, B.: Međumetalni spojevi, kristalna struktura i reakcija s vodikom, 3.6.2002.
Katušin-Ražem, B.: Fizičko kemijski učinci ionizirajućeg zračenja u bioorganskim tvarima i njihove primjene, 6.6.2002.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

Miljanić, S.: Chemical dosimetry system for radiation accidents, Commissariat à l'Energie Atomique, Valduc, Dijon, Francuska, 17.6.2002.
Ranogajec-Komor, M.: Neutron dosimetry, US Department of Energy, Environmental Measurements Laboratory (EML), New York, SAD, 20.11.2002.
Mihaljević, B.: Radijacijske tehnologije u postupcima pročišćavanja tehnoloških otpadnih voda, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb, 25.11.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

Cobalt, A.: Institut za nuklearnu kemiju, Warszawa, Poljska, 16.9.-15.11.2002.
Štefanić, G.: Department of Physics and Astronomy, University of Denver, Denver, Colorado, SAD, 1.10.2002.-30.9.2003.

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje:

Blažina, Ž.: Manchester Metropolitan University, Manchester, Velika Britanija, 5.3.-15.3.2002.
Miljanić, S.; Vekić, B.: Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), Braunschweig, Njemačka, 6.4.-20.4.2002.
Miljanić, S.: SILENE Accident Dosimetry Intercomparison Exercise Organised jointly by the French Institute for Nuclear Protection and Safety (IPSN), and the OECD Nuclear Energy Agency (NEA), Dijon, Francuska, 10.6.-21.6.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

6th INTERNATIONAL CONFERENCE ON INORGANIC CHEMISTRY

Munchen, Njemačka, 7-10.4.2002.

Sudionici: Brničević, N.

Prilog:

Brničević, N.; Vojnović, M.; Planinić, P.; Bašić, I.; Perić, B. The hexanuclear tantalum halide clusters with differently charged cluster units, poster

9. MEĐUNARODNI SASTANAK "VAKUMSKA ZNANOST I TEHNIKA"

Trakošćan, Hrvatska, 15.5.2002.

Sudionica: Pucić, I.

Prilog:

Pucić, I.; Posedel, D.; Turković, A.; Crnjak Orel, Z. Diferencijalna pretražna kalorimetrija, impedancijska spektroskopija, IR, Raman spektroskopija (PEO)₈ZnCl₂ polielektrolita.

8th EUROPEAN POWDER DIFFRACTION CONFERENCE

Uppsala, Švedska, 23.5.-26.5.2002.

Sudionica: Gržeta, B.

Prilog:

Gržeta, B.; Medaković, D.; Popović, S. New method for the estimation of magnesium fraction in magnesian calcite, pozvano predavanje.

7th EUROPEAN SYMPOSIUM ON POLYMER BLENDS

Lyon – Villeurbanne, Francuska, 27.5.-29.5.2002.

Prilozi:

Denac, M.; Musil, V.; Šmit, I.; Ranogajec, F. Mechanical and morphological properties of modified PP/SEP and PP/SBS blends, poster

Radonjić, G.; Šmit, I. Phase morphology and mechanical properties of iPP/aPS blends compatibilized by SEP block copolymer, poster

3. KONGRES HRVATSKOG DRUŠTVA RADIOLOGA

Split, Hrvatska, 5-8.6.2002.

Prilog:

Brnić, Z.; Vekić, B.; Hebrang, A. Izloženost dojke rentgenskom zračenju kod radioloških pretraga i mogućnosti smanjivanja doze zračenja, predavanje

14th SIS SURFACTANTS IN SOLUTION SYMPOSIUM

Barcelona, Španjolska, 9-14.6.2002.

Prilog:

Sikirić, M.; Šmit, I.; Tušek-Božić, Lj.; Primožić, I.; Filipović-Vinceković, N. Solid state transitions of dissymmetric gemini surfactants, poster

ELEVENTH SLOVENIAN-CROATIAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING

Bohinj, Slovenija, 27-30.6.2002.

Sudionici: Kosanović, C.; Mužić, A.; Gržeta, B.; Štefanić, G.; Krehula, S.

Prilozi:

Gržeta, B.; Tkalčec, E.; Ivanković, H.; Noethig-Laslo, V. Structural study of chromium doped mullite, predavanje

Janjatović, I. Gržeta, B. X-ray Rietveld analysis of the calcium-aluminate-cement clinker, predavanje

Kosanović, C.; Subotić, B.; Ristić, A.; Kranjc, E. Kinetic analysis of the formation of low-carnigieite from Zeolite Na-A [LTA], predavanje

Mužić, A.; Bronić, J.; Subotić, B. Preinvestigation of the synthesis of the ZA small crystals from clear solutions, predavanje

Musić, S.; Krehula, S.; Popović, S.; Skoko, Ž. Some factors influencing forced hydrolysis of FeCl₃ solutions, predavanje

Perić, B.; Leban, I.; Miljak, M.; Brničević, N. One-dimensional magnetism in [Ta₆Cl₁₂(CH₃OH)₆]BR₃ and [(TA₆Cl₁₂)Cl(H₂O)₅][CdBr₄]-6H₂O with possible merohedral twinning in the latter, predavanje

Popović, S.; Gržeta, B.; Skoko, Ž. Peculiar diffraction effects in Al-Zn Alloys, predavanje

2nd INTERNATIONAL CONFERENCE ON POLYMER MODIFICATION, DEGRADATION AND STABILISATION

Budimpešta, Mađarska, 30.6.-4.7.2002.

Sudionici: Ranogajec, F.

Prilog:

Denac, M.; Musil, V.; Šmit, I.; Ranogajec, F. Effect of gamma irradiation on mechanical properties and morphology of PP/talc composites, predavanje

10th "TIHANY" SYMPOSIUM ON RADIATION CHEMISTRY

Sopron, Mađarska, 31.8.-5.9.2002.

Sudionici: Katušin-Ražem, B.; Mihaljević, B.; Pucić, I.; Ranogajec, F.; Ranogajec-Komor, M.; Ražem, D.

Prilog:

Katušin-Ražem, B.; Ražem, D.. Availability of oxygen in radiation-induced peroxidation of unsaturated fatty acids, poster

Mihaljević, B.; Ražem, D.. Influence of the medium on the reaction rate of the t-butoxy radical with iron(II), poster

Ranogajec-Komor, M.; Miljanić, S.; Blagus, S.; Knežević, Ž.; Osvay, M. Selective assessment of fast neutron and gamma components using TLD activation, predavanje

2nd FEZA (FEDERATION OF THE EUROPEAN ZEOLITE ASSOCIATIONS) CONFERENCE

Taormina, Italija, 1-5.9.2002.

Sudionici: Bronić, J.; Subotić, B.

Prilog:

Subotić, B.; Aiello, R.; Bronić, J.; Testa F. Modeling of crystal growth at early stages of analcime synthesis from clear solutions, poster

XXVI EUROPEAN CONGRESS ON MOLECULAR SPECTROSCOPY (XXVI EUCMOS)

Villeneuve d'Ascq, Francuska, 1-6.9.2002.

Prilog:

Gajović, A.; Furić, K.; Musić, S. Raman spectroscopy of ball milling of TiO₂ and ZrO₂ to nanometric sizes, poster

INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON METAL HYDROGEN SYSTEMS, FUNDAMENTAL AND APPLICATIONS

Annecy, Francuska, 2-6.9.2002.

Sudionik: Šorgić, B.

Prilozi:

Sato, R.; Kakehashi, R.; Uchida, H.; Terao, K.; Šorgić, B.. hydriding properties of a Ti-Cr based hydrogen storage alloy, poster

Šorgić, B.; Drašner, A.; Blažina, Ž. on structural and hydrogen sorption properties of the RENi₅-XAIX (RE = Gd, Tb, Dy, Ho, Er AND Y) alloys, poster

EANM '02 CONGRESS – POSTCONGRESS SCIENTIFIC MEETING HOSPITAL PREPAREDNESS AND HANDLING OF RADIATION ACCIDENTS

Zagreb, Hrvatska, 5.9.2002.

Sudionice: Miljanić, S.; Knežević, Ž.

15th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON INDUSTRIAL CRYSTALLIZATION

Sorrento, Italija, 15-18.9.2002.

Sudionici: Kontrec, J.; Kralj, D.; Brečević, Lj.

Prilozi:

Kontrec, J.; Kralj, D.; Brečević, Lj. Removal of metal ion impurities from calcium sulphate using liquid membranes, poster

Kralj, D.; Kontrec, J.; Brečević, Lj. Precipitation of calcium carbonate from calcium hydroxide and carbonic acid solutions, poster

INTERNATIONAL WORKSHOP ON NANOCHEMISTRY

Wien, Austrija, 26.9.-28.9.2002.

Sudionica: Noethig-Laslo, V.
Prilog: Noethig-Laslo, V.; Kralj, D.; Brečević, Lj. A study of ion and molecule interactions with calcium carbonate polymorphs using Mn²⁺ ions as a paramagnetic probe, poster

SLOVENSKI KEMIJSKI DNEVI 2002

Maribor, Slovenija, 26-27.9.2002.

Sudionici: Ranogajec, F.; Šmit, I.

Prilog:

Radonjič, G.; Šmit, I. Modifikacija izotaktičnega polipropilena z blokkopolimerom SEP, predavanje

AUTUMN SCHOOL ON MATERIALS SCIENCE AND ELECTRON MICROSCOPY 2002 "PROGRESS IN ADVANCED MATERIALS SCIENCE THROUGH ELECTRON MICROSCOPY"

Berlin, Njemačka, 28.9.-3.10.2002.

Sudionici:

Prilog: Gajović, A.; Furić, K.

Gajović, A.; Furić, K.; Musić, S. Ball milling of TiO₂ and ZrO₂, poster

MACROMOLECULES IN THE 21st CENTURY

Beč, Austrija, 7-9.10.2002.

Sudionici: Pucić, I., Ranogajec, F.

EUROPEAN INTERNATIONAL RADIATION PROTECTION ASSOCIATION (IRPA) CONGRESS 2002

Firenze, Italija, 8-11.10.2002.

Sudionici: Katušin-Ražem, B.; Knežević, Ž.; Miljanić, S.; Ranogajec-Komor, M.; Ražem, D., Vekić, B.

Prilog:

Brnić, Z.; Vekić, B.; Hebrang, A.; Anić, P. Efficacy of breast shielding during CT of the head, poster

Katušin-Ražem, B.; Mihaljević, B.; Ražem, D. Identification of irradiated foods prospects for post-irradiation estimate of irradiation dose in irradiated dry egg products, poster.

Kovačević, N.; Vrtar, M.; Vekić, B.; Knežević, Ž. A simple calibration method for Ru106-Rh106 eye applicators, poster

Milković, Đ.; Žagar, L.; Nogalo, B.; Ranogajec-Komor, M. Advantages of in-time radiological diagnosis: minimum dose and less respiratory and surgical complications, poster

Miljanić, S.; Knežević, Ž.; Krpan, K.; Štuhec, M.; Vekić, B.; Ranogajec-Komor, M. Energy dependence characteristics of new TLDs in terms of Hp(10) values, poster

Ranogajec-Komor, M.; Vinceković, M.; Knežević, Ž.; Miljanić, S. Influence of thermal annealing on the characteristics of different Al₂O₃ thermoluminescence dosimeters, poster

1st WORKSHOP OF THE COST CHEMISTRY ACTION D 27 - "ORIGIN OF LIFE AND EARLY EVOLUTION"

Ravello, Italija, 17-20.10.2002.

Sudionica: Noethig-Laslo, V.

Prilog:

Noethig-Laslo, V.; Kralj, D.; Brečević, Lj. A study of ion and molecule interactions with calcium carbonate polymorphs using Mn²⁺ ions as a paramagnetic probe, poster

SAVJETOVANJE "POLIMERNI MATERIJALI I DODACI POLIMERIMA"

Zagreb, Hrvatska, 14-15.11.2002.

Sudionici: Pucić, I.; Ranogajec, F.

Prilog:

Landek, G.; Pucić, I.; Matošević, E. Otpuštanje pigmenata iz obojenih pvc filmova u toluenu,

predavanja

GODIŠNJI SASTANAK HRVATSKOG DRUŠTVA ZA ELEKTRONSKU MIKROSKOPIJU
Osijek, Hrvatska, 13.12.2002.

Sudionici: Babić-Ivančić, V.; D.; Brečević, Lj.; Kontrec, J.; Kralj, D.; Njegić, B.

Prilog:

Babić-Ivančić, V.; Kralj, D.; Brečević, Lj. Svjetlosna mikroskopija, povezanost morfologije i sastava kristala, poster

STANDARDS AND CODES OF PRACTICE IN MEDICAL RADIATION DOSIMETRY

Beč, Austrija, 25-28.11.2002.

Sudionici: Miljanić, S.; Vekić, B.

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija:

Gržeta, B.: član International Centre for Diffraction Data, Newtown Square, SAD, 2002; član triju tehničkih podkomiteta ove organizacije: Ceramics Subcommittee, Metals and Alloys Subcommittee, X-ray Diffraction Methods Subcommittee; 2002.

Ranogajec-Komor, M.: "voting member" u European Radiation Dosimetry Group – EURADOS, od 2001. Generalna skupština, Braunschweig, Njemačka, 23.1.-25.1.2002.

Ranogajec-Komor, M.: član u International Solid State Dosimetry Organization, drugi mandat: 2001-2004. ISSDO Meeting, Yale University, New Haven, CT, SAD, 17.11.-18.11.2002.

Ranogajec-Komor, M.: član Znanstvenog odbora European IRPA Regional Congress on Radiation Protection, Firenze, Italija, 8-11.10.2002.

Ražem, D.: predsjednik radne skupine Q za kodifikaciju standardnog postupka za etanol-klorbenzenski dozimetar American Society for Testing and Materials (ASTM) pododbora E-10.01 za dozimetriju visokih doza Odbora E-10 za nuklearnu tehnologiju i primjene.

Ražem, D.: predstavnik Republike Hrvatske u International Consultative Group on Food Irradiation (ICGFI); 19th Annual Meeting of ICGFI, Vienna, Austrija, 12-14.11.2002.

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Blažina, Ž.: Magnetic and thermodynamic characterisation of hydrogen storage materials for clean energy systems. Bilateralna britansko-hrvatska suradnja, projekt ALIS 050, Manchester, Velika Britanija.

Miljanić, S.: Unapređenje kvalitete dozimetrije fotonskog zračenja u području doza od μGy do kGy . Bilateralna hrvatsko-slovenska suradnja između Instituta "Ruđer Bošković", Zagreb, i Instituta "Jozef Štefan", Ljubljana.

Ranogajec, F.: Investigation of the effect of high-energy radiation on polymeric systems. Bilateralni hrvatsko-mađarski projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Institute of Isotopes and Surface Chemistry, Budimpešta (putem Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Mađarske akademije znanosti).

Ranogajec-Komor, M.: Dosimetry in medicine and environmental monitoring. Bilateralni hrvatsko-mađarski projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Institute of Isotopes and Surface Chemistry, Budimpešta (putem Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Mađarske akademije znanosti).

Ranogajec-Komor, M.: Investigation of solid state dosimeters. Bilateralni hrvatsko-mađarski projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Institute of Isotopes and Surface Chemistry, Budimpešta (putem Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Mađarske akademije znanosti).

Ražem, D.: Development and intercomparison studies of dosimetry systems for radiation process control at industrial gamma and electron irradiation facilities. Bilateralni hrvatsko-mađarski projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Institute of Isotopes and Surface Chemistry, Budimpešta (putem Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Mađarske akademije znanosti).

Šmit, I.: Modificirani polimerni materijali. Bilateralna hrvatsko-slovenska suradnja između Instituta "Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska i Inštituta za tehnologiju, EPF, Univerza v Mariboru, Maribor, Slovenija.

Vekić, B.: Unapređenje mjeriteljskog sustava Republike Hrvatske. Standardni dozimetrijski laboratorij. Ugovor između Vlade Republike Hrvatske i Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig, Njemačka.

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković

Denac, M., Inštitut za tehnologiju, EPF, Univerza v Mariboru, Maribor, Slovenija, 15.-17.5.2002.

**ZAVOD ZA MOLEKULARNU GENETIKU
DEPARTMENT OF MOLECULAR GENETICS**

Dr. sc. Đurđica Ugarković, predstojnica Zavoda
Tel. ++385 1 4561 083, fax: ++385 1 4561 177

e-mail: ugarkov@rudjer.irb.hr

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za mikrobijalnu genetiku, dr. sc. Erika Salaj-Šmic, voditeljica laboratorija
Laboratorij za molekularnu mikrobiologiju, dr. sc. Mirjana Petranović, voditeljica laboratorija
Laboratorij za molekularnu genetiku, dr. sc. Vera Gamulin, voditeljica laboratorija
Laboratorij za elektronsku mikroskopiju, dr. sc. Nikola Ljubešić, voditelj laboratorija
Laboratorij za molekularnu genetiku eukariota, dr. sc. Đurđica Ugarković, voditeljica laboratorija
Laboratorij za eksperimentalnu kancerologiju, dr. sc. Ivica Rubelj, voditelj laboratorija
Laboratorij za genotoksične agense, dr. sc. Maja Osmak, voditeljica laboratorija
Laboratorij za neurokemiju i molekularnu neurobiologiju, dr. sc. Branimir Jernej, voditelj laboratorija
Laboratorij za biocenotska istraživanja, dr. sc. Andrija Željko Lovrić, voditelj laboratorija
Laboratorij za gensku regulaciju, dr. sc. Marija Mary Sopta, voditeljica laboratorija
Laboratorij za kemijsku biologiju, dr. sc. Volker Magnus, voditelj laboratorija
Tajništvo, Marija Kober

U okviru Zavoda za molekularnu genetiku do 30.6.2002. provodila su se istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

**STRUKTURA, FUNKCIJA I EVOLUCIJA STANIČNOG GENOMA
THE STRUCTURE, FUNCTION AND EVOLUTION OF THE CELL GENOME**

Direktorica programa: dr. sc. Đurđica Ugarković

Teme u sastavu programa:

Uloga rekombinacije u popravku DNA i stabilnosti plazmida, dr. sc. Erika Salaj-Šmic, voditeljica teme
Regulacija rekombinacije i rekombinacijskog popravka DNA, dr. sc. Mirjana Petranović, voditeljica teme
Studij filogenetski sačuvanih i industrijski važnih gena, dr. sc. Vera Gamulin, voditeljica teme
Struktura i funkcija fotosintetskog aparata, dr. sc. Nikola Ljubešić, voditelj teme
Organizacija i evolucija eukariotskog genoma, dr. sc. Đurđica Ugarković, voditeljica teme
Molekularni mehanizmi karcinogeneze, dr. sc. Branko Brdar, voditelj teme
Stanični odgovor na genotoksične agense, dr. sc. Maja Osmak, voditeljica teme
Inicijacija transkripcije kod eukariota, dr. sc. Marija Mary Sopta, voditeljica teme
Genetika i dinamika bioaktivnih molekula, dr. sc. Volker Magnus, voditelj teme

Teme izvan sastava programa:

Neurokemija sinaptičke transmisije, dr. sc. Branimir Jernej, voditelj teme
Obalni i morski fitoindikatorji jadranskih otoka i primorja, dr. sc. Andrija-Željko Lovrić, voditelj teme

Program rada:

U Laboratoriju za mikrobijalnu genetiku proučavana je uloga enzima RecBCD u metabolizmu DNA bakterije *Escherichia coli*. RecBCD enzim sudjeluje u homolognoj genetičkoj rekombinaciji, popravku DNA, vijabilnosti stanice i razgradnji strane DNA kao i DNA domaćina. Poznato je da je popravak dvolančanih lomova nakon γ -zračenja u divljem tipu bakterije *Escherichia coli* lizogene za λ *cl857 red3* mnogo učinkovitiji u prisustvu proteina Gam λ bakteriofaga. Za otpornost na zračenje ovisno o proteinu Gam,

fenomen koji je otkriven u ovom laboratoriju, potrebno je međudjelovanje RecBCD enzima i proteina Gam. Proučavan je utjecaj mutacije u nanošenju proteina RecA (*recB*^{D1080A} mutanta) na konjugacijsku rekombinaciju u prisustvu proteina Gam. Rezultati pokazuju da sposobnost nanošenja proteina RecA nije inhibirana kompleksom RecBCD-Gam.

Laboratorij za molekularnu mikrobiologiju proučava gene, enzime i molekularne procese uključene u regulaciju rekombinacije i popravka DNA. Istraživanja su usmjerena na proučavanje uloge RuvABC resolvaze bakterije *E. coli* u rekombinacijskom popravku DNA. Ustanovili smo da je u prisutnosti mutacije *sbcB15*, RuvABC resolvaza nužna za rekombinacijski popravak blokirane replikacijske viljuške, te da mutirani protein SbcB ima važnu ulogu u ovom procesu.

Na osnovu istraživanja gena/proteina morskih spužava (Porifera), najjednostavnijih višestaničnih životinja, a koja se provode u Laboratoriju za molekularnu genetiku, dobiveni su važni podaci o: 1) složenosti genoma zajedničkog pretka svih Metazoa, 2) postanku i porijeklu pojedinih introna. U bakteriji *Streptomyces rimosus* je otkriven: 1) novi tip promotora koji kontrolira transkripcija gena *recA* i 2) novi tip enzima lipaze. Pretraživanjem banke gena je identificiran novi promotor ispred mnogih gena bakterija roda *Streptomyces*. Samo dvije lipaze ovog tipa su do sada pronađene u ovim bakterijama.

Proučavanje organizacije i evolucije visoko ponovljenih sekvenci DNA smještenih u centromernim i telomernim područjima, provodi se u Laboratoriju za molekularnu genetiku eukariota. Karakterizirane su satelitske DNA roda *Palorus* koje su sačuvane u nukleotidnom slijedu, uzastopnoj organizaciji jedinica ponavljanja i smještaju na kromosomima kroz dugo evolucijsko razdoblje. Sačuvanost ovih sekvenci DNA kroz evolucijsko razdoblje od oko 70 milijuna godina ukazuje na njihovo moguće funkcionalno značenje. Model evolucije satelitskih DNA zasnovan na konceptu "biblioteke" je predstavljen u preglednom članku. U suradnji s Institutom za molekularnu biologiju u Barceloni (Španjolska) analizirane su telomerne i subtelomerne sekvence kod morskih školjkaša i bodljikaša. Pokazano je kako kod ovih skupina beskralješnjaka postoje telomerni ponovljeni nizovi čija je osnovna jedinica ponavljanja identična onoj koja se smatrala specifičnom za kralješnjake, te vjerojatno predstavlja ishodišnu telomernu sekvencu.

Regulacija transkripcije putem RNA-polimeraze II osnovni je mehanizam regulacije ekspresije gena u eukariotima, a proučava se u Laboratoriju za gensku regulaciju. Osim polimeraze, u procesu transkripcije ključnu funkciju imaju opći transkripcijski faktori. Svrha istraživanja je pojašnjavanje funkcije nekoliko modelnih transkripcijskih faktora u kvascu *Saccharomyces cerevisiae*. U dosadašnjim istraživanjima je pokazano da protein retinoblastoma, pRb, može reprimirati transkripciju u stanicama kvasca. Također su definirani faktori (Rpd3 i Sin3, te Cln3) koji su potrebni za represiju putem pRb *in vivo*. Prethodnim istraživanjima se utvrdilo da kvašćev protein Xtc1 stvara interakcije s kiselim aktivacijskim domenama nekoliko aktivatora transkripcije. Nastavljena su istraživanja funkcije proteina Xtc1 u regulaciji transkripcije i pokazano je da posjeduje svojstva transkripcijskog represora. Pošto je ovaj protein uključen i u regulaciju fiziologije mitohondrija u kvašćevim stanicama, istražena je i potencijalna uloga Xtc1-a u komunikaciji između jezgre i mitohondrija. U daljnjem radu će se karakterizirati funkcija kvašćevog faktora TFIIIF, čiji homolog u humanim stanicama ima ključnu ulogu u inicijaciji i elongaciji transkripcije putem RNA-polimeraze II.

Znanstveni interes Laboratorija za eksperimentalnu kancerologiju je istraživanje uloge telomera u karcinogenezi i staničnom starenju. Telomere su uključene u osnovne stanične funkcije kao što su dioba stanice, stanično starenje, besmrtnost tumorskih stanica kao i jednostaničnih eukariota. U Laboratoriju je eksperimentalno dokazano da

inhibicija Sindroma naglog starenja (Sudden Senescence Syndrome (SSS)) proteinom SV40 Tg reducira stanično starenje, te da SSS predstavlja ključni događaj u normalnom staničnom starenju koji je direktno povezan sa zbivanjima na telomerama.

Stanični odgovor na fizikalne, kemijske i biološke agense se proučava u Laboratoriju za genotoksične agense. Stanični odgovor na ove agense je vrlo složen proces koji ovisi o tipu agensa, kao i o tipu stanice. Glavni rezultati ostvareni u protekloj godini su slijedeći: a) aktivacija MAP kinaze je važna u odgovoru tumorske stanice na cisplatin, a vjerojatno i za rezistenciju na cisplatin, b) specifični spojevi usmjereni na glutation mogu reducirati rast tumorskih stanica, c) skraćenje dužine adenovirusnog vlakna blago utječe na njegovo vezivanje, ali nije praćeno uspješnim ulaskom.

U Laboratoriju za neurokemiju i molekularnu neurobiologiju nastavljena su neurokemijska, molekularno-genetička istraživanja, kao i proučavanje ponašanja na originalnom eksperimentalnom modelu životinja s promijenjenom serotoninском homeostazom: "Wistar-Zagreb 5HT". Također su napravljene neurokemijske i molekularno genetičke studije serotonergičnih parametara u zdravoj populaciji kao i kod psihijatrijskih pacijenata. Nastavljeno je također proučavanje hidrodinamike cerebrospinalnog likvora.

U Laboratoriju za elektronsku mikroskopiju proučava se struktura i funkcija plastida i citoskeleta. Kombinacijom genetičkih metoda i mikroskopskih analiza došlo se do važnih podataka o strukturi i dinamici aktinskog citoskeleta kod modelnog organizma *Dictyostelium*. U suradnji s grupom W. Baumester-a s Max-Planck Instituta u Martinsried-u uspješno je primjenjena krioelektronska tomografija za vizualizaciju molekularnog kompleksa aktinskog citoskeleta u stanicama vrste *Dictyostelium*. Po prvi put je vizualizirana makromolekularna arhitektura unutar eukariotske stanice s razlučivanjem od 5 do 6 nanometara. Tijekom traženja komponenti uključenih u kloroplastnu diobu i biogenezu, otkriven je novi protein biljke *Arabidopsis* koji posjeduje jedinstvenu molekularnu strukturu. Protein nazvan ARTEMIS prema *Arabidopsis thaliana* envelope membrane integrase posjeduje karboksi-terminalnu domenu koja je u sekvenci slična YidC, Oxa1 i Alb3 proteinima. Ovi proteini su važni za integraciju membranskih proteina pri izlučivanju proteina kod bakterija, unosu proteina u mitohondrije kod kvasca, odnosno za formiranje fotosintetskog aparata kod biljaka.

U Laboratoriju za kemijsku biologiju istraživanja strukturne osnove fiziološke aktivnosti su bila usmjerena na biljne hormone. Veći broj drugih biomolekula je također bio proučavan spektroskopskim metodama (osobito nuklearnom magnetskom rezonancijom).

U Laboratoriju za biocenotska istraživanja nastavilo se s terenskim proučavanjem morskih algi i halofita duž jadranske obale i otoka. Detaljna ekološka karta vegetacijskih staništa Hrvatske je gotovo završena u GIS elektronskom obliku. Proučavanje gljiva je rezultiralo registracijom 78 novih taxona hrvatske mikoflore.

Research programme:

Laboratory of Microbial Genetics has studied the role of the RecBCD enzyme in the processes of DNA metabolism in *Escherichia coli*. RecBCD enzyme participates in homologous genetic recombination, DNA repair, cell viability and degradation of foreign and damaged host DNA. It is well known that the repair of double strand breaks after γ -irradiation in wild type *Escherichia coli* lysogenic for λ *cl857 red3* is more efficient when λ Gam protein is present. Gam dependent radioresistance, a phenomenon discovered in this laboratory, requires the interaction of RecBCD enzyme with the Gam protein of phage λ . The effect of the RecA loading- deficient *recB* (*recB*^{D1080A}) mutation on conjugational recombination in the presence of the Gam protein has been studied. The

obtained results show that RecA loading activity is not inhibited by the RecBCD-Gam complex.

From the investigation of genes/proteins in marine sponges (Porifera), the most simple extant multicellular animals, studied in the Laboratory for Molecular Genetics, we obtained valuable (bio)information about: (1) the complexity of the genome in the ancestral organism, common to all metazoan animals and (2) the origin and ancestry of certain introns. The findings point to the sponges as an excellent model organism for molecular evolutionary studies. In *Streptomyces rimosus* we discovered: (1) a new type of the promoter, that controls transcription of the *recA* gene and (2) a new type of the lipase. After the search of genomic databases we identified this new promoter in front of many *Streptomyces* genes. Only two lipases of this type are so far reported from the bacteria.

Study of organization and evolution of highly repetitive DNA sequences present in the centromeric and telomeric regions of the chromosomes has been performed in the Laboratory for Molecular Genetics of Eukaryotes. Characterization of satellite DNAs from insect genus *Palorus* revealed their conservation in nucleotide sequence, tandem organization and chromosome localization for long evolutionary periods. Conservation of the satellites through evolutionary period of around 70 million years indicates their potential functional significance. Model of satellite DNA evolution based on "library" concept was presented and discussed in the review article. In collaboration with Institute for Molecular Biology in Barcelona telomeric and subtelomeric sequences have been characterized in marine molluscs and echinoderms. It has been shown that telomeric motif characteristic for this group of avertebrate species is identical to those specific for vertebrates and probably represents an ancient telomeric sequence.

Gene Regulation Laboratory is broadly concerned with the regulation of gene expression in eukaryotes. The process of gene transcription in higher eukaryotes is a complex process involving a variety of protein factors in addition to RNA polymerase II, the enzyme responsible for transcribing protein coding genes. Our research currently centres on questions regarding the fundamental mechanisms of gene transcription in eukaryotic cells where we use the yeast *Saccharomyces cerevisiae* as a model system. One aspect of our work centres on the function and regulation of the general initiation factor TFIIF. This factor is essential to the initiation and elongation phases of transcription by RNA polymerase II. Since transcriptional elongation is the major mechanistic target of the HIV Tat regulatory gene, insights into the role of TFIIF in transcriptional regulation will aid in our understanding of the mechanisms by which viruses usurp the cellular machinery. Another research theme is the intra-cellular signalling pathway which connects mitochondrial function to nuclear gene expression. Lastly, we have begun to study human transcription factors in a heterologous yeast system. The aim is to develop assays for disease related transcription factors in yeast which will aid in generating high-throughput systems for drug development.

Broad interest of Laboratory for Experimental Cancerology is to investigate role of telomeres in carcinogenesis and cell aging. Telomeres are involved in basic cell functions, such as cell division, cell aging or maintenance of immortal state of tumor cells and unicellular eukaryotes. We presented experimental evidence demonstrating that inhibition of the onset of Sudden Senescence Syndrome (SSS) by viral protein SV40 Tg, greatly reduces the appearance of senescent cells in the culture and results in an increase in the population doublings (PD) to that of the number of cell generations (CGs). This is what causes the observed lifespan extension. Our results also provide an explanation for "additional" telomere shortening during this "extended" lifespan. The results indicate SSS as the single, primary mechanism of cell senescence. We also investigated the ability of human immunodeficiency virus-1 (HIV-1) tat/nef-defective

genomes containing diphtheria toxin A chain gene (DTA) to inhibit replication of HIV in human cells. Each of the DTA-containing plasmids strongly suppressed HIV production, whereas the defective non-DTA containing plasmids did not interfere with the virus growth. This may be taken into consideration as a therapy approach to treatment of HIV infection, based on its selective and specific toxicity only to HIV infected CD4- positive cells.

Cell response to physical, chemical and biological agents is studied in the Laboratory for Genotoxic Agents. This is highly complex process that depends on the type of the damaging agent as well as on the cell status. The network of proliferation, survival and apoptotic genes will determine the fate of damaged cells. In infection with adenoviruses, fiber protein plays important role. Our main results obtained in the last year are: a) the activation of MAP kinases is important in response of tumor cells to cisplatin, and probably in resistance to this drug; b) specific compounds targeted to glutathione may reduce the growth of tumor cells, c) the shortening of adenovirus fiber length slightly influences its binding, but is not followed by successful entry.

In the Laboratory for Neurochemistry and Molecular Neurobiology further neurochemical, molecular-genetic and behavioral characterization of their original experimental model of animals with altered serotonin homeostasis-“Wistar-Zagreb 5HT rat” was performed. Also, neurochemical and molecular genetic studies of serotonergic parameters in healthy population and neuropsychiatric patients were done. Former studies on hydrodynamics of the cerebrospinal fluid (CSF) are continued focusing on the validation the model of perfusion of the CSF system using indicator substance, a method for calculation of the CSF formation, and on development of a new model of measuring the CSF formation. Laboratory for Electron Microscopy focuses on structure and function of plastids and cytoskeleton. Combination of genetic and imaging approaches resulted in important insights into several aspects of the structure and the dynamics of the actin cytoskeleton in the model organism *Dictyostelium*. In collaboration with W. Baumeister's group at the Max-Planck-Institut für Biochemie in Martinsried, cryoelectron tomography was successfully applied to image molecular complexes and ultrastructure of the actin cytoskeleton in intact *Dictyostelium* cells. For the first time, macromolecular architecture of an unperturbed environment inside eukaryotic cells was visualized at a resolution of 5 to 6 nanometers. In a search of novel components involved in chloroplast division and biogenesis, a new *Arabidopsis* protein with a unique molecular structure was discovered. The protein, called ARTEMIS for *Arabidopsis thaliana* envelope membrane integrase, has a carboxy-terminal domain that shows sequence similarity to YidC, Oxa1 and Alb3 proteins. These proteins are important for integration of membrane proteins involved, respectively, in protein secretion in bacteria, protein import to the mitochondrion in budding yeast, and assembly of the photosynthetic apparatus in plants.

In the Laboratory for Chemical Biology research on the structural basis of physiological activity was focused on plant hormones. A number of other biomolecules were studied by spectroscopic methods (in particular, Nuclear Magnetic Resonance).

In Laboratory for Biocenology the field studies of marine algae and coastal halophytes along Croatian mainland shores and Adriatic islands were done. A detailed ecological map of vegetation habitats across Croatia is mostly completed in GIS electronic form. By the intense studies of fungi across Croatia, 78 taxa new to Croatian mycoflora were registered.

ULOGA REKOMBINACIJE U POPRAVKU DNA I STABILNOSTI PLAZMIDA THE ROLE OF RECOMBINATION IN DNA REPAIR AND STABILITY OF PLASMIDS

Voditeljica teme: dr. sc. Erika Salaj-Šmic

Tel. ++385 1 4561 099 e-mail: salaj@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Krunoslav Brčić-Kostić, doktor biol. znanosti, viši asistent
Gordana Čogelja Čajo, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Damir Đermić, magistar biol. znanosti, asistent, znanstveni novak
Nella Lerš, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica
Erika Salaj-Šmic, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehničke suradnice:

Blaženka Dumić, peračica suđa (1/2 radnog vremena)
Mirjana Filipović, tehničarka
Mirela Kosinjski, tehničarka (1/3 radnog vremena)

Suradnica iz druge ustanove:

Ivana Ivančić Baće, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja,
Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb.

Program rada i rezultati na temi:

U našim istraživanjima bavimo se izučavanjem uloge enzima RecBCD u metabolizmu bakterije *Escherichia coli*. Enzim RecBCD sudjeluje u homolognoj genetičkoj rekombinaciji, popravku DNA, očuvanju vijabilnosti stanica i razgradnji vlastite i strane DNA. Popravak dvolančanih lomova nakon γ -zračenja u divljem tipu bakterija koje su lizogene s mutantom faga lambda λ *cl857 red3* je učinkovitiji ako je u bakterijama prisutan i protein Gam faga lambda. Taj fenomen nazvan Gam-inducirana radiorezistencija je posljedica interakcije između enzima RecBCD i proteina Gam. U našem radu uspoređivali smo preživljenje divljeg tipa bakterija i različitih mutanata lizogenih s fagom λ nakon prolazne temperaturne indukcije (6 min., 42°C). Glavni nalazi naših istraživanja su: 1) RecBCD-Gam put rekombinacije je sličan ali nije identičan RecBCD \ddagger putu koji djeluje u mutantu *recD*; 2) RecBCD-Gam put rekombinacije je ovisan o produktima gena *recJ*, *recQ* i *recN* a pretpostavljeno je da kompleks RecBCD-Gam zadržava sposobnost nanošenja proteina RecA na jednolančanu DNA.

Research programme and results:

We have studied the role of the RecBCD enzyme in the processes of metabolism in *Escherichia coli*. RecBCD enzyme participates in homologous genetic recombination, DNA repair, cell viability and degradation of foreign and damaged host DNA. The repair of double strand breaks after γ -irradiation in wild type *Escherichia coli* lysogenic for λ *cl857 red3* is more efficient when λ Gam protein is present. This phenomenon, called Gam Dependent Radioresistance, requires the interaction of RecBCD enzyme and Gam protein. We compared cell survival after γ -irradiation in wild type and mutant lysogens with and without induction of Gam by transient heat treatment of the cells (6 min., 42°C). The main conclusions are: 1) The RecBCD-Gam pathway of recombination repair is similar but not equivalent to RecBCD \ddagger , a pathway operating in *recD* mutants; 2) The RecBCD-Gam pathway is dependent on *recJ*, *recQ* and *recN* gene products and it is proposed that the RecBCD-Gam complex has ability to load RecA protein onto single-strand DNA.

REGULACIJA REKOMBINACIJE I REKOMBINACIJSKOG POPRAVKA DNA

REGULATION OF RECOMBINATION AND RECOMBINATIONAL DNA REPAIR

Voditeljica teme: dr. sc. Mirjana Petranović

Tel. ++385 1 46 80 945 e-mail: dina@irb.hr

Suradnici na temi:

Senka Džidić, doktorica biotehnol. znanosti, viša asistentica

Ivan Mijaković, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak

Mirjana Petranović, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Davor Zahradka, doktor biol. znanosti, viši asistent, znanstveni novak

Ksenija Zahradka, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Tehničke suradnice:

Blaženka Dumić, peračica (1/2 radnog vremena)

Mirela Kosinjski, tehničarka (2/3 radnog vremena)

Program rada i rezultati na temi:

Naša istraživanja su bila usmjerena na ulogu RuvABC rezolvaze bakterije *Escherichia coli* u procesima genetičke rekombinacije i rekombinacijskog popravka DNA. Proteinski kompleks RuvABC ima dvostruku ulogu u popravku DNA: osim što sudjeluje u postsinaptičkom razrješenju rekombinacijskih intermedijera, on također sudjeluje u uklanjanju zaustavljenih replikacijskih vilica. Pronašli smo da je u prisutnosti mutacije *sbcB15*, rezolvaza RuvABC neophodna za rekombinacijski popravak blokiranih replikacijskih vilica. Predložili smo novu ulogu proteina SbcB u ovom procesu. Naša hipoteza je da se mutirani protein SbcB veže za Hollidayeve strukture nastale reverzijom zaustavljenih replikacijskih vilica, da stabilizira te strukture i čini njihovo razrješenje izuzetno ovisnim o RuvABC rezolvazi.

Research programme and results:

Our investigations were focused on the role of *Escherichia coli* RuvABC resolvase in the processes of genetic recombination and recombinational DNA repair. It was recently shown that the RuvABC complex has a dual repair function: in addition to its well-known role in the postsynaptic resolution of recombination intermediates, it also participates in the removal of replication forks arrested at different obstacles in DNA. We found that in the presence of the *sbcB15* mutation, the RuvABC resolvase is indispensable for recombinational repair of blocked replication forks. We proposed a new role for the SbcB protein in this process. We postulate that the mutant SbcB protein binds to Holliday junctions made from stalled replication forks, stabilizes these junctions and makes their processing highly dependent on RuvABC resolvase.

**STUDIJ FILOGENETSKI SAČUVANIH I INDUSTRIJSKI VAŽNIH GENA
STUDY OF PHYLOGENETICALLY CONSERVED AND INDUSTRIALLY IMPORTANT GENES**

Voditeljica teme: dr. sc. Vera Gamulin

Tel. ++385 1 4561 115 e-mail: gamulin@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Ivan Ahel, magistar biol. znanosti, asistent, znanstveni novak

Helena Četković, magistrica biol. znanosti, asistentica

Sonja Durajlija Žinić, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Vera Gamulin, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Matija Harcet, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak
Lada Lukić, magistrica biol. znanosti, asistentica
Andreja Mikoč, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Dušica Vujaklija, doktorica biotehnol. znanosti, viša asistentica

Program rada i rezultati na temi:

Istraživanja na temi bila su usredotočena na proučavanje primarne strukture, genomske organizacije i načina ekspresije gena kod streptomiceta (posebno bakterije *Streptomyces rimosus*) i jadranskih spužava.

Na temi su u završnoj godini zaokružena i objavljena istraživanja načina transkripcije gena *recA* kod bakterije *S. rimosus*, kao i istraživanja primarne strukture gena za GDS(L) lipazu iz iste bakterije. Objavljeni su i rezultati istraživanja MAP(SAP)-kinaza p38 i JNK iz spužve *Suberites domuncula*.

Research programme and results:

This project was focused on the investigation of primary structure, genomic organization and mode of the expression of genes in streptomyces (especially *Streptomyces rimosus*) and in sponges from Adriatic Sea.

We completed and published results of the study of *recA* gene transcription in *S. rimosus*, results of the analysis of GDS(L) lipase gene from the same bacteria and the results of the investigation of MAP(SAP) kinases p38 and JNK from marine sponge *Suberites domuncula*.

**STRUKTURA I FUNKCIJA FOTOSINTETSKOG APARATA
STRUCTURE AND FUNCTION OF PHOTOSYNTHETIC APPARATUS**

Voditelj teme: dr. sc. Nikola Ljubešić

Tel. ++385 1 4561 083, fax: ++385 1 4561 177 e-mail: ljubesic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Hrvoje Fulgosi, doktor biol. znanosti, viši znanstveni asistent, znanstveni novak
 Nikola Ljubešić, doktor biol. znanosti, znanstveni savjetnik
 Tatjana Prebeg, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Vanjska suradnica na temi:

Mercedes Wrischer, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica u mirovini

Program rada i rezultati na temi:

Tema obuhvaća istraživanja strukturnih i funkcijskih promjena tijekom diferencijacije plastida, kao i utjecaja tvari rastenja i specifičnih herbicida na te procese. Praćene su ultrastrukturne promjene plastida u sustavima leukoplast (amiloplast) - kloroplast, leukoplast - kloroplast - kromoplast te kloroplast - gerontoplast. Primjenom određenih tvari rastenja utvrđeno je u kojoj mjeri one utječu na pojedine stadije u pretvorbi plastida. Koristeći specifične herbicide zakočena je diferencijacija plastida, što je omogućilo istraživanja načina i mjesta njihovog inhibitornog djelovanja. Praćen je tijek sinteze pojedinih proteinskih kompleksa u fotosintetskim membranama tijekom formiranja fotosintetski aktivnih kloroplasta. Usporedo s tim, istražene su promjene ultrastrukture i sastava pigmenata tijekom formiranja različitih tipova kromoplasta. U sklopu teme izučavani su oksidacijsko/redukcijski mehanizmi regulacije fotosinteze te transporta proteina iz citoplazme u kloroplaste. Karakterizirane su dvije proteinske kinaze vanjske

ovojnice plastida koje su vjerojatno uključene u regulaciju receptora preproteina (toc34 i toc159) putem fosforilacije.

Research programme and results:

The project comprises the investigation of structural and functional changes during plastid differentiation and the effect of growth substances and specific herbicides on these processes. Ultrastructural changes of plastids were studied on the following systems: leucoplast (amyloplast) - chloroplast, leucoplast - chloroplast - chromoplast, and chloroplast - gerontoplast. It has been established as to what extent some growth substances influence different stages of these transformations. By applying specific herbicides, the plastid differentiation has changed and in this way the mode of their inhibition determined. The synthesis of specific protein complexes of photosynthetic apparatus during development of chloroplasts from the other plastid types, as well as the photosynthetic activity of the membranes were studied. Parallel with this work, we examined the changes in the pigment composition of photosynthetic membranes and of specific chromoplast structures. New thylakoid auxiliary components involved in regulation and sensing of photosynthesis have also been characterized in the scope of this research. Also, two outer envelope protein kinases most likely involved in regulation of preprotein receptors Toc34 and Toc159 via phosphorylation have been preliminary characterized.

ORGANIZACIJA I EVOLUCIJA EUKARIOTSKOG GENOMA ORGANIZATION AND EVOLUTION OF EUKARYOTIC GENOME

Voditeljica teme: dr. sc. Đurđica. Ugarković

Tel. ++385 1 4561 083 e-mail: ugarkov@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Branka Bruvo, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Tomislav Domazet-Lošo, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak

Nevenka Meštrović, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Brankica Mravinac, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Vlatka Petrović, dipl. inž. biotehnol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Miroslav Plohl, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Đurđica Ugarković, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Suradnici iz drugih ustanova:

Martina Podnar, magistrica biol. znanosti, znanstvena novakinja, Hrvatski prirodoslovni muzej, Zagreb

Damjan Franjević, magistar biol. znanosti, znanstveni novak, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Uzastopno ponovljene sekvence ili satelitske DNA su sastavni dio svakog eukariotskog genoma. Unatoč tomu što često izgrađuju više od 50% genomske DNA, funkcija kao i evolucija satelitskih sekvenci slabo je istražena. S obzirom da se sastav satelitskih sekvenci uglavnom razlikuje već između blisko srodnih vrsta, pretpostavlja se da imaju važnu ulogu u specijaciji tj. u nastanku novih vrsta. Cilj ovog projekta je proučavanje evolucije, organizacije i strukture satelitskih DNA na modelu kukaca kornjaša iz porodice Tenebrionidae (Coleoptera) koji sadrže veliku količinu satelitske DNA, do 50% ukupnog genoma, a u pravilu su smještene u području centromernog heterokromatina svih

kromosoma. Kukci ove porodice su značajni štetnici u skladištima hrane pa proučavanje organizacije i strukture genoma može naći primjenu u biološkoj kontroli veličine njihovih populacija.

Karakterizirane su satelitske DNA roda *Palorus* koje su sačuvane u nukleotidnom slijedu, uzastopnoj organizaciji jedinica ponavljanja i smještaju na kromosomima kroz dugo evolucijsko razdoblje. Sačuvanost ovih sekvenci DNA kroz evolucijsko razdoblje od oko 70 milijuna godina ukazuje na njihovo moguće funkcionalno značenje. Sačuvane sekvence prisutne u genomu u malom broju kopija predstavljaju "biblioteku", pojedini elementi koje se diferencijalno umnažaju i postaju dominantne komponente centromernog heterokromatina, specifične za vrstu. Model evolucije satelitskih DNA zasnovan na konceptu biblioteke je predstavljen u preglednom članku. U suradnji s Institutom za sistematiku i evoluciju iz Krakova započeta su istraživanja evolucije satelitskih DNA kod fitofagnih vrsta roda *Cionus*. U suradnji s Institutom za molekularnu biologiju u Barceloni (Španjolska) analizirane su telomerne i subtelomerne sekvence kod morskih školjkaša i bodljikaša. Pokazano je kako kod ovih skupina beskralješnjaka postoje telomerni ponovljeni nizovi čija je osnovna jedinica ponavljanja identična onoj koja se smatrala specifičnom za kralješnjake. Ovaj rezultat pokazuje kako je ova telomerna DNA sekvenca rasprostranjena među evolucijski veoma udaljenim vrstama, te vjerojatno predstavlja ishodišnu telomernu sekvencu.

Research programme and results:

Tandemly repeated DNA sequences or satellite DNAs represent constitutive part of all eukaryotic genomes. Although they often build more than 50% of the total genomic DNA, their function and evolution is poorly understood. Since satellite DNAs differ substantially in nucleotide sequences even among closely related species, their role in the speciation process has been proposed. The aim of the project is the study of evolution, organization and structure of satellite DNAs in insect species belonging to the family Tenebrionidae (Coleoptera). These species have high amount of satellite DNAs (up to 50% of the whole genome), located in the region of pericentromeric heterochromatin of all chromosomes. Insects from the family Tenebrionidae are known as store product pests and study of genome organization and structure could be relevant for efficient biological control of population size.

Satellite DNAs from insect genus *Palorus* have been characterized. These satellites exhibit conservation in nucleotide sequence, tandem organization and chromosome localization for long evolutionary periods. Conservation of these satellites through evolutionary period of around 70 million years indicates their potential functional significance. Conserved satellite sequence present in a genome in low copy number form satellite DNA "library". Some of the sequences from the "library" are differentially amplified and become prevalent components of centromeric heterochromatin, that are specific for a species. Model of satellite DNA evolution based on "library" concept was presented and discussed in the review article. In collaboration with Institute for Molecular Biology in Barcelona telomeric and subtelomeric sequences have been characterized in marine molluscs and echinoderms. It has been shown that telomeric motifs characteristic for this group of invertebrate species is identical to those specific for vertebrates. The results reveal that this telomeric sequence that is distributed among evolutionary distant species, probably represents an ancient telomeric sequence.

MOLEKULARNI MEHANIZMI KARCINOGENEZE MOLECULAR MECHANISMS OF CARCINOGENESIS

Voditelj teme: dr. sc. Branko Brdar

Tel. ++385 1 4561 093

e-mail: brdar@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Branko Brdar, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Marina Ferenac, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Milena Ivanković, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Maja Matulić, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Ivica Rubelj, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Program rada i rezultati na temi:

1) Istražujemo mehanizme kontrole ekspresije plazminogenog aktivacijskog sustava te fibrinolize u patološkim procesima kao što su tumorski rast i upale.

Ispitivan je učinak citostatika etopozida na aktivaciju urokinaznog tipa plazminogen aktivatora (uPA) u trajnoj staničnoj liniji glioblastoma, te su određivani signalni putevi koji bi mogli sudjelovati u toj aktivaciji. Ustanovljeno je da etopozid inducira uPA i inhibitor uPA (PAI); indukcija ovisi o aktivaciji njihovih promotora, a ekstracelularna proteoliza o njihovoj ravnoteži. Etopozid uzrokuje aktivaciju p53, kao i indukciju p21 i gadd45, te bi oni mogli biti odgovorni za zaustavljanje staničnog rasta.

2) Istraživano je svojstvo tat/nef-defektnog genoma humanog deficijentnog virusa-1 (HIV-1) koji sadrži A lanac gena difterijskog toksina (DTA), da inhibira replikaciju HIV-a u ljudskim stanicama. Svi ti plazmidi koji sadrže DTA snažno inhibiraju proizvodnju HIV-a, dok defektni plazmidi koji ne sadrže DTA ne interferiraju s rastom virusa. Taj bi model mogao predstavljati terapijski pristup u liječenju infekcija HIV-om, koja se temelji na selektivnoj i specifičnoj toksičnosti samo za CD4-pozitivne stanice inficirane HIV-om.

3) Istraživani su molekularni mehanizmi staničnog starenja i imortalizacije. Naši rezultati ističu Sindrom naglog starenja (SSS) kao jedini i primarni mehanizam staničnog starenja.

Research programme and results:

1) We investigate mechanisms that control the plasminogen activation system expression and/or fibrinolysis in the pathological processes such as inflammation and tumor invasion: We examined the activation of urokinase-type plasminogen activator (uPA) by sodium salicylate in a glioblastoma cell strain, and investigated some signalling pathways that might be involved in this activation. We observed that salicylate induced the production of uPA by activating the uPA promoter through some NF- κ B-independent pathway(s).

2) We investigate the ability of human immunodeficiency virus-1 (HIV-1) tat/nef-defective genomes containing diphtheria toxin A chain gene (DTA) to inhibit replication of HIV in human cells. Each of the DTA-containing plasmids strongly suppressed HIV production, whereas the defective non-DTA containing plasmids did not interfere with the virus growth. This may be taken into consideration as a therapy approach to treatment of HIV infection, based on its selective and specific toxicity only to HIV infected CD4- positive cells.

3) We investigated molecular mechanisms of cell aging and immortalization. Our results support Sudden Senescence Syndrome (SSS) as the single, primary mechanism of cell senescence.

STANIČNI ODGOVOR NA GENOTOKSIČNE AGENSE CELL RESPONSE TO GENOTOXIC AGENTS

Voditeljica teme: dr. sc. Maja Osmak

Tel. ++385 1 4560 939

e-mail: osmak@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Andreja Ambriović Ristov, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica
Anamaria Brozović, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Tamara Čimbora Zovko, dipl. ing. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Ana Ferle-Vidović, doktorica med. znanosti, znanstvena savjetnica
Sanjica Jakopec, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Dragomira Majhen, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Maja Osmak, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica
Lidija Vuković, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Ljiljana Krajcar, tehničarka

Suradnik iz druge ustanove:

Slovenko Polanc, doktor kemijskih znanosti, prof., Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Ljubljana, Slovenija

Program rada i rezultati na temi:

Budući da se novi projekt nastavlja na istraživanja započeta na prethodnoj temi, prikaz oba projekta bit će objedinjen.

Odgovor stanica na fizikalne, kemijske i biološke agense ovisi o vrsti štetnog agensa i o statusu same stanice. Iako se stanični odgovor na oštećenja istražuje dugi niz godina, elementi signalnih puteva nedovoljno su poznati, njihova regulacija samo djelomično rasvijetljena, a literaturni podaci često kontradiktorni. Naša istraživanja u ovom području proširili smo na razjašnjavanje uloge pojedinih mehanizama staničnog odgovora na genotoksične agense: popravka oštećenja u DNA, aktivacije stresnih kinaza JNK/SAPK i p38, obitelji gena p53, te elemenata procesa apoptoze. Posebnu pažnju posvetili smo mehanizmima kojima stanice postaju otporne na citostatike.

Adenovirusni vektori najčešće se koriste u genskoj terapiji tumora. Ispitali smo utjecaj dužine vlakna na vezivanje i ulazak u stanicu.

Temeljem poznavanja centralnih molekula stanične homeostaze, kao što je glutation, sintetiziraju se i testiraju novi spojevi, koji bi mogli poboljšati učinak terapije tumora, osobito u onih pacijenata koji su na klasičnu kemoterapiju postali otporni.

Glavni rezultati koje smo dobili u prošloj godini su: a) aktivacija MAP kinaza ima važnu ulogu u odgovoru humanih tumorskih stanica na cisplatinu, te vjerojatno i u otpornosti stanica na taj citostatik; b) skraćenje dužine vlakna adenovirusa malo utječe na njegovo vezivanje, ali bitno utječe na učinkovitost ulaska u stanicu; c) novosintetiziran spoj UP-91 smanjuje koncentraciju glutationa u stanicama, te inducira staničnu smrt.

Reserach programme and results:

New project continues on the old one. Therefore, the research program and the results of both will be presented together.

Cell response to physical, chemical and biological agents depends on the type of DNA damaging agents and on the cell status. Although the cell response has been examined for years, molecular mechanisms involved in this process are not completely elucidated, their regulation is only partially known, and the literature data are often contradictory.

Our investigation is focused to the elucidation of molecular mechanisms of cell response to genotoxic agents and its regulation, specially the role of DNA damage repair, stress

kinases, the genes of p53 family, as well as the apoptotic signaling pathway. The molecular mechanisms involved in drug-resistance are studied as well. Adenovirus vectors are usually used in human tumor gene therapy. We examine the role of adenovirus fiber length on its binding and entry in the cells. Main results that we obtained in last year are: a) the activation of MAP kinases is important in the response of tumor cells to cisplatin, and probably, in cell-resistance to this drug; b) the shortening of adenovirus fiber length slightly influences its binding, but significantly alters its entry into the cell; c) specific compound UP-91 targeted to glutathione may reduce its level and induce cell death in tumor cells.

INICIJACIJA TRANSKRIPCije KOD EUKARIOTA INITIATION OF TRANSCRIPTION IN EUKARYOTES

Voditeljica teme: dr. sc. Mary Sopta

Tel. ++385-1-456-0948 e-mail: msopta@rudjer.irb.hr

Suradnice na temi:

Lidija Starešinčić, dipl. inž. biol., mleđa asistentica, znanstvena novakinja

Ana Traven, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Mary Sopta titula, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica

Program rada i rezultati na temi:

Koristili smo modelni organizam *Saccharomyces cerevisiae* za funkcionalnu karakterizaciju nekoliko modelnih transkripcijskih faktora. Pokazali smo da humani protein retinoblastoma može reprimirati transkripciju gena pokazatelja *lacZ in vivo* u kvascu *Saccharomyces cerevisiae*. Delecijskim analizama smo utvrdili da za represiju nije potrebna intaktna domena iz regije "džepa", nego da postoje individualne represijske domene koje uključuju odvojene regije A i B unutar proteina retinoblastoma. Također smo započeli karakterizaciju kvašćevog proteina Xtc1/Mhr1, koji je potreban za održavanje mitohondrijske DNA. *In vitro* eksperimenti su pokazali da se taj faktor veže na kisele aktivacijske domene aktivatora transkripcije. Analizirali smo unutarstaničnu lokalizaciju proteina Xtc1 korištenjem fuzija na GFP (zeleni fluorescentni protein), te pokazali da se Xtc1 može lokalizirati i u jezgri i u mitohondrijima.

Research programme and results:

We have used the model organism *Saccharomyces cerevisiae* to functionally characterize a number of model transcription factors. We have shown that the human retinoblastoma protein can repress transcription of a *lacZ* reporter gene *in vivo* in the yeast *Saccharomyces cerevisiae*. Deletion studies have shown that the repressor function does not require an intact "pocket domain", but that individual repression modules exist that involve the separated A and B regions of the molecule. In addition, we have begun to characterize the yeast factor Xtc1/Mhr1 which has previously been shown to be required for mitochondrial DNA maintenance. *In vitro* studies have also shown that this factor interacts with the acidic activation domain of several transcription factors. We have addressed the issue of intracellular localization of the Xtc1 protein using GFP (green fluorescent protein) fusions. To this end we have demonstrated that Xtc1 can localize to both mitochondrial and nuclear compartments.

GENETIKA I DINAMIKA BIOAKTIVNIH MOLEKULA GENETICS AND DYNAMICS OF BIOACTIVE MOLECULES

Voditelj teme: dr. sc. Volker Magnus
Tel. ++385 1 4561 002, e-mail: magnus@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Eduard Dolušić, magistar kem. znanosti, asistent, znanstveni novak
Branimir Klaić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Volker Magnus, doktor biol. znanosti, znanstveni savjetnik
Željko Marinić, magistar kem. znanosti, stručni suradnik
Branka Salopek-Sondi, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Kristina Wolsperger, dipl. inž. kemije, stručna suradnica

Tehnički suradnik:

Vladimir Vraneša, samostalni tehničar (1/2 radnog vremena)

Program rada i rezultati na temi:

Cilj rada na temi je upoznavanje molekularne osnove biološke aktivnosti. Glavni rezultati postignuti su na području fiziologije, biokemije i kemije biljnih hormona, te NMR-spektroskopije spojeva od biološkog interesa, a objavljeni su u razdoblju koje pokriva projekt "Dinamika i genetika bioaktivnih molekula", u okviru kojeg su nastavljena istraživanja započeta ovom temom. Pojediniosti o postignutim rezultatima su stoga navedene u izvještaju za spomenuti projekt.

Research programme and results:

The research programme addresses the molecular base of biological activity. In the report period, we focused on the physiology, biochemistry and chemistry of plant hormones, and on NMR spectroscopy applied to compounds of biological interest. The results were mostly published during the period covered by the project "Genetics and dynamics of bioactive molecules" which continues the present programme. Details are therefore provided in the report for the above project.

Teme izvan sastava programa:**NEUROKEMIJA SINAPTIČKE TRANSMISIJE
NEUROCHEMISTRY OF SYNAPTIC TRANSMISSION**

Voditelj teme: dr. sc. Branimir Jernej
Tel. ++385 1 45 61 150 e-mail: jernej@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Zvonimir Bokulić, dipl. inž. kem., mlađi asistent, znanstveni novak
Tatjana Bordukalo Nikšić, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Lipa Čičin-Šain, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica
Vedrana Filić, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Dubravka Hranilović, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica
Branimir Jernej, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik
Darko Orešković, doktor vet. znanosti, znanstveni suradnik
Jasminka Štefulj, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnici:

Katarina Karlo, samostalna tehničarka
Vladimir Vraneša, samostalni tehničar (1/2 radnog vremena)

Tamara Vraneša, peračica laboratorijskog posuđa (1/3 radnog vremena)

Program rada i rezultati na temi:

Daljnji razvoj i karakterizacija dvaju eksperimentalnih modela koji su izvorno razvijeni u našem laboratoriju: štakor s konstitucijskom hiperserotoninemijom i štakor s disreguliranim serotoninским prijenosnikom (Wistar-Zagreb 5HT štakor). Karakterizacija se odnosila na neurokemiju mozga i specifične aspekte ponašanja vezane uz serotonin. Na kliničkoj razini, osim nastavka neurokemijskih istraživanja sinaptičnih 5HT proteina na trombocitnom modelu, u tijeku su molekularno-genetička istraživanja gena koji kodiraju te sinaptične elemente, u bolesnika od shizofrenije, migrene te žrtava samoubojstva.

Oba vida istraživanja (fundamentalna i klinička) u jednom svom dijelu se provode u okviru međunarodnih suradnji.

Research programme and results:

Further development and characterisation of two originally developed rodent models: rat with constitutional hyperserotonemia and rat with disregulated serotonin transporter (Wistar-Zagreb 5HT rat). Characterisation was focused on 5HT related brain neurochemistry and specific behavioral paradigms. Progress report was given on COST B10 meeting (*Brain damage and repair*, Trinity College, Dublin).

At the clinical level, besides continuation in neurochemical research on synaptic 5HT proteins on platelet model, molecular-genetic studies on genes encoding synaptic 5HT proteins in schizophrenic patients, migraineous patients and suicide victims are in course.

Both, basic and clinical research is partly conducted in the frame of international collaborations.

**OBALNI I MORSKI FITOINDIKATORI JADRANSKIH OTOKA I PRIMORJA
COASTAL AND MARINE PHYTO-INDICATORS IN ADRIATIC ISLANDS AND
LITTORAL**

Voditelj teme: dr. sc Andrija-Željko Lovrić

Tel. ++385 1 4561 075, e-mail: azlovric@irb.hr

Suradnici na temi:

Oleg Antonić, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Andrija - Željko Lovrić, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Armin Mešić, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak

Mladen Rac, doktor biol. znanosti, viši asistent

Zdenko Tkalčec, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak

Tehnički suradnik:

Neven Matočec, tehničar

Suradnice iz drugih ustanova:

Maja Kovačević, magistrica biol. znanosti, Arboretum HAZU, Trsteno, Dubrovnik

Program rada i rezultati na temi:

Terenska istraživanja obalnih halofita i morskih alga obavljena su od travnja do listopada na kopnenoj obali Kvarnera i sjeverne Dalmacije, te na otocima Krk, Rab, Dugi otok, Kornati i srednjodranski pučinski otočići. Sabrani uzorci su spremljeni u herbarij ADRZ na IRB, iz

čega su sada objavljeni ili u tisku vegetacijski pregledi Dugog otoka, jugoistočnog Krka, Prvića, Grgura, Žirja, Sveca, Sušca i Palagruže. Mikološka su istraživanja obavljena uglavnom u okolici Zagreba, Gorskom Kotaru, Istri i nekim dalmatinskim otocima, a pripadni uzorci gljiva uvršteni su u mikološku zbirku CNF na IRB-u, od čega su novonađene za Hrvatsku 78 vrsta i 10 rodova gljiva. Naši noviji i već postojeći terenski rezultati su obrađeni kvantitativnim metodama raster-GIS modeliranja, čime je uglavnom dovršena detaljna ekološka karta vegetacijskih staništa Hrvatske u elektronskom obliku 1:300.000, koja će biti dostupna za uvid na internetu od 2003., u svrhu zaštite okoliša i gospodarenja prirodnim resursima. Naša istraživačka ekipa je ove godine objavila 8 znanstvenih i stručnih radova u časopisima i zbornicima, od kojih su 2 CC i još 2 SCI - citata.

Research programme and results:

Our field sampling of coastal halophytes and marine algae was from April to October 2002 at mainland shores of Kvarner Gulf and Northern Dalmatia, and also in Adriatic islands Krk, Rab, Dugi otok, Kornati, and in remote islets of central Adriatic offing. Collected samples are inserted in Herbarium ADZ at our Institute, resulting by new vegetation surveys of islands Dugi otok, SE Krk, Prvić, Grgur, Žirje, Svetac, Sušac and Palagruža now published or in press. Mycological studies included chiefly the surroundings at Zagreb, Gorski Kotar highlands, Istra peninsula and some Dalmatian islands, and collected samples are in the fungarium CNF at our Institute, including 78 species and 10 genera new to Croatia. Our recent results and preexisting data are elaborated by the quantitative methods of raster-GIS models, resulting by a new computerized ecological map of vegetation sites in Croatia 1:300.000 that is mostly completed in electronic form, and will be available on Internet from 2003 for nature management and conservation. During this year, our laboratory published 8 scientific and professional papers in the periodicals and proceedings, including 2 ones quoted in Current Contents, and 2 others in Science Citation Index.

Nakon 1.7.2002. u Zavodu za molekularnu genetiku provodila su se istraživanja u okviru slijedećih znanstvenoistraživačkih projekata:

ULOGA REKOMBINACIJE U POPRAVKU DNA I STABILNOSTI GENOMA THE ROLE OF RECOMBINATION IN DNA REPAIR AND GENOME STABILITY

Voditeljica projekta: dr. sc. Erika Salaj-Šmic

Tel. ++385 1 4561 099 e-mail: salaj@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Krunoslav Brčić-Kostić, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Damir Đermić, magistar biol. znanosti, asistent, znanstveni novak

Gordana Čogelja Čajo, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Nella Lerš, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica

Erika Salaj-Šmic, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehničke suradnice:

Blaženka Dumić, peračica suđa

Mirjana Filipović, tehničarka

Suradnici iz drugih ustanova:

Ivana Ivančić, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja,

Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb.

Robert G. Lloyd, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Department of Genetics, University of Nottingham, Nottingham, Velika Britanija (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

U našim istraživanjima bavimo se izučavanjem uloge enzima RecBCD u metabolizmu bakterije *Escherichia coli*. Enzim RecBCD sudjeluje u homolognoj genetičkoj rekombinaciji, popravku DNA, očuvanju vijabilnosti stanica i razgradnji vlastite i strane DNA. Također se bavimo i genetičkom analizom Gam-ovisne radiorezistencije koja nastaje u bakterijama u kojima enzim RecBCD stupa u interakciju s proteinom Gam faga λ i u kojima nastaje kompleks RecBCD-Gam. U našim prethodnim istraživanjima pretpostavili smo da kompleks RecBCD-Gam zadržava sposobnost nanošenja proteina RecA na 3'-jednolančanu DNA *in vivo*. Izučavanjem konjugacijske rekombinacije u prisutnosti proteina Gam u mutantu deficijentnom u nanošenju proteina RecA (*recB*^{D1080A} mutant) našli smo da aktivnost enzima RecBCD nije inhibirana u prisutnosti proteina Gam, te da je konjugacijska rekombinacija u prisutnosti proteina Gam ovisna djelomično o produktima gena RecF puta rekombinacije *recJ* i *recO*. U našim daljnjim istraživanjima pokušat ćemo utvrditi koji enzimi RecF puta sudjeluju u rekombinacijskom popravku u mutantu deficijentnom u nanošenju proteina RecA.

Research programme and results:

We have studied the role of RecBCD enzyme in the processes of DNA metabolism in *Escherichia coli*. RecBCD enzyme participates in homologous genetic recombination, DNA repair, cell viability and degradation of foreign and damaged host DNA. We have also investigated the genetic requirements for Gam-induced radioresistance which occurs in bacteria in which the RecBCD-Gam complex is formed. In our former studies we have proposed that the RecBCD-Gam complex retains the ability to load the RecA protein onto 3'-single stranded DNA. Therefore, we studied (i) the effect of the RecA loading- deficient *recB* (*recB*^{D1080A}) mutation on conjugational recombination in the presence of λ phage Gam protein and (ii) additional genetic requirements for the RecBCD-Gam-mediated conjugational recombination. For this purpose, we introduced Gam+ and Gam- expressing plasmids into wild type cells and different mutants of *E. coli* (*recJ*, *recB*^{D1080A}, *recB*, *recN*, *recF*, *recR*, *recO*, *recD*), and determined the yields of recombinants after Hfr mediated conjugation. The obtained results suggest that RecA loading activity is not inhibited by Gam and that recombination in the presence of Gam is partially dependent on *recJ* and *recO* gene products.

REGULACIJA REKOMBINACIJE I REKOMBINACIJSKOG POPRAVKA REGULATION OF RECOMBINATION AND RECOMBINATIONAL REPAIR

Voditeljica projekta: dr. sc. Mirjana Petranović

Tel. ++385 1 46 80 945 e-mail: dina@irb.hr

Suradnici na projektu:

Senka Džidić, doktorica biotehno. znanosti, viša asistentica

Ivan Mijaković, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak

Mirjana Petranović, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Davor Zahradka, doktor biol. znanosti, viši asistent, znanstveni novak

Ksenija Zahradka, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Mirela Kosinjski, tehničarka

Suradnici iz drugih ustanova:

Duško S. Ehrlich, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Institut National de la Recherche Agronomique, Jouy-en-Josas, Francuska (konzultant)
Benedicte Michel, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Institut National de la Recherche Agronomique, Jouy-en-Josas, Francuska (konzultant)
Miroslav Radman, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Faculté de Médecine Necker – Enfants Malades, Paris, Francuska (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Bavimo se istraživanjem gena, enzima i molekularnih procesa uključenih u regulaciju genetičke rekombinacije i popravka DNA. Također proučavamo utjecaj rekombinacije na druge stanične procese kao što su replikacija DNA, segregacija kromosoma i stanična dioba.

(1) Nastavili smo istraživanje uloge rekombinacijskih gena *ruvABC* u navedenim procesima. Upotrebom fazno-kontrastne i fluorescencijske mikroskopije pronašli smo da mutacije u genima *ruv* izazivaju jake poremećaje u segregaciji kromosoma i staničnoj diobi tijekom eksponencijalnog rasta bakterije *E. coli*, naročito mutanata *recBC sbcBC*. Citološki defekti mogli su se suprimirati pomoću mutacije *rus-1* koja inducira sintezu alternativne rezolvaze RusA. Također smo pokazali da supresivni učinak mutacije *rus-1* ovisi o funkcionalnom genu *recG*. Dobiveni rezultati upućuju na to da tijekom eksponencijalnog rasta mutanata *ruv* dolazi do abortivne rekombinacije. Nerazriješene Hollidayeve strukture koje pritom nastaju izazivaju citološke poremećaje i smanjuju staničnu vijabilnost.

(2) Dio naših istraživanja posvetili smo metilacijom usmjerenom popravku krivo sparenih baza u DNA kod bakterije *E. coli*. Tim procesom uklanjaju se krivo sparene baze nastale tijekom procesa replikacije i rekombinacije. Istraživali smo ulogu jednolančanih lomova u usmjeravanju popravka DNA u odsutnosti proteina MutH koji prepoznaje nemetilirane sekvence GATC u novosintetiziranoj DNA te usmjerava popravak. Određivanjem frekvencije mutacija u odsutnosti proteina MutH ustanovili smo da jednolančani lomovi mogu nadomjestiti MutH funkciju u popravku krivo sparenih baza.

(3) U okviru međunarodne suradnje započeli smo dva nova projekta koja su bliska našoj dosadašnjoj problematici: (i) istraživanje mehanizma popravka DNA kod radiorezistentne bakterije *Deinococcus radiodurans*, i (ii) identifikacija novih gena i proteina uključenih u regulaciju segregacije kromosoma bakterije *E. coli*. Također nastavljamo suradnju na projektu replikacije ovisne o rekombinaciji. Replikacija ovisna o rekombinaciji je nedavno otkrivena kao ključni mehanizam za popravak dezintegriranih replikacijskih vilica.

Research programme and results:

The project deals with the investigation of genes, enzymes and molecular processes involved in the regulation of genetic recombination and DNA repair. We also study the influence of recombination on other processes, e. g. DNA replication, chromosome segregation and cell division.

(1) We have continued our study of the role of recombination genes *ruvABC* in these processes. By the usage of phase-contrast and fluorescence microscopy we have found that mutations in *ruv* genes cause severe chromosome segregation and cell division defects in exponentially growing *E. coli* cells, particularly in *recBC sbcBC* mutants. All *ruv*-associated cytological defects could be suppressed by the *rus-1* mutation which is known to induce synthesis of an alternative Holliday junction resolvase, the RusA protein. We also showed that the suppressive effect of *rus-1* depends on a functional *recG* gene. Our results suggest that in *ruv* mutants abortive recombination takes place

during exponential growth. The unresolved Holliday junctions accumulated during this process cause cytological defects and affect cell viability.

(2) A part of our investigation has been carried on the methyl-directed DNA mismatch repair in *E. coli*. This process removes mismatched bases created during the processes of replication and recombination. We have investigated the role of single-stranded nicks in directing mismatch repair in the absence of MutH protein which recognises non-methylated GATC sequences and directs the repair. By determining the frequency of mutations in the absence of MutH protein we have shown that persisting DNA strand nicks could compensate MutH deficiency.

(3) In a frame of an international collaboration we have started two new projects closely related to our previous work: (i) investigation of the mechanism of DNA repair in the radioresistant bacterium *Deinococcus radiodurans*, and (ii) identification of new genes and proteins involved in the regulation of chromosome segregation in *E. coli*. We have also continued collaboration on the project of recombination-dependent replication (RDR). RDR has recently been discovered as a mechanism that is crucial for restoration of broken replication forks.

STUDIJ GENA I GENOMA EVOLUCIJSKI SAČUVANIH I GOSPODARSKI VAŽNIH ORGAIZAMA

GENES AND GENOMES OF EVOLUTIONARY CONSERVED AND ECONOMICALLY IMPORTANT SPECIES

Voditeljica projekta: dr. sc. Vera Gamulin

Tel. ++385 1 4561 115 e-mail: gamulin@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Ivan Ahel, magistar biol. znanosti, asistent, znanstveni novak

Helena Četković, magistrica biol. znanosti, asistentica

Sonja Durajlija Žinić, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Vera Gamulin, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Matija Harcet, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak

Lada Lukić, magistrica biol. znanosti, asistentica

Andreja Mikoč, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Dušica Vujaklija, doktorica biotehnol. znanosti, viša asistentica

Suradnici iz drugih ustanova:

Werner E.G. Müller, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Sveučilište Johannes Gutenberg, Mainz, Njemačka (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu

Na ovom se projektu predviđa nastavak rada na proučavanju primarne strukture, genomske organizacije i načina ekspresije gena (kao i funkcije njihovih produkata) kod bakterija iz roda *Streptomyces* (posebno *Streptomyces rimosus*) i jadranskih spužava. Streptomiceti su najznačajnija skupina industrijskih mikroorganizama, dok su spužve (Porifera) najstarije i najjednostavnije građene mnogostanične životinje i stoga su izuzetno zanimljive za molekularno evolucijska istraživanja Metazoa. Evolucijska istraživanja na spužvama se provode kroz suradnju s prof. W.E.G. Müller-om sa Sveučilišta u Mainzu. Predviđeno proširenje istraživanja uključuje određivanje strukture mitohondrijskog genoma spužve *Suberites domuncula*, kao i traženje novih, do sada neopisanih gena kod streptomiceta značajnih za biotehnološku primjenu. U projektu je predviđeno i novo područje istraživanja – genetička karakterizacija (genotipizacija)

rijetkih i ugroženih životinjskih vrsta u Hrvatskoj, prvenstveno zaštićene autohtone pasmine domaće turopljske svinje.

Do sada su načinjena i objavljena istraživanja starosti i položaja introna u evolucijski sačuvanim genima kod mnogostaničnih životinja (Metazoa). Pokazalo se da postoji izuzetno visoka sačuvanost položaja introna/arhitekture gena između spužava i sisavaca. Nadalje, u spužvi *Geodia cydonium* je određena struktura proteina SRP 54, jednog od najsačuvanijih proteina u živom svijetu (prisutan je u svakom živom organizmu) i utvrđena je izuzetno visoka srodnost između homologa kod spužve i sisavaca/čovjeka. Rezultati analize šest tirozin-kinaza (potencijalni protoonkoproteini) iz spužve *S. domuncula*, čija je struktura u cjelosti određena i bioinformatički obrađena, pripremljeni su za objavljivanje. Dosadašnji rezultati analize nekoliko mikrosatelitskih lokusa turopljske svinje objavljeni su u monografiji o ovoj zaštićenoj pasmini domaće životinje.

Research programme and results:

In the frame of this project we planned to continue our investigation of the structure, genomic organization and mode of the expression of genes (and the function of their products) in bacteria from the genus *Streptomyces* and in marine sponges. *Streptomyces* are the most important industrial microorganisms and sponges (Porifera), the most ancient and simple multicellular organisms, are very informative for the study of molecular evolution of Metazoa. Molecular evolutionary studies of sponges is done in collaboration with prof. W. E.G. Müller from the University in Mainz, Germany. The work will be extended with the analysis of sponge mitochondrial genome and with the search for new and biotechnologically important genes from streptomyces. The new topic in the project is genetic characterization of the protected and rare autochthonous animal breeds (i.e. "Turopolje pig").

We have found that the positions of introns in evolutionary conserved metazoan genes are highly conserved from sponges to mammals/human. Moreover, sponge and mammalian homologous genes share highest similarity in the introns-exons organizations. The analysis of the SRP 54 protein from the sponge *Geodia cydonium* showed surprisingly high homology between sponge and human homologues. SRP 54 is one of the best-conserved protein in nature, that is present in all living organisms. The results of primary structure analysis of six protein tyrosine kinases from sponge *Suberites domuncula* (very potential protooncoproteins in higher animals) are also completed and are ready for publication.

We have analyzed several microsatellite *loci* in "Turopolje pig" and the results are published in the book dedicated to this protected autochthonous breed.

STRUKTURA I FUNKCIJA PLASTIDA I CITOSKELETA STRUCTURE AND FUNCTION OF PLASTIDS AND CYTOSKELETON

Voditelj projekta: dr. sc. Nikola Ljubešić

Tel. ++ 385 1 46 80 238, e-mail: ljubesic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Hrvoje Fulgosi, doktor biol. znanosti, viši znanstveni asistent, znanstveni novak

Nikola Ljubešić, doktor biol. znanosti, znanstveni savjetnik

Tatjana Prebeg, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Igor Weber, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Vanjska suradnica na projektu:

Mercedes Wrischer, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica u mirovini

Program rada i rezultati na projektu:

U okviru projekta nastavljena su istraživanja strukturnih i funkcionalnih promjena tijekom diferencijacije plastida. U laboratorijskim uvjetima praćen je utjecaj specifičnih tvari rastenja, giberelina i citokinina, na diferencijaciju lipoproteinskih struktura kromoplasta (kao objekt su korišteni cvjetovi vrste *Cucumis sativus* L.). Na više različitih eksperimentalnih modela nastavljena su istraživanja na rješavanju porijekla i strukture nosioca karotenoidnih pigmenata. Biokemijskim i tehnikama funkcionalne genomike nastavljen je rad na karakterizaciji proteina uključenih u procese kratkoročne regulacije fotosinteze. Pomoću tehnike antisense RNA i genetički modificiranih biljaka vrste *Arabidopsis* želi se utvrditi funkcija novootkrivenog proteina TROL (thylakoid rodanase-like protein). Pronađena je i sekvencionirana cjelokupna cDNA proteina TROL. U tijeku je subkloniranje fragmenata cDNA u proteinske ekspresijske vektore kao i u binarne vektore za genetičku transformaciju biljaka *Arabidopsis*.

Kombinacijom genetičkih i mikroskopskih pristupa omogućen je uvid u neke važne značajke strukture i dinamike aktinskog citoskeleta u modelnom organizmu *Dictyostelium discoideum*. U suradnji s grupom W. Baumeister-a s Max-Planck-Institut für Biochemie u Martinsried-u, krioelektronska tomografija uspješno je upotrijebljena za oslikavanje molekulskih kompleksa i ultrastrukture aktinskog citoskeleta u intaktnim stanicama *Dictyostelium*. Netaknuta makromolekulska arhitektura unutrašnjosti eukariotske stanice vizualizirana je po prvi puta s razlučenjem od 5 do 6 nanometara. C-terminalni fragment talina iz *Dictyostelium* označen je pomoću GFP-a i zatim iskorišten kao zamka za aktinska vlakna u procesima staničnog gibanja pri kemotaksiji, endocitoze i mitotske stanične diobe. Pokazano je da je u sve te procese uključen tok F-aktina i određeni su njegov smjer i brzina.

Research programme and results:

The project comprises the investigations of structural and functional changes during plastid differentiation. The effect of specific plant growth regulators, cytokinins and giberellins on differentiation of flower chromoplast lipoprotein structures of *Cucumis sativus* L., was studied in the conditions of controlled environment. Investigations of origin and organization of carotenoid-bearing structures were performed on various experimental models. Research on novel protein components involved in short-term regulation of photosynthesis has been extended using biochemical and functional genomics approaches. Using antisense RNA technique and transgenic plants of *Arabidopsis* function of newly identified protein TROL (thylakoid rodanase-like protein), entire TROL cDNA has been selected and sequenced. Currently, we are subcloning various cDNA fragments into protein expression vectors, as well as into binary vectors suitable for genetic transformation of *Arabidopsis* plants.

Combination of genetic and imaging approaches resulted in important insights into several aspects of the structure and the dynamics of the actin cytoskeleton in the model organism *Dictyostelium discoideum*. In collaboration with W. Baumeister's group at the Max-Planck-Institut für Biochemie in Martinsried, cryoelectron tomography was successfully applied to image molecular complexes and ultrastructure of the actin cytoskeleton in intact *Dictyostelium* cells. For the first time, macromolecular architecture of an unperturbed environment inside eukaryotic cells was visualized at a resolution of 5 to 6 nanometers. A C-terminal talin fragment from *Dictyostelium* was tagged with GFP and used as a trap for actin filaments in chemotactic cell migration, endocytosis and mitotic cell division. It was demonstrated that a flow of F-actin is present during all these processes and its direction and velocity were estimated.

**EVOLUCIJSKA DINAMIKA SATELITSKIH DNA
EVOLUTIONARY DYNAMICS OF SATELLITE DNAs**

Voditeljica projekta: dr. sc. Đurđica Ugarković
Tel. ++385 1 45 61 083 e-mail: ugarkov@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Branka Bruvo, doktorica biol. znanosti, viša asistentica
Tomislav Domazet-Lošo, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak
Nevenka Meštrović, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Miroslav Plohl, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik
Đurđica Ugarković, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Suradnici iz drugih ustanova:

Carlos Juan, doktor bioloških znanosti, izvanredni profesor, Facultat de Biologia,
Universitat de Illes Balears, Palma de Mallorca, Španjolska (konzultant)
Martina Podnar, magistrica biol. znanosti, znanstvena novakinja, Hrvatski prirodoslovni
muzej, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Predloženi projekt obuhvaća sveobuhvatno istraživanje evolucije satelitskih DNA u različitim vrstama beskralješnjaka s ciljem potpunijeg i dubljeg razumijevanja uloge satelitske DNA u evoluciji vrsta. Evolucija satelitskih DNA proučava se na modelu kukaca iz porodice Tenebrionida, fitofagnim vrstama kukaca iz porodice Curculionidae, kao i u vrstama nematoda roda Meloidoginae. Dobiveni će se podaci usporediti s filogenijom vrsta, zasnovanoj na analizi različitih molekularnih biljega. Na taj će način biti moguće proučavati odnos između evolucije satelitskih DNA i evolucije vrsta, što će pomoći rasvijetljavanju uloge satelitskih DNA u procesima pregradnje genoma i nastanka novih vrsta.

Research programme and results:

The proposed project includes the extensive study of satellite DNA evolution in different invertebrate model organisms with the aim to get a more thorough understanding of the role of satellite DNA in the evolution of species. Satellite DNA evolution is studied in species from insect family Tenebrionidae, in phytophagous beetles from the family Curculionidae and in nematods from the genus Meloydoginae. The obtained data will be correlated with the phylogeny of species based on analysis of different molecular markers. In this way relationship between evolution of satellite DNA and species evolution can be studied and possible role of satellite DNA in the dynamics of genome rearrangements associated with speciation can be deduced.

**ORGANIZACIJA HETEROKROMATINSKIH SEKVENCI U GENOMIMA
BESKRALJEŠNJAKA
ORGANIZATION OF HETEROCHROMATIC DNA SEQUENCES IN INVERTEBRATES**

Voditelj projekta: dr. sc. Miroslav Plohl
Tel. ++385 1 45 61 083 e-mail: plohl@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Branka Bruvo, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Brankica Mravinac, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Vlatka Petrović, dipl. inž. biotehnol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Đurđica Ugarković, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Miroslav Plohl, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Damjan Franjević, magistar biol. znanosti, znanstveni novak, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Luis Cornudella, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik, Institute of Molecular Biology CSIC, Barcelona, Španjolska (konzultant)

Program rada na projektu:

Glavni cilj projekta jest istražiti sastav i najvažnija svojstva organizacije komponenti DNA na dugim odsječcima genomske DNA centromernog i telomernog heterokromatina te odrediti krajnje telomerne sekvence kod odabranih vrsta beskralješnjaka: kukaca iz porodica Tenebrionidae i Curculionidae (Coleoptera), oblića iz roda *Meloidogyne* i nekoliko vrsta morskih školjkaša. Sve odabrane vrste predstavljaju gospodarski zanimljive organizme, bilo kao štetnici, ili kao izvori hrane. Pretpostavlja se kako heterokromatinske sekvence ponovljene u malom broju kopija tvore "biblioteku" satelitnih sekvenci, čiji su elementi rasprostranjeni u genomima vrsta udaljenih srodnika iz drugih rodova. Namjerava se izraditi karte koje će pojasniti načela organizacije sekvenci heterokromatinske DNA na velikoj skali: raspodjelu, duljinu i raspored nizova satelitnih DNA, svojstva drugih sekvenci umetnutih između satelitnih nizova, kao i odrediti komponente DNA telomernih i subtelomernih područja. Fundamentalno razumijevanje sastava i načina organizacije heterokromatinskih sekvenci DNA na velikoj skali će pomoći u razumijevanju svrhe postojanja i moguće uloge ovih bogato zastupljenih genomskih elemenata.

Research programme and results:

The main goal of the project is to explore composition and principal features of large scale organizational pattern of DNA components in centromeric and telomeric heterochromatin, and determine ultimate telomeric sequences in selected invertebrate species: insects from the families Tenebrionidae and Curculionidae (Coleoptera), root-knot nematodes from the genus *Meloidogyne*, and marine bivalve molluscs. All selected species are economically important organisms, either as pests, or as food resources. It is proposed that heterochromatic low-copy repeats form a "library" of satellite sequences, whose elements are distributed even among distantly related non-congeneric species. It is planned to reveal maps that will show principles of large scale organization of DNA sequences within heterochromatic genomic compartments: distribution, length and interspersed pattern of satellite arrays, nature of other sequences interspersed between arrays, as well as to characterize DNA components of telomeric and subtelomeric regions. Understanding of composition and organizational patterns of DNA sequences in heterochromatin will help to explain existence and possible functional contribution of these abundant genomic DNA components.

**STANIČNI ODGOVOR NA FIZIKALNE, KEMIJSKE I BIOLOŠKE NOKSE
CELL RESPONSE TO PHYSICAL, CHEMICAL AND BIOLOGICAL NOXA**

Voditeljica projekta: dr. sc. Maja Osmak

Tel. ++385 1 4560 939

e-mail: osmak@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Andreja Ambriović Ristov, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica
Anamaria Brozović, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Tamara Čimbora Zovko, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Ana Ferle-Vidović, doktorica med. znanosti, znanstvena savjetnica
Sanjica Jakopec, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Dragomira Majhen, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Maja Osmak, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica
Lidija Vuković, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Ljiljana Krajcar, tehničarka

Suradnik iz druge ustanove:

Slovenko Polanc, doktor kem. znanosti, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Ljubljana, Slovenija

Program rada i rezultati na projektu:

Budući da se novi projekt nastavlja na istraživanja započeta na prethodnoj temi, prikaz oba projekta bit će objedinjen.

Odgovor stanica na fizikalne, kemijske i biološke agense ovisi o vrsti štetnog agensa i o statusu same stanice. Iako se stanični odgovor na oštećenja istražuje dugi niz godina, elementi signalnih puteva nedovoljno su poznati, njihova regulacija samo djelomično rasvijetljena, a literaturni podaci često kontradiktorni. Naša istraživanja u ovom području proširili smo na razjašnjavanje uloge pojedinih mehanizama staničnog odgovora na genotoksične agense: popravka oštećenja u DNA, aktivacije stresnih kinaza JNK/SAPK i p38, obitelji gena p53, te elemenata procesa apoptoze. Posebnu pažnju posvetili smo mehanizmima kojima stanice postaju otporne na citostatike.

Adenovirusni vektori najčešće se koriste u genskoj terapiji tumora. Ispitali smo utjecaj dužine vlakna na vezivanje i ulazak u stanicu.

Temeljem poznavanja centralnih molekula stanične homeostaze, kao što je glutation, sintetiziraju se i testiraju novi spojevi, koji bi mogli poboljšati učinak terapije tumora, osobito u onih pacijenata koji su na klasičnu kemoterapiju postali otporni.

Glavni rezultati koje smo dobili u prošloj godini su: a) aktivacija MAP kinaza ima važnu ulogu u odgovoru humanih tumorskih stanica na cisplatinu, te vjerojatno i u otpornosti stanica na taj citostatik; b) skraćenje dužine vlakna adenovirusa malo utječe na njegovo vezivanje, ali bitno utječe na učinkovitost ulaska u stanicu; c) novosintetiziran spoj UP-91 smanjuje koncentraciju glutationa u stanicama, te inducira staničnu smrt.

Reserach programme and results

New project continues on the old one. Therefore, the research program and the results of both will be presented together.

Cell response to physical, chemical and biological agents depends on the type of DNA damaging agents and on the cell status. Although the cell response has been examined for years, molecular mechanisms involved in this process are not completely elucidated, their regulation is only partially known, and the literature data are often contradictory.

Our investigation is focused to the elucidation of molecular mechanisms of cell response to genotoxic agents and its regulation, specially the role of DNA damage repair, stress kinases, the genes of p53 family, as well as the apoptotic signaling pathway. The molecular mechanisms involved in drug-resistance are studied as well.

Adenovirus vectors are usually used in human tumor gene therapy. We examine the role of adenovirus fiber length on its binding and entry in the cells. Main results that we obtained in last year are: a) the activation of MAP kinases is important in the response of tumor cells to cisplatin, and probably, in cell-resistance to this drug; b) the shortening of adenovirus fiber length slightly influences its binding, but significantly alters its entry into the cell; c) specific compound UP-91 targeted to glutathione may reduce its level and induce cell death in tumor cells.

REGULACIJA TRANSKRIPCIJE KOD EUKARIOTA TRANSCRIPTIONAL REGULATION IN EUKARYOTES

Voditeljica projekta: dr. sc. Mary Sopta

Tel. ++385 1 4560 948 e-mail: msopta@rudjer.irb.hr

Suradnice na projektu:

Lidija Starešinčić, dipl. inž. mol. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Ana Traven, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Mary Sopta, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica

Program rada i rezultati na projektu:

Regulacija transkripcije putem RNA-polimeraze II osnovni je mehanizam regulacije ekspresije gena u eukariotima. Osim polimeraze, u procesu transkripcije ključnu funkciju imaju opći transkripcijski faktori. Aktivatori i represori transkripcije pozitivno, odnosno negativno reguliraju ekspresiju gena modificirajući strukturu kromatina, ili djelujući direktno na opće transkripcijske faktore i RNA-polimerazu II. U procesu transkripcije ključne su brojne interakcije protein-protein koje se mijenjaju ovisno o okolišnim i razvojnim signalima, te se tako mijenja ekspresija pojedinih gena. U mnogim slučajevima, promjene u aktivnosti ili regulaciji transkripcijskih faktora uzrokuju patološka stanja, kao što su rak i SIDA.

Svrha predloženih istraživanja je pojašnjavanje funkcije nekoliko modelnih transkripcijskih faktora u kvascu *Saccharomyces cerevisiae*. U dosadašnjim istraživanjima smo pokazali da protein retinoblastoma, pRb, može reprimirati transkripciju u stanicama kvasca. Također smo definirali faktore (Rpd3 i Sin3, te Cln3) koji su potrebni za represiju putem pRb *in vivo*. Prethodnim istraživanjima se utvrdilo da kvašćev protein Xtc1 stvara interakcije s kiselim aktivacijskim domenama nekoliko aktivatora transkripcije. Nastavili smo istraživanja funkcije proteina Xtc1 u regulaciji transkripcije i pokazali da posjeduje svojstva transkripcijskog represora. Pošto je ovaj protein uključen i u regulaciju fiziologije mitohondrija u kvašćevim stanicama, istražiti ćemo i potencijalnu ulogu Xtc1-a u komunikaciji između jezgre i mitohondrija. U daljnjem radu ćemo karakterizirati funkciju kvašćevog faktora TFIIIF, čiji homolog u humanim stanicama ima ključnu ulogu u inicijaciji i elongaciji transkripcije putem RNA-polimeraze II.

Pojašnjavanje funkcije ovih modelnih transkripcijskih faktora imat će opće značenje za razumijevanje procesa regulacije ekspresije gena u eukariota, te potencijalno značajnu primjenu u istraživanjima diferencijacije, razvoja i bolesti kod kojih je pokazano da dolazi do promjena u ekspresiji gena.

Research programme and results:

We have used the model organism *Saccharomyces cerevisiae* to functionally characterize a number of model transcription factors.

Our studies have shown that pRb can repress transcription of a reporter gene when introduced into a heterologous yeast system. Transcriptional repression by pRb in yeast depends on the histone deacetylase components Rpd3 and Sin3, and in addition appears to require the yeast cyclin Cln3. The yeast protein Xtc1 is involved in maintenance of mitochondrial DNA. It has also been shown to interact with the acidic activation domain of E2F1 in *in vitro* experiments. We have shown that Xtc1 can function as a weak transcriptional repressor *in vivo* when tethered to DNA by a heterologous DNA binding domain and that this repression is dependent on the yeast factor Srb10. Future studies include a functional characterization of the yeast general initiation factor TFIIIF, a homolog of the human TFIIIF factor which has essential roles in initiation and elongation of transcription by RNA polymerase II.

MOLEKULARNI MEHANIZMI IMORTALIZACIJE I STANIČNOG STARENJA MOLECULAR MECHANISMS OF IMMORTALIZATION AND CELLULAR AGING

Voditelj projekta: dr. sc. Ivica Rubelj

Tel. ++385 1 456 1093

e-mail: rubelj@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Ivica Rubelj, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Marina Ferenac, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Milena Ivanković, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Maja Matulić, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Branko Brdar, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Suradnici iz drugih ustanova:

Miljenko Huzak, doktor matem. znanosti, docent, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Jasna Ban, doktorica biol. znanosti, redovita profesorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultantica)

Antonella Bandiera, doktorica biol. znanosti, izvanredna profesorica, University of Trieste, Trieste, Italija

Olivia Pereira-Smith, doktorica biol. znanosti, UTHSCSA, San Antonio, SAD (konzultantica)

Program rada i rezultati na projektu:

U ovom projektu ćemo temeljitije istražiti molekularne mehanizme karcinogeneze i staničnog starenja, ponajprije kroz istraživanje strukture i funkcije telomera te njihove interakcije s kontrolom staničnog ciklusa koje uključuje: istraživanje finih mehanizama održavanja telomera (skraćivanje/produživanje) i strukturnih promjena te proteinske interakcije; istraživanje raznih aspekata Sindroma naglog starenja (Sudden Senescence Syndrome (SSS)), ključnog događaja u normalnom staničnom starenju koji je direktno povezan sa zbivanjima na telomerama; detaljnije istraživanje ulaska stanica u krizu i njihova imortalizacija nakon ekspresije SV40 Tg.

Research programme and results:

In this project we will further examine molecular mechanisms of cell aging and immortalization, primarily through research on telomere structure and function and their interaction with cell cycle control which include: examination of fine mechanisms of telomere maintenance (shortening/extension), structural properties and protein interactions; to elucidate various aspects of phenomena of sudden and stochastic

appearance of senescent cells in mammalian cell culture (referred to as Sudden Senescence Syndrome (SSS)), a crucial event in normal cell aging connected to telomere shortening; to elucidate in more details crisis and immortalization of SV40 Tg expressing normal human fibroblasts.

STRUTURA, FUNKCIJA I REGULACIJA PLAZMINOGENSKIH SERINSKIH PROTEAZA

STRUCTURE, FUNCTION AND REGULATION OF PLASMINOGEN SERINE PROTEASES

Voditelj projekta: dr. sc. Branko Brdar

Tel. ++385 1 45 61 093 e-mail: brdar@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Branko Brdar, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Maja Matulić, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Suradnica iz druge ustanove:

Nathalie Busso, doktorica biol. znanosti, Centre Hospitalier Universitaire Vaudois, Lausanne, Švicarska

Program rada i rezultati na projektu

Razvijamo eksperimentalni model za nadzor razine fibrina/fibrinogena *in vivo*, pospješujući njegovu razgradnju koja se temelji na aktivaciji plazminogena (Plg) u plazmin (Plm) pomoću neizravnog plazminogen aktivatora (PA), fuzijskog proteina streptokinaze (SK) i ljudskog mikroplazminogena (mPlg) (SK-mPlg), za kojeg očekujemo da aktivira mišji Plg pa bi stoga bio podesan za terapijsko testiranje na mišjim modelima humanih bolesti (npr. reumatoidni artritis) karakterističnim po prekomjernom odlaganju fibrina. Konstruirali smo cDNA kimeru SK-mPlg i klonirali je u kvaščevom i bakterijskom ekspresijskom vektoru.

Research programme and results:

We are developing an experimental model for control of fibrin/fibrinogen *in vivo* by accelerating its destruction based on plasminogen (Plg) activation to protease plasmin (Plm) through the action of indirect plasminogen activator, streptokinase (SK)-human microplasminogen (mPlg) fusion protein. This fusion protein is expected to be an efficient activator of mouse Plg, and would therefore be suitable for therapeutic testing in mouse models of human diseases (e. g., rheumatoid arthritis) that are characteristic for excessive deposition of fibrin. We constructed SK-mPlg fusion cDNA and cloned it into *Pichia pastoris* as well as bacterial expression vectors.

DINAMIKA I GENETIKA BIOAKTIVNIH MOLEKULA DYNAMICS AND GENETICS OF BIOACTIVE MOLECULES

Voditelj projekta: dr. sc. Volker Magnus

Tel. ++385 1 4561 002, e-mail: magnus@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Eduard Dolušić, magistar kem. znanosti, asistent, znanstveni novak

Ivan Habuš, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Branimir Klaić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Volker Magnus, doktor biol. znanosti, znanstveni savjetnik
Željko Marinić, magistar kem. znanosti, stručni suradnik
Branka Salopek-Sondi, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Kristina Wolsperger, dipl. inž. kemije, stručna suradnica

Tehnički suradnik:

Vladimir Vraneša, samostalni tehničar (1/2 radnog vremena)

Suradnica iz druge ustanove:

Maja Kovač, doktorica biol. znanosti, izvanredna profesorica, Univerza v Ljubljani, Slovenija (konzultantica)

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj rada na projektu je upoznavanje molekularne osnove biološke aktivnosti. Glavni rezultati postignuti su na ovim područjima:

- fiziologija, biokemija i kemija biljnih hormona,
- NMR spektroskopija spojeva od biološkog interesa.

Na području biljnih hormona nastavili smo istraživanje morfoloških i biokemijskih promjena koje prate razvoj cvjetova i plodova u bijelog kukurijeka (*Helleborus niger* L.), eksperimentalnog modela koji obećava zanimljive rezultate o koordinaciji vegetativnog i generativnog razvoja u biljaka. Dokazali smo da se rast cvjetne stapke ubrzava kako plodnice dozrijevaju, a mladi plodovi djeluju na latice da se rašire i da razviju funkcionalni fotosintetski sustav. U steriliziranim cvjetovima, uspjeli smo inducirati rast stabljike primjenom auksina, dok su giberelini i citokinini pokrenuli metamorfozu latica. To upućuje na zaključak da u tim procesima sudjeluju odgovarajući endogeni hormoni. Ova pretpostavka upravo se provjerava u suradnji s inozemnim kolegama koji raspolažu s potrebnim instrumentima/metodama. Drugi dugoročni projekt na području biokemije biljnih hormona obuhvaća pripremu auksina koji sadrže dodatne funkcionalne skupine koje omogućavaju vezanje na molekularne probe i makromolekularne nosače, a da se pri tom ne blokiraju strukturni elementi koji definiraju auksine. Istraživanja na području NMR-spektroskopije uključuju kolege s Instituta te domaćih i stranih sveučilišta, a odnose se na strukturnu i preparativnu kemiju i na interakcije molekula u otopini.

Research programme and results:

The project addresses the molecular base of biological activity. In the report period, we focused on the following subjects:

- physiology, biochemistry and chemistry of plant hormones,
- NMR spectroscopy applied to compounds of biological interest.

In the area of plant hormones, we continued previous research on the morphological and biochemical changes which accompany flower and fruit development in the Christmas rose (*Helleborus niger* L.), a promising model system for research on the coordination of vegetative and generative development in plants. We showed that the elongation of the flower stalk (peduncle) is triggered by the maturing pistils, and that the ripening fruit cause the petals to spread and to develop a functional photosynthetic system. In depistilled flowers, the elongation of the peduncle could be induced by applying auxins, while gibberellins and cytokinins initiated the metamorphosis of the petals. This suggests a role for the respective endogenous plant hormones in these processes. This hypothesis is currently checked in collaboration with foreign colleagues who have access to the necessary instruments/methods. A second long-term project in plant hormone biochemistry comprises the design of auxins which contain additional functional groups that permit coupling to molecular probes and macromolecular carriers without blocking

the structural elements by which auxins are defined. The NMR-spectroscopic studies, including colleagues from the Institute and domestic and foreign universities, covered the structural and preparative chemistry of heterocycles, as well as molecular interactions in solution.

MOLEKULARNA PATOFIZIOLOGIJA SEROTONERGIČNE TRANSMISIJE MOLECULAR PATHOPHYSIOLOGY OF SEROTONERGIC TRANSMISSION

Voditelj projekta: dr. sc. Branimir Jernej

Tel. ++385 1 45 61 150 e-mail: jernej@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Zvonimir Bokulić, dipl. inž. kem., mlađi asistent, znanstveni novak
Tatjana Bordukalo Nikšić, dipl. inž. mol. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Lipa Čičin-Šain, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica
Vedrana Filić, dipl. inž. mol. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Dubravka Hranilović, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica
Branimir Jernej, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik
Jasminka Štefulj, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnici:

Katarina Karlo, samostalna tehničarka
Vladimir Vraneša, samostalni tehničar (1/2 radnog vremena)
Tamara Vraneša, peračica laboratorijskog posuđa (1/3 radnog vremena)

Suradnici iz drugih ustanova:

Brigitta Boudy, doktorica med. znanosti, redovita profesorica, University of Munich, Munich, Njemačka
José-Maria Delgado, doktor med. znanosti, redoviti profesor, University of Sevilla, Sevilla, Španjolska
Dieter Wildenauer, doktor biol. znanosti, University of Bonn, Bonn, Njemačka
Marko Žirin, doktor med. znanosti, University of Ljubljana, Ljubljana, Slovenija

Program rada i rezultati na projektu:

Daljnji razvoj i karakterizacija dvaju eksperimentalnih modela koji su izvorno razvijeni u našem laboratoriju: štakor s konstitucijskom hiperserotoninemijom i štakor s disreguliranim serotoninским prijenosnikom (Wistar-Zagreb 5HT štakor). Karakterizacija se odnosila na neurokemiju mozga i specifične aspekte ponašanja vezane uz serotonin. Izvještaj o rezultatima tog dijela istraživanja iznesen je na 11. sastanku akcije COST B10 (*Brain damage and repair*, Trinity College, Dublin).

Na kliničkoj razini, osim nastavka neurokemijskih istraživanja sinaptičnih 5HT proteina na trombocitnom modelu, u tijeku su molekularno-genetička istraživanja gena koji kodiraju te sinaptične elemente, u bolesnika od shizofrenije, migrene te žrtava samoubojstva.

Oba vida istraživanja (fundamentalna i klinička) u jednom svom dijelu se provode u okviru međunarodnih suradnji.

Research programme and results:

Further development and characterisation of two originally developed rodent models: rat with constitutional hyperserotonemia and rat with disregulated serotonin transporter (Wistar - Zagreb 5HT rat). Characterisation was focused on 5HT related brain

neurochemistry and specific behavioral paradigms. Progress report was given on COST B10 meeting (*Brain damage and repair*, Trinity College, Dublin).

At the clinical level, besides continuation in neurochemical research on synaptic 5HT proteins on platelet model, molecular-genetic studies on genes encoding synaptic 5HT proteins in schizophrenic patients, migraineous patients and suicide victims are in course.

Both, basic and clinical research is partly conducted in the frame of international collaborations.

HIDRODINAMIKA CEREBROSPINALNOG LIKVORA HYDRODYNAMICS OF THE CEREBROSPINAL FLUID

Voditelj projekta: dr. sc. Darko Orešković

Tel. ++385 1 4680 218 e-mail: doresk@rudjer.irb.hr

Suradnik na projektu:

Darko Orešković, doktor veterinar. znanosti, znanstveni suradnik

Suradnici iz drugih ustanova:

Ana Fröbe, doktorica med. znanosti, Zavod za nuklearnu medicinu, Klinička bolnica "Sestre milosrdnice", Zagreb (konzultantica)

Marijan Klarica, doktor med. znanosti, Hrvatski institut za mozak, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Nastavit će se dosadašnje istraživanje hidrodinamike cerebrospinalnog likvora s posebnim naglaskom na vrednovanju modela perfuzije likvorskih prostora indikator supstancijom, kao metodom za izračunavanje stvaranja likvora. Također će se razviti novi model mjerenja stvaranja likvora praćenjem slobodnog istjecanja likvora kroz cjevčicu uvedenu u Sylvijev akvedukt. Dobiveni rezultati pomoću te dvije metode bit će međusobno uspoređivani.

Research programme and results:

Former studies on hydrodynamics of the cerebrospinal fluid (CSF) are continued focusing on the validation the model of perfusion of the CSF system using indicator substance, a method for calculation of the CSF formation, and on development of a new model of measuring the CSF formation by monitoring a free efflux of the CSF through a canule introduced into aqueduct of Sylvius. The obtained results in this manner will be compared with those obtained by perfusion.

ENDEMSKE I RELIKTNE FITOCENOZE HVATSKE I NJIHOVA MIKOFLORA ENDEMIC AND RELICT PHYTOCENOSES IN CROATIA AND THEIR MYCOFLORA

Voditelj: dr. sc. Andrija-Željko Lovrić

Tel. ++385 1 4561 075 e-mail: azlovric@irb.hr

Suradnici na projektu :

Oleg Antonić, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Andrija-Željko Lovrić, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Armin Mešić, dipl. inž. biologije, mlađi asistent, znanstveni novak

Mladen Rac, doktor biol. znanosti, viši asistent

Zdenko Tkalčec, dipl. inž. biologije, mlađi asistent, znanstveni novak

Tehnički suradnik :

Neven Matočec, tehničar

Vanjska suradnica na projektu:

Morana Biljaković, dipl. inž. biol., volonter

Suradnica iz druge ustanove:

Maja Kovačević, magistrica biologije, Arboretum HAZU, Trsteno, Dubrovnik

Program rada i rezultati na projektu:

Terenska istraživanja obalnih halofita i morskih alga obavljena su od travnja do listopada na kopnenoj obali Kvarnera i sjeverne Dalmacije, te na otocima Krk, Rab, Dugi otok, Kornati i srednjojadranski pučinski otočići. Sabrani uzorci su spremljeni u herbarij ADRZ na IRB, iz čega su sada objavljeni ili u tisku vegetacijski pregledi Dugog otoka, jugoistočnog Krka, Prvića, Grgura, Žirja, Sveca, Sušca i Palagruže. Mikološka su istraživanja obavljena uglavnom u okolini Zagreba, Gorskom Kotaru, Istri i nekim dalmatinskim otocima, a pripadni uzorci gljiva uvršteni su u mikološku zbirku CNF na IRB-u, od čega su novonađene za Hrvatsku 78 vrsta i 10 rodova gljiva. Naši noviji i već postojeći terenski rezultati su obrađeni kvantitativnim metodama raster-GIS modeliranja, čime je uglavnom dovršena detaljna ekološka karta vegetacijskih staništa Hrvatske u elektronskom obliku 1:300.000, koja će biti dostupna za uvid na internetu od 2003., u svrhu zaštite okoliša i gospodarenja prirodnim resursima. Naša istraživačka ekipa je ove godine objavila 8 znanstvenih i stručnih radova u časopisima i zbornicima, od kojih su 2 CC i još 2 SCI – citata.

Research programme and results:

Our field sampling of coastal halophytes and marine algae was from April to October 2002 at mainland shores of Kvarner Gulf and Northern Dalmatia, and also in Adriatic islands Krk, Rab, Dugi otok, Kornati, and in remote islets of central Adriatic offing. Collected samples are inserted in Herbarium ADRZ at our Institute, resulting by new vegetation surveys of islands Dugi otok, SE Krk, Prvić, Grgur, Žirje, Svetac, Sušac and Palagruža now published or in press. Mycological studies included chiefly the surroundings at Zagreb, Gorski Kotar highlands, Istra peninsula and some Dalmatian islands, and collected samples are in the fungarium CNF at our Institute, including 78 species and 10 genera new to Croatia. Our recent results and preexisting data are elaborated by the quantitative methods of raster-GIS models, resulting by a new computerized ecological map of vegetation sites in Croatia 1:300.000 that is mostly completed in electronic form, and will be available on Internet from 2003 for nature management and conservation. During this year, our laboratory published 8 scientific and professional papers in the periodicals and proceedings, including 2 ones quoted in Current Contents, and 2 others in Science Citation Index.

PRILOZI**Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:**

1. Ahel, Ivan; Stathopoulos, Constantinos; Ambrogelly, Alexandre; Sauerwald, Anselm; Toogood, Helen; Hartsch, Thomas; Söll, Dieter. Cysteine activation is an inherent *in vitro* property of prolyl-tRNA synthetases. // Journal of biological chemistry. 277 (2002), 38; 34743-34748.

2. Ahel, Ivan; Vujaklija, Dušica; Mikoč, Andreja; Gamulin, Vera. Transcriptional analysis of the *recA* gene in *Streptomyces rimosus*: identification of a new type of promoter. // FEMS microbiology letters. 209 (2002), 1; 129-133.
3. Ambrogelly, Alexandre; Ahel, Ivan; Polycarpo, Carla; Bunjun-Srihari, Shipra; Krett, Bethany; Jacquin-Becker, Clarisse; Ruan, Benfang; Köhrer, Caroline; Stathopoulos, Constantinos; RajBhandary, Uttam L.; Söll, Dieter. Methanocaldococcus jannaschii prolyl-tRNA synthetase charges tRNA^{Pro} with cysteine. // Journal of biological chemistry. 277 (2002), 38; 34749-34754.
4. Antica, Mariastefania; Kušić, Borka; Hranilović, Dubravka; Dietz, Al; Vuk-Pavlović, Stanimir. Cloning the cDNA for murine U2 snRNP-A' gene and its differential expression in lymphocyte development. // Immunology letters. 82 (2002) 217-223.
5. Arnerić, Milica; Traven, Ana; Starešinčić, Lidija; Sopta, Mary. The retinoblastoma family of proteins directly represses transcription in *Saccharomyces Cerevisiae*. // Journal of biological chemistry. 277 (2002), 11; 8797-8801.
6. Basarić, Nikola; Marinić, Željko; Višnjevac, Aleksandar; Kojić-Prodić, Biserka; Griesbeck, Axel; Šindler-Kulyk, Marija. Photochemical transformations of 2,2'-(1,2-phenylenedivinylene)dipyrroles. // Photochemical and photobiological sciences. 1 (2002), 12; 1017-1023.
7. Böhm, Markus; Gamulin, Vera; Schröder, Heinz C.; Müller, Werner E.G. Evolution of osmosensing signal transduction in *Metazoa*: stress-activated protein kinases p38 and JNK. // Cell and tissue research. 308 (2002), 3; 431-438.
8. Brdar, Branko; Matulić, Maja; Rubelj, Ivica; Ivanković, Milena; Reich, Edward. Human immunodeficiency virus-1 tat- and tat/nef-defective genomes containing HIV-regulated diphtheria toxin A chain gene inhibit HIV replication // Croatian medical journal. 43 (2002), 5; 591-597.
9. Durajlija-Žinić, Sonja; Četković, Helena; Müller, Werner E.; Gamulin, Vera. Signal recognition particle 54 kD protein (SRP54) from the marine sponge *Geodia cydonium*. // Food technology and biotechnology. 40 (2002), 3; 233-237.
10. Frkanec, Leo; Jokić, Milan; Makarević, Janja; Wolšperger, Kristina; Žinić, Mladen. Bis(PheOH) maleic acid amide-fumaric acid amide photoisomerization induces microsphere-to-gel fiber morphological transition: The photoinduced gelation system. // Journal of the american chemical society. 124 (2002), 33; 9718-9719.
11. Fulgosi, Hrvoje; Gerdes, Lars; Westphal, Sabine; Glockman, Christel; Soll, Jürgen. Cell and organelle division requires ARTEMIS. // Proceedings of national academy of sciences USA. 99 (2002), 17; 11501-11506.
12. Fulgosi, Hrvoje; Soll, Jürgen. The chloroplast protein import receptors Toc34 and Toc 195 are phosphorylated by distinct protein kinases. // Journal of biological chemistry. 277 (2002), 11; 8934-8940.
13. Fulgosi, Hrvoje; Soll, Jürgen; de Faria Maraschin, Simone; Korthout, Henrie; Wang, Mei; Testerink, Christa. 14-3-3 proteins and plant development. // Plant molecular

biology. 50 (2002) 1019-1029.

14. Ivančić-Baće, Ivana; Škrobot, Nikolina; Zahradka, Davor; Salaj-Šmic, Erika; Brčić-Kostić, Krunoslav. Genetic requirements for conjugational recombination in the presence of lambda Gam protein in *Escherichia coli*. // Food technology and biotechnology. 40 (2002), 4; 261-265.
15. Jacquin-Becker, Clarisse; Ahel, Ivan; Ambrogelly, Alexandre; Ruan, Benfang; Söll, Dieter; Stathopoulos, Constantinos. Cysteinyl-tRNA formation and prolyl-tRNA synthetase. // FEBS letters. 514 (2002), 1 SI; 34-36.
16. Jernej, Branimir; Vladić, Anton; Čičin-Šain, Lipa; Hranilović, Dubravka; Banović, Miroslav; Bališa, Melita; Bilić, Ervina; Sučić, Zvonimir; Vukadin, Stjepan; Grgičević, Damir. Platelet serotonin measures in migraine. // Headache. 42 (2002), 7; 588-595.
17. Korenčić, Dragana; Ahel, Ivan; Soll, Dieter. Aminoacyl-tRNA synthesis in methanogenic archaea. // Food technology and biotechnology. 40 (2002), 4; 255-260.
18. Matulić, Maja; Brdar, Branko. Urokinase-type plasminogen activator and plasminogen activator inhibitor induction by etoposide in a glioblastoma cell strain. // Food technology & biotechnology. 40 (2002), 1; 1-7.
19. Medalia, O.; Weber, Igor; Frangakis, A. S.; Nicastro, D.; Gerisch, G.; Baumeister, W. Macromolecular architecture in eukaryotic cells visualized by cryoelectron microscopy. // Science. 298 (2002) 1209-1213.
20. Mešić, Armin; Tkalčec, Zdenko. Preliminary checklist of agaricales from Croatia. II. Families Agaricaceae, Amanitaceae, Cortinariaceae and Hygrophoraceae. // Mycotaxon. 83 (2002) 453-502.
21. Moskatelo, Dubravka; Benjak, Aleksandar; Laketa, Vibor; Polanc, Slovenko; Košmrlj, Janez; Osmak, Maja. Cytotoxic effects of diazenes on tumor cells in vitro. // Chemotherapy. 48 (2002), 1; 36-41.
22. Moskatelo, Dubravka; Polanc, Slovenko; Košmrlj, Janez; Vuković, Lidija; Osmak, Maja. Diazenecarboxamide UP-91, a potential anticancer agent, acts by reducing intracellular glutathione content. // Pharmacology & toxicology. 91 (2002); 258-263.
23. Mravinac, Brankica; Plohl, Miroslav; Meštrović, Nevenka; Ugarković, Đurđica. Sequence of PRAT satellite DNA "frozen" in some coleopteran species. // Journal of molecular evolution. 54 (2002), 6; 774-783.
24. Müller, Werner EG; Böhm, Markus; Grebenjuk, Vladislav A.; Skorokhod, Alexander; Müller, Isabel M.; Gamulin, Vera. Conservation of the positions of metazoan introns from sponges to humans. // Gene. 295 (2002), 2; 299-309.
25. Orešković, Darko; Klarica, Marijan; Vukić, Miroslav. The formation and circulation of cerebrospinal fluid inside the brain ventricles: a fact or a illusion?. // Neuroscience letters. 327 (2002), 2; 103-106.

26. Plohl, Miroslav; Prats, Eva; Martinez-Lage, Andres; Gonzales-Tizon, Ana; Mendez, Josefina; Cornudella, Luis. Telomeric localization of the vertebrate-type hexamer repeat, (TTAGGG)_n, in the wedgeshell clam *Donax trunculus* and other marine invertebrate genomes. // *Journal of biological chemistry*. 277 (2002), 22; 19839-19846.
27. Rubelj, Ivica, Huzak, Miljenko; Brdar, Branko; Pereira-Smith, Olivia M. A single-stage mechanism controls replicative senescence through Sudden Senescence Syndrome. // *Biogerontology*. 3 (2002), 4; 213-222.
28. Salopek-Sondi, Branka; Kovač, Maja; Prebeg, Tatjana; Magnus, Volker. Developing fruit direct post-floral morphogenesis in *Helleborus niger* L.. // *Journal of experimental botany*. 53 (2002), 376; 1949-1957.
29. Salopek-Sondi, Branka; Luck, Linda A. ¹⁹F NMR study of the leucine-specific binding protein of *Escherichia coli*: mutagenesis and assignment of the 5-fluorotryptophan-labeled residues. // *Protein engineering*. 15 (2002), 11; 855-859.
30. Salopek-Sondi, Branka; Swartz, Derrick; Adams, Pamela S.; Luck, Linda A. Exploring the role of amino acid-18 of the leucine binding proteins of *E. coli*. // *Journal of biomolecular structure and dynamics*. 20 (2002), 3; 381-387.
31. Štefulj, Jasminka; Jakopec, Sanjica; Osmak, Maja; Jernej, Branimir. Serotonin and apoptosis: studies on rat lymphocytes. // *Neuroimmunomodulation*. 10 (2002), 3; 132-133.
32. Traven, Ana; Starešinčić, Lidija; Arnerić, Milica; Sopta, Mary. The yeast protein Xtc1 functions as a direct transcriptional repressor. // *Nucleic acids research*. 30 (2002), 11; 2358-2364.
33. Ugarković, Đurđica; Plohl, Miroslav. Variation in satellite DNA profiles - causes and effects. // *EMBO journal*. 21 (2002), 22; 5955-5959.
34. Vujaklija, Dušica; Schröder, Werner; Abramić, Marija; Zou, Peijian; Leščić, Ivana; Franke, Peter; Pigac, Jasenka. A novel streptomycete lipase: cloning, sequencing and high-level expression of the *Streptomyces rimosus* GDS(L)-lipase gene. // *Archives of microbiology*. 178 (2002), 2; 124-130.
35. Weber, Igor; Niewöhner, Jens; Du, A.; Röhrig, Ursula; Gerisch, Günther. A talin fragment as an actin trap visualizing actin flow in chemotaxis, endocytosis, and cytokinesis. // *Cell motility and the cytoskeleton*. 53 (2002) 136-149.
36. Xu, Rong; Hranilović, Dubravka; Fetsko, Leah A.; Bućan, Maja; Wang, Yanyan. Dopamine D2S and D2L receptors may differentially contribute to the actions of antipsychotic and psychotic agents in mice. // *Molecular psychiatry*. 7 (2002), 10; 1075-1082.
37. Zahradka, Davor; Zahradka, Ksenija; Petranović, Mirjana; Đermić, Damir; Brčić-Kostić, Krunoslav. The RuvABC resolvase is indispensable for recombinational repair in sbcB15 mutants of *Escherichia coli*. // *Journal of bacteriology*. 184 (2002),

15; 4141-4147.

38. Zdenko Tkalčec; Armin Mešić. Preliminary checklist of agaricales from Croatia. I. Families *Pleurotaceae* and *Tricholomataceae*. // *Mycotaxon*. 81 (2002) 113-176.

Knjige i poglavlja u knjigama:

1. Albrecht, Richard; Weber, Igor. Interference reflection microscopy // *Encyclopedia of life sciences*. London: Nature Publishing Group, 2002. Vol. 10, 369-371.
2. Harcet, Matija; Đikić, Marija; Gamulin, Vera. Genotipizacija Turopoljske svinje // *Turopoljska svinja - autohtona hrvatska pasmina / Đikić, Marija; Jurić, Ivan; Kos, Franjo (ur.). Velika Gorica: Plemenita općina turopoljska, 2002. 173-177.*
3. Magnus, Volker; Kojić-Prodić, Biserka. Auxins (indole auxins) // *Encyclopedia of agrochemicals, / Plimmer, Jack R. (ur.). New York: Wiley Interscience, 2002. Vol. 1, 99-121.*
4. Weber, Igor; Gerisch, G. Cortexillins // *Wiley encyclopedia of molecular medicine*. New York: John Wiley & Sons, 2002. vol. 1, 914-916.

Ostali radovi u časopisima:

1. Durgo, Ksenija; Osmak, Maja; Garaj-Vrhovac, Vera; Franekić-Colić, Jasna. Glucosinolates as possible revertants of drug-resistance. // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 4; 475-479.
2. Fulgosi, Hrvoje; Ester, Lea; Ljubešić, Nikola. Essential role of peptidyl-prolyl isomerase sll0408 in *Synechocystis sp.* PCC 6803 development. // *Periodicum biologorum*. 11 (2002), 4; 413-419.
3. Jokić, Maja; Andreis, Mladen; Klaić, Branimir. Pedeset godina Kemije u industriji - bibliometrijski i scientometrijski prikaz. // *Kemija u industriji*. 51 (2002), 3; 116-122.
4. Lovrić, Andrija-Željko; Rac, Mladen. Flora, phytocenoses and algal phytonyms in islands Svetac, Brusnik and near bottoms of central Adriatic. // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 2; 149-158.
5. Lovrić, Andrija-Željko; Rac, Mladen; Mileković, Marijan Horvat. Diversity of old-Croatian names for seaweeds and maritime nature in the Adriatic islands. // *Natura Croatica*. 11 (2002), 4; 455-477.
6. Rac, Mladen; Lovrić, Andrija-Željko. Benthic and xeric vegetation of remote islands Sušac and Kopište, and of adjacent seafloors in southern Adriatic. // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 2; 139-148.
7. Zahradka, Davor; Zahradka, Ksenija; Džidić, Senka; Đermić, Damir; Petranović, Mirjana. The rus-1 mutation suppresses cytological defects in *recBC sbcBC ruv* mutants of *Escherichia coli* // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 4; 389-397.
8. Zahradka, Ksenija; Zahradka, Davor; Đermić, Damir; Džidić, Senka; Petranović, Mirjana. The inactivation of free phages in UV-irradiated *Escherichia coli*. //

Periodicum biologorum. 104 (2002), 4; 399-403.

Znanstveni radovi u tisku:

1. Dogan-Koružnjak, Jasna; Slade, Neda; Grdiša, Mira; Zamola, Branimir; Pavelić, Krešimir; Karminski-Zamola, Grace. Novel derivatives of benzo[b]thieno[2,3-c]quinolones: synthesis, photochemical synthesis and antitumor evaluation. // Journal medicinal chemistry.

Doktorske disertacije:

1. Brozović, Anamaria. Molekularni mehanizmi apoptoze i popravka oštećenja u osjetljivoj stanici na cisplatinu. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 26.4.2002., 129 str., voditeljica: Osmak, Maja.
2. Šprem, Marina. Dijagnostičko i prognostičko značenje glutaciona, glutation S-transferaza, katepsina D, urokinaznog plazminogen aktivatora, inhibitora plazminogen aktivatora tipa 1, p53 i bcl-2 u bolesnika sa karcinomom jajnika. Zagreb: Medicinski fakultet, 30.9.2002., 90 str., voditeljica: Osmak, Maja.
3. Traven, Ana. Komunikacija između staničnih organela u regulaciji transkripcije ovisne o RNA-polimerazi II. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 22.11.2002, 110 str., voditeljica: Sopta, Mary.

Magistarski radovi:

1. Franjević, Damjan. Struktura i organizacija satelitske DNA vrste *Tribolium brevicornis* (Coleoptera, Tenebrionidae). Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 29.4.2002., 121 str., voditelj: Plohl, Miroslav.
2. Hegediš, Ksenija. Serotoninski prijenosnik: kinetička istraživanja u moždanoj kori štakora. Zagreb: Farmaceutsko-biokemijski fakultet, 21.3.2002., 63 str., voditeljica: Čičin-Šain, Lipa.

Diplomski radovi:

1. Čepo, Tina. Kloniranje gena za protein koji veže jednolančanu DNA iz bakterije *Streptomyces griseus*. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 28.5.2002., 38 str., voditeljica: Vujaklija, Dušica.
2. Kožić, Erika Katačić. Priprava i biološka aktivnost 2-alkilindol-3-octenih kiselina. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 20.9.2002., 54 str., voditelj: Magnus, Volker.
3. Miše, Nikica. Utjecaj mutacije *recS* na popravak DNA u bakteriji *Escherichia coli*. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 12.11.2002., 39 str., voditeljica: Lerš, Nella.
4. Moslavac, Sunčana. Uloga kompleksa RecB1080CD-Gam u popravku DNA nakon gama zračenja u bakteriji *Escherichia coli*. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 20.12.2002., 52 str., voditelj: Brčić-Kostić, Krunoslav.
5. Mustapić, Maja. Distribucija polimorfnih alela gena za prijenosnik 5HT u ljudi. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 10.10.2002., 44 str., voditelj: Jernej,

Branimir.

6. Paškvan, Ivan. Genetička analiza Gam-ovisne radiorezistencije u bakteriji *Escherichia coli*. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 9.10.2002, 41 str., voditelj: Brčić-Kostić, Krunoslav.
7. Šarić, Maja. Utjecaj kadmija na vodenu leću (*Lemna minor* L.) u uvjetima *in vitro*. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 21.1.2002, 45 str., voditelj: Ljubešić, Nikola.
8. Tadin, Ante. Polimorfizam introna 13, gena za monoamin-oksidadazu B (MAO-B) u zdravih žena. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 5.2.2002., 32 str., voditelj: Jernej, Branimir.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

Bruvo, B.: Evolucija satelitskih DNA roda *Pimelia*, Hrvatsko genetičko društvo - Grupa za molekularnu biologiju, Zagreb, 28.1.2002.

Fulgosi, H.: Evolucija eukariotske stanice - teorija endosimbioze, Hrvatsko društvo za teorijsku i matematičku biologiju, 14.3.2002.

Ambriović Ristov, A.: Skraćivanje drška vlakna adenovirusa tip 5, Hrvatsko genetičko društvo – Grupa za molekularnu biologiju, 11.4.2002.

Fulgosi, H.: ARTEMIS is a novel component of chloroplast division apparatus, Department of biochemistry, Arrhenius laboratories for natural sciences, University of Stockholm, Švedska, 12.4.2002.

Fulgosi, H.: Tic i Toc na vratima kloroplasta, Zavod za molekularnu biologiju Biološkog odsjeka PMF-a, Hrvatsko genetičko društvo i Hrvatsko društvo za biljnu fiziologiju, Zagreb, 14.5.2002.

Meštrović, N.: Satelitna DNA u svijetlu rađanja novih vrsta, Hrvatsko društvo za teorijsku i matematičku biologiju, Zagreb, 6.6.2002.

Štefulj J.: Samoubojstvo - postoje li biološki pokazatelji rizika, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zavod za molekularnu biologiju, 155. Kolokvij Mladih istraživača, 27.6.2002.

Klaić, B.: Primjena scientometrijskih pokazatelja u procjeni znanstvenog doprinosa u medicinskim znanostima, Zavod za fiziologiju Medicinskog fakulteta u Zagrebu, 30.10.2002.

Petrović, V.: Obrasci promjena u biološkoj evoluciji, Hrvatsko društvo za teorijsku i matematičku biologiju, Zagreb, 7.11.2002.

Zahradka, D.: Uloga RuvABC rezolvaze u rekombinacijskom popravku DNA kod bakterije *Escherichia coli*, Hrvatsko genetičko društvo, 371. kolokvij Grupe za molekularnu biologiju, Zagreb, 20.11.2002.

Weber, I.: Kompjuterizirana mikroskopija u analizi stanične dinamike, Hrvatsko društvo za teorijsku i matematičku biologiju, Zagreb, 13.12.2002.

Domazet Lošo, T.: Geni bez porijekla i evolucijske inovacije, Hrvatsko genetičko društvo - Grupa za molekularnu biologiju, Zagreb, 23.12.2002.

Rubelj, I.: A single-stage mechanism controls replicative senescence through Sudden Senescence Syndrome, UTHSCSA, San Antonio, SAD, 25.9.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

Ahel, I., Department of molecular biophysics and biochemistry, Yale university, New Haven, SAD, 1.1.-31.12.2002.

Čogelja Čajo, G., Departement de biochimie medicale, Faculté de médecine, Université de Genève, Geneva, Švicarska, 1.1.-31.12.2002.

Domazet Lošo, T., Institut für Genetik, Universität Köln, Köln, Njemačka, 1.1.-31.12.2002.

Zahradka, D., Institut Jacques Monod, Paris, Francuska, 1.1.-31.7.2002.

Zahradka, K., Faculté de médecine Necker - Enfants Malades, Paris, Francuska, 1.1.-31.7.2002.

Čimbora Zovko, T., McGill university, Montreal, Kanada 14.1.-13.3.2002.

Jakopec, S., FEBS advanced course: «Estimation of DNA damage induced by radiation and genotoxic agents», Gliwice. Poljska, 17-23.2.2002.

Bruvo, B., Department of Zoology, University of Vienna, Vienna, Austrija, 1.3.-31.12.2002.

Plohl, M., Institute for molecular biology IBMB-CSIC, Barcelona, Španjolska, 2.5.-2.8.2002.

Majhen, D., FEBS advanced course: «Identification of novel targets cancer therapy: application SEREX methodology», Kiev, Ukrajina, 27.5.-1.6.2002.

Dolušić, E., Departement Scheikunde, Katholieke Universiteit Leuven, Belgija, od 15.6.2000.

Brozović, A., Institut für Toxikologie, Universität Mainz, Mainz, Njemačka 18.6.-30.11.2002.

Rubelj, I., University of Texas health science centre at San Antonio, Ann and Sam Barshop centre for longevity and aging, San Antonio, SAD, 1.7.-31.9.2002.

Mijaković, I., INRA, Plaisire Grignone, Versailles, Francuska, 1.8.-31.12.2002.

Salopek-Sondi, B., Center for advanced materials processing, Clarkson university, Potsdam, SAD, od 15.8.2001.

Hranilović D., School of medicine, University of Bonn, Bonn, Njemačka, 18.8.-14.9.2002.

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje:

Magnus V., Department of agricultural, food and nutritional science, University of Alberta, Kanada, 26.7.-9.9.2002.

Gamulin, V., Johannes Gutenberg Universität, Institut für Physiologische Chemie, Mainz, Njemačka, 11.11.-11.12.2002.

Petranović, M., Institut national de la recherche agronomique, Jouy-en-Josas, Francuska, 1.12.-31.12.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

EMBO WORKSHOP ON PROKARYOTES IN THE THIRD MILLENIUM

Heidelberg, Njemačka, 25.4.-30.4.2002.

Sudionica: Džidić, S.

43. FRÜHJAHRSTAGUNG DER DGPT

Mainz, Njemačka, 12.3.-14.3.2002.

Sudionica: Brozović, A.

Prilog:

Brozović, A.; Osmak, M.; Fritz, G.; Kaina, B.: Molecular mechanisms contributing to cisplatin resistance in human cervix carcinoma cell, predavanje.

2nd INTERNATIONAL MEETING SUICIDE – INTERPLAY OF GENES AND ENVIRONMENT

Portorož, Slovenija, 9.5.-12.5.2002.

Sudionica: Štefulj, J.

Prilog:

Štefulj, J.; Furač, I.; Hranilović, D.; Balija, M.; Kubat, M.; Jernej, B.: Tryptophan hydroxylase gene polymorphism (A218C) in violent suicide victims: age and sex influences, predavanje.

CROATIAN, HUNGARIAN AND SLOVENIAN SYMPOSIUM ON INDUSTRIAL MICROBIOLOGY AND MICROBIAL ECOLOGY

Opatija, Hrvatska, 7.6.-9.6.2002.

Sudionica: Vujaklija, D.

Prilog:

Vujaklija, D.; Abramić, M.; Leščić, I.; Pigac, J.: The third lipolytic-family in *Streptomyces*, represented by the novel GDS(L) lipase from *S. rimosus*, pozvano predavanje.

1st CROATIAN CONGRESS ON MOLECULAR LIFE SCIENCES

Opatija, Hrvatska, 9.6.-13.6.2002.

Sudionici: Brčić-Kostić, K.; Četković, S.; Durajlija-Žinić, S.; Ferenac, M.; Fulgosi, H.; Gamulin, V.; Harcet, M.; Ivanković, M.; Lukić-Bilela, L.; Magnus, V.; Matulić, M.; Mravinac, B.; Petranović, M.; Petrović, V.; Prebeg, T.; Rubelj, I.; Salaj-Šmic, E.; Traven, A.; Ugarković, Đ.; Vujaklija, D.

Prilozi:

Antolić, S.; Dolušić, E.; Bertoša, B.; Kojić-Prodić, B.; Magnus, V.; Salopek-Sondi, B.; Čepo, T.; Gamulin, V.; Vujaklija, D.: Cloning the gene of the single stranded DNA binding protein (SSB) from *Streptomyces rimosus*, poster.

Četković, H.; Müller, W. E.G.; Gamulin, V.: Primary structure and phylogenetic analysis of protein-tyrosine kinases (PTKS) from the marine sponge *Suberites domuncula* (Demospongiae), poster.

Durajlija-Žinić, S.: Computational long range analyses of human pericentromeric regions, predavanje.

Fulgosi, H.; Gerdes, L.; Westphal, S.; Glockman, C.; Soll, J.: Cell and organelle division requires ARTEMIS, predavanje.

Gamulin, V.; Müller, W. E. G.: Sponges (Porifera): the source of valuable bioinformation, pozvano predavanje.

Harcet, M.; Đikić, M.; Gamulin, V.: Genotyping of the Turopolje pig, poster.

Ivančić-Baće, I.; Škrobot, N.; Moslavac, S.; Salaj-Šmic, E.; Brčić-Kostić, K.: Genetic requirements for conjugational and transductional recombination in the presence of the lambda Gam protein in *Escherichia coli*, poster.

Leščić, I.; Vujaklija, D.; Pigac, J.; Abramić, M.: Protein sequence analysis of *Streptomyces rimosus* extracellular lipase, poster.

Lukić-Bilela, L.; Müller, W., EG; Gamulin, V.: Partial analysis of the mitochondrial DNA from the marine sponge *Suberites domuncula* (Demospongiae), poster.

Meštrović, N.; Mravinac, B.; Plohl, M.; Ugarković, Đ.: Phylogeny of Tribolium beetles (Coleoptera: Tenebrionidae) resolved by combined analysis of mitochondrial genes: congruence with morphological data, poster.

Mravinac, B.; Ugarković, Đ.; Franjević, D.; Plohl, M.: Satellite DNA sequences of three species from the genus Tribolium (Insecta, Coleoptera), poster.

Paškvan, I.; Salaj-Šmic, E.; Ivančić-Baće, I.; Zahradka, K.; Lerš, N.; Brčić-Kostić, K.: The genetic dependence of RecBCD-Gam mediated double strand end repair in *Escherichia*

coli, pozvano predavanje.

Paškvan, I.; Salaj-Šmic, E.; Ivančić-Baće, I.; Zahradka, K.; Lerš, N.; Brčić-Kostić, K.: The genetic dependence of RecBCD-Gam mediated double strand end repair in *Escherichia coli*, poster.

Petrović, V.; Ugarković, Đ.; Plohl, M.: Characterization of two novel satellite DNAs from the mollusc *Donax trunculus*, poster.

Prebeg, T.; Wrischer, M.; Ljubešić, N.: Molecular organization and origin of chromoplast fibrils - do they develop by simple self-assembly?, poster

Tomić, S.: Molecular recognition of auxins - a rational approach to plant growth regulation, pozvano predavanje.

Ugarković, Đ.; Meštrović, N.; Mravinac, B.; Bruvo, B.; Plohl, M.: Evolutionary dynamics of satellite DNAs, pozvano predavanje.

MATH/CHEM/COMP 2002. THE 17th DUBROVNIK INTERNATIONAL COURSE & CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATHEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCES

Dubrovnik, Hrvatska, 24.6.-29.6.2002.

Sudionik: Marinić, Ž.

Prilog:

Vikić-Topić, D.; Marinić, Ž.: Deuterium isotope effects in ¹³C NMR spectra, poster.

3rd FORUM OF EUROPIAN NEUROSCIENCE

Pariz, Francuska, 13.7.-17.7.2002.

Sudionik: Jernej, B.

Prilog:

Jernej, B.; Čičin-Šain, L.; Hranilović, D.; Bordukalo, T.; Hegediš, K.: Rat model of constitutional upregulation/downregulation of the serotonin transporter, poster.

XIXth IUPAC SYMPOSIUM ON PHOTOCHEMISTRY

Budimpešta, Mađarska, 14.7.-19.7.2002.

Prilog:

Butković, K.; Basarić, N.; Marinić, Ž.; Šindler-Kulyk, M.: Photochemical behaviour of o-stilbenyl-pyrroles and sydnones, poster.

XIX. CONGRESS AND GENERAL ASSEMBLY OF THE INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY

Ženeva, Švicarska, 6.8.-15.8.2002.

Sudionica: Kojić-Prodić, B.

Prilog:

Kojić-Prodić, B.; Magnus, V.; Tomić, S.; Antolić, S.; Salopek-Sondi, B.; Dolušić, E.; Bertoša, B.: Molecular recognition of the plant hormone auxin is still a puzzle, poster.

5th EMBL TRANSCRIPTION MEETING

Heidelberg, Njemačka, 24.8.-28.8.2002.

Sudionica: Sopta, M.

Prilog:

Arnerić M.; Traven, A.; Starešinčić L.; Sopta, M.: The Rb family of proteins directly represses transcription in *S. cerevisiae*, poster.

BRIJUNI CONFERENCE "SPACE, TIME AND LIFE"

Brijuni, Hrvatska, 26.8.-30.8.2002.

Sudionik: Plavšić, D.

Prilog:

Plavšić, D.; Šoškić, M.; Lerš, N.; Frkanec, L.: Modelling of boiling points of benzenoid hydrocarbons revisited, poster.

13th CONGRESS OF THE FEDERATION OF EUROPEAN SOCIETIES OF PLANT PHYSIOLOGY

Hersonissos, Kreta, Grčka, 2.6.-6.9.2002.

Sudionica: Prebeg, T.

Prilog:

Prebeg, T.; Šarić, M.; Ljubešić, N.: Effect of cadmium on the chloroplasts of duckweed (*Lemna minor* L.), poster.

1st CENTRAL EUROPEAN CONFERENCE «CHEMISTRY TOWARDS BIOLOGY»

Portorož, Slovenija, 8.9.-12.9.2002.

Sudionica: Abramić, M.

Prilog:

Abramić, M.; Leščić, I.; Vujaklija, D.; Pigac, J.: Extracellular lipase from *Streptomyces Rimosus*: an unusual bacterial lipolytic enzyme, pozvano predavanje

3rd SLOVENIAN SYMPOSIUM ON PLANT PHYSIOLOGY

Ljubljana, Slovenija, 25.9.-27.9.2002.

Sudionici: Fulgosi, H.; Magnus, V.; Prebeg, T.

Prilozi:

Fulgosi, H.; Gerdes, L.; Westphal, S.; Glockman, C.; Soll, J.: ARTEMIS is a novel element of cell and chloroplast division, poster.

Kokanj, D.; Šoškić, M.; Magnus, V.; Ilakovac-Kveder, M.: Fluorescence properties of derivatives of indole-3-acetic acid, poster.

Prebeg, T.; Wrischer, M.; Ljubešić, N.: Characteristics of overwintering leaves, poster.

Salopek-Sondi, B.; Tarkowski, P.; Kovač, M.; Strnad, M.; Magnus, V.: Cytokinins in flowers and fruit of the Christmas rose, poster.

ERA OF HOPE DEPARTMENT OF DEFENSE BREAST CANCER RESEARCH PROGRAM MEETING

Orlando, Florida, SAD, 25.9.-28.9.2002.

Sudionica: Salopek-Sondi, B.

Prilog:

Luck, L. A.; Swartz, D. J.; Maab, A.; Salopek-Sondi, B.: Biophysical studies of the hormone-binding domain of the estrogen receptor, poster.

FROM MOLECULAR STRUCTURE TO CELLULAR MOTILITY

München, Njemačka, 9.10.-12.10.2002.

Sudionik: Weber, I.

Prilozi:

Faix, J.; Weber, I.; Jacob, J.; Schleicher, M.: Signaling molecules as regulators of cytokinesis and cell motility, predavanje.

Gerisch, G.; Bretschneider, T.; Köhler, J.; Weber, Igor.: Actin dynamics and actin flow in chemotaxis, endocytosis and cytokinesis, predavanje.

Weber, I.; Niewöhner, J.; Du, A.; Gerisch, G.: A talin fragment entraps actin and visualizes actin flow in chemotaxis, endocytosis and cytokinesis, poster.

Xth WORLD CONGRESS ON PSYCHIATRIC GENETICS

Bruxelles, Belgija, 9-13.10.2002.

Prilog:

Hranilović, D.; Čičin-Šain, L.; Bordukalo, T.; Jernej, B.: Sublines of rats with constitutionally upregulated and downregulated 5HT homeostasis: differences in anxiety and exploratory behavior, poster.

MUSEOLOGICAL SYMPOSIUM RIJEKA 2002

Rijeka, Hrvatska, 23.10.-26.10.2002.

Sudionik: Lovrić, A.-Ž.

Prilozi:

Hrabrić, T.; Lovrić, A.-Ž.: Scientific collections of biological specimens from islands Prvić, Grgur and SE Krk, predavanje.

Lovrić, A.-Ž.: Herbaria and documentation on Mediterranean flora in southwestern Croatia, predavanje.

Rac, M.: Phycothecas and bibliographies of eastern Adriatic macroalgae, poster.

ANNUAL MEETING OF CROATIAN IMMUNOLOGICAL SOCIETY

Trakošćan, Hrvatska, 22.11.-24.11.2002.

Sudionice: Ambriović-Ristov, A.; Majhen, D.

Prilog:

Majhen, D.; Ambriović-Ristov, A.; Eloit, M.: Vector for tumor gene therapy: human adenovirus type 5 retargeted on aminopeptidase N, poster.

SIXTH SIGMA-ALDRICH ORGANIC SYNTHESIS MEETING

Spa, Belgija, 5-6.12.2002.

Sudionik: Dolušić, E.

Prilog:

Dolušić, E.; Dehaen, W.: Selective syntheses of A2B-type meso-triarylcorroles, poster.

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija:

Jernej, B.: COST B10, član upravnog odbora, predstavnik Hrvatske (Europska zajednica)

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Brdar, B. (IRB); Busso, N. (Centre hospitalier universitaire Vaudois, Lausanne): Utjecaj fibronilitičkog djelovanja u eksperimentalnim modelima reumatoidnog artritisa - Effect of fibronilytic treatment in experimental models of rheumatoid arthritis, SCOPES grant, Swiss national science foundation.

Gamulin, V. (IRB); Schröder, H.C. (Universität Mainz, Institut für Physiologische Chemie): Sistem za odgovor na etilen kod Metazoa - Ethylene-responsible system in Metazoa, bilateralna suradnja Hrvatska-Njemačka.

Jernej, B.; Delgado-García J.M.: Biološke studije i studije ponašanja štakora sa promjenjenom serotoninском homeostazom - Behavioral and biological studies on rats with altered serotonin homeostasis (Zagreb - Wistar 5HT rats), bilateralni hrvatsko-španjolski projekt između: IRB, Zagreb i Neuroscience department, University Pablo de Olavide, Seville, Španjolska.

Jernej, B.; Schauenstein, K.: Serotonin i imuna funkcija: studija štakora nakon farmakološke i genetičke manipulacije serotoninске homeostaze - Serotonin and immune functions: studies on rats after pharmacological and genetic manipulations of serotonin homeostasis, bilateralni hrvatsko-austrijski projekt između: IRB, Zagreb i

Institute for general and experimental pathology, Karl-Franzens university, Graz, Austrija.

Jernej, B.; Wildenauer, D.B.: Pročavanje gena za serotoninški transporter i ekspresija u šizofreniji - Studies on serotonin transporter gene structure and expression in schizophrenia, bilateralni hrvatsko-njemački projekt između: IRB, Zagreb i School of medicine, University of Bonn, Njemačka.

Jernej, B.; Bondy, B.: Genetičke studije sinaptičkih elemenata u zdravoj populaciji i psihijatrijski poremećaji - Genetic studies on synaptic elements in healthy population and psychiatric disorders, bilateralni hrvatsko-njemački projekt između: IRB, Zagreb i Neurochemistry department, Psychiatric hospital, University of Munich, Njemačka.

Landini, P. (EAWAG, Dübendorf, Swiss); Svetličić, V.; Žutić, V.; Petranović, M.; Batel, R. (IRB): Identifikacija bakterijskih struktura važnih za bakterijsku adheziju uz korištenje senzora za elektrokemijsku adheziju - Identification of bacterial structures important for bacterial adhesion using electrochemical adhesion sensors, SCOPES grant, Swiss national science foundation.

Osmak, M. (IRB); Polanc, S. (University of Ljubljana, Faculty of chemistry and chemical technology): Diazeni kao mogući lijekovi protiv raka - Diazenes as potential anticancer drugs, bilateralna suradnja Hrvatska-Slovenija.

Plohl, M. (IRB); Lachowska-Cierlik, D. (Polish academy of sciences, Institute of systematics and evolution of animals, Krakow): Satelitna DNA i konstitutivni heterokromatin vrsta roda *Cionus* (Coleoptera: Curculionidae) - Satellite DNA and constitutive heterochromatin in *Cionus* species (Coleoptera: Curculionidae), projekt u okviru bilateralnog sporazuma Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Poljske akademije znanosti.

Salaj-Šmic, Erika; Robert G. Lloyd: Uloga enzima RecBCD u staničnoj vijabilnosti - Role of RecBCD enzyme in cell viability, bilateralni hrvatsko-britanski projekt u okviru programa "Academic links and interchange scheme (ALIS) između Instituta "Ruđer Bošković" i Department of genetics, Nottingham university, Nottingham.

Sopta, M. (IRB); Schaffner, W. (University of Zürich, Institute for molecular biology): Funkcionalna karakterizacija proteina Xtc1 kvasca *Saccharomyces cerevisiae* - Functional characterization of the Xtc1 protein of *Saccharomyces cerevisiae*, SCOPES grant, Swiss national science foundation.

Vujaklija, D. (IRB); Schwab, H. (Graz university of technology, Institute of biotechnology): Molekularna enzimologija i enzimsko inženjerstvo hidrolaza - Molecular enzymology and enzyme engineering of hydrolases, bilateralna suradnja Hrvatska – Austrija.

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

Dorota Lachowska-Cierlik, Institute of systematics and evolution of animals, Polish academy of sciences, Krakow, Poljska, 7.2.–30.3.2002. i 10–22.9.2002.

Jutta Ludwig-Müller, Technische Universität Dresden, Njemačka, 14-15.6.2002.

László Szilágyi, Lajos Kossuth university, Debrecen, Mađarska, 20-22.6.2002.

Petr Tarkowski, Laboratory of growth regulators, Olomouc, Češka republika, 10-12.7.2002.

Dieter B. Wildenauer, Molecular genetics laboratory, Department of psychiatry, University of Bonn, 13.12.2002.

<http://www.irb.hr/zmm.html>

ZAVOD ZA MOLEKULARNU MEDICINU

DIVISION OF MOLECULAR MEDICINE

Prof. dr. sc. Krešimir Pavelić, predstojnik Zavoda

Tel: ++385 1 4680 094, fax: ++385 1 456 1010, e-mail: pavelic@irb.hr

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za staničnu i molekularnu imunologiju, dr. sc. Mariastefania Antica, voditeljica laboratorija

Laboratorij za molekularnu onkologiju, dr. sc. Jasminka Pavelić, voditeljica laboratorija

Laboratorij za molekularnu patologiju, dr. sc. Koraljka Gall-Trošelj, voditeljica laboratorija

Laboratorij za eksperimentalnu hematologiju, imunologiju i onkologiju, dr. sc. Jelka Gabrilovac, voditeljica laboratorija

Laboratorij za modifikatore biološkog odgovora, dr. sc. Ivo Hršak, voditelj laboratorija do 31.1.2002., dr. sc. Tatjana Marotti, voditeljica laboratorija od 1.2.2002.

Laboratorij za imunokemiju, dr. sc. Biserka Pokrić, voditeljica laboratorija

Laboratorij za molekularnu endokrinologiju i transplantaciju, dr. sc. Milivoj Slijepčević voditelj laboratorija do 30.6.2002., dr. sc. Mirko Hadžija, voditelj laboratorija od 1.7.2002.

Laboratorij za diferencijaciju stanica i tkiva, dr. sc. Neven Žarković, voditelj laboratorija

Laboratorij za molekularnu neurofarmakologiju, dr. sc. Danka Peričić, voditeljica laboratorija Pogon laboratorijskih životinja, dr. sc. Marko Radačić, voditelj

Tajništvo: Olgica Pečnik, Ankica Vratarić

Pomoćno osoblje: Renata Despotović, (Ines Poljanec, Adrijana Cesnik, na porodiljskom dopustu) Marko Vratarić

U okviru Zavoda do 30.6.2002. provodila su se istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

ISTRAŽIVANJE RAKA

CANCER RESEARCH

Direktor programa: dr. sc. Krešimir Pavelić

Teme u sastavu programa:

Aktivacija gena u leukemijama, dr. sc. Mariastefania Antica, voditeljica teme

Patogeneza kronične limfocitne leukemije, dr. sc. Jelka Gabrilovac, voditeljica teme

Opioidni peptidi i hematopoeza, dr. sc. Jelka Gabrilovac, voditeljica teme

Uzroci i posljedice presađivanja endokrinog tkiva pankreasa, dr. sc. Mirko Hadžija, voditelj teme

Mehanizmi djelovanja enkefalina i peptidoglikana, dr. sc. Ivo Hršak, voditelj teme

Genetička istraživanja Gorlinova sindroma, dr. sc. Sonja Levanat, voditeljica teme

Komparativna molekularna imunologija, dr. sc. Renata Novak Kujundžić, voditeljica teme

Gensko liječenje tumora, dr. sc. Jasminka Pavelić, voditeljica teme

Molekulska genetička osnova metastaziranja, dr. sc. Krešimir Pavelić, voditelj teme

Cijepljenje virusnim podjedinicama, dr. sc. Biserka Pokrić, voditeljica teme

Oksidativni stres i zloćudne bolesti, dr. sc. Neven Žarković, voditelj teme

Tema izvan sastava programa:

Neurofarmakologija GABA i 5-HT sustava, dr. sc. Danka Peričić, voditeljica teme

Program rada:

Program «Istraživanje raka» obuhvatio je bazična i primjenjena istraživanja molekularno-genetičke i stanične osnove raka. Program je također obuhvatio i istraživanja molekulske genetike oboljenja uzrokovanih tzv. dinamičnim mutacijama odnosno nakupljanjem ponavljajućih sljedova trinukleotida.

Rezultati istraživanja objavljeni su u 2002. godini u 33 znanstvena rada u časopisima indeksiranim u Current Contents. U prvom ćemo dijelu spomenuti neke od rezultata koji su inače iscrpno opisani u okviru pojedinih tema. Osvrnut ćemo se također i na primjenu rezultata ovih istraživanja, jer se taj aspekt ne spominje u rezultatima izvještaja prikazanim u ovom izvješću.

Znatan dio rezultata našao je svoju izravnu ili potencijalnu primjenu u okviru molekulske-genetičkih dijagnostičkih postupaka, novootkrivenih gena kao potencijalnih genetičkih biljega, novih postupaka u liječenju oboljelih od zloćudnih tumora te novih postupaka u domeni tkivnog inženjerstva. Evo i nekih od primjera. Razvijene su i uključene u rutinsku kliničku primjenu slijedeće genetičke metode: određivanje genetičke sklonosti nastanku medularnog raka štitnjače u okviru sindroma MEN-2 (analiza gena *ret*), dijagnostika familijarne adenomatozne polipoze (analiza gena *APC*), određivanje sklonosti nastanka ne-polipoznog raka debelog crijeva (geni skupine odgovorne za HNPCC), dijagnostika Duchennove mišićne distrofije, Huntingtonove bolesti, sindroma fragilnog X, cistične fibroze, Gorlinova sindroma, familijarnog melanoma, genotipizacija humanih papiloma virusa, citomegalovirusa, adeno-združenog virusa, *Helicobacter pylori*, *Eikenella corrodens*, *Actinobacillus actinomycetemcomitans*, *Porphyrromonas gingivalis*, *Bacterioides forsythus*, *Leptotrichia buccalis*, *Streptococcus mitis*, *Fusobacterium nucleatum* i *Prevotella intermedia*.

U okviru programa testiran je novi sustav za otkrivanje mutacija švicarske firme Elchrom Scientific (Spreadex™ i GMA™ gels SEA® 2000 Apparatus). Rezultat tog testiranja je i vrlo uspješna primjena sustava za otkrivanje mutacija gena za cističnu fibrozu ($\Delta F508$ i $\Delta I507$) i gena *APC* (familijarna adenomatozna polipoza debelog crijeva) što je i objavljeno u tiskanom propagandnom materijalu spomenute kompanije.

Otkrivena je nova metoda brzog probira bolesti uzrokovanih dinamičnim mutacijama.

Rutinski se primjenjuje metoda expand long PCR za dijagnosticiranje sindroma fragilnog X. Testira se i primjena te metode u dijagnosticiranju ostalih bolesti uzrokovanih dinamičnim mutacijama. Metodu su u literaturi prvi opisali istraživači uključeni u ovaj program, a danas se rutinski primjenjuje.

Otkrivena su dva nova gena – jedan u čovjeka, a drugi u miša. Gen *USP25* porijeklom iz čovjeka smješten je na kromosomu 21. Otkriven je i gen koji sudjeluje u razvoju T-stanica u miševa; cDNA za protein U2 snRNP-A poput *USP25* upisana je u GENE BANK. Uloga dvaju novootkrivenih gena sada se već istražuje i u drugim laboratorijima.

Primjenjuju se istraživanja hipertermije u liječenju oboljelih od tumora. Rezultati naših istraživanja učinaka cisplatine i etopozida ušli su u neke kliničke protokole. Rezultati testiranja novih potencijalnih lijekova ušli su u fazu I odnosno fazu II kliničkih istraživanja. Rezultati rada na problemu genskog liječenja doveli su do kliničkih faza istraživanja. Model genskog liječenja tzv. samoubilačkim genom (HSVtk) u kliničkoj je primjeni za liječenje zloćudnih tumora glave i vrata. Ostali genski pristupi zasnovani na primjeni tumor supresorskih gena *p53*, *p21*, *nm23-H1/H2* i *p73* ili su dovršeni ili se istražuju na *in vitro* ili *in vivo* modelima. Rezultati dobiveni s *antisense* liječenjem za gene obitelji IGF također bi uskoro mogli naći kliničku primjenu.

Neki od rezultata koriste se u Dispanzeru za kožne i spolne bolesti Doma zdravlja Medveščak u Zagrebu. Laser GaAs koristi se uspješno u bolesnika s *ulcus cruris*. Nadalje, spoznaje o fotodinamskom liječenju poslužile su kao temelj za kliničku primjenu koja je pred realizacijom.

Rezultati istraživanja mehanizama djelovanja met-enkefalina (MENK) omogućavaju planiranje MENK u liječenju. Mono- i polivalentna cjepiva, sastavljena od virusnih podjedinica i priređena u obliku emulzije voda/ulje/voda testirana su na 19000 pilića na farmama uzgojenih i tovnih pilića, pokazala su izvanrednu zaštitnu učinkovitost. Potvrđena je i mogućnost korištenja sintetskog peptida met-enkefalina (peptid-M) kao imunomodulatora kod autoimunih bolesti te korist od primjene metoda tzv. mašinskog učenja pri procjeni utjecaja proteina na preživljenje oboljelih od karcinoma, na nastanak dijabetičke retinopatije i na razvoj bubrežnih kamenaca.

U okviru teme genskog liječenja tumora (samoubilačkim i supresorskim genima) potpuno su završena istraživanja liječenja upotrebom gena za timidin kinazu iz virusa Herpes simpleks

(HSVtk), koji, u kombinaciji s protuherpesnim lijekom ganciklovirom (GCV) izaziva samoubojstvo stanica. I u *in vitro* i u *in vivo* modelima ovaj se je pristup liječenja pokazao učinkovitim. Nastavljena su istraživanja genskog liječenja primjenom tumor supresorskih gena *p53* i *p21* na staničnim linijama tumora ljudi i miševa. Dokazali smo da gen *p53* izaziva apoptozu u staničnim linijama tumora ljudi s mutiranim ili inaktiviranim oblikom gena *p53*, dok gen *p21* izaziva apoptozu u istim staničnim linijama, ali tek nakon produženog djelovanja gena. Oba su gena, međutim, izazvala apoptozu u staničnoj liniji tumora miša Renca.

Započeta su istraživanja primjene gena *p73* u genskom liječenju. Gen *p73* stvara i mutirani oblik proteina koji je prisutan u različitim vrstama tumora čovjeka, ali ga nema u normalnom tkivu. Nastavljamo istraživanja kojima ćemo razriješiti ulogu mutiranog proteina u održavanju zloćudnog fenotipa. U svrhu liječenja genima *nm23-H1* i *nm23-H2*, fuzijski geni sačinjeni od gena *nm23* i gena za zeleni fluorescentni protein, korišteni su za prolaznu i stabilnu transfekciju (i kotransfekciju) stanica tumora glave i vrata čovjeka. Prolazna transfekcija uzrokuje pojačanu proliferaciju stanica, čak i kada su transfecirane konstruktima koji proizvode *antisense* RNA navedenih gena. Klonovi stabilno transfeciranih stanica, koje konstitutivno ekspimiraju *nm23-H1*, 24 sata nakon nasađivanja nisu pokazivale značajniji proliferirajući učinak za razliku od *nm23-H2* klonova.

Nasljedna su oboljenja osobito prikladna za istraživanje molekularnih mehanizama koji bi mogli uzrokovati karcinogenezu i malformacije. Gen *PTCH*, koji je odgovoran za Gorlinov sindrom, je tumor supresor uključen u genuz malformacija i tumora koji se u sindromu javljaju s većom učestalošću nego sporadično u općoj populaciji. Usto, nedavno je pokazano da *PTCH* funkcionira u sklopu novootkrivenog signalnog puta *SHH/PTCH/SMO*.

U našem istraživanju molekularne genetike sporadičnih karcinoma kolona istraživali smo također i učestalost mutacija gena *DPC4*. Mutaciju smo dokazali u svega jednom tumoru; radilo se o novoj, do sada još neobjavljenoj, sporadičnoj mutaciji.

U okviru istraživanja molekularne genetike karcinoma kolona ispitali smo ekspresiju proteina *nm23-H1* i prisutnost gubitka heterozigotnosti gena *nm23-H1* u sporadičnim adenokarcinomima debelog crijeva. Ekspresija proteina i to slabog intenziteta dokazana je u 41% ispitanih tumora. Ekspresija proteina *nm23-H1* dokazana je većinom u tumorima klasificiranim kao Dukes' B (67%) te u dobro diferenciranim tumorima (65%). Gubitak heterozigotnosti dokazali smo u 33% informativnih uzoraka. Također je dokazana pozitivna korelacija između LOH-a gena *nm23-H1* i stupnja diferencijacije te stadija po Dukes'-u ispitivanih tumora. Iz navedenih se rezultata može zaključiti da promjene gena *nm23-H1* sigurno doprinose napredovanju karcinoma debelog crijeva.

Nastavljena su istraživanja diferencijacije limfocita s posebnim naglaskom na transkripcijske faktore i ispoljavanje gena koji reguliraju ovaj složen i strogo kontroliran proces. Glavni regulatori razvoja imunološkog sustava su tkivno specifični transkripcijski faktori koji diktiraju mjesto, vrijeme i brzinu prepisivanja ciljnih gena. Najvažnija obitelj gena odgovornih za pravilno sazrijevanje limfocita je obitelj *Ikaros* (*Ikaros*, *Aiolos*, *Helios*) opisana primarno na modelu miša. Među prvima smo pokazali da je gen *Aiolos* iz miševa homologan genu u ljudi te da kao i *Ikaros* ima više izoformi nastalih različitim prekrajanjem primarne mRNA.

Uspješno smo umnožili dio mRNA iz limfocita ljudi što ukazuje na njihovu međusobno visoku homologiju. Daljnjim istraživanjem utvrdit ćemo koje su izoforme gena *Ikaros*, *Aiolos* i *Helios* prisutne u malignim limfoproliferativnim oboljenjima ljudi.

Ispitivanje interakcije opioidnih peptida s membranskim enzimima koji sudjeluju u njihovoj degradaciji, pokazalo je da dugotrajno izlaganje nezrelih B-limfocita opioidnim peptidima dovodi do pojačane ekspresije enzima neutralne endopeptidaze. Rezultati govore u prilog uloge opioidnih peptida i neutralne endopeptidaze u regulaciji rasta nezrelih B-limfocita. U suradnji s kliničkim ustanovama ispitivani su defekti mitohondrijske DNA u bolesnika s nasljedno degenerativnim bolestima ili dijabetesom.

U nastavku studije polimorfizma gena za angiotenzin I – konvertazu (ACE) u mijelodisplastičnom sindromu (MDS) nije nađena statistički značajna razlika u distribuciji genotipova između MDS-bolesnika i kontrolne skupine. Multiparmetrijskom analizom kliničko-laboratorijskih parametara obzirom na izražaj ACE-a i ACE-genotip, utvrđena je negativna

korelacija između izražaja ACE-a u koštanoj srži i broja trombocita. Međutim, nije nađena značajna razlika u preživljenju bolesnika s MDS-om obzirom na ACE genotip.

Na modelu promijelocitne stanične linije HL-60 s visokom i selektivnom ekspresijom membranske aminopeptidaze N, ispitana je regulacija ovog enzima pomoću T-limfocitnog citokina, interferona-gamma. Nađeno je da interferon-gamma, ovisno o koncentraciji i duljini tretmana, regulira APN/CD13 na HL-60 stanicama, i to na razini mRNA, kao i funkcionalnog proteina.

S ciljem odabira imunološki aktivnih proteina, polipeptida i peptida za pripremu cjepiva koja potiču anti-virusni imunitet i specifični odgovor na antigene vezane uz autoimune i tumorske bolesti razrađen je i eksperimentalno potvrđen model za prepoznavanje komplementarnih peptida. Da bi se povećala učinkovitost proteina i peptida kao cjepiva ispitivan je način njihove pripreme i primjene. Za ciljanu antivirusnu zaštitu peradi i pripremu odgovarajućih cjepiva, uvedene su metode genske identifikacije terenskih izolata virusa.

Izučavana je pojavnost oksidativnog stresa u *in vitro* i *in vivo* uvjetima u srodnim patofiziološkim stanjima vezanim uz bolesti ljudi. Proučavani su učinci 4-hidroksinonenala (HNE), završnog produkta lipidne peroksidacije, na proliferaciju i diferencijaciju stanica te ekspresiju gena. Stanice mezenhimalnog porijekla međusobno su se razlikovale u osjetljivosti na HNE tako da su maligne osteosarkomske stanice bile osjetljivije na njegov učinak nego normalni osteoblasti. Slično tome, HNE je utjecao na proliferaciju malignih CEM-NKR leukemijskih stanica i normalnih ljudskih limfocita (HPBM) pri čemu je primijećena jasna razlika u odgovoru na HNE koja je ovisna o dozi. HNE je imao značajne citotoksične učinke na sintezu DNA i mitohondrijsku aktivnost CEM-NKR stanica, dok su učinci na HPBM stanice bili zanemarivi.

Nastavljena su istraživanja molekularno-genetičkih aspekata nasljednih bolesti. Opisan je prvi slučaj nasljedne mentalne retardacije u okviru sindroma fragilnog X (FRAXE), a objavljena je i velika studija mentalno retardirane djece s sindromom fragilnog X. Objavljen je podatak o novim alelima polimorfnog genetskog biljega D16S752 vezanog za E-kadherinski gen. Objavljena je i studija genske osnove Huntingtonove bolesti u Hrvatskoj u kojoj je načinjena molekularna analiza polimorfizama delta 2642 (E2642del), CAG i CCG. Objavljeni su i podaci funkcionalnih analiza jednostanične zelene alge *Acetabularia*. Jednostanična zelena alga *Acetabularia* koristi neobičajeni genetički kod, pri čemu univerzalni STOP kodoni UAA i UAG kodiraju za amino-kiselinu glutamin. Funkcionalne analize rekombinantnih proteina *Acetabularie* ograničene su stoga na djelomično translirane polipeptide. Da bismo riješili problem nepotpune translacije konstruirali smo inducibilni ekspresijski plazmid pET-5a sa supresorskom tRNA. UAA supresorka tRNA uvodi glutaminsku kiselinu kod UAA i UAG kodona. Praćenjem ekspresije gena za aktin *Acetabularie* pokazali smo da je naš sistem funkcionalan. Ekspimirane proteine, krnje ili cjelovite, moguće je upotrijebiti za pokuse obilježavanja epitopnih sljedova za međudjelovanja s nukleinskim kiselinama, proteinima ili drugim komponentama.

Research programme:

The "Cancer Research" program covered basic and applied research into the molecular-genetic and cellular basis of cancer. The program also covered research into the molecular genetics of diseases caused by so-called dynamic mutations, namely the accumulation of repeated trinucleotide sequences.

The results of the research were published in 2002 in 33 of scientific journals indexed in the Current Contents. In the first section, we shall mention some of the results which were comprehensively described within the framework of individual projects. We shall also address the application of the results of these researches, since this aspect is not mentioned in the results of the reports presented in this document.

A significant part of the results found their direct or potential application within the framework of molecular-genetic diagnostic procedures, newly discovered genes as potential genetic markers, new procedures in treating patients with malignant tumors and new procedures in the domain of tissue engineering. Here are some examples. On the basis of the program, the following genetic methods were developed and included into routine clinical practice:

determining the genetic predisposition to develop medullary cancer of the thyroid gland within the MEN-2 syndrome (analysis of the *RET* gene), the diagnostics of the familial adenomatous polyposis (analysis of the *APC* gene), determining the tendency to develop nonpolyposis colon cancer (the genes of the group responsible for HNPCC), diagnostics of Duchenne's muscular dystrophy, Huntington's disease, fragile X syndrome, cystic fibrosis, Gorlin's syndrome, familial melanoma, genotyping of the human papilloma viruses, presence of cytomegalovirus, adeno-associated virus, *Helicobacter pylori*, *Eikenella corrodens*, *Actinobacillus actinomycetemcomitans*, *Porphyromonas gingivalis*, *Bacterioides forsythus*, *Leptotrichia buccalis*, *Streptococcus mitis*, *Fusobacterium nucleatum* and *Prevotella intermedia*.

Within the program, a new system for detecting a mutation launched by the Swiss company Elchrom Scientific (Spreadex™ and GMA™ gels SEA® 2000 Apparatus) was tested. The testing resulted in a very successful application of the system for detecting mutation of the cystic fibrosis gene ($\Delta F508$ and $\Delta I507$) and the *APC* gene (familial adenomatous polyposis of the colon), which was published in the company's promotional material.

A new method for the quick differential diagnosis of diseases caused by dynamic mutations was also discovered. The expand long PCR method for diagnosing the fragile X syndrome is routinely applied. The application of this method in diagnosing other disease caused by dynamic mutations is also being tested. The method was first described by the researchers involved in this program and is today routinely applied.

Two new genes were discovered – one in human subjects, the other in mice. The *USP25* gene, originating from human subject, is located on chromosome 21. A gene participating in the development of the T-cells in mice was also discovered; cDNA for the U2 snRNP-A protein like *USP25* was entered into the GENE BANK. The role of the two newly discovered genes is being researched in other laboratories.

The research into hyperthermia in treating tumor patients is being applied. The results of our research into cisplatin and etoposides were included in some clinical protocols. The results of the testing of some new potential medications have entered Phase I or Phase II of clinical trials.

The results of the work in the field of genetic treatment are being partially applied. The gene therapy model using the suicide gene (HSVtk) is in clinical application in treating head and neck malignant tumors. Other genetic approaches based on the application of the tumor suppressor genes *p53*, *p21*, *nm23-H1/H2* and *p73* are either completed or are being researched on *in vitro* or *in vivo* models.

The results obtained through antisense treatment for genes of the IGF family could also soon be clinically applied. Some of the results are used at the Dermato-Venerological Clinic of the Medveščak Health Center in Zagreb. The GaAs laser is successfully used in patients with *ulcus cruris*. Furthermore, findings on photodynamic treatment have served as the basis for clinical application which is about to be implemented.

The results of the research into mechanisms of action for Met-Enkephalin (MENK) allow for planning MENK in treatment. Mono- and polyvalent vaccines, containing viral subunits and prepared as a water/oil/water emulsion were tested on 19,000 farm-grown and fattened chickens and demonstrated a remarkable protective efficiency in application. The possibility of using the synthetic peptide Met-Enkephalin (peptide M) as an immunomodulator in autoimmune diseases and the benefit from using the methods of machine learning in evaluating the impact of proteins on the survival of carcinoma patients, on the development of diabetic retinopathy and on the development of kidney stones were confirmed.

In the program of tumor gene therapy, we completed our research into the suicide gene approach. The suicide gene we used was the Herpes simplex virus thymidine kinase gene (HSVtk), which, when incorporated into tumor cells, rendered the infected cell sensitive to the otherwise nontoxic drug ganciclovir (GCV). The antitumor suicide gene approach was fully effective in both *in vitro* and *in vivo* models. In the course of 2002, we proceeded with exploring the therapeutic suppressor genes *p53* and *p21* in tumor gene therapy. We confirmed our hypothesis that the programmed cell death (apoptosis) counterparts in the mechanisms of tumor growth inhibition. The exogenous *p53* gene caused apoptosis in tumor

cell lines that had a mutated or inactivated endogenous *p53* gene, while the apoptosis induced by *p21* gene overexpression was seen only after a prolonged period of incubation with the virus-carrying *p21* transgene. Both genes were equally effective in inducing apoptosis in mouse carcinoma cell line. The main question concerning the *in vivo* therapeutic approach with *p53* and *p21* genes is whether the ectopic expression of therapeutic genes can stop or diminish *in vivo* tumor growth, and we started experiments to resolve this question. We also started experiments on evaluating the antitumor activity of the *p73* gene. We found that the human *p73* gene generates an NH₂-terminally truncated isoform that is frequently overexpressed in a variety of human cancers but not in normal tissue. We are proceeding with research into the role of the mutated *p73* protein in initiating or keeping a transformed phenotype in order to find a way of interfering with malignant transformation by the use of gene therapy.

Hereditary syndromes have facilitated understanding of the molecular mechanisms that may cause carcinogenesis and malformations during development. *PTCH*, the gene responsible for Gorlin syndrome, is a tumor suppressor involved in the genesis of various malformations and tumors that appear with greater incidence in the syndrome than in the general population. It has recently been found that *PTCH* functions within the newly discovered SHH/*PTCH*/*SMO* signaling pathway. Our research has proved by indirect methods (analysis of heterozygosity and SSCP) that the incidence of *PTCH* mutations in sporadic tumors and malformations is much greater than that of the syndrome itself. SSCP analysis established the patterns of the most frequent *PTCH* gene polymorphisms. Our first results from analyzing gene expression in the SHH/*PTCH*/*SMO* pathway indicate aberrant behavior of the *SMO* gene and the target gene *GLI*, supporting the hypothesis that all the pathway genes should be considered.

In order to select the immunologically active proteins, polypeptides and peptides for the design of vaccines that generate anti-viral immunity and a specific response against antigens associated with tumors and immune-mediated diseases, a complementary protein recognition model was proposed and experimentally tested. The vaccine preparation and administration were studied in order to find the optimal efficacy of the protein and peptide vaccines. Newly-introduced molecular biology methods for the identification of poultry viruses will enable the design and preparation of the appropriate vaccines for effective immunoprotection.

We also studied the mechanisms and factors involved in lymphocyte differentiation and the genes orchestrating this process. These mechanisms are strictly controlled. One of the lymphocyte development control systems is the activation of certain transcription factors that define the place, time and speed of target gene expression. The most important transcription factors in lymphocyte development are proteins from the *Ikaros* gene family (*Ikaros*, *Aiolos*, *Helios*). We found a very high homology between the mouse and the human *Aiolos* gene. In human material, we detected several *Aiolos* isoforms that are the result of alternative mRNA splicing. Given the predicted importance of these transcriptional factors in lymphocyte maturation, we investigated *Helios* mRNA expression in human lymphocytes in order to find out its possible role in human lymphoproliferative disorders.

The myelodysplastic syndrome (MDS) comprises a heterogeneous group of clonal bone marrow disorders characterised by abnormal differentiation and maturation of myeloid cells, bone marrow failure and a genetic instability with enhanced risk of transforming into secondary leukemia. As ACE has been shown to enhance the recruitment of bone marrow stem cells into the S-phase of the cell-cycle, we chose to investigate its role in dysfunctional hemopoiesis of the MDS. Multiparametric analysis of biochemical parameters to ACE expression and ACE genotype showed a statistically significant negative correlation between ACE expression and the number of platelets. Polymorphism of the ACE gene had no significant influence on the survival of MDS patients.

A major research topic is the evaluation of oxidative stress under experimental conditions *in vitro* and *in vivo* that resemble clinical disorders based on oxidative stress. We primarily studied the effects of 4-hydroxynonenal (HNE), the end-product of lipid peroxidation, on the proliferation and differentiation of normal and malignant cells and their gene expression. The

results indicated that HNE has a complex role in the processes of cell proliferation and differentiation and tumorigenesis; however, additional studies are needed to further clarify the role of HNE in cell growth control.

We concluded our molecular genetic studies of hereditary diseases concerning fragile chromosome X syndrome and Huntington disease. The molecular and clinical data show that FRAXE mental retardation is phenotypically very mild and that every woman with a mentally retarded and/or learning disabled family member should be investigated for the FRAXA and FRAXE loci of the fragile X syndrome.

AKTIVACIJA GENA U LEUKEMIJAMA GENE ACTIVATION IN LEUKAEMIA

Voditeljica teme: dr. sc. Mariastefania Antica

Tel. ++385 1 4561 065, e-mail: antica@irb.hr

Suradnice na temi:

Mariastefania Antica, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica

Tajana Körbler, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Borka Kušić, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Suradnici iz drugih ustanova:

Branimir Čvorišćec, doktor med. znanosti, redoviti profesor, Opća bolnica Sveti Duh, Zagreb

Marija Dominis, doktorica med. znanosti, redovita profesorica, Klinička bolnica Merkur, Zagreb

Miroslava Katičić, doktorica med. znanosti, redovita profesorica, Klinička bolnica Merkur, Zagreb

Elisabeth Kremmer, doktorica mol. znanosti, GSF Institute of Molecular Immunology, München, Njemačka

Elfriede Noessner, doktorica mol. znanosti, GSF Institute of Molecular Immunology, München, Njemačka

Stanimir Vuk-Pavlović, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Mayo Cancer Foundation, Rochester, MN, SAD

Program rada i rezultati na temi:

Laboratorij za staničnu i molekularnu imunologiju u proteklom se razdoblju bavio istraživanjem diferencijacije limfocita s posebnim naglaskom na transkripcijske faktore i ispoljavanje gena koji reguliraju ovaj složen i strogo kontroliran proces. Nezreli limfociti dobivaju specifične signale za daljnje usmjeravanje ili idu u programiranu staničnu smrt (apoptozu). Glavni regulatori razvoja imunološkog sustava su tkivno specifični transkripcijski faktori koji diktiraju mjesto, vrijeme i brzinu prepisivanja ciljnih gena. Najvažnija obitelj gena odgovornih za pravilno sazrijevanje limfocita je obitelj *Ikaros* (*Ikaros*, *Aiolos*, *Helios*) opisana primarno na modelu miša. Ovi transkripcijski faktori pojavljuju se u više izoformi nastalih različitim prekrajanjem primarne RNA.

Razlike u razvoju limfocita u dominantno negativnih (DN+/-) miševa i miševa s nul mutacijom Ikarosa (C/-) pokazale su da osim izoforme Ikarosa postoje i drugi faktori koji se mogu svojom dimerizacijskom domenom vezati za Ikaros i tvoriti heterodimere ili višestruke komplekse. Neke od ovih promjena izazivaju pojavu leukemija i limfoma u miševa.

Istraživanja gena *Ikaros* u ljudi pokazala su da su promjene u ekspresiji *Ikarosa* također uključene u maligna oboljenja; limfome i leukemije. Među prvima smo pokazali da je gen *Aiolos* iz miševa homologan genu u ljudi te da kao i Ikaros ima više izoformi nastalih različitim prekrajanjem primarne mRNA. Za ova istraživanja prilagodili smo i poboljšali metodu izolacije RNA u svrhu izolacije ukupne RNA iz limfnih čvorova fiksiranih u formalinu i uklopljenih u parafin. Tako smo mogli raditi retrospektivne studije na arhivskim uzorcima limfnih čvorova ljudi s limfoproliferativnim bolestima (limfomi, leukemije, folikularne hiperplazije).

S početnicama specifičnim za gen *Helios* miša uspješno smo umnožili dio mRNA iz limfocita ljudi što ukazuje na njihovu međusobno visoku homologiju. RT-PCR produkti nastali umnažanjem mRNA gena *Helios* ljudi iste su veličine kao u miša i odgovaraju dvjema izoformama *Heliosa*. U limfocitima tonzila zdravih ljudi, kao i u staničnim linijama izvedenih iz leukemija limfocita T, također su prisutne obje izoforme ovog transkripcijskog faktora. Međutim u limfocitima iz limfnih čvorova bolesnika s limfomima pokazali smo da se osim izoformi *Helios A* (712 pb) i *Helios B* (790 pb) pojavljuju i kraći RT-PCR produkti. Daljnjim istraživanjem utvrdit ćemo da li su to izoforme gena *Helios* ili produkti nastali zbog mutacije ili delecije dijela gena *Helios*.

Maligne limfome ponekad je teško dijagnosticirati rutinskim histopatoškim metodama i razlikovati ih od benignih infiltrata. Određivanje klonalnog profila limfocitne populacije najbolji je pristup, jer su maligni tumori monoklone bolesti. DNA smo izolirali iz tkiva limfnih čvorova bolesnika s limfomima. Čvorovi su bili fiksirani u formalinu i uklopljeni u parafin. Koristili smo semi-nested PCR metodu s početnicama komplementarnim za relativno konzervirane regije gena teškog lanca imunoglobulina (IgH). Ukoliko se radi o monoklonalnoj populaciji dobiva se PCR produkt jedinstvene veličine, nasuprot tome poliklonalna populacija daje PCR produkt različitih veličina. Metoda se pokazala izrazito učinkovitom (iznad 80%) u detektiranju malignih limfoma. Ovu smo metodu nadalje modificirali i primijenili na rano otkivanje MALT (mucosa-associated tissue) limfoma u uzorcima biopsija želuca osoba pozitivnih na *Helicobacter pylori*. Od 160 uzoraka biopsija želuca uklopljenih u parafin, porijeklom od 60 bolesnika s dispepsijom samo su dva pokazala monoklonalnu limfocitnu populaciju.

Research programme and results:

The main subjects of the studies in the Laboratory of cellular and molecular immunology were mechanisms and factors involved in lymphocyte differentiation, and genes orchestrating this process. These mechanisms are strictly controlled. Disregulation and defects in lymphocyte development and differentiation cause different diseases, in most cases lethal. One of the lymphocyte development control systems is activation of certain transcription factors. They define the place, time and speed of target gene expression. The most important transcription factors in lymphocyte development are proteins from the *Ikaros* gene family (*Ikaros*, *Aiolos*, *Helios*). They were first found and characterised in mice. Differences in lymphocyte development in dominant negative ($DN^{+/}$) mice and mice with null *Ikaros* mutation (C^{-}) revealed that beside various protein isoforms, exist some other factors that can bind *Ikaros* resulting in different heterodimer complexes formation.

Former investigation of *Ikaros* gene in humans showed altered *Ikaros* expression in malignant disorders; lymphomas and leukemias. We found a very high homology between the mouse and the human *Aiolos* gene. In human material we detected several *Aiolos* isoforms which are the result of alternative mRNA splicing. Given the predicted importance of these transcriptional factors in lymphocyte maturation we investigated *Helios* mRNA expression in human lymphocytes, to find out its possible role in human lymphoproliferative disorders. We amplified human mRNA using primers complementary to mouse *Helios* mRNA. The RT-“nested” PCR product was the same size as one derived from mice, which indicates their great homology. In fresh human tissues we managed to detect 1 isoform (peripheral blood) or 2 isoforms (lymph nodes and T derived cell lines) of *Helios* mRNA. In archive tissue specimens product of “nested”PCR was unexpectedly short. For these studies we isolated RNA from formalin fixed and paraffin embedded tissue which enabled retrospective studies on archive specimens of lymph nodes from patients with lymphoma, or with follicular hyperplasia.

Malignant lymphoma may be very difficult to diagnose with routine histopathological methods because they may recapitulate benign architecture or contain benign infiltrates. The best method of diagnosis is to establish the clonal profile of the lymphocyte population, since a monoclonal proliferation is highly suggestive of neoplasia. By means of a PCR (polymerase chain reaction) method it is possible to detect the immunoglobulin heavy chain (IgH) gene rearrangement and therefore establish the lymphocyte clonality. PCR with primers

complementary to relatively conserved regions called frameworks (FR1-FR3) laying among hypervariable regions (CDR1-CDR3) of IgH gene enable us to detect monoclonal versus polyclonal B-cell population. The length of the PCR product with these primers is unique if we deal with a monoclonal population. On the contrary, a polyclonal population gives PCR products of a different size.

In a retrospective study we used a semi-nested PCR to analyse paraffin embedded specimens. Clonality was successfully determined in all specimens. The method was further modified to analyse clonality in gastric biopsies from patients with *Helicobacter pylori* infection to detect the earliest stage of mucosa-associated lymphoid tissue lymphoma (MALT). From 160 biopsies belonging to 60 patients two showed monoclonal lymphocyte population not detectable by histopathology.

OPIOIDNI PEPTIDI I HEMATOPOEZA OPIOID PEPTIDES AND HEMATOPOIESIS

Voditeljica teme: dr. sc. Jelka Gabrilovac

Tel: ++385 1 4561 011 e-mail: gabril@irb.hr

Suradnici na temi:

Davorka Brelljak, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Barbara Buza-Vidas, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 22.2.2002.)
Jelka Gabrilovac, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Irena Martin Kleiner, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
Maruška Marušić, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja (do 14.1.2002.)
Marko Radačić, doktor vet. znanosti, znanstveni savjetnik
Tamara Stipčević, magistrica biomed. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja (porodiljni dopust)
Ranko Stojković, magistar biomed. znanosti, asistent, znanstveni novak

Tehnička suradnica:

Margareta Cvetkovski, tehničarka (60% radnog vremena)

Program rada i rezultati na temi:

U nastavku istraživanja uloge opioidnih peptida u hematopoezi, ispitivan je učinak endogenih (degradabilnih) opioidnih peptida na rast stanica hematopoetskog porijekla *in vitro*, te uspoređen s učinkom sintetskih (nedegradabilnih) peptida, iste receptorske specifičnosti. Endogeni i sintetski opioidni peptidi negativno su utjecali na rast nezrelih B limfocita. Mehanizam usporenog rasta mogao se djelomice pripisati inhibiciji signalizacije putem Ca^{++} kao drugog glasnika, dok nije nađena fragmentacija DNA kao odraz pokretanja apoptotičnog signalnog puta. U ispitivanju interakcije opioidnih peptida s membranskim enzimima koji sudjeluju u njihovoj degradaciji, pokazano je da dugotrajno izlaganje nezrelih B limfocita opioidnim peptidima dovodi do pojačane ekspresije enzima neutralne endopeptidaze (NEP, EC 3.4.24.11, CD10;) na razini mRNA i proteina. *Rezultati govore u prilog uloge opioidnih peptida i neutralne endopeptidaze (NEP) u regulaciji rasta nezrelih B limfocita.* U suradnji s kliničkim ustanovama ispitivali su se defekti mitohondrijske DNA u bolesnika s nasljednim degenerativnim bolestima ili dijabetesom.

Research programme and results:

Previous investigations on the role of opioid peptides in hematopoiesis have been continued. Regulation of the cell growth by endogenous opioid peptides was compared to that by synthetic peptides having the same receptor selectivity but resisting degradation by peptidases. Immature B lymphocytes of the NALM-1 cell line expressing delta-, mu-, and kappa-opioid receptors were used as a model. A suppression of NALM-1 cell proliferation was observed with endogenous and synthetic peptides alike. The mechanism could be partly

ascribed to dysregulated Ca^{++} signalling; no DNA fragmentation, as a marker of opioid-triggered apoptosis, was found. Prolonged exposure of NALM-1 cells to opioid peptide methionine-enkephalin resulted in up-regulation of neutral endopeptidase (NEP; EC 3.4.24.11; CD10), an enzyme that hydrolyses opioid peptides and thus changes their activity. The up-regulation was shown at the levels of mRNA and of the membrane protein (CD10). *The data suggest the role of opioid peptides and neutral endopeptidase in growth regulation of immature B lymphocytes.* In collaboration with clinical institutions, mitochondrial DNA defects in hereditary diseases and diabetes have been studied.

PATOGENEZA KRONIČNE LIMFOCITNE LEUKEMIJE PATHOGENESIS OF CHRONIC LYMPHOCYTIC LEUKEMIA

Voditeljica teme: dr. sc. Jelka Gabrilovac

Tel: ++385 1 4561 082 e-mail: gabril@irb.hr

Suradnica na temi:

Jelka Gabrilovac, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Tehnička suradnica:

Margareta Cvetkovski, tehničarka (40 % radnog vremena)

Program rada i rezultati na temi:

Nastavljena je studija polimorfizma gena za angiotenzin I – konvertazu (ACE) u mijelodisplastičnom sindromu (MDS). Nije nađena statistički značajna razlika u distribuciji genotipova između MDS bolesnika i kontrolne skupine. Imunohistokemijskim metodama određena je ekspresija ACE proteina na stanicama koštane srži. ACE ekspimiraju stanice eritropoeze, odnosno eritroblasti i normoblasti o čemu do sada nije bilo podataka. ACE protein izražen je na stanicama zdrave i mijelodisplastične koštane srži. Razina ekspresije ACE-a značajno je viša u stanicama MDS-a nego u stanicama kontrolne skupine. Također, značajno je veći i broj stanica koje ekspimiraju ACE u bolesnika s MDS-om u odnosu na kontrolnu skupinu. Multiparametrijskom analizom kliničko-laboratorijskih parametara obzirom na izražaj ACE-a i ACE genotip, utvrđena je negativna korelacija između izražaja ACE-a u koštanoj srži i broja trombocita. Međutim, nije nađena značajna razlika u preživljenju bolesnika s MDS-om obzirom na ACE genotip.

Research programme and results:

The myelodysplastic syndrome (MDS) comprises a heterogeneous group of clonal bone marrow disorders characterised by abnormal differentiation and maturation of myeloid cells, bone marrow failure and a genetic instability with enhanced risk to transform to secondary leukemia. As ACE has been shown to enhance the recruitment of bone marrow stem cells into the S-phase of the cell-cycle, we choose to investigate its role in dysfunctional haemopoiesis of the MDS. Methods for DNA isolation from bone marrow smears were established. Specific DNA region was amplified and immunohistochemical staining of ACE protein in bone marrow biopsies, ACE I/D genotype distribution, ACE expression on bone marrow cells and their correlation with biochemical parameters of MDS patients were examined. No statistically significant difference in genotype distribution between MDS patients and controls was found. However, significantly higher ACE expression as well as the number of cells expressing it in the bone marrow of the MDS patients were observed. Multiparametric analysis of biochemical parameters to ACE expression and ACE genotype showed a statistically significant negative correlation between ACE expression and the number of platelets. Polymorphism of the ACE gene had no significant influence on the survival of MDS patients.

UZROCI I POSLJEDICE PRESADIVANJA ENDOKRINOG TKIVA PANKREASA

CAUSES AND CONSEQUENCES OF PANCREAS ENDOCRINE TISSUE TRANSPLANTATION

Voditelj teme: dr. sc. Mirko Hadžija

Tel: ++385 1 456 1064 e-mail: hadzija@irb.hr

Suradnici na temi:

Mirko Hadžija, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Marijana Popović Hadžija, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena asistentica

Milivoj Slijepčević, doktor vet. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehničke suradnice:

Marina Pavić (porodiljni dopust)

Iva Pešun, tehničarka (od 14.9.2002.)

Program rada i rezultati na temi:

U protekloj godini ispitivali smo promjene tumor-supresorskog gena *DPC4* koji je mutiran u karcinomima gušterače i debelog crijeva. S tim u vezi ispitali smo mogući doprinos ovog gena u procesu maligne transformacije. Na sakupljenim uzorcima akutnog i kroničnog pankreatitisa, kao i na uzorcima karcinoma gušterače ispitali smo gubitak heterozigotnosti ovog gena kao i prisutnost mutacija u dvije regije MH1 i MH2. Analizu smo proširili i na 60 bolesnika sa sporadičnim adenokarcinomom debelog crijeva. Gubitak heterozigotnosti gena *DPC4* ispitali smo upotrebom tri para specifičnih početnica za mikrosatelitne ponavljajuće regije u tumorskom i odgovarajućem normalnom tkivu. Korištenjem metoda restrikcijskog polimorfizma i jednonolančanog konformacijskog polimorfizma istražili smo i prisutnost mutacija u eksonima 2, 8, 10 i 11.

U nekim uzorcima pankreatitisa detektirali smo mutaciju u eksonu 8 gena *DPC4*, a uz to našli smo i mutaciju gena *K-ras* u kodonu 12. U istim uzorcima ispitali smo prisutnost mutacija u genima *p53* (ekson 5 i 7) i *APC* (kodon 1309) ali nismo našli niti jednu testiranu mutaciju. U uzorcima karcinoma gušterače zabilježen je izraziti gubitak heterozigotnosti gena *DPC4*. Od 60 ispitivanih uzoraka sporadičnog adenokarcinoma čak je 58 (97%) bilo informativno (heterozigoti), a gubitak heterozigotnosti je zamijećen u 26 (45%) informativnih uzoraka. Mutaciju smo našli samo u jednom tumoru, u eksonu 11; mutacija je potvrđena sekvencioniranjem. To je novo pronađena mutacija (134-153 del TAGACGAAGTACTTCATACC) gena *DPC4* u MH2regiji.

Na osnovu naših rezultata čini se da gen *DPC4* ima ulogu u nastanku i napredovanju zloćudne preobrazbe.

Research program and results

During the last year we examined the alterations of the *DPC4* tumor suppressor gene which was before all mutated in pancreas and colon cancer. We investigated the possible contribution of this gene to malignant transformation. On collected samples of acute and chronic pancreatitis, and also on samples of cancer of pancreas we investigated loss of heterozygosity and the presence of mutation in two regions – MH1 and MH2. The analysis was expanded on 60 samples of Croatian patients with sporadic colon adenocarcinoma. Using three pairs of specific primers for the *DPC4* microsatellite repetitive sequences, we investigated loss of heterozygosity on the tumor specimens and the corresponding normal tissues. The presence of mutations in exons 2, 8, 10, and 11 were analyzed by using specific restriction fragment length polymorphism analysis and by single strand conformation polymorphism analysis.

In tested samples of pancreatitis we detected mutation in *DPC4* gene, exon 8, and besides that mutation in *K-ras* gene, codon 12. The same samples were tested for the presence mutation in *p53* gene (codon 5 and 7) and *APC* gene (codon 1309), but we did not detected any tested mutation.

From 60 collected samples of sporadic adenocarcinoma even 58 (97%) of them were informative (heterozygous) and loss of heterozygosity was observed in 26 (45%) of informative cases.

We found mutation in only one tumor sample in exon 11, which was verified by sequencing. This is a novel mutation (134-153 del TAGACGAAGTACTTCATACC) of the *DPC4* gene in MH2 region. Based on our results it seems that *DPC4* gene has a role in induction and progression of malignant transformation.

MEHANIZMI DJELOVANJA ENKEFALINA I PEPTIDOGLIKANA MECHANISMS OF ACTIVITY OF ENKEPHALINS AND PEPTIDOGLYCANS

Voditelj teme: dr. sc. Ivo Hršak

Tel: ++385 1 4680 120 e-mail: ihrsak@irb.hr

Suradnici na temi:

Tihomir Balog, doktor biomed. znanosti, viši asistent

Ivo Hršak, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik

Tanja Marotti, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Sandra Sobočanec, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Višnja Šverko, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehnička suradnica:

Vesna Matešić, tehničarka

Program rada i rezultati na temi:

Feokromocitom je tumor nadbubrežne žlijezde koji luči veće količine enkefalina u krv. Obzirom da enkefaline razgrađuju aminopeptidaze i enkefalinaze prisutne u membrani neutrofila, mi smo u pacijenata s različitim tumorima nadbubrežne žlijezde određivali oba enzima. Pokazali smo da je enkefalinazna aktivnost specifično regulirana nagore u pacijenata sa feokromocitomom, što nije slučaj u pacijenata s drugim vrstama tumora, te se takvo određivanje može koristiti kao dodatni test u dijagnostici feokromocitoma. Proces lipidne peroksidacije (LPO) ima bitnu ulogu u organizmu tijekom procesa starenja. Obzirom da nije dovoljno ispitan proces LPO u različitim tkivima, vrstama životinja i različitim spolovima posebice nakon primjene opioidnih peptida, cilj istraživanja je istražiti mogući utjecaj različitih doza met-enkefalina na proces LPO u mužjaka i ženki miševa različite dobi u jetri, kao i koncentraciju ukupne sijalinske kiseline (TSA) u splenocitima, koja je pokazatelj upalnih procesa u organizmu. Nađeno je da se proces LPO mijenja tijekom starenja ovisno o spolu i koncentraciji MENK-a. Veća doza MENK-a stimulira proces LPO u mužjaka i ženki miševa mlađe dobi, ali smanjuje LPO u starijih mužjaka. Primjena manje doze MENK-a suprimira LPO u mužjaka, ali je bez učinka u ženki miševa. Razina TSA je viša u mužjaka nego u ženki. Nasuprot učinku na proces LPO sadržaj TSA u miševa tretiranih MENK-om značajno je bio niži u oba spola miševa mlađe dobi. Podaci ukazuju da se imunomodulatorni učinak MENK-a mijenja ovisno o spolu, što bi moglo biti važno pri mogućoj primjeni MENK-a u adjuvantnoj terapiji u bolesnika s oslabljenim imunološkim odgovorom.

Research program and results:

Pheochromocytoma is an adrenal gland tumor which releases large amounts of enkephalins into the bloodstream. Since enkephalins are degraded by aminopeptidase(APN)/enkephalinase(NEP) enzyme systems, which are incorporated into the membranes of the neutrophils, we determined activities of both enzymes in different types of adrenal gland tumors. We assumed that altered enkephalin level in pheochromocytoma patients (but not in patients with tumors of different origin) might result in differently regulated APN/NEP activity. We showed that enkephalinase activity is upregulated in all patients with pheochromocytoma comparing to healthy controls or other kinds of renal tumors. This finding

suggests the possibility of using given parameters in determination of adrenal pheochromocytoma.

It was observed that lipid peroxidation (LPO) production, which was age- and gender related was differentially regulated by methionin-enkephalin (MENK) concentration. The aim of this study was to assess the possible influence of MENK in both sexes on age associated LPO process in the liver and sialic acid content in the splenocytes. TSA content is considered as a marker of inflammatory reactions and immunogenic properties of cells. In higher dose, MENK stimulated LPO production in younger males and females but suppressed in older male mice. At lower dose MENK induced suppression in males while being without any effect in female mice. In TSA levels, the age-associated increase was greater in males than in females. Contrary to the effect on LPO level, TSA level in MENK-treated mice was suppressed in both sexes but only in young mice. These data provide evidence that some immunomodulatory properties of MENK are age- and gender-related which may be relevant to the potential use of MENK as adjuvant therapy in patients with immunocompromised status.

GENETIČKA ISTRAŽIVANJA GORLINOVA SINDROMA MOLECULAR GENETICS OF GORLIN SYNDROME

Voditeljica teme: dr. sc. Sonja Levanat

Tel: ++385 1 4561 110 e-mail: levanat@irb.hr

Suradnici na temi:

Maša Katić, magistrica mol. biologije, znanstvena novakinja

Arijana Komar, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Sonja Levanat, doktorica biokem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Vesna Musani, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Suradnici iz drugih ustanova:

Heidi Hahn, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, Sveučilište Göttingen, Njemačka

Mirjana Končar, doktorica biol. znanosti, Zavod za nuklearnu medicinu, Klinička bolnica

Sestara milosrdnica, Zagreb

Spomenka Manojlović, doktorica med. znanosti, docentica, Medicinski fakultet, Zagreb

Božidar Pavelić, doktor stomatol. znanosti, docent, Stomatološki fakultet, Zagreb

Mirna Šitum, doktorica med. znanosti, Zavod za dermatovenerologiju, Klinička bolnica

«Sestre milosrdnice», Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Nasljedno oboljenje Gorlinov sindrom (ili NBCCS) osobito je prikladno za istraživanje molekulskih mehanizama karcinogeneze i razvoja općenito. Pokazalo se da je gen *PTCH*, koji je odgovoran za Gorlinov sindrom, tumor supresor uključen u genezu različitih malformacija i tumora koji se u sindromu javljaju s većom učestalošću negoli sporadično u općoj populaciji. Usto, nedavno je utvrđeno da *PTCH* funkcionira u sklopu novootkrivenog signalnog puta *SHH/PTCH/SMO*, koji je važan za razvoj organizama od najranije embrionalne faze.

U proteklih pola godine analizirali smo veći broj sporadičnih tumora (bazocelularnih karcinoma i fibroma ovarija) i malformacija (cisti). Indirektnim smo metodama (analiza heterozigotnosti i SSCP) pokazali da su mutacije *PTCH* i u tumorima i u malformacijama puno češće od ukupne učestalosti samoga sindroma. Metodom SSCP utvrdili smo obrasce najčešćih polimorfizama gena *PTCH*.

Započeli smo ispitivanja ukupnog *SHH/PTCH/SMO* puta u sporadičnim tumorima i malformacijama. Razvijene su metode ekspresijske analize *PTCH*, gena *GLI1* i *SMO*. Prvi rezultati podupiru hipotezu da u promatranim poremećajima treba analizirati sve gene toga signalnog puta. Pokazali smo da membranski protein Smo i citoplazmatski proteina Gli (produkt novootkrivenog onkogenog), imaju ključnu ulogu u signalnom putu *SHH/PTCH/SMO*.

Započeta je međunarodna suradnja na cjelovitom istraživanju SHH/PTCH/SMO signalnog puta u dermoidnim cistama. Uzorke ćemo analizirati komplementarno kod nas i u laboratoriju Sveučilišta u Göttingenu.

U širem kontekstu zanimanja za tumorske supresore u nasljednim oboljenjima, analizirali smo uzorke malignog melanoma. Istražujemo eventualne promjene na lokusu CDKN2A/p16 koje bi mogle ukazati na obiteljsku predispoziciju. Najprije smo analizirali polimorfizme u regiji 9p21, na slučajnom uzorku od 50 osoba. Nađena učestalost pojedinih alela sukladna je literaturnim podacima za druge populacije.

Research program and results:

Gorlin syndrome (or NBCCS-nevoid basal cell carcinoma syndrome) is a hereditary disease particularly suitable for exploration of molecular mechanisms in carcinogenesis and development in general. It has been shown that *PTCH*, the gene responsible for Gorlin syndrome, is a tumor suppressor involved in the genesis of various malformations and tumors which in the syndrome appear with greater incidence than sporadically in general population. In addition, it has recently been found that PTCH functions within the newly discovered SHH/PTCH/SMO signaling pathway, which has an important role in development of organism from the earliest embryonic phase.

During last six months we have analyzed a number of sporadic tumors (basocellular carcinoma and ovarian fibroma) and malformations (cysts). We have proved by indirect methods (analysis of heterozygosity and SSCP) that the incidence of PTCH mutations in tumors and malformations is much greater than that of the syndrome itself. By SSCP analysis we have established the patterns of most frequent *PTCH* gene polymorphisms. We have started exploration of the entire SHH/PTCH/SMO pathway in sporadic tumors and malformations. Methods for gene expression analysis of *PTCH*, *GLI1* and *SMO* have been developed. Our first results support the hypothesis that all the genes from this signaling pathway should be analyzed in the cases under consideration. We found that the membrane protein Smo, as well as the cytoplasm protein Gli (product of recently discovered oncogene), were implicated as the key factors in the SHH/PTCH/SMO pathway.

International co-operation in a comprehensive research of the SHH/PTCH/SMO signaling pathway in dermoid cysts has been initiated. A complementary analysis will be carried out in our laboratory as well as in laboratory at the University Göttingen.

Within a broader context of our interest for tumor suppressors in hereditary diseases, we were analyzing malignant melanoma samples. We are looking for potential alterations on the CDKN2A/p16 locus which could indicate a familial predisposition. At first, we analyzed polymorphisms in the 9p21 region of this melanoma locus, on a random sample of 50 individuals, and the allelic frequencies we found generally correspond to the literature data for other populations.

KOMPARATIVNA MOLEKULARNA IMUNOLOGIJA COMPARATIVE MOLECULAR IMMUNOLOGY

Voditeljica teme: dr. sc. Renata Novak Kujundžić
Tel. ++385 1 4560 949 e-mail: rnovak@irb.hr

Suradnice na temi:

Katja Ester, dipl. inž. mol. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Renata Novak Kujundžić, doktorica vet. znanosti, viša asistentica

Suradnici iz drugih ustanova:

Vladimir Savić, magistar vet. znanosti, asistent, Centar za peradarstvo, Veterinarski institut RH

William Lauman Ragland III, doktor biokem. znanosti, savjetnik IRB na poslovima vezanim uz pitanja razvitka molekularne medicine

Program rada i rezultati na temi:

Vidi pod «Molekularni mehanizmi imunosupresije»

**GENSKO LIJEČENJE TUMORA
TUMOR GENE THERAPY**

Voditeljica teme: dr. sc. Jasminka Pavelić

Tel: ++385 1 45 60 926 e-mail: jpavelic@irb.hr

Suradnici na temi:

Koraljka Gall-Trošelj, doktorica med. znanosti, znanstvena suradnica

Igor Jurak, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak

Jasminka Pavelić, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Neda Slade, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Program rada i rezultati na temi:

Potpuno su završena istraživanja genskog liječenja tumora upotrebom gena za timidin kinazu iz virusa Herpes simpleks (HSVtk), koji, u kombinaciji s protuherpesnim lijekom ganciklovirom (GCV) izaziva samoubojstvo stanica. I u *in vitro* i u *in vivo* modelima ovaj se je pristup liječenja pokazao učinkovitim. Nastavljena su istraživanja genskog liječenja primjenom tumor supresorskih gena *p53* i *p21* na staničnim linijama tumora ljudi, HeLa, MCF-7, CaCo-2, SW 620, i miševa, B16Bl6, B16F10, Renca, Fsar. U prijašnjim pokusima dokazan je inhibicijski učinak ispitivanih gena na rast svih staničnih linija. Ovogodišnji pokusi bili su usmjereni na detekciju programirane stanične smrti (apoptoze) u zaraženim staničnim linijama. Korišteno je nekoliko metoda za dokazivanje i kvantificiranje apoptotičnih stanica (Annexin V test, analiza fragmentacije DNA te morfološke promjene na stanicama). Dokazali smo da gen *p53* izaziva apoptozu u staničnim linijama tumora ljudi s mutiranim ili inaktiviranim oblikom gena *p53*, dok gen *p21* izaziva apoptozu u istim staničnim linijama, ali tek nakon produženog djelovanja gena. Oba su gena, međutim, izazvala apoptozu u staničnoj liniji tumora miša Renca.

U svrhu liječenja gena *nm23-H1* i *nm23-H2*, fuzijski geni sačinjeni od gena *nm23* i gena za zeleni fluorescentni protein, korišteni su za prolaznu transfekciju (i kotransfekciju) stanica tumora glave i vrata čovjeka, HEP-2 i CAL 33. Nakon ektopične ekspresije ovih gena opazili smo povećanu proliferaciju stanica. Isti učinak opazili smo i kod stanica koje su bile transfecirane konstruktima koji proizvode antisense RNA navedenih gena.

Research programme and results:

We completed the research of tumor gene therapy by using a suicide gene approach. The suicide gene we used was the Herpes simplex virus thymidine kinase gene (HSVtk), which, incorporated into tumor cells rendered infected cell sensitive to otherwise nontoxic drug ganciclovir (GCV). Antitumor suicide gene approach was fully effective in both, *in vitro* and *in vivo* models.

During the year 2002. we proceeded with the experiments in tumor gene therapy by exploring the therapeutic suppressor genes, *p53* and *p21*. The experiments were performed on the human, HeLa, MCF-7, CaCo-2, SW 620, and mouse, B16Bl6, B16F10, Renca, Fsar, tumor cell lines grown *in vitro*. Both genes inhibited the growth of all tumor cell lines tested. The idea that the programmed cell death (apoptosis) counterparts in the mechanisms of tumor growth inhibition was tested by several methods: Annexin V test, DNA fragmentation analysis and exploring the morphological changes of the cells. We proved that exogenous *p53* gene causes the apoptosis in tumor cell lines that have mutated or inactivated endogenous *p53* gene. The apoptosis was also induced by *p21* gene overexpression, but only after prolonged period of incubation with the virus carrying *p21* transgene. The *in vitro* growth inhibition of mouse bladder carcinoma cell line Renca was also caused by apoptosis, induced, at the same extend, by genes *p53* and *p21*.

To enlighten the possible role of *nm23-H1* and *nm23-H2* genes in the formation of head and neck tumors, the therapeutic genes were fused to green fluorescent reporter system. The constructs were used for transient transfection of human head and neck cell lines, HEP-2 and CAL 33. Cell proliferation was followed. Ectopic expression of both genes increased the cell proliferation, as did the ectopic expression of constructs that produce antisense RNA of *nm23-H1* and *nm23-H2* genes.

MOLEKULSKO-GENETIČKA OSNOVA METASTAZIRANJA MOLECULAR-GENETICS BASIS OF CANCER METASTASIS

Voditelj teme: dr. sc. Krešimir Pavelić

Tel: ++385 1 4680 094 e-mail: pavelic@irb.hr

Suradnici na temi:

Tamara Čačev, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Magdalena Grce, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica
Mira Grdiša, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Silva Hećimović, doktorica biotehnol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Koraljka Husnjak, dipl. inž. molekularne biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Sanja Kapitanović, doktorica med. znanosti, znanstvena suradnica
Krešimir Pavelić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik
Matea Radačić-Aumiler, dr. med., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Ante Škrabalo, dipl. inž. mol. biol., mlađi asistent, znanstveni novak
Lidija Šuman, doktorica biol. znanosti, viša asistentica
Oliver Vugrek, doktor bioloških znanosti, viši asistent

Tehničko i pomoćno osoblje:

Mihaela Alivojvodić, tehničarka
Jasminka Golubić, med. lab. inž., tehničarka
Ines Poljanec, pomoćno osoblje (porodiljni dopust)
Adrijana Culak, pomoćno osoblje (porodiljni dopust)
Marko Vratarić, pomoćno osoblje
Renata Despotović, pomoćno osoblje

Program rada i rezultati na temi:

Opisan je prvi slučaj nasljedne mentalne retardacije u okviru sindroma fragilnog X (FRAXE). Također je objavljena velika studija mentalno retardirane djece s sindroma fragilnim X. Objavljen je podatak o novim alelima polimorfnog genetskog biljega D16S752 vezanog za E-kadherinski gen.

Objavljena je također studija genetske osnove Hungtingtonove bolesti u Hrvatskoj u kojoj je načinjena molekularna analiza polimorfizama delta 2642 (E2642del), CAG i CCG. Molekularne i biokemijske promjene tijekom diferencijacije crvenih krvnih stanica, studirane su na modelu pilećih eritroblasta (HD3 stanična linija). U regulaciju diferencijacije crvenih krvnih stanica uključeno je više signalnih puteva. Pored povećane sinteze hemoglobina, dolazi do promjene u ekspresiji gena za glicerinaldehid-3-fosfat dehidrogenazu (GAD) i njene aktivnosti, promjene u fosforilaciji Ser/Thr i Tyr te nivoa staničnog cAMP. Ekspresije gena za transport šećera (GLUT1 i GLUT3), na nivou transkripcije i post-transkripcije, regulirana je fosforilacijom Tyr i Ser/Thr te aktivnošću cAMP-ovisnih kinaza. U svrhu proučavanja signalnih puteva te pokušaja njihove korekcije u nekim bolestima, pristupilo se izolaciji i pročišćavanju proteina. U tu svrhu priređen je fuzijski protein TAT-p27, koji će poslužiti za proučavanje staničnog ciklusa.

Utvrđeno je da stanice karcinoma pluća stvaraju povišene količine IGF II i IGF IR što rezultira autokrinim poticanjem proliferacije tih stanica. Proliferaciju je moguće dokinuti blokiranjem aktivnosti mRNA tih gena što navodi na zaključak da bi pristup liječenja antisense

oligonukleotidima mogao biti vrlo efikasan način u liječenju oboljelih. In vitro pokusima ovo je i potvrđeno.

Opisan je novi tip miozina 100kD – Hamyo3 iz suncokreta. To je ujedno najmanji do sada poznati miozin. Nađena je alteracija glicina u glutamin na poziciji 741 (G699). Promjene ključnog dijela miozina mogu ukazivati na ulogu različitu od one koju inače ta molekula ima u unutarstaničnom kretanju.

Jednostanična zelena alga *Acetabularia* koristi neuobičajeni genetički kod, pri čemu univerzalni STOP kodoni UAA i UAG kodiraju za amino-kiselinu glutamin. Funkcionalne analize rekombinantnih proteina *Acetabularie* su stoga ograničene na djelomično translirane polipeptide. Da bismo riješili problem nepotpune translacije konstruirali smo inducibilni ekspresijski plazmid pET-5a sa supresorskom tRNA. UAA supresorka tRNA uvodi glutaminsku kiselinu kod UAA i UAG kodona. Praćenjem ekspresije gena za aktin *Acetabularie* pokazali smo da je naš sistem funkcionalan. Moguće je eksprimirane proteine, krnje ili cjelovite, upotrijebiti za pokuse obilježavanja epitopnih sljedova za međudjelovanja s nukleinskim kiselinama, proteinima ili drugim komponentama.

U okviru istraživanja molekularne genetike karcinoma kolona ispitali smo ekspresiju proteina nm23-H1 i prisutnost gubitka heterozigotnosti gena nm23-H1 u sporadičnim adenokarcinomima debelog crijeva. Ekspresija proteina i to slabog intenziteta dokazana je u 41% ispitanih tumora. Ekspresija proteina nm23-H1 dokazana je većinom u tumorima klasificiranim kao Dukes' B (67%) te u dobro diferenciranim tumorima (65%). Gubitak heterozigotnosti dokazali smo u 33% informativnih uzoraka i bio je puno češći u tumorima većim od 5 cm. Također je dokazana pozitivna korelacija između LOH-a gena nm23-H1 i stupnja diferencijacije te stadija po Dukes'-u ispitivanih tumora. Iz navedenih se rezultata može zaključiti da je promjene gena nm23-H1 te promjene u njegovoj ekspresiji sigurno doprinose napredovanju karcinoma debelog crijeva.

U našem istraživanju molekularne genetike sporadičnih karcinoma kolona ispitali smo također i učestalost mutacija gena DPC4. Mutaciju smo dokazali u svega jednom tumoru i radilo se o novoj, do sada još ne objavljenoj, sporadičnoj mutaciji gena DPC4.

Gubitak heterozigotnosti gena DPC4 kao i mutacije istog ispitivane su također i u uzorcima karcinoma bubrega. Gubitak heterozigotnosti gena DPC4 u ovim je tumorima dokazan u 13% informativnih uzoraka.

Nastavljen je rad na istraživanjima onkogenih virusa. U suradnji s kolegama dermatovenerolozima iz Klinike za kožne i spolne bolesti "Šalata", KBC-a Zagreb objavljeni su rezultati genotipizacije HPV-a u klinički vidljivim genitalnim lezijama kod muškaraca.

Research programme and results:

The first FRAXE family diagnosed in Croatia was reported. Molecular and clinical data show that FRAXE mental retardation is phenotypically very nonspecific and mild and that every woman with any mentally retarded and/or learning disabled family member should be investigated for the FRAXA and FRAXE loci of the fragile X syndrome. Fragile X screening among mentally retarded children attending a special school should be highly encouraged to reveal the cause of mental retardation and to detect yet unrecognized fragile X individuals. The frequency of fragile X syndrome in a such population in Croatia was found to correlate with similar results from previous studies. However, since at the time of diagnosis all affected families had a second or even a third child born, earlier diagnosis should be considered to provide greater benefit to fragile X families.

Seven DNA variants that polymorphic genetic marker D16S752 reveals in Croatian population are reported in this paper. The marker is a GATA tetranucleotide repeat linked to human E-cadherin gene (CDH1). Prior studies involving this marker revealed only four DNA allele variants. The reported DNA variants contribute to the collection of hypervariable DNA polymorphisms data useful in the field of anthropological and population genetic and forensic medicine.

Molecular and biochemical changes during differentiation of red blood cells were studied, using chicken erythroblasts cell line (HD3) as a model. In the regulation of erythroblastic differentiation the multiple pathways are involved. With increasing of hemoglobin synthesis,

the changes in Ser/Thr and Tyr phosphorylation, cAMP level, glyceraldehyde-3phosphate dehydrogenase (GAD) gene expression and GAD activity, were observed. Glucose transport activity is regulated by phosphorylation of Tyr, Ser/Thr and by cAMP-dependent kinases, both transcriptionally and post-transcriptionally.

To elucidate signal transduction pathways and to correct inappropriate signaling in transformed cells, some protein was prepared. A cell cycle regulatory protein, p27 was purified.

Our data suggest that lung cancer cells produce IGF-IR and IGF-II, which in turn stimulates their proliferation by autocrine mechanism. Cancer cell proliferation can be abrogated or alleviated by blocking the mRNA activity of these genes indicating that an antisense approach may represent an effective and practical cancer gene therapy strategy.

Hamy3, a novel type myosin heavy chain from sunflower is the smallest myosin described so far, with only 900 amino acid residues. One interesting finding in Hamy3 is the glycine to glutamine alteration at residue 741, which corresponds to chicken skeletal muscle myosin glycine 699 (G699). G699 is found in 125 out of 129 myosin sequences and is interpreted in terms of its role as a pivot point for motion in the myosin «lever arm hypothesis». Changes in this crucial part of myosin might indicate a role that is different from the generation of intracellular motility.

The unicellular marine green alga *Acetabularia* uses a nonstandard genetic code, in which the universal stop codons UAA and UAG encode glutamine. Functional analysis of recombinant *Acetabularia* proteins would therefore be limited to analysis of partially translated polypeptides. To circumvent the problem of protein truncation, we introduced an inducible suppressor-tRNA into expression plasmid pET-5a. The UAA tRNA-suppressor inserts glutamic acid for codons UAA and UAG; codon UAG is read by wobble pairing. Monitoring the expression of *Acetabularia* actin by Western blotting proved our system functional, showing that each of the three UAA and UAG codons in *Acetabularia* actin were partially successfully read through. Additionally, expressed polypeptides, whether truncated or not, can be used for epitope mapping experiments targeting interactive molecules as nucleic acids, proteins or other compounds.

As the part of our research in molecular genetics of colon cancer we investigated the prevalence of nm23-H1 expression and nm23-H1 gene loss of heterozygosity (LOH) in sporadic colon cancer. A weak positive immunostaining of nm23-H1 protein was detected in 41% of tumors. The most nm23-H1 positive tumors were in Dukes' B (67%) and in the well differentiated tumors (65%). nm23-H1 LOH was detected in 33% of informative tumor samples and was more frequent in larger tumors (> 5 cm) than in smaller ones. Positive correlation was found between the nm23-H1 LOH and histological grade or Dukes' stage of tumors. It can be concluded that inactivation of the nm23-H1 gene plays a role in a multistep process of development and progression of colon cancer.

We also investigated the presence of DPC4 gene mutations in sporadic colon cancer. We found the mutation in only one tumor sample. It was a new sporadic mutation in exon 11 of the DPC4 gene.

The DPC4 LOH and mutations were also investigated in renal cell carcinoma. DPC4 LOH was detected in 13% of informative tumor samples.

Research on oncogenic viruses was focused on human papillomaviruses (HPV). The collaboration with the Department of dermatovenerology "Šalata" of the Clinical hospital center Zagreb, resulted with the publication of the HPV prevalence in male genital lesions.

CIJEPLJENJE VIRUSNIM PODJEDINICAMA VACCINATION WITH VIRAL SUBUNITS

Voditeljica teme: dr. sc. Biserka Pokrić

Tel: ++385 1 4680 193 e-mail: pokric@irb.hr

Suradnici na temi:

Biserka Pokrić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Nikola Štambuk, doktor med. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnička suradnica:

Maja Pokas, tehničarka (do 31.7.2002.)

Program rada i rezultati na temi:

Završen je rad na temi "Cijepljenje virusnim podjedinicama" koji je rezultirao u ukupno 18 radova u časopisima citiranim u CC, 4 SCI znanstvena rada (1 je pregledni članak), 6 znanstvenih radova tiskano je u časopisima navedenim u drugim sekundarnim publikacijama, 4 rada objavljena su u knjigama. Na znanstvenim skupovima održano je 11 pozvanih predavanja i složeno je 53 referata i postera, a saopćenja i sažeci objavljeni su u zbornicima i knjigama.

Svrha rada na temi bio je odabir imunološki aktivnih proteina, polipeptida i peptida za pripremu cjepiva koja potiču anti-virusni imunitet i specifični odgovor na antigene vezane uz autoimune i tumorske bolesti. S tim ciljem razrađen je model za prepoznavanje komplementarnih peptida i razvijene su nove metode za molekularno i gensko definiranje bioaktivnih peptidnih motiva, te određivanje sekundarne proteinske strukture modifikatora bioloških odgovora. Ispravnost modela molekularnog prepoznavanja temeljenog na kodiranju proteina iz komplementarnih DNK i m-RNK potvrđena je eksperimentalno analizom reakcije ligand-receptor. Da bi se povećala učinkovitost proteina i peptida kao cjepiva ispitivao se način njihove pripreme i primjene. Za ciljanu anti-virusnu zaštitu peradi i pripremu odgovarajućih cjepiva, započelo se s identifikacijom terenskih izolata virusa koristeći metode molekularne biologije.

Research programme and results

The investigations concerning "Vaccination with viral subunits" resulted in 18 papers published in the journals indexed by the CC, 4 SCI scientific papers (1 review article), 6 papers in the journals indexed by other citation data bases, 4 articles in books, 11 invited lectures, 53 conference oral and poster presentations published in Books of Abstracts or Proceedings.

The main goal of the proposed programme was the selection of the immunologically active proteins, polypeptides and peptides for the design of the vaccines which generate anti-viral immunity as well as a specific response against antigens associated with the tumors and immune-mediated diseases. For such a purpose, a complementary protein recognition model was proposed and new methods for the molecular and genetic definitions of the bioactive peptide motifs as well as the determination of the secondary protein structure of the modifiers of the biological responses, were developed. The accuracy of our model of the molecular recognition of the protein pairs based on the DNA and m-RNA complementary was experimentally proved by testing the ligand-receptor interactions. The vaccine preparation and administration were studied in order to find the optimal efficacy of the protein and peptide vaccines. Newly-introduced molecular biology methods for the identification of the poultry viruses will enable the design and preparation of the appropriate vaccines for an effective immunoprotection.

**OKSIDATIVNI STRES I ZLOĆUDNE BOLESTI
OXIDATIVE STRESS AND MALIGNANT DISEASES**

Voditelj teme: dr. sc. Neven Žarković

Tel: ++385 1 4560 937 e-mail: zarkovic@irb.hr

Suradnici na temi:

Suzana Borović, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Ana Čipak, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Marija Poljak-Blaži, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Neven Žarković, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehničke suradnice:

Tea Kališnik, biokem. lab. inž, viša tehničarka

Nevenka Hiršl, samostalna tehničarka

Suradnici iz drugih ustanova:

Fiorella Biasi, doktorica med. znanosti, Institute of Biological and Medical Sciences, University of Torino, Italija, konzultantica

Mircea Cazacu, doktor med. znanosti, University Surgical Clinics, Cluj, Rumunjska, konzultant

Toni Hanich, dr. med., Opća bolnica, Našice

Suzana Kukulj, doktorica med. znanosti, Klinička bolnica Jordanovac, Zagreb

Giusseppe Poli, doktor med. znanosti, redovni profesor, Institute of Biological and Medical Sciences, University of Torino, Italija, konzultant

Rudolf Jorg Schaur, doktor biokem. znanosti, redovni profesor, Institute of Biochemistry, Microbiology and Molecular Biology, Karl-Franzens University of Graz, Austrija

Ivo Soldo, magistar biol. znanosti, Opća bolnica Sv. Duh, Zagreb

Igor Stipančić, doktor med. znanosti, Klinička bolnica Dubrava, Zagreb

Svorad Štolc, doktor kem. znanosti, redovni profesor, Institute of Experimental

Neuropharmacology, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovačka, konzultant

Franz Tatzber, doktor biol. znanosti, Tatzber KEG, reagents and recycling, Beč, Austrija, konzultant

Manfred Tillian, doktor vet. znanosti, izvanredni profesor, Institute of Biochemistry,

Microbiology and Molecular Biology, Karl-Franzens University of Graz, Austrija, konzultant

Kamelija Žarković, doktorica med. znanosti, izvanredna profesorica, Zavod za

neuropatologiju, Medicinski fakultet, KBC "Zagreb", Zagreb, konzultantica

Renate Wildburger, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, University Clinic of Traumatology, LKH, Graz, Austrija, konzultantica

Program rada i rezultati na temi:

Vidi projekt «Oksidativni stres i zloćudne bolesti»

POGON ZA UZGOJ LABORATORIJSKIH ŽIVOTINJA (PLŽ)

Voditelj: dr. sc. Marko Radačić

Tel: ++385 1 4680 091 e-mail: radacic@irb.hr

Tehničko osoblje:

Goran Goleš, vet. tehničar

Zlatko Pandžić, vet. tehničar

Maja Pokas, poljopr. tehničarka

Program rada:

Cijela PLŽ jedinica nalazi se na dvije lokacije, tj. u Baraci I (sjeverna) i u baraci II (južna).

Prostorije za uzgoj laboratorijskih životinja nalazi se u Baraci I (sjeverna). U njima se uzgajaju genetski standardizirani sojevi miševa (BALB/cBkl, CBA/H, C3Hf/Bu, C57BL/Go, C57BL/6-Ly5, NOD). Prostor za držanje i timarenje životinja (miševa, štakora i mačaka) tijekom pokusa nalazi se u Baraci II (južna).

Osim miševa u PLŽ-u se uzgajaju i štakori za potrebe laboratorija za neurokemiju i molekularnu neurobiologiju. Ti štakori su originalno soj Wistar iz kojega je dr. B. Jernej, za svoja istraživanja, napravio dvije subgrupe:

1. «Hyperserotoninemic rat» i **2.** «Wistar-Zagreb 5HT rat»

Unutar IRB ustroja, PLŽ je ustrojen unutar Zavoda za molekularnu medicinu.

U 2002. prostori za držanje pokusnih životinja (tzv. pokusna štala) su u potpunosti građevinski rekonstruirani i obnovljeni, tj. uvedena je nova struja, voda, kompjutorska mreža, klimatizacija, ventilacija, rasvjeta «noć-dan» (12 sati svjetlo i 12 sati tama). U slijedećoj – 2003. godini treba stići nova oprema: kavezi, stalaže, strojevi za pranje kaveza i bočica. Tako opremljena štala, nadamo se da će zadovoljiti europske standarde.

Prikaz izvršenog rada:

U prvoj baraci uzgajaju se različiti sojevi miševa (BALB/cBkl, CBA/H, C3Hf/Bu, C57BL/Go, C57BL/6-Ly5, NOD) koji se koriste za pokusne unutar Zavoda, odnosno Instituta, a za potrebe znanstvenih projekata koje financira Ministarstvo znanosti i tehnologije Republike Hrvatske. Osim znanstvenika IRB, povremeno od nas naručuje miševe Institut za Oceanografiju i ribarstvo iz Splita te Imunološki Zavod iz Zagreba i Veterinarski fakultet iz Zagreba. Od vanjskih potrošača posebno treba spomenuti Institut za oceanografiju u Splitu koji je u zadnjih nekoliko godina redovni naručilac BALB/c miševa i to, gotovo redovno svaki mjesec oko 100 komada.

U drugoj baraci smještene su, uglavnom, životinje (miševi) na kojima se izvode pokusi. U drugoj baraci se također uzgajaju i štakori. Osim toga, u ovoj baraci se nalazi i posebni (odvojeni) prostor za držanje mačaka tijekom pokusa. Mačke se ne uzgajaju u IRB-u nego se nabavljaju od vanjskih naručitelja, jer se tu radi o vrlo malom broju jedinki.

Laboratory animal science unit:

This unit breeds experimental mouse for the research program which is mainly sponsored by Croatian Ministry of science. The inbred strains of mice are: BALB/cBkl, CBA/H, C3Hf/Bu, C57BL/Go, C57BL/6-Ly5, NOD.

Also, the care of animals during experimental period is undertaken, not only of mice than and of rats and sometimes of cats. In our animal unit two colony of rats are developed from the Wistar stock, i.e. "Hyperserotoninemic rat" and "Wistar-Zagreb 5HT rat". Both models are used in neuroscience research as rodent models for selected neuropsychiatric disorders as well as in related neuropsychopharmacological research. The cats are used in neurophysiological research.

Tema izvan sastava programa:**NEUROFARMAKOLOGIJA GABA I 5-HT SUSTAVA
NEUROPHARMACOLOGY OF GABA AND 5-HT SYSTEM**

Voditeljica teme: dr. sc. Danka Peričić

Tel: ++385 1 4561 126 e-mail: pericic@irb.hr

Suradnice na temi:

Milica Bjegović, doktorica med. znanosti, znanstvena suradnica

Maja Jazvinščak Jembrek, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Dorotea Mück-Šeler, doktorica farm. znanosti, viša znanstvena suradnica

Danka Peričić, doktorica med. znanosti, znanstvena savjetnica

Nela Pivac, doktorica vet. znanosti, znanstvena suradnica

Dubravka Švob, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Zlatica Tonšetić, samostalna tehničarka

Suradnik iz druge ustanove:

Miro Jakovljević, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, KBC Rebro, Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Istraživanja na temi bila su usmjerena su k boljem upoznavanju mehanizma djelovanja neuropsihofarmaka, posebice onih koji djeluju putem GABA i 5-HT sustava, proširenju

temeljnih spoznaja o funkciji GABAergičnih i serotonergičnih (5-HT) neurona kao i o njihovoj interakciji s endokrinim sustavom, te razjašnjenju etiopatogeneze psihijatrijskih poremećaja i patofiziologije stresa.

Tijekom 2002.g. nastavljena su istraživanja posvećena regulaciji GABA-A receptora in vitro nakon dugotrajnog izlaganja benzodiazepinima te neurotransmitoru GABA-i. Kao farmakološki model korišteni su rekombinantni GABA-A receptori. Preliminarni rezultati koji trebaju biti potvrđeni dodatnim istraživanjima pokazali su zanimljive razlike u učincima pojedinih liganada GABA-A receptora na regulaciju rekombinantnih GABA-A receptora in vitro.

U nastavku istraživanja patofiziologije stresa, posebice uloge neurotransmitora u stresu, pokazali smo da integritet noradrenergičnog sustava nije neophodan za antikonvulzivni učinak stresa. Štoviše, bitno oštećenje tog sustava ne mijenja konvulzivni prag, dok potenciranje noradrenergične aktivnosti desipraminom potencira antikonvulzivni učinak stresa.

U istraživanju povezanosti serotoninskog i endokrinog sustava pokazali smo značajnu pozitivnu korelaciju između koncentracije trombocitnog serotonina te plazmatskih hormona kortizola i prolaktina u zdravih osoba, ali ne i u shizofrenih i depresivnih bolesnika. Rezultati upućuju na poremećenu ulogu serotoninskog sustava u regulaciji aktivnosti osovine hipotalamus-hipofiza-nadbubrežna žlijezda i u lučenju prolaktina u depresiji i shizofreniji.

Research programme and results:

Our research has been focused on the investigation of the mechanism of action of acute and long-term administration of neuropsychotropic drugs, primarily those acting via GABA_A and 5-HT receptors, on the elucidation of the fundamental facts about the function of GABAergic and serotonergic (5-HT) neurones and their interaction with the endocrine system, and on the elucidation of the ethiopathogenesis of psychiatric disorders and pathophysiology of stress.

During 2002, studies related to regulation of GABA-A receptors in vitro following long-term exposure to benzodiazepines and GABA were continued. Recombinant GABA-A receptors were used as a model. The preliminary results that require further studies, demonstrated interesting differences in the effects of various ligands of GABA-A receptors on the regulation of recombinant GABA-A receptors in vitro.

In continuation of our studies related to pathophysiology of stress, particularly the role of neurotransmitters in stress, we have shown that the integrity of noradrenergic system is not substantial for the anticonvulsant effect of stress. Moreover, the lesion of this system failed to affect the seizure threshold, but potentiation of noradrenergic activity by desipramine potentiated the anticonvulsive effect of stress.

In the investigation of the relationship between serotonergic and endocrine systems, we have found a significant positive correlation between platelet serotonin concentration and plasma cortisol and prolactin levels in healthy subjects, but not in schizophrenic and depressed patients. The results suggest an altered influence of serotonergic system in the regulation of the hypothalamus-pituitary-adrenal axis activity and prolactin secretion in schizophrenia and depression.

Od 1.8.2002. u Zavodu su se provodila istraživanja u okviru sljedećih znanstvenoistraživačkih projekata:

TRANSKRIPCijsKA KONTROLA RAZVOJA LIMFOCITA – ULOGA U GENEZI LIMFOMA TRANSCRIPTIONAL CONTROL OF LYMPHOCYTE DEVELOPMENT – ITS ROLE IN LEUKEMOGENESIS

Voditeljica projekta: dr. sc. Mariastefania Antica
Tel: ++385 1 4561 065, e-mail: antica@irb.hr

Suradnice na projektu:

Mariastefania Antica, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica
Borka Kušić, doktorica biol. znanosti, viša asistentica
Tajana Körbler, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Suradnici iz drugih ustanova:

Marija Dominis, doktorica med. znanosti, redovita profesorica, Klinička bolnica Merkur, Zagreb
Miroslava Katičić, doktorica med. znanosti, redovita profesorica, Klinička bolnica Merkur, Zagreb
Branimir Čvorišćec, doktor med. znanosti, redovni profesor, Opća bolnica Sveti Duh, Zagreb
Stanimir Vuk-Pavlović, doktor biol. znanosti, redovni profesor, Mayo Cancer Foundation, Rochester, MN, SAD
Elisabeth Kremmer, doktorica med. znanosti, GSF Institute of Molecular Immunology, München, Njemačka
Elfriede Noessner, doktorica med. znanosti, GSF Institute of Molecular Immunology, München, Njemačka

Program rada i rezultati na projektu:

Laboratorij za staničnu i molekularnu imunologiju proučava mehanizme koji kontroliraju progresiju i usmjeravanje hematopoetskih staničnih loza, faktore koji ih reguliraju te gene uključene u taj proces. Razvoj i diferencijaciju stanica nadziru transkripcijski faktori koji određuju mjesto, vrijeme i brzinu prepisivanja ciljnih gena. Kritičnu ulogu u usmjeravanju, diferencijaciji i selekciji limfocita, imaju transkripcijski faktori iz obitelji *Ikaros* (*Ikaros*, *Aiolos* i *Helios*) kao i članovi iz obitelji *Notch*. Istraživanja su pokazala da nedostatak transkripcijskog faktora *Aiolos* u limfocitima B te dominantna negativna mutacija u *Ikaros* genu (DN^{-/-}) uzrokuju deregulaciju proliferacije stanica i razvoj malignih oboljenja. Pretpostavlja se da *Ikaros* aktivira transkripciju, ali i da djeluje kao tumor supresor gen. Čini se da za razliku od miševa bez *Ikarosa*, *Ikaros* protein u DN^{-/-} miševa koji se ne veže na DNA, može stvarati heterodimere s drugim članovima iz te porodice proteina te tako mijenja njihovu funkciju. U miševa dominantna negativna mutacija u 100% slučajeva rezultira malignim oboljenjima. Novija istraživanja pokazuju da važnu ulogu u razvoju limfocita imaju i proteini iz obitelji *Notch*. To su transmembranski receptori kod kojih nakon vezanja jednog od liganada (*Jagged 1*, *Jagged 2* ili *Delta*) dolazi do prijenosa signala tako da se intracelularna domena *Notcha* proteolitički otcijepi i transportira u jezgru gdje *Notch* djeluje kao transkripcijski aktivator. U našim istraživanjima proučavamo ekspresiju transkripcijskih faktora iz obitelji *Ikaros* i *Notch* te pre-TCR u leukemijama i limfomima ljudi. Metodom reverzne transkripcije mRNA izolirane iz arhivskih uzoraka i lančanom reakcijom polimerazom (RT-PCR) detektiramo i određujemo količinu i omjere transkripcijskih faktora *Ikaros*, *Aiolos* i *Helios* u uzorcima limfnih čvorova ljudi s limfoproliferativnim oboljenjima. Odabrali smo početnice pomoću kojih smo pokušali utvrditi da li poput *Ikarosa* i transkripcijski faktor *Aiolos* i *Helios* imaju izoforme koje mogu interferirati s drugim faktorima iz te porodice te tako utjecati na malignu transformaciju stanica.

Research programme and results:

Laboratory for cellular and molecular immunology investigate mechanisms that control progression and commitment of haematopoietic cell lineages, factors that regulate them and genes involved in the process. Cell development and differentiation are controlled by transcription factors that dictate the place, time and rate of target gene expression. Critical role in lymphocyte commitment, differentiation and selection have transcription factors from the *Ikaros* family: *Ikaros*, *Aiolos*, *Helios* as well as the members from the *Notch* family. Studies have shown that the lack of *Aiolos* transcription factor in B lymphocytes, as well as the dominant negative mutation (DN^{-/-}) of the *Ikaros* gene, undergo dramatic changes in lymphocyte proliferation resulting in malignant disorders. *Ikaros* is a potent transcriptional activator, but a tumor suppressor gene as well. It seems that, as distinguished from *Ikaros*

null mice, *Ikaros* protein in DN^{-/-} mice that has no ability to bind DNA, can form heterodimers with other proteins within the *Ikaros* family altering their function. Mice with the *Ikaros* dominant negative mutation develop malignant lymphomas in 100% of cases. Recent studies report an important role of *Noch* family proteins in the regulation of lymphocyte development. *Noch* proteins are transmembrane receptors, that bind their ligands *Jagged1*, *Jagged2* or *Delta*. Thereafter their intracellular receptor domene is proteolitically dissociated and transported into the nucleus where *Notch* acts as a transcription factor. In our investigation we study expression of *Ikaros* family transcription factors as well as membrane expression of pre-TCR in human leukemias and lymphomas.

Using reverse transcription of mRNA isolated from archive samples and PCR (RT-PCR method) we detect and quantify *Ikaros*, *Aiolos* and *Helios* transcription factors and their splicing isoforms in lymph node samples from leukemia and lymphoma patients. With new designed different primers for RT-PCR we tried to identify whether *Aiolos* and *Helios* have similar isoforms like *Ikaros* with ability to interfere with other family members causing malignant transformation.

REGULACIJA EKSPRESIJE EKTOPEPTIDAZA I OPIOIDNIH RECEPTORA REGULATION OF ECTOPEPTIDASES AND OPIOID RECEPTORS EXPRESSION

Voditeljica projekta: dr. sc. Jelka Gabrilovac

Tel: ++385 1 4561 011 e-mail: gabril@irb.hr

Suradnici na projektu:

Davorka Breljak, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Barbara Buza-Vidas, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Jelka Gabrilovac, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Irena Martin Kleiner, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Tamara Stipčević, doktorica biomed. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja (porodiljni dopust)

Suradnik iz druge ustanove:

Milivoj Boranić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik, redovni profesor Medicinskog fakulteta Sveučilišta u Osijeku

Tehnička suradnica:

Margareta Cvetkovski, tehničarka

Program rada i rezultati na projektu:

Započeta su istraživanja regulacije ekspresije membranskih ektopeptidaza na stanicama hematoopoetskog porijekla. Na modelu promijelocitne stanične linije HL-60 sa visokom i selektivnom ekspresijom membranske aminopeptidaze N (EC 3.4.11.2; APN; CD13), ispitana je regulacija ovog enzima pomoću T-limfocitnog citokina, interferona-gamma. Nađeno je da *interferon-gamma*, ovisno o koncentraciji i duljini tretmana, regulira APN/CD13 na HL-60 stanicama, i to na razini mRNA, kao i funkcionalnog proteina. Rezultati govore u prilog uloge aminopeptidaze N na stanicama mijelomonocitnog porijekla u upalnim procesima.

Research programme and results:

Regulation of the expression of membrane aminopeptidases on cells of hematopoietic origin has been studied. Effects of a T-cell cytokine, interferon-gamma on the expression of membrane aminopeptidase N (EC 3.4.11.2; APN; CD13) have been examined by using cells of a promyelocytic cell-line HL-60, which strongly and selectively express CD13. *Interferon-gamma regulated the expression of aminopeptidase N on HL-60 cells in a dose- and time-dependent manner both at mRNA level and at the level of functional protein. The data suggest a role of aminopeptidase N on cells of myelo-monocytic origin in inflammation.*

MOLEKULARNI MEHANIZMI NASTANKA NEUROENDOKRINIH TUMORA MOLECULAR MECHANISMS IN THE PATHOGENESIS OF NEUROENDOCRINE TUMORS

Voditeljica projekta: dr. sc. Koraljka Gall-Trošelj
Tel: ++ 385 1 4560 972 e-mail: troselj@irb.hr

Suradnici na projektu:

Koraljka Gall-Trošelj, doktorica med. znanosti, znanstvena suradnica
Maša Katić, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena asistentica
Ante Škrabalo, dipl. inž. biol., mlađi asistent

Suradnik iz druge ustanove:

Toni Kolak, doktor med. znanosti, znanstveni asistent (50% radnog vremena), Klinička bolnica Dubrava, Zagreb

Program rada i rezultati:

Poznato je da je zloćudna preobrazba višestupnjeviti proces koji nastaje zbog poremećaja u građi ili funkciji više gena, poglavito onkogena i tumor supresorskih gena. Iako se nastanak nekih tumora iz skupine neuroendokrinih tumora povezuje s promjenama u točno određenim genima (na primjer, medularni karcinom štitnjače s mutacijama u protoonkogenu *ret*), genetičke promjene koje dovode do nekontroliranog dijeljenja neuroendokrinih stanica i dalje su nepoznanica. Gubitak heterozigotnosti (LOH, od engl. loss of heterozigosity) određivat ćemo za tumor supresorske gene: *BRCA-1*, *NF-1*, *p53*, *nm23-H1*, *p73*, *IGF2-R* i *H19* u arhivskim uzorcima tkiva medularnog karcinoma štitnjače, feokromocitoma i inzulinoma, kao i u tkivima svih dodatno prikupljenih neuroendokrinih tumora. Promjene u ispoljavanju gena koji se ponašaju u skladu s genomskim upisom ("imprinting"): *IGF2* i *H19* pratit ćemo na razini mRNA izdvojenoj iz tkiva prikupljenih neuroendokrinih tumora smrznutih u tekućem dušiku. Očekujemo pojačano ispoljavanje gena za *IGF2*, odnosno smanjeno ispoljavanje gena za *H19* u odnosu na tkivo netumora (u slučajevima kada će biti dostupno), ili u odnosu na gen čije je ispoljavanje u tkivu tumora stalno – GAPDH ("housekeeping gene"). Usporednom analizom DNA i mRNA u tkivima netumora i tumora odredit ćemo da li je došlo do poremećaja u genomskom upisu (LOI), što bi rezultiralo gubitkom obrasca monoalelne ekspresije za gen *IGF2*. Očekujemo da će usporedna analiza ekspresije gena za *IGF2-R* u tkivima tumora i netumora (u slučajevima kada će tkivo tumora biti dostupno) odnosno usporedne analize ekspresije ovog gena i gena GAPDH (u slučajevima kada tkivo tumora neće biti dostupno) pokazati smanjeno ispoljavanje gena za *IGF2-R* u analiziranim neuroendokrinih tumorima. U tijeku je prikupljanje parafinskih rezova uzoraka feokromocitoma, inzulinoma te svježih uzoraka neuroendokrinih tumora. Do sada su učinjene analize LOH na arhivskim uzorcima šest feokromocitoma za gene *p53*, *nm23-H1*, *BRCA-1* (biljezi D17S856 i D17S579) i *NF-1*. Gubitak heterozigotnosti za gen *BRCA-1* (D17S579) pokazan je u jednom uzorku. Iz novoprikupljenih uzoraka neuroendokrinih tumora izdvojene su ukupna RNA, čija je kvaliteta ispitana umnažanjem gena za GAPDH, koji bi trebao biti ispoljen u svim tkivima, i genomski DNA. Dio dosadašnjih rezultata, uz prije dobivene rezultate na medularnim karcinomima štitnjače i inzulinomima, iako dobiveni na malom broju analiziranih tumora, ukazuju da se i u neuroendokrinih tumorima dešavaju višestupnjevite genetičke promjene.

Research programme and results:

Malignant transformation is the multistage process which occurs as a consequence of mutations in different genes, mainly oncogenes and tumor suppressor genes. Although the small proportion of neuroendocrine tumors has been connected with changes in specific genes (medullary thyroid cancer – mutations in the *ret* protooncogene), the majority of genetic changes that cause occurrence of most neuroendocrine tumors remain unknown. Loss of

heterozigosity analysis (LOH) will be performed on archive samples of medullary thyroid carcinoma, pheochromocytoma and insulinoma for tumor suppressor genes *BRCA-1*, *NF-1*, *p53*, *nm23-H1*, *p73*, *IGF2-R* i *H19*. In addition, this analysis will be performed on all newly collected neuroendocrine tumor samples. Subtile changes, mainly at the level of promoter methylation, that results with aberrant expression of imprinted genes: *IGF-2* and *H19* will be explained at the level of LOI (loss of imprinting) analysis. These experiments will be performed on mRNA extracted from neuroendocrine tumor tissues preserved in liquid nitrogen. If included in molecular mechanism of neuroendocrine tumors occurrence, *IGF-2* expression should be shown to be increased, with reciprocal expression of *H19* gene. Also, we do expect to show an decreased expression of *IGF-2R*, when compared with its expression in non-tumorous tissue (when available) and/or when compared with expression of housekeeping gene – GAPDH in the tumor tissue. The sampling of the paraffin sections of the pheochromocytoma samples and fresh samples of subset of neuroendocrine tumors is in the action. So far, LOH analysis for *p53*, *nm23-H1*, *BRCA-1* (markers D17S579 and D17S856) and *NF-1* has been performed on six pheochromocytoma archive samples. LOH of *BRCA-1* (marker D17S579) has been detected in one tumor sample. The total RNA, as well as genomic DNA, has been isolated from all newly collected neuroendocrine tumors. The RNA's quality has been checked by amplifying the part of the GAPDH housekeeping gene which should be expressed in all analyzed tissues. Our results, in addition with our previous results obtained on medullary thyroid carcinoma and insulinoma samples, although obtained on small number of tumor samples, show the presence of multigenetic changes in neuroendocrine tumors.

MOLEKULARNO-GENETIČKI I PROGNOŠTIČKI ČIMBENICI U NASTANKU RAKA VRATA MATERNICE GENETIC AND MOLECULAR PROGNOSTIC FACTORS OF CERVICAL CANCEROGENESIS

Voditeljica projekta: dr. sc. Magdalena Grce

Tel. ++385 1 4561110 e-mail: grce@irb.hr

Suradnici na projektu:

Vera Gamulin, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica (konzultantica)

Magdalena Grce, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica

Koraljka Husnjak, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Mihaela Matovina, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Krešimir Pavelić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik, (konzultant)

Tehnička suradnica:

Jasminka Golubić, med. lab. inž., tehnička suradnica

Suradnici iz drugih ustanova:

Damir Eljuga, doktor med. znanosti, znanstveni suradnik, KB "Sestre milosrdnice", Zagreb (konzultant)

Ivan Fistončić, doktor med. znanosti, viši znanstveni asistent, Klinička bolnica "Merkur", Zagreb

Goran Grubišić, doktor med. znanosti, redovni profesor, KB "Sestre milosrdnice", Zagreb (konzultant)

Branko Hodek, doktor med. znanosti, redovni profesor, KB "Sestre milosrdnice", Zagreb (konzultant)

Marijan Ilijaš, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, KB "Sveti duh", Zagreb (konzultant)

Petar Klarić, doktor med. znanosti, viši znanstveni asistent, Klinička bolnica "Sestre milosrdnice", Zagreb

Gerard Orth, doktor vet. znanosti, znanstveni savjetnik, Pasteur-ov institut, Pariz, Francuska (konzultant)

Mihael Skerlev, doktor med. znanosti, docent, KBC "Šalata", Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Od kolovoza 2002. nastavljena su prethodna istraživanja molekularno-genetičke osnove raka vrata maternice. Istraživanja se provode u suradnji s kolegama kliničarima iz nekoliko kliničkih bolničkih centara u Zagrebu (KB "Sestre milosrdnice", KB "Merkur" i dr.), Požegi i povremeno drugim gradovima u Hrvatskoj. Prate se prognostički čimbenici u nastanku i razvoju raka vrata maternice, a poglavito infekcije papilomavirusima čovjeka (HPV). Infekcije HPV su subkliničke i održavaju se u latentnom obliku tijekom dugog vremenskog razdoblja. Zbog rasprostranjenosti HPV infekcija i dugog razdoblja između primarne infekcije i razvoja karcinoma, očito je da infekcija HPV sama za sebe nije dovoljna za zloćudnu preobrazbu. Razni čimbenici koji su uključeni u transformaciju, odnosno imortalizaciju stanica, a posljedica su infekcije HPV-a predmet su istraživanja u ovom projektu. Sustavnim praćenjem nastoji se procijeniti važnost infekcije HPV, kao i ostalih spolno prenosivih infekcija, u nastanku i razvoju karcinoma vrata maternice. U odabranom uzorku neoplazija pločastog epitela vrata maternice visokog stupnja (CIN III), preteča karcinoma, istraženi su svi mogući tipovi HPV-a različitim molekularno-genetičkim metodama (PCR, RFLP, hibridizacija, sekvenciranje) u cilju identifikacije novih tipova HPV-a te utvrđivanja učestalosti pojedinih visokorizičnih HPV-a u žena u Hrvatskoj. Ispitana je također povezanost spontanih pobačaja sa bakterijskim i virusnim infekcijama. Naime, metodom PCR utvrđena je prisutnost bakterijske infekcije u 6,2 % (5/81), a virusne infekcije u 7,4 % (6/81) uzoraka spontano pobačenih plodova. Osim toga, u suradnji sa kolegama s Farmaceutsko-biokemijskog fakulteta i Prirodoslovno-matematičkog fakulteta ispitano je u uvjetima *in vitro* nekoliko novosintetiziranih spojeva iz kemijski različitih grupa, u cilju prepoznavanja potencijalno novih protuvirusnih lijekova.

Research programme and results:

From august 2002, research on prognostic factors of cervical cancerogenesis is in pursuit, in collaboration with colleagues from clinical centers in Zagreb (University hospital "Sestre Milosrdnice", "Merkur" and others), Požega and occasionally other Croatian towns. Cervical cancerogenesis is closely associated to sexually transmitted infections and especially human papillomavirus (HPV). HPV infections are subclinical and latent for a long period of time. Because of their wide-spread and long period between the primary infection and the development of the cancer, it is obvious that HPV infections alone are not enough for the malignant transformation. Different factors involved in the cellular transformation and immortalization are directly under influence of HPV infection and are the purpose of investigation herein. By means of different molecular methods (PCR, RFLP, hybridisation, sequencing) a selected sample of high grade cervical intraepithelial neoplasia (CIN III) were analysed in order to determine the prevalence of high risk HPV types and the eventual emergence of new HPV types among Croatian women. The association between spontaneous miscarriages and intrauterine infections was investigated. Bacterial infection was detected in 6,2 % samples (5/81), while viral infection in 7,4 % (6/81). Beside that, newly synthesised compounds were tested in an *in vitro* model for antiviral properties in order to recognise potential new antiviral drugs.

KLONIRANJE STANICA EMBRIJA U STRUKTURE SLIČNE OTOČIĆIMA EMBRYONIC CELL PRODUCTION OF PANCREATIC-LIKE ISLETS

Voditelj projekta: dr. sc. Mirko Hadžija

Tel: ++385 1 4561064 e-mail: hadzija@irb.hr

Suradnici na projektu:

Mirko Hadžija, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Marijana Popović Hadžija, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena asistentica

Milivoj Slijepčević, doktor vet. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehničke suradnice:

Marina Marš, (porodiljni dopust)
Iva Pešun, tehničarka (od 14.9.2002.)

Program rada i rezultati na projektu:

U inzulin ovisnoj šećernoj bolesti (IDDM, engl. Insulin dependent diabetes mellitus, tip I) dolazi do autoimune razgradnje β stanica gušterače, mjesta proizvodnje inzulina, što se može djelomično nadomjestiti egzogenim inzulinom.

Transplantacija Langerhansovih otočića u dijabetične glodavce i pse pokazala se uspješnom metodom dokidanja potrebe za egzogenim inzulinom. Osim toga, ovaj način tretmana bolesti uspješno sprečava pojavu i razvoj sekundarnih komplikacija karakterističnih za dijabetes. Rezultati na opisanim eksperimentalnim modelima ukazali su na potrebu transplantacije otočića i u ljudi. Međutim, pri tome postoje neki limitirajući čimbenici: dostatan broj otočića (4000 otočića/kg/tj. težine), dostatan broj davatelja gušterače (tri do četiri davatelja), primjena imunosupresivne terapije recipijenta. Snažna imunosupresivna terapija, koja je nužna da ne bi došlo do odbacivanja transplantata, povećava rizik od infekcija i razvoja malignog oboljenja. Osim toga, imunosupresivi su toksični za β stanice.

U posljednjih nekoliko godina u tretmanu različitih bolesti ukazala se potreba za dobivanjem staničnih inplantata dobivenih od embrionalnih matičnih stanica. Embrionalne matične stanice su pluripotenti, samo-obnavljajući elementi koji se mogu diferencirati u različite tipove stanica.

Transplantacija takvih struktura u dijabetične recipijente može poboljšati stanje bolesti *Diabetes mellitus*, bolesti koja zahvaća sve veći broj ljudi u svijetu.

U našem laboratoriju razvijamo metode i uvjete *in vitro* za razvoj funkcionalnih struktura slične otočićima gušterače. U tu svrhu parovi NOD miševa su testirani na postojanje sluzavog vaginalnog čepa svako jutro. 3,5 dana od oplodnje maternica je izvađena, a pojedinačni rogovi odvojeni. Pomoću tupe igle i medija rogovi maternice su isprani, a skupljene blastociste su kultivirane u M16 mediju 48 sati. U kiselim uvjetima (regulirano pomoću CO_2 i Tyrode kiselinom) unutrašnja stanična masa izlazi izvan zone pelucide. Pluripotentne stanice su propagirane u prisutnosti leukemija-inhibitornog faktora (LIF). Nakon 3-4 dana u odsutnosti LIF-a embrionalne matične stanice formiraju embrionalna tijela na sloju trofoblasta. Embrionalna tijela predstavljaju početnu točku u formiranju struktura sličnih otočićima gušterače. Stanice embrionalnih tijela se nasade na želatinizirane pločice u specifičnom N2 mediju koji sadrži B27, fibroblastni čimbenik rasta i nikotinamid. Ovim načinom dobivamo imunokompetentno tkivo pogodno za transplantaciju u dijabetičnog recipijenta.

Research programme and results:

Autoimmune destruction of pancreatic β cells in type I, insulin dependent diabetes mellitus (IDDM), results in the damage of endogenous insulin secretion tissue, which is partially replaced by exogenous insulin administration.

Islet transplantation in diabetic rodents and dogs successfully eliminates the requirement for exogenous insulin. Transplantation of isolated Langerhans islets in the diabetic recipients causes successful protection from development of diabetes complications. These results increase prosperity of human transplantation islets. But, in human transplantation the functional amelioration of diabetes provided by allogeneic β cell transplantation. Several limiting factors are included in that: number of islets (4000 islets /kg/body weight), number of donors (three to four donor pancreases are required) and immunosuppression. Immunosuppression therapy generally reduced immune responsiveness, suppress immune system and increasing risk of infection and development of cancer. Also, the drugs write now available for immuno therapy are exactly toxic for beta cells.

In recent years, there has been an increasing interest in the possible use of cell implants derived from embryonic stem cells to treat a variety of disease. Embryonic stem (ES) cells are pluripotent, self-renewing elements that can generate many cell types of the organism.

Transplantation of *in vitro* produced structures similar to Langerhans islets in diabetic recipient could improve development and progression of stage of *Diabetes mellitus*, the disease which affects more and more people worldwide.

In our lab we developed the methods and conditions for *in vitro* producing functional structure like-pancreatic islet. For these purpose, NOD mice were caged in pairs and female examined for mating plugs each morning. On 3 ½ days of pregnancy entire uterus was dissected out, and two uterine horns were individually isolated. By blunt-ended needle medium was flushed through uterine horn. Blastocysts were collected and cultured in M16 medium during 48 hours. In acid condition (regulated by CO₂ and Tyrode acid) inner cell mass came out from the *zona pellucid*. Pluripotent stem cells are propagating in the presence of leukemia inhibitory factor (LIF) in medium, growing attached to the bottom of Petri dish. After 3-4 days, in the absence of LIF, embryonic cells formed embryonic bodies onto cells of trophoblast. Embryonic bodies, presented the main base for forming naive insulin-secreted (and other hormones) structure similar to pancreatic islet. These structures were carefully picked off from the trophoblast layer and dispersed on gelatin (0.2%) coated dish. These cells we propagate in insulin-secreted cells by using specific condition, which included N2 medium containing B27, basic fibroblast growth factor and nicotinamid.

This is a good way for producing of immunocompatible tissue for transplantation in diabetic recipients.

ANTITUMORSKI UČINCI VIRUSA I ONKOLITIČKA VIRUSNA CJEPIVA VIRUS ANTITUMOROUS ACTION AND ONCOLYTIC VIRUS VACCINE

Voditelj projekta: dr. sc. Mislav Jurin

Tel: ++385 1 4680 118 e-mail: jurin@irb.hr

Suradnici na projektu:

Siniša Ivanković, magistar biomed. znanosti, asistent

Mislav Jurin, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik

Biserka Pokrić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica (konzultantica)

Tehnička suradnica

Nevenka Hiršl, samostalna tehničarka

Suradnici iz drugih ustanova:

Stanislav Čajavec, doktor biotehnol. znanosti, viši znanstveni suradnik, Veterina d.o.o., Zagreb

Michael Parnham, prof. doktor farmakologije, Pliva, Istraživački institut, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Izabrati soj virusa njukastlske bolesti (Newcastle disease virus; NDV) koji najučinkovitije prodiru u tumorsku ali ne i u normalnu stanicu. Odrediti intenzitet i opseg citolize nakon replikacije virusa, te promjenu antigeničnosti stanica u kojima se virus replicira. Nadalje, ispitati *in vitro* citotoksično djelovanje spojeva poput soli mangana, metionina, dimetilsulfoksida (DMSO) te A i E vitamina, primijenjenih pojedinačno ili u kombinaciji s NDV, s ciljem modulacije proliferacijske sposobnosti tumorskih stanica te pojačanja replikacijskih a time i onkolitičkih sposobnosti NDV.

Pratiti dinamiku imunoloških promjena u organizmu s tumorom te rasta ovakvih tumora nakon primjene odabranog virusa, samog ili u kombinaciji s lizatima tumorskih stanica. Razraditi kombinirani terapijski pristup problemu tumorske bolesti koji će se temeljiti na onkolitičkoj aktivnosti NDV i supstancama poput mangana, DMSO, indometacina i deksametazona koje će u sinergističkom djelovanju s NDV pojačati njegovu antitumorsku aktivnost te tako spriječiti ili barem usporiti tumorski rast. Učinkovitost ovakvog pristupa u tretiranju tumorskih bolesti usporedit će se s konvencionalnom metodom liječenja citostaticima.

Potvrđena je ranija spoznaja da intenzitet citopatogenih promjena u stanicama ovisi o patogenosti soja, dozi virusa i histiogenetskom porijeklu tumorskih stanica, dok su promjene u normalnim stanicama neznatne. Veća količina virusa nađena u nadtalozima tumorskih stanica zaraženih sojem Herts33 govori u prilog multicikličkoj replikaciji ovog soja NDV. Nadalje, kombinacija A i E vitamina, te MnCl₂ inhibira proliferaciju svih tipova stanica značajnije nego svaka komponenta primjenjena posebno, što je naročito izraženo na kulturama tumorskih stanica. U proširenim pristupima potvrđeno je da primjena A vitamina nije znatnije utjecala na replikaciju virusa, dok je prisustvo manganovog sulfata rezultiralo nalazom višeg titra virusa u nadtalogu zaraženih tumorskih stanica, a nižim titrom u nadtalogu zaraženih fibroblasta. Primijenjene doze E vitamina nisu znatnije utjecale na razinu titra lentogenih sojeva NDV LaSote i Hitchnera u stanicama SCCVII dok je u stanicama FsaR u prisustvu ovog vitamina zabilježen značajno viši titar virusa.

Research programme and the results:

The intention is to select Newcastle disease virus (NDV) strain penetrating strongly in tumour but not in normal cells. Further, the intensity of cytolysis following virus replication should be determined as well as the changes in the antigenicity of these tumor cells. In vitro cytotoxic effects of manganese, methionine DMSO and vitamins A and E alone or in combination with NDV, expecting the modulation of tumor cell proliferation and the stimulation of virus oncolytic abilities will be investigated. The dynamics of tumor growth in experimental animals following particular virus and/or tumor cell lysate application will be determined. Therapeutical protocol including NDV, manganese, DMSO, indometacin and other relevant compounds will be performed in treating tumor bearing animals. The results obtained will be compared with the effects of chemotherapy.

We confirmed our previous results indicating that the intensity of cytopathogenic changes in the cells depended on virus strain and the dose applied and on histogenetic origin of tumor cells and that there was no significant changes in normal cells. Increased virus quantity in tumor cell cultures supernatants treated with NDV strain Hertz33 point to a multicyclical virus replications. Further, the combination of vitamins A and E with MnCl₂ inhibit cell proliferation much more stronger than each of them separately, particularly for tumor cells. In a new approach we confirmed that vitamin A did not influence virus replication in tumor cells but MnCl₂ did increasing the replication. There was no changes in normal cells. Vitamin E increased the replication of NDV LaSote and Hitchner in FsaR cells and there was no any effect in SCCVII cell.

MOLEKULARNA GENETIKA TUMORA GASTROINTESTINALNOG SUSTAVA MOLECULAR GENETICS OF GASTROINTESTINAL TUMORS

Voditeljica projekta: dr. sc. Sanja Kapitanović

Tel: ++385 1 4561 108 e-mail: kapitan@irb.hr

Suradnici na projektu:

Tamara Čačev, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Sanja Kapitanović, doktorica med. znanosti, viša znanstvena suradnica
Krešimir Pavelić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Suradnici iz druge ustanove:

Marina Premužić, doktorica med. znanosti, Zavod za gastroenterologiju, KBC Rebro, Zagreb
Boris Vucelić, doktor med. znanosti, redovni profesor, Zavod za gastroenterologiju, KBC Rebro, Zagreb (konzultant)
Šimun Križanac, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, Zavod za patologiju, KBC Rebro, Zagreb (konzultant)
Radan Spaventi, doktor med. znanosti, znanstveni suradnik, PLIVA d.d., Zagreb (konzultant)

Progran rada i rezultati na projektu:

Tumori debelog crijeva pogodan su model za proučavanje genetičke podloge nastanka i napredovanja raka. Smatra se da je većina karcinoma kolona posljedica stupnjevitog procesa, tijekom kojeg iz dobroćudnog adenoma kao posljedica naslijeđenih i/ili stečenih mutacija nastaje zloćudni invazivni tumor. Geni u kojima su najčešće ustanovljene promjene u tumorima kolona su tumor supresorski geni APC, MCC, DCC, DPC4, p53, p27, nm23 te obitelj gena ras. Najveći broj karcinoma debelog crijeva javlja se u sporadičnom obliku, dok na nastanak do 20% karcinoma kolona utječu nasljedni čimbenici. Do danas najbolje definirani nasljedni sindromi su obiteljska adenomatozna polipoza (FAP, od engl. familial adenomatous polyposis) i nasljedni nepolipozni karcinom debelog crijeva (HNPCC, od engl. hereditary nonpolyposis colon cancer). Cilj ovog istraživanja je ispitati nasljedne i sporadične genetske promjene u sporadičnim i nasljednim tumorima debelog crijeva radi boljeg razumijevanja mehanizama njihovog nastanka i napredovanja. Promjene različitih gena u nasljednim i sporadičnim tumorima debelog crijeva ispituju se na razini DNA, mRNA i proteina. Rezultati ovog istraživanja bi trebali pokazati kakva je uloga i važnost svakog od gena koji se ispituje (APC, DCC, DPC4, NF1, hMSH2, hMLH1, E-kadherin i β -katenin) u nastanku i napredovanju tumora debelog crijeva čovjeka. Korištenje suvremenih metoda molekularne biologije omogućit će nam presimptomatsku dijagnostiku što većeg broja nositelja nasljednih mutacija u našoj populaciji. Rezultati ovog istraživanja naći će svoju direktnu primjenu u dijagnostici i praćenju oboljelih od tumora debelog crijeva.

Research programme and results:

Of all human cancers, the molecular genetic alterations in colorectal cancer are best understood. This disease arises from the accumulation of mutations during progression from normal epithelium to adenoma and carcinoma. The genes which are most frequently changed in colon tumors are *APC*, *MCC*, *DPC4*, *p53*, *p27*, *nm23* and the family of *ras* genes. The most cases of colon cancer occur in sporadic form while the hereditary factors are considered to be the cause of up to 20 % of colon cancers. Until today the best defined hereditary syndromes are familial adenomatous polyposis (FAP) and hereditary non-polyposis colorectal cancer (HNPCC). The main goal of this study is to investigate hereditary and sporadic genetic changes in benign and malignant colon tumors in order to elucidate the mechanisms that lie in the core of their development and progression. The results of this study will help to elucidate the role and importance of each of the genes are examined (*APC*, *DCC*, *DPC4*, *NF1*, *hMSH2*, *hMLH1*, E-cadherin i β -catenin) in development and progression of colon cancer. The molecular genetic changes in these genes are examined on DNA, mRNA and protein level. Standard and new molecular biology methods will offer more efficient presymptomatic diagnostics of the germ-line mutations carriers in our population. The results of this study will also improve the diagnostics and surveillance of patients with sporadic and hereditary colon cancer.

ULOGA GENA FHIT U NASTANKU NEUROENDOKRINIH TUMORA ROLE OF FHIT GENE IN NEUROENDOCRINE TUMORS

Voditelj projekta: dr. sc. Šimun Križanac

Tel: ++385 1 4566 975 e-mail: simun_krizanec@hotmail.com

Suradnici na projektu:

Sanja Kapitanović, doktorica med. znanosti, viša znanstvena suradnica, konzultantica

Krešimir Pavelić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik, konzultant

Suradnici iz drugih ustanova:

Zlata Ivanovi-Herceg, doktorica med. znanosti, izvanredna profesorica, Medicinski fakultet, Zagreb

Jerolim Karadža, doktor med. znanosti, viši asistent, Medicinski fakultet, Zagreb

Šimun Križanac, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, Medicinski fakultet, Zagreb

Smiljka Lambaša, magistrica med. znanosti, asistentica, Klinička bolnica Dubrava, Zagreb
Ljubomir Pavelić, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, Klinika za plućne bolesti
Jordanovac, Zagreb, konzultant
Fadila Pavičić, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, Klinika za plućne bolesti
Jordanovac, Zagreb, konzultantica
Miroslav Samaržija, doktor med. znanosti, viši asistent, Klinika za plućne bolesti Jordanovac,
Zagreb, konzultant

Tehničke suradnice:

Ozrenka Poljak, med. lab. inž, viša tehničarka, KBC Rebro, Zagreb
Jelena Barač, med. lab. inž, viša tehničarka, Medicinski fakultet, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj projekta je odrediti ulogu gena FHIT i njegovih promjena u razvoju i progresiji neuroendokrinih tumora i to: a) vrstu molekulske promjene gena FHIT (nedostatak eksona, izostanak transkripcije, LOH); b) posljedice gubitka funkcije gena FHIT (apoptoza, djelovanje inhibitora ciklin ovisnih kinaza, stanična proliferacija); c) cjelokupni profil DNA FHIT pozitivnih i negativnih tumora; d) kliničke posljedice inaktivacije gena FHIT.

Research programme and results:

The purpose of this project is to evaluate the role of FHIT gene and its aberrations in development and progression of neuroendocrine tumors. Particularly: a) type of molecular aberrations of FHIT gene (missing exon, absence of transcription, LOH); b) the consequence of the loss of FHIT function (apoptosis, function of inhibitors of cyclin dependent kinases, cell proliferation); c) global DNA profile of FHIT positive and FHIT negative tumors; d) clinical consequences of FHIT inactivation.

**SIGNALNI PUT SHH/PTCH/SMO U TUMORIMA I MALFORMACIJAMA
THE SHH/PTCH/SMO SIGNALING PATHWAY IN CANCER AND DEVELOPMENT**

Voditeljica projekta: dr. sc. Sonja Levanat
Tel: ++ 385 1 45 61 110 e-mail: levanat@irb.hr

Suradnice na projektu:

Sonja Levanat, doktorica biokem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Arijana Komar, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja
Vesna Musani, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Mihaela Alivojvodić, tehničarka (50 % radnog vremena)

Suradnici iz drugih ustanova:

Allen Bale, doktor med. znanosti, redovni profesor, Department of Genetics, Yale University School of Medicine, New Haven, SAD, konzultant
Anna-Marija Frischauf, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, University of Salzburg, Austrija, konzultantica
Heidi Hahn, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, University of Goettingen, Njemačka, konzultantica
Šimun Križanac, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, Zavod za patologiju Rebro, Medicinski fakultet, Zagreb, konzultant
Milovan Kubat, doktor med. znanosti, redovni profesor, Zavod za sudsku medicinu, Medicinski fakultet, Zagreb, konzultant
Mirna Šitum, doktorica med. znanosti, docentica, Zavod za dermatovenerologiju, Klinička bolnica «Sestare milosrdnice», Zagreb, konzultantica

Rune Toftgard, doktor med. znanosti, Department of Bioscience, NOVUM, Karolinska Institute, Švedska, konzultant

Program rada i rezultati:

Jedan od pet poznatih signalnih puteva koji se danas povezuju s karcinogenezom je SHH/PTCH/SMO signalni put, koji također ima istaknutu ulogu tijekom razvoja sisavaca. Ta je dvostruka uloga posebno uočljiva u ljudi sa naslijeđenim mutacijama PTCH gena koje uzrokuju Gorlinov sindrom.

SHH/PTCH/SMO signalni put normalno funkcionira tako da vezanje liganda Shh na Ptch prekida inhibiciju Smo-a, zbog čega počinje kontrolirana ekspresija ciljnih gena koji uključuju GLI1, sam PTCH kao autoregulator, te vjerojatno druge za sada uglavnom nepoznate gene. Naš program obuhvaća proučavanje svih učesnika ovog signalnog puta, što je nužno za razumijevanje njegove uloge u normalnom razvoju, u malformacijama i u karcinogenezi, te otvara nove perspektive ne samo u dijagnostici nego i u genskoj i konvencionalnoj terapiji. U proteklih smo pola godine našli indicije poremećenog funkcioniranja SHH/PTCH/SMO signalnog puta u različitim tumorima. Analiziran je set tumora ovarija (dvadeset fibroma ovarija, pet fibrotekoma, fibroadenom, karcinom, metastaze, leomiom te dvadeset dermoida) na 9q22.3 regiju sa polimorfim biljezima D9S287, D9S127, D9S196, D9S180 te PTCH intra. U suradnji s laboratorijem iz Goettingena u Njemačkoj sekvencionirana su 23 eksona PTCH gena u deset fibroma i deset dermoida.

Razvijena je metoda kvantitativnog PCR za PTCH, SMO, GLI i SHH koja će, uz metode ekspresije razvijene u prethodnom razdoblju, biti ključna u pojašnjavanju funkcioniranja ovog signalnog puta, njegove regulacije i interakcije sa ostalim signalnim putevima.

Uspostavljena je austrijsko-hrvatska suradnja koja je usmjerena na analize tkivno specifičnih tumora iniciranih inaktivacijom PTCH gena. Pratit će se ciljni geni ovog signalnog puta na mišjem modelu (laboratorij u Austriji) te u bazocelularnom tumoru, prvenstveno preko ekspresije Gli.

Uspostavlja se suradnja sa Francuskom oko izrade dijagnostičke metode za PTCH i dijagnostiku Gorlinova sindroma.

Istraživanja bi općenito trebalo proširiti i na različite potencijalne interakcije sa SHH/PTCH/SMO signalnim putem. Promjene na lokusu CDKN2A/p16, koje indiciraju predispoziciju za obiteljski melanom, postaju nam zanimljive i u tom kontekstu jer je nedavno opažen gubitak heterozigotičnosti (LOH) gena p16 i u bazocelularnom karcinomu, za koji je PTCH gen dokazani tumor supresor. Mi smo u nastavku istraživanja lokusa p16 analizirali desetak pacijenata s malignim melanomom, te članove njihovih obitelji radi mogućih indicija haplotipa bolesti. Do sada smo našli nekoliko LOH-ova i polimorfizama, te jednu mutaciju p16 gena (sekvencioniranje u suradnji s Medicinskim fakultetom u Zagrebu).

Research programme and results:

The SHH/PTCH/SMO pathway is one of the five signaling pathways which are presently associated with carcinogenesis, and it also has a prominent role in mammalian development. This dual role is particularly visible in persons with inherited PTCH mutations which cause Gorlin syndrome.

In the SHH/PTCH/SMO signaling pathway normal functioning, the ligand Shh binds Ptch and relieves Smo from inhibition, thereby initiating a controlled expression of the pathway target genes which include the GLI1 gene, the PTCH gene itself as an auto-regulator, and probably other genes that are largely unknown at present time.

Our program encompasses the study of all actors of this signaling pathway, which is necessary for understanding of its role in normal development, in malformations, and in carcinogenesis, and which may open new prospects not only in diagnostics but also in gene and conventional therapy.

In last six months we have found indications of aberrant SHH/PTCH/SMO pathway functioning in various tumors. In a set of ovarian tumors (twenty ovarian fibromas, five fibrotecomas, a fibroadenoma, an ovarian carcinoma, metastases, a leomyoma, and twenty dermoids) the 9q22.3 region was typed with polymorphic markers D9S287, D9S127,

D9S196, D9S180 and PTCH intra. In collaboration with the lab from Goettingen, Germany, twenty-three PTCH exons were sequenced in ten fibromas and ten dermoids. Quantitative PCR for PTCH, SMO, GLI and SHH has been developed, and together with the methods for gene expression analysis from the previous period, this will provide the key approach to explanation of the pathway functioning, its regulation and interaction with other signaling pathways.

An Austrian-Croatian collaboration has been established which is focused on analysis of tissue-specific tumors initiated by the PTCH gene inactivation. Target genes of this pathway will be examined on mouse models (lab in Austria) and in basocellular tumor, mainly through Gli expression.

A collaboration with a French lab has been initiated, aimed at diagnostic methods for the PTCH gene and Gorlin syndrome.

More generally, our research should be extended to various potential interactions with the SHH/PTCH/SMO signaling pathway. The CDKN2A/p16 locus alterations, which indicate hereditary predisposition to melanoma, are becoming interesting also in this context, because recently a loss of heterozygosity (LOH) for p16 has been reported in basocellular carcinoma too, for which the PTCH gene is a well-established tumor suppressor. Continuing our p16 locus exploration from the previous period, we have analyzed some ten patients with malignant melanoma, as well as their family members for possible indications of the disease haplotype. So far we have found several LOHs and polymorphisms, and one p16 mutation (sequencing in collaboration with the Medical School of Zagreb University).

OKSIDACIJSKI/ANTIOKSIDACIJSKI STATUS NAKON PRIMJENE OPIOIDA I OPIJATA OXIDATIVE/ANTIOXIDATIVE STATUS AFTER TREATMENT WITH OPIOIDS/OPIATES

Voditeljica projekta: dr. sc. Tanja Marotti

Tel: ++385 1 4561 172 e-mail: marotti@irb.hr

Suradnici na projektu:

Tihomir Balog, doktor biomed. znanosti, viši asistent

Ivo Hršak, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik

Tanja Marotti, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Sandra Sobočanec, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Višnja Šverko, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehnička suradnica:

Vesna Matešić, tehničarka

Program rada i rezultati na projektu:

Utjecaj spola i starosti na oksidacijski/antioksidacijski status ispitan je u CBA miševa u dva organa: jetri i mozgu. Utvrdili smo da su oksidacijski (LPO) i antioksidacijski (superoksid dismutaza, katalaza i glutation-peroksidaza) status ovisni o dobi i spolu u oba tkiva. U jetri oba spola oksidacijski status podjednako raste s dobi, a u mozgu je u starih ženki niži nego u mužjaka iste dobi. Međutim, u oba tkiva je antioksidacijski status viši u ženki nego u mužjaka iste dobi. U konačnici ovi rezultati prikazuju da su u starosti ženke u antioksidacijskom, a mužjaci u prooksidacijskom stanju u oba tkiva, što bi moglo biti od važnosti u određivanju uzroka različite osjetljivosti spolova prema degenerativnim promjenama te u odnosu na sam proces starenja.

Research program and results:

We have examined the influence of sex and age on oxidative/antioxidative status in liver and brain of CBA mice. We determined the dependence of both oxidative (LPO) and antioxidative (superoxide dismutase, catalase and glutathione-peroxidase) parameters upon sex and age in both tissues. While liver oxidative status is increased with age to the same extent in both sexes, brain oxidative status is lower in senescent females than in males of

corresponding age. In general, antioxidative status is always in favor of females over males of same age period. Thus, senescent female mice show tendency toward antioxidant conditions, while male mice of corresponding age show prooxidant behavior. In conclusion, such changes could be of great relevance in determining causes of different behavior of sexes and possible influence of these phenomena on degenerative changes and the aging process as well.

NEUROFARMAKOLOGIJA SEROTONINSKOG SUSTAVA NEUROPHARMACOLOGY OF SEROTONERGIC SYSTEM

Voditeljica projekta: dr. sc. Dorotea Muck-Šeler

Tel: ++385 1 4571 207 e-mail: seler@irb.hr

Suradnici na projektu:

Dorotea Muck-Šeler, doktorica med. znanosti, viša znanstvena suradnica

Nela Pivac, doktorica med.znanosti, znanstvena suradnica

Tehnički suradnici:

Zlatica Tonšetić, tehničarka

Suradnici iz drugih ustanova:

Mirko Dikšić, doktor kem. znanosti, redovni profesor, Montreal Neurological Institute, McGill University, Montreal, Kanada ,konzultant

Rudolf Gregurek, doktor med. znanosti, redovni profesor, Klinika za psihološku medicinu, KBC Rebro, Zagreb, konzultant

Miro Jakovljević, doktor med. znanosti, redovni profesor, Psihijatrijska klinika, KBC Rebro, Zagreb, konzultant

Dragica Kozarić-Kovačić, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, Nacionalni centar za psihotraumu, KBC Dubrava, Zagreb

Korona Nenadić-Šviglin, magistarica med. znanosti, Psihijatrijska bolnica Vrapče, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Projekt istražuje ulogu perifernih biokemijskih pokazatelja (trombocitni serotonin, trombocitna monoamino oksidaza, dopamin beta-hidroksilaza) u etiologiji i liječenju psihičkih poremećaja posebice u ovisnika o alkoholu, osoba s bipolarnim depresivnim poremećajem, shizofrenih bolesnika. i bolesnika s posttraumatskim stresnim poremećajem koji imaju psihotičke simptome. Preliminarni rezultati upućuju na smanjenu koncentraciju trombocitnog serotonina i smanjenu aktivnosti trombocitne monoamino oksidaze u ovisnika o alkoholu, te povećanu koncentraciju trombocitnog serotonina u maničnih bolesnika.

Research programme and results:

The programme involves investigation of the role of peripheral biochemical markers (platelet serotonin, platelet monoamine oxidase, dopamine beta-hydroxylase) in the ethiology and treatment of psychiatric disorders, particularly in persons with alcohol abuse, patients with bipolar depression, schizophrenia and patients with posttraumatic stress disorder and psychotic features. Preliminary results have shown decreased concentration of platelet serotonin and decreased activity of platelet monoamine oxidase in patients with alcohol abuse. An increase in platelet serotonin concentration was found in patients with mania.

MOLEKULARNI MEHANIZMI IMUNOSUPRESIJE MOLECULAR MECHANISMS OF IMMUNOSUPPRESSION

Voditeljica projekta: dr. sc. Renata Novak Kujundžić

Tel: ++385 1 4560 949 e-mail: rnovak@irb.hr

Suradnice na projektu:

Katja Ester, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Renata Novak Kujundžić, doktorica vet. znanosti, viša asistentica
William Lauman Ragland III, doktor biokem. znanosti, savjetnik IRB na poslovima vezanim uz pitanja razvitka molekularne medicine

Suradnici iz drugih ustanova:

Vladimir Savić, magistar vet. znanosti, asistent, Centar za peradarstvo, Veterinarski institut RH

Program rada i rezultati na projektu:

Tijekom 2002. godine nastavljena su istraživanja mehanizma djelovanja imunosupresivnih virusa peradi na transkripciju gena za interferon (IFN) alfa i gama. Istraživan je utjecaj najznačajnijih imunosupresivnih virusa peradi, virusa zarazne anemije kokoši (CAV), jednolančanog DNA circovirusa i virusa zarazne bolesti burze (IBDV), dvolančanog RNA virusa. Oba ova virusa često izazivaju subkliničku infekciju te su ekonomske štete posljedica neprimjerenog imunološkog odgovora na različite patogene i oboljevanja od bolesti izazvanih njima. Ne postoji opće prihvaćeni test za određivanje imunološkog statusa peradi. Istraživana je primjenljivost testa kompetitivne hibridizacije nukleinskih kiselina u mikrotitarskim pločicama za određivanje količine mRNA za IFN alfa i gama u ocjeni oštećenja imunološkog sustava imunosupresivnim virusima. Poznato je da brojni imunosupresivni virusi drugih životinjskih vrsta utječu na transkripciju gena za IFN. Utjecaj CAV na transkripciju gena za IFN alfa i gama istraživan je na SPF pilićima, eksperimentalno inficiranim CAV-om. Kako bi se potaknula proizvodnja IFN alfa i gama, životinje su injicirane inaktiviranim virusom Newcastle-ske bolesti (iNDV) ili trovalentnim cjepivom (IBDV, iNDV, zarazni bronhitis). U uzorcima krvi je određivan hematokrit i bijela krvna slika te je iz njih izolirana RNA i DNA. Izolirana RNA je korištena u testu kompetitivne hibridizacije za određivanje količine mRNA za IFN alfa i gama, a DNA u istom formatu testa za određivanje CAV. Transkripcija gena za IFN alfa i gama je bila znatno viša u kontrolnoj skupini u odnosu na inficirane piliće u različitim vremenskim razmacima nakon indukcije proizvodnje IFN pomoću cjepiva. U istraživanju utjecaja IBDV na transkripciju gena za IFN, korišteni su SPF brojleri. Polovica ptica je cijepljena protiv IBDV. Nakon 30 dana obje skupine su bile smještene zajedno sa 5 necijepljenih eksperimentalno inficiranih ptica. Zaraza se brzo širi kontaktom u jat. Uz pomoć enzyme-linked immunosorbent assay (ELISA) je izmjeren visok titar protutijela za IBDV u cijepljenih ptica, dok necijepljene ptice nisu imale protutijela za IBDV 30 dana. Necijepljene ptice su nakon izlaganja zaraženim pticama imale nakon tjedan dana mjerljivu razinu

protutijela na IBDV čime je potvrđena infekcija. Tjedan dana nakon infekcije, ptice, koje nisu bile cijepjene su nakon indukcije proizvodnje IFN-a imale značajno nižu razinu mRNA za IFN alfa i gama od cijepljenih ptica. Utvrđeno je da IBDV utječe u manjoj mjeri na transkripciju gena za IFN alfa i gama od CAV-a. Treba istražiti druge sojeve IBDV-a, kako bi se utvrdilo da li oni imaju izraženiji utjecaj na transkripciju gena za IFN od izolata korištenog u ovim pokusima. Navedenim pokusima je prvi puta dokazano *in vivo* da CAV i IBDV imaju negativan učinak na transkripciju gena za IFN alfa i gama. Infekcije izazivaju transkripciju gena za IFN kao početni dio imunološkog odgovora. Kako ne dolazi uvijek do uspješnog eliminiranja virusa iz organizma, očito je da su virusi razvili strategije zaobilazanja imunološkog sustava. Jedna od tih strategija je i ometanje transkripcije gena za IFN. Treba istražiti da li se to događa usljed ometanja indukcije transkripcije gena za IFN pomoću interleukina ili su uključeni direktniji načini. Pokusi na pilećim embrijima ukazuju na to da virusi mogu direktno ometati transkripciju gena za IFN.

Na kulturi MDCC-MSB1 stanica, za koje smo utvrdili da nakon indukcije iNDV-om proizvode interferon, smo izučavali utjecaj primjene rekombinantnog IFN (rIFN) na replikaciju CAV. Stanice su inokulirane DelRoss sojem virusa i mjrena je količina virusne DNA pri tretmanu različitim dozama IFN alfa. Dio stanica je tretiran IFN-om prije inokulacije i određivan je utjecaj IFN na replikaciju virusa mjerenjem količine virusne DNA. U svim pokusima je rađena

i titracija virusa. Utvrdili smo da IFN u dozi od 1000 i 10000 jedinica negativno utječe na replikaciju virusa, ali za vrijeme u kojem je mjerena količina virusa, virus nije u potpunosti uklonjen. Treba utvrditi da li je tijekom duljeg vremena moguće u potpunosti ukloniti virus iz stanica.

Research programme and results:

Studies on mechanism underlying influence of immunosuppressive viruses on transcription of genes for interferon (IFN) alpha and gamma continued through 2002. The two most important immunosuppressive viruses of poultry, chicken anemia virus (CAV), a single-stranded DNA circovirus, and infectious bursal disease virus (IBDV), double-stranded RNA birnavirus were investigated. Both of these viruses often cause subclinical infections. Financial losses caused by those viruses are consequence of inadequate immune response and infections with opportunistic pathogens. There is currently no generally accepted test for evaluating immune status in chickens. We investigated the feasibility of competitive hybridization test for assessing the abundance of mRNA for IFN alpha and gamma in evaluation of immune system damage caused by immunosuppressive viruses. It is known that many immunosuppressive viruses in other species adversely affect transcription of genes for IFN alpha and gamma. Specific pathogen-free chickens, experimentally inoculated with CAV, were used to study the effect of CAV on transcription of genes for IFN alpha and gamma. Birds were injected with inactivated Newcastle disease virus (iNDV) or trivalent vaccine (iNDV, IBDV, infectious bronchitis) to induce IFN production. Transcription for both IFNs was induced in uninfected chickens to significantly higher level than in infected chickens. To investigate the effect of IBDV on transcription of genes for IFN, SPF broilers were used. Half of the birds were vaccinated against IBDV. After 30 days, both groups were housed together with 5 unvaccinated, infected birds. Infection spreads by contact exposure. Vaccinated birds had high titer of antibodies for IBDV, while nonvaccinated birds had no antibodies against IBDV as estimated using enzyme-linked immunosorbent assay (ELISA). One week after contact exposure to infected birds, nonvaccinated birds had measurable level of antibodies for IBDV that confirmed infection. One week after infection, nonvaccinated birds had, after induction with iNDV, significantly lower level of mRNA for IFN alpha and gamma than vaccinated birds. Transcription for IFN alpha and gamma was not impaired as much by IBDV as was by CAV.

Influence of other strains of IBDV on transcription of gene for IFN alpha and gamma remains to be investigated. This study demonstrated for the first time *in vivo* that both CAV and IBDV can interfere with the transcription of genes for IFN alpha and gamma. It is known that viral infections provoke transcription for IFN as initial immune response. Persistent and latent infections are evidence that viruses have developed strategies for evading immune surveillance. One of these strategies is interference with transcription of IFN mRNA. It remains to be investigated whether it occurs through an indirect path, such as interference with induction of transcription for IFN by interleukins or through more direct way. Studies in chicken embryo cells suggest that direct effects of viral interference with transcription may be involved.

To investigate antiviral effect of recombinant IFN (rIFN) alpha on CAV replication, MDCC-MSB1 cell line was used. We observed that this cell line is capable of producing IFN upon induction with iNDV. Cells were inoculated with DelRoss strain of CAV and the abundance of viral DNA was measured after treatment with different doses of rIFN alpha. Viral load is measured by viral titration and by competitive hybridization test. We demonstrated that rIFN alpha inversely affects viral replication at high doses (1000 and 10000 units), but IFN treatment did not completely clear viral infection. It remains to be investigated whether longer treatment with rIFN would clear CAV infection in MDCC-MSB1 cells.

GENSKO LIJEČENJE TUMORA KOREKCIJOM TUMOR-SUPRESORSKIH GENA TUMOR GENE THERAPY – CORRECTION OF ONCOSUPPRESSOR GENES

Voditeljica projekta: dr. sc. Jasminka Pavelić

Tel: ++385 1 4560 926 e-mail: jpavelic@irb.hr

Suradnici na projektu:

Silva Hećimović, doktorica biotehno. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja (50% radnog vremena)

Maja Herak Bosnar, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja (od 2.12.2002.)

Jelena Knežević, dipl. inž. preh. tehnol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Marijeta Kralj, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Sandra Kraljević, dipl. prof. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 2.12.2002.)

Jasminka Pavelić, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Neda Slade, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Ranko Stojković, magistar biomed. znanosti, asistent, znanstveni novak

Lidija Šuman, doktorica biol. znanosti, viša asistentica (50% radnog vremena)

Tehnička suradnica:

Mihaela Alivojvodić, tehničarka, (50% radnog vremena)

Suradnici iz drugih ustanova:

Jean deGonzburg, doktor med. znanosti, redovni profesor, Curie Institute, Pariz, Francuska, konzultant

Ute Moll, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, Stony Brok, NY, SAD, konzultantica

Michael Rogy, doktor med. znanosti, redovni profesor, University Viena, Beč, Austrija, konzultant

Šime Spaventi, akademik, HAZU, Zagreb, konzultant

Peter Stambrook, doktor med. znanosti, redovni profesor, University of Cincinnati, Cincinnati, OH, SAD, konzultant

Program rada i rezultati na projektu:

Nastavljena su istraživanja vezana uz gensko liječenje tumor supresorskim genima *p53* i *p21* na modelu *in vivo*. Ispitujemo različite kombinacije tretmana tumora koji rastu u miševima s obzirom na način unosa terapijskog gena. Pokazat ćemo gube li stanice tumora miša, nakon unosa pojedinog gena, sposobnost stvaranja tumora u miševima, inhibiraju li rast već formiranih tumora te koja će doza i način primjene biti najučinkovitiji.

U svrhu liječenja genima *nm23-H1* i *nm23-H2* uspostavili smo niz klonova stanica CAL 27 (karcinom pločastog epitela tumora glave i vrata čovjeka) koji konstitutivno ekspimiraju proteine Nm23-H1, Nm23-H2 i mutirani oblik proteina Nm23-H1. Načinili smo niz pokusa u kojima smo promatrali proliferaciju stanica 24, 48 i 72 sata nakon nasađivanja. Stanice koje konstitutivno ekspimiraju *nm23-H1*, 24 sata nakon nasađivanja nisu pokazivale značajniji proliferirajući učinak za razliku od *nm23-H2* klonova u kojima je 75% stanica bilo u S fazi staničnog ciklusa 24 sata nakon nasađivanja. Smatramo da je ovakvo ponašanje klonova posljedica njihove različite sposobnosti vezivanja za podlogu za što bi mogli biti odgovorni konstitutivno ekspimirani geni *nm23*. Nastavljamo istraživanja kojima ćemo ustanoviti ulogu ovih gena u procesu nastanka tumora glave i vrata sa svrhom procjene upotrebe ovih gena u genskom liječenju.

Započeta su i istraživanja primjene gena *p73* u genskom liječenju. Gen *p73* homologan je genu *p53*, ali ne pokazuje aktivnost klasičnih supresorskih gena. Istraživanjima na staničnim linijama tumora čovjeka našli smo da gen *p73* stvara i mutirani oblik proteina kojem manjka NH₂ terminalna domena (deltaNp73). Protein se prepisuje s alternativnog promotora u intronu 3; ne posjeduje transaktivacijsku domenu karakterističnu za divlji oblik proteina *p73*. Našli smo da je mutirani oblik proteina vrlo često prisutan u različitim vrstama tumora čovjeka, ali da ga nema u normalnom tkivu. Nastavljamo istraživanja kojima ćemo razriješiti ulogu mutiranog proteina u održavanju zloćudnog fenotipa.

Research programme and results:

During the year 2002. we proceeded with the experiments in tumor gene therapy by exploring the therapeutic suppressor genes, *p53* and *p21*. We have been started with the *in vivo* experiments, by using mouse bladder tumor cell line Renca. The main question is whether the ectopic expression of therapeutic genes could stop or diminish *in vivo* tumor growth. For that purpose different combinations of transgene application are under the investigation.

To evaluate the use of *nm23-H1*, *nm23-H2* and mutated *nm-23-H1* genes in tumor gene therapy a series of the clones of parental human tumor cell line CAL 27 (squamous cell carcinoma of the head and neck) were established. The clones were transfected with all three genes and the proliferation was followed 24, 48 and 72 hours after seeding. In brief, CAL 27 clones constitutively expressing GFP-Nm23-H2 protein exhibited intense proliferation the first two days after seeding, while the GFP-Nm23-H1 expressing clones behaved completely opposite, having one-day incubation before starting to proliferate. We consider this difference being a consequence of different attachment properties of the two clones. The main goal of the future work with *nm23* genes is to enlighten their role in the process of head and neck tumor development, and to evaluate whether these genes could be used in cancer gene therapy.

We also started with the experiments on evaluating the antitumor activity of *p73* gene. *p73* has a significant homology to *p53* gene; however, it does not show the activity of the classical suppressor genes. In the experiments conducted on different human tumor cell lines we found that human *p73* gene generates NH₂-terminally truncated isoform (deltaNp73). The protein derives from an alternative promoter in intron 3 and lacks transactivation domain of the wild type *p73*. We found that mutated form is frequently overexpressed in a variety of human cancers, but not in normal tissue. We proceed with the research on the role of deltaNp73 in initiating or keeping transformed phenotype, in order to find out the possible way of interfering with malignant transformation by the use of gene therapy.

UTJECAJ TRANSDUKCIJE GENA/PROTEINA NA SIGNALNE PUTOVE TRANSFORMIRANIH STANICA GENE OR PROTEIN TRANSDUCTION AND SIGNALLING PATHWAYS IN TRANSFORMED CELLS

Voditelj projekta: dr. sc. Krešimir Pavelić

Tel: ++385 1 4680 094 e-mail: pavelic@irb.hr

Suradnici na projektu:

Mira Grdiša, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Silva Hećimović, doktorica biotehnol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja (50% radnog vremena)

Krešimir Pavelić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik

Matea Radačić-Aumiler, dr. med., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Lidija Šuman, doktorica biol. znanosti, viša asistentica (50% radnog vremena)

Suradnici iz drugih ustanova:

Florence Cymbalista, doktorica med. znanosti, Hospital Hotel Dieu, Paris, Francuska, konzultantica

Toni Kolak, doktor med. znanosti, znanstveni asistent (50% radnog vremena), Klinička bolnica Dubrava, Zagreb

Saša Radić, doktor kem. znanosti, viši asistent, Institut za pomorsku medicinu, Split

Hans J. Seitz, doktor med. znanosti, redovni profesor, University of Hamburg, Eppendorf Clinics, Hamburg, Njemačka, konzultant

Peter J. Stambrook, doktor med. znanosti, redovni profesor, University of Cincinnati, College of Medicine, Cincinnati, OH, SAD, konzultant

Stanimir Vuk-Pavlović, doktor biol. znanosti, redovni profesor, Mayo Clinic and Foundation, Rochester, MN, SAD, konzultant
Martyn K. White, doktor kem. znanosti, Jefferson Medical College, Philadelphia, SAD, konzultant

Program rada i rezultati na projektu:

Glavni cilj istraživanja je razjašnjenje prijenosa signala u stanici te mogućnost korekcije određenog signalnog puta uvođenjem gena/proteina. Mnoge bolesti su posljedica poremećaja prijenosa signala kod proliferacije, diferencijacije i apoptoze. Primjena transdukcije proteina pruža mogućnost razjašnjenja njihove fiziološke uloge u stanici te mogućnost zamjene defektnog/fiziološki neaktivnog proteina.

Research programme and results:

The aim this project is to elucidate signal transduction pathways after protein/gene introduction and to correct inappropriate signaling in transformed cells. Many diseases were caused by error in signal transduction pathways for proliferation or apoptosis or differentiation.

**GENI FAMILIJE IGF U RAZVOJU I NASTANKU RAKA PLUĆA
INSULIN LIKE GROWTH FACTOR FAMILY OF GENES IN LUNG CANCER**

Voditelj projekta: dr. sc. Ljubomir Pavelić
Tel: ++ 385 1 2348 315

Suradnici na projektu:

Koraljka Gall-Trošelj, doktorica med. znanosti, znanstvena suradnica, konzultantica
Sanja Kapitanović, doktorica med. znanosti, viša znanstvena suradnica, konzultantica
Krešimir Pavelić, doktorica med. znanosti n. savjetnik, konzultant, konzultant

Suradnici iz drugih ustanova:

Jerolim Karadža, doktor med. znanosti, viši asistent, Medicinski fakultet, Zagreb, konzultant
Šimun Križanac, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, Medicinski fakultet, Zagreb, konzultant
Ljubomir Pavelić, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, Klinika za plućne bolesti Jordanovac, Zagreb
Fadila Pavičić, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, Klinika za plućne bolesti Jordanovac, Zagreb, konzultantica
Miroslav Samaržija, doktor med. znanosti, viši asistent, Klinika za plućne bolesti Jordanovac, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj projekta je rasvijetliti ulogu obitelji gena inzulinu sličnih čimbenika rasta (IGF) u razvoju i progresiji raka pluća, te razviti djelotvorne načine liječenja temeljene na supresiji IGF 2/IGF 1R protutjelima ili antisense oligonukleotidima.

Research programme and results:

To elucidate the role of insulin-like growth factor (IGFs) family of genes in the development and progression of lung cancer, and to create new therapeutic strategy based on IGF 2/IGF 1R down-regulation by antibody or antisense approach.

**NEUROTRANSMITORI U STRESU I REGULACIJA GABA RECEPTORA IN VITRO
NEUROTRANSMITTERS IN STRESS AND REGULATION OF GABA_A RECEPTORS IN VITRO**

Voditeljica projekta: dr. sc. Danka Peričić

Tel: ++385 1 4561 126 e-mail: pericic@irb.hr

Suradnice na projektu:

Milica Bjegović, doktorica med. znanosti, znanstvena suradnica
Maja Jazvinščak Jembrek, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Danka Peričić, doktorica med. znanosti, znanstvena savjetnica
Ivana Rajčan, dr. med., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Dubravka Švob, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Suradnik iz druge ustanove:

Branimir Živković, doktor med. znanosti, redovni profesor, Zavod za farmakologiju,
Medicinski fakultet, Zagreb

Tehnička suradnica:

Zlatica Tonšetić, samostalna tehničarka

Program rada i rezultati na projektu:

Istraživanja na projektu usmjerena su razjašnjenju molekularnih mehanizama koji dovode do razvoja tolerancije i fizičke ovisnosti o neuropsihoaktivnim lijekovima, kao što su benzodiazepini i barbiturati, lijekovi koji se svakodnevno koriste za suzbijanje stanja tjeskobe i nesanice, a koji svoje djelovanje ostvaruju preko GABA-A receptora.

Nadalje, naša su istraživanja usmjerena rasvjetljavanju patofiziologije stresa, posebice djelovanja stresa na procese neurotransmisije, uključujući i njegovo djelovanje na aktivnost konvulziva i drugih neuropsihofarmaka.

Prvi dio istraživanja izvodi se na rekombinantnim GABA-A receptorima stabilno eksprimiranim u embrionalnim stanicama bubrega čovjeka (HEK 293). Stanična kultura sa spomenutim rekombinantnim receptorima izlaže se prolongirano djelovanju benzodiazepina, ali i djelovanju same GABA-e, te antagonista veznih mjesta za GABA-u i benzodiazepine. Učinak benzodiazepina i GABA-e procjenjuje se metodom vezanja ("binding") tricijem obilježenih liganada za stanične membrane, pri čemu se određuju maksimalni broj (B_{max}) i afinitet (K_d) veznih mjesta prisutnih na GABA-A receptoru, kao i stupanj funkcionalne povezanosti veznih mjesta unutar GABA-A receptorskog kompleksa. Nađeno je da kronična prisutnost GABA-e u kulturi stanica povećava broj veznih mjesta za benzodiazepine i konvulzive, što upućuje na porast broja GABA-A receptora. Jednak učinak postiže se i primjenom muscimola, agonista veznog mjesta za GABA-u, ali ne i primjenom diazepama, lijeka koji svoje djelovanje postiže potenciranjem GABAergičnog živčanog prijenosa. Prolongirana prisutnost GABA-e u kulturi stanica ne dovodi do kompletnog prekidanja funkcionalnih veza između veznog mjesta za GABA-u i onog za benzodiazepine, što je često slučaj sa receptorima koji se nalaze u svom prirodnom okruženju u mozgu.

Istražujući učinke stresa na procese neurotransmisije, našli smo da stres izazvan u miševa plivanjem na temperaturi 18-19 °C snažno inhibira ponašanje posredovano 5-HT_{2A} receptorima, podsjećajući na učinke antipsihotika.

Research programme and results:

Our research is focused on the investigation of the molecular mechanisms leading to development of tolerance and physical dependence on neuropsychotropic drugs, such as benzodiazepines and barbiturates, drugs being in everyday use for the treatment of anxiety and insomnia and known to produce their effects via GABA-A receptors. Further, our studies are also directed to the elucidation of the pathophysiology of stress, particularly the effects of stress on the processes of neurotransmission including the effect of stress on the activity of convulsants and other neuropsychotropic drugs.

In the first part of our investigation we are using recombinant GABA-A receptors stably expressed in human embryonic kidney (HEK) 293 cells. Cell culture containing recombinant receptors is being exposed for a prolonged period of time to benzodiazepines, GABA or agonists and antagonists of GABA and benzodiazepine binding sites. The effects of

benzodiazepines and GABA are being evaluated by using technique of binding of 3H-labeled ligands to cell membranes. We estimate the affinity and maximal density of binding sites for benzodiazepines and convulsants, as well as the presence or absence of allosteric coupling between the binding sites within the GABA-A receptor complex. We found that chronic presence of GABA in culture of stably transfected HEK-293 cells increases the number of binding sites for benzodiazepines and convulsants, suggesting that the number of GABA-A receptors is enhanced. An analogue effect was obtained with muscimol, an agonist of GABA binding site, but not with diazepam, a drug which act by potentiating GABAergic transmission. Long-term exposure of recombinant receptors to GABA, produced only partial uncoupling between GABA and benzodiazepine binding sites. This phenomenon is known to be very pronounced when receptors are located in their natural neuronal environment. By studying the effects of stress on the processes of neurotransmission, we found that swim stress (18-19 °C) in mice provokes a profound inhibition of 5-HT_{2A} mediated head twitch behavior, reminding to the effects of antipsychotic agents.

MODULIRANJE IMUNOLOŠKOG ODGOVORA BIOAKTIVNIM PEPTIDIMA MODULATION OF IMMUNOLOGICAL RESPONSE BY BIOACTIVE PEPTIDES

Voditeljica projekta: dr. sc. Biserka Pokrić

Tel: ++385 1 4680 193 e-mail: pokric@irb.hr

Suradnici na projektu:

Biserka Pokrić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Nikola Štambuk, doktor med. znanosti, znanstveni suradnik

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj rada na predloženom projektu je uklapanje u svjetske tokove istraživanja vezana uz biološku aktivnost peptida uz razvoj vlastitih znanstvenih metoda računarskog modeliranja, odabira i eksperimentalnog testiranja bioaktivnih peptida. Preliminarno utvrđivanje bioaktivnih svojstava peptida osnova je za racionalno oblikovanje vakcina za preventivnu i terapijsku imunomodulaciju. Uz poznavanje epizootičke situacije na terenu te identifikaciju terenskih sojeva animalnih virusa moguće je ciljano odabrati i prirediti vakcine koje će biti najučinkovitije u postojećim okolnostima na terenu.

U okviru projekta nastavljen je rad na razvoju novog računarskog algoritama koji omogućuje brzu, jednostavnu i točnu predikciju alfa- i beta-proteinskih struktura korištenjem osobnog računala. Model se temelji na binarnom kodiranju fizikalno-kemijskih svojstava nukleotida i amino kiselina. Na temelju predviđene sekundarne proteinske strukture može se procijeniti bioaktivnost peptida i proteina jer njihova bioaktivnost uvelike ovisi o njihovoj strukturi.

Nadalje, za predviđanje sekundarne strukture korištena je i metoda rezonantnog prepoznavanja bioaktivnosti proteina. Metoda se temelji na fizikalnom i matematičkom modelu elektronsko-ionskog interakcijskog pseudopotencijala (EIIP) i koristi analizu signala za interpretaciju linearne informacije sadržane u sekvenci makromolekule. Ova dvo-stepena metoda sastoji se od pretvorbe proteinske sekvence u brojčani niz koristeći zasebne EIIP vrijednosti svake pojedine aminokiseline i Fourierove spektralne analize dobivenih brojčanih nizova. Točnost predviđanja sekundarne proteinske strukture opisanim metodama veća je od 90%.

Za utvrđivanje terapijske učinkovitosti peptida, eksperimentalno je testiran pentadekapeptid BPC 157. Njegova djelotvornost u saniranju opekotina pri lokalnoj i sistemske primjeni potvrđena je na mišjem modelu.

Uvedena je metoda diferencijacije sojeva virusa restrikcijom analizom virusnih gena. Metoda je testirana na vakcinalnim sojevima virusa zarazne bolesti burze te korištena za identifikaciju terenskih izolata.

Primjena metoda strojnog učenja u prognostičke i dijagnostičke svrhe ispitana je na kliničkim modelima. Nađeno je također da one mogu poslužiti za procjenu učinkovitosti novih lijekova i

terapijskih postupaka kao i utjecaja biološki aktivnih tvari na fiziološke funkcije.

Research programme and results:

The main goal of the proposed study is the participation in the recent investigations concerning biological activity of peptides together with the development of our own methods for the computer modelling, selection and experimental testing of the bioactive peptides. The preliminary determination of the bioactive properties of peptides enables a rational design of the vaccines for the preventive and therapeutic immunomodulation. The epizootiological monitoring and identification of the field strains of animal viruses will be carried out in order to select and prepare the vaccines that will generate the most efficient protection under given field conditions.

In order to predict the secondary structure responsible for the peptide and protein bioactivity, the development of a new computational algorithm for the prediction of the alpha- and beta-protein folding types from the nucleotide and amino acid sequences continues. The method is based on the binary coding of the physicochemical nucleotide and amino acid properties. The algorithm enables quick, simple and accurate prediction of the alpha- and beta-protein folds on a personal computer using a few binary patterns of a coded physicochemical properties. The Resonant Recognition Model (RRM) of the protein bioactivity is also applied to the protein secondary structure prediction. The method is based on the physical and mathematical model of the electron-ion interaction pseudopotential (EIIP) and uses a signal analysis for the interpretation of a linear information contained in a macromolecular sequence. The method for the analysis is based on a two-step procedure. First of all, a protein sequence is transformed into a numerical series by a means of the individual EIIP amino acid values. The second step of the model involves the Fourier spectral analysis of the obtained numerical series. The accuracy of the prediction of the protein secondary structures using both methods amounted to more than 90%.

The pentadecapeptide BPC 157 was experimentally tested in order to prove a therapeutical efficiency of the peptides. The beneficial effect was obtained when the BPC was administered topically or systemically in burned mice.

The method of the differentiation of the virus strains using a restriction enzyme analysis of the virus genes, was introduced. The method was tested on known vaccinal strains of the infectious bursal disease virus and then applied to the differentiation of the field isolates. The applicability of the methods of a machine learning in the disease prognosis and diagnosis was tested on the clinical models. It was found that they also enable the evaluation of the efficacy of a new drugs and therapeutic procedures as well as the determination of the ratio between biologically active substances and physiological functions.

CIKLOOKSIGENAZA-2: NOVA META U KEMOTERAPIJI I LIJEČENJU TUMORA DEBELOG CRIJEVA**CYCLOOXYGENASE-2: NEW TARGET FOR CHEMOPREVENTION AND TREATMENT OF COLON TUMORS**

Voditelj projekta: dr. sc. Radan Spaventi

Tel: ++385 1 3781 078 e-mail: radan.spaventi@pliva.hr

Suradnici na projektu:

Sanja Kapitanović, doktorica med. znanosti, viša znanstvena suradnica, konzultantica

Krešimir Pavelić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik, konzultant

Jasminka Pavelić, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica, konzultantica

Suradnici iz drugih ustanova:

Karmen Brajša, magistrica biol. znanosti, PLIVA d.d., Zagreb

Željko Ferenčić, dr. med., PLIVA d.d., Zagreb

Senka Radošević, magistrica inform. znanosti, PLIVA d.d., Zagreb

Donatella Verbanac, doktorica kem. znanosti, docentica, PLIVA d.d., Zagreb

Radan Spaventi, doktor med. znanosti, znanstveni suradnik, PLIVA d.d., Zagreb
Boris Vucelić, doktor med. znanosti, redovni profesor, Zavod za gastroenterologiju, KBC
Rebro, Zagreb, konzultant

Progran rada i rezultati na projektu:

Karcinom debelog crijeva jedan je od najčešćih zloćudnih tumora i drugi po redu uzročnik smrti od raka u razvijenim zemljama. Usprkos razvoju medicine u području dijagnostike i terapije, preživljenje oboljelih od ovog karcinoma nije se značajno promijenilo u posljednjih dvadeset godina. Napredak u području molekularne medicine doveo je do novih spoznaja o mehanizmima nastanka raka te omogućio nove pristupe u istraživanju potencijalnih lijekova za prevenciju i liječenje zloćudnih tumora. Najnovija istraživanja pokazuju da bi nesteroidni protuupalni lijekovi (NSAIDs od engl. nonsteroidal anti-inflammatory drugs) mogli smanjiti rizik oboljevanja od raka kolona. Klasični NSAIDs inhibiraju ekspresiju enzima COX-1 i COX-2. Njihovo protuupalno djelovanje temelji se na inhibiciji COX-2, dok su toksične nuspojave rezultat inhibicije COX-1. COX-1 je konstitutivno eksprimiran u sluznici probavnog sustava i djeluje protektivno. COX-2 je u sluznici probavnog sustava prisutan u vrlo niskim količinama, a njegova pojačana ekspresija dokazana je u 85% karcinoma te u 50% adenoma kolona čovjeka. Klinički pokazatelji ukazuju na to da nova skupina NSAIDs koja specifično inhibira COX-2 zadržava sve pozitivne efekte klasičnih NSAIDs uz manje nuspojave. U nastanku karcinoma kolona važnu ulogu ima i erbB/HER signalni put. Kombinirana terapija koja bi djelovala na oba signalna puta istovremeno mogla bi značajno poboljšati djelotvornost prevencije i/ili liječenja karcinoma kolona u čovjeka. Cilj ovog istraživanja je ispitati ekspresiju enzima COX-1 i COX-2 u tumorima debelog crijeva i uspostaviti eksperimentalni model za ispitivanje učinka neselektivnih i selektivnih inhibitora COX-2. Učinak supstanci ispituje se na normalnim te staničnim linijama karcinoma kolona čovjeka. Ekspresija različitih onkogeni i tumor supresorskih gena prije i nakon djelovanja supstance prati se metodama molekularne biologije. Osim korištenja klasičnih metoda uvela se metoda "real-time quantitative RT-PCR" u svrhu preciznijeg praćenja ekspresije specifične mRNA. Rezultati ovog istraživanja bit će korisni u boljem razumijevanju mehanizama antitumorskog učinka inhibicijom enzima COX-2. Novouspostavljene metode i protokoli bit će korisni za buduća ispitivanja novih potencijalnih COX-2 inhibitora te kombinirane kemoprevencije.

Research programme and results:

Colorectal adenocarcinoma is one of the most common cancers and the second leading cause of cancer death in the Western world. Despite advances in medical practice and research on various chemotherapeutic protocols, survival rates in patients with colorectal cancer have not changed much in the past 20 years. Chemoprevention is another approach to decrease the incidence of colorectal cancer in the general population. Recent findings suggest that nonsteroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) may reduce the risk of human colon and other gastrointestinal cancers. All the classic NSAIDs inhibit both COX-1 and COX-2. The anti-inflammatory and analgesic effects are based on the inhibition of COX-2, but the gastrointestinal toxicity is the result of the inhibition of COX-1. COX-2 is undetectable or present only at low concentrations in the GI tract. However, approximately 50% of colorectal adenomas, and 80% of carcinomas in humans express high levels of COX-2 mRNA and protein. Clinical evidence indicates that a new class of NSAIDs that specifically inhibit the COX-2 isoform offer the therapeutic benefits of traditional NSAIDs with less of associated toxicity. Therefore, COX-2 is attractive target for the design of therapeutic and chemopreventive strategies in colorectal cancer patients. The second signaling cascade that is known to play important role in colorectal tumorigenesis is erbB/HER pathway. An exciting area for future investigation will be to test whether combination therapy with COX-2 inhibitors and drugs that target other oncogenic pathways (erbB/HER) will enhance efficacy for treatment and/or prevention of colorectal cancer. The goal of this study is to examine the expression of COX-1 and COX-2 enzymes in colon tumors and to establish experimental models to investigate the role of non-selective and selective COX-2 inhibitors in prevention and/or treatment of colorectal cancer. The expression of different genes, oncogenes and

tumor suppressor genes in cell lines of normal human tissue and human colon carcinomas are examined using standard and new molecular biology methods, real-time quantitative RT-PCR. The results will help us to understand the antitumor mechanisms of COX-2 inhibition, and the newly established protocols can be used in the research of new potential COX-2 inhibitors.

NOVE MOGUĆNOSTI LIJEČENJA TUMORA DOJKE NEW THERAPEUTIC POSSIBILITIES IN BREAST CANCER

Voditelj projekta: dr. sc. Josip Unušić
Tel: ++ 385 1 2421 845

Suradnici na projektu:

Jasminka Pavelić, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica, konzultantica
Krešimir Pavelić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik, konzultant
Neda Slade, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, konzultantica

Suradnici iz druge ustanove:

Krešimir Bulić, magistar med. znanosti, znanstveni asistent, KBC Rebro, Zagreb,
Ivo Džepina, doktor med. znanosti, viši asistent, KBC Rebro, Zagreb
Davor Hulina, dr. med., mlađi asistent, KBC Rebro, Zagreb
Radojko Ivrlač, magistar med. znanosti, asistent, KBC Rebro, Zagreb,
Šimun Križanac, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, Medicinski fakultet, Zagreb,
konzultant
Josip Unušić, doktor med. znanosti, izvanredni profesor, KBC Rebro, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj projekta je definirati molekularni profil tumora dojke kako bi se pronašle specifične molekule koje bi mogle služiti kao meta tzv. «inteligentnog» liječenja. Posebna pažnja posvetit će se genskom liječenju temeljenom na primjeni gena *p53*, *p21*, *nm23-H1* i *HSV-tk*.

Research programme and results:

To define molecular status of the breast cancer regarding specific molecular target for therapy with specific «intelligent» therapeutics. By the use of newly established primary cell cultures and breast cancer cell lines we will investigate the therapeutic effects of molecularly targeted approach directed to *p53*, *p21*, *nm23-H1* and *HSV-tk*.

ISTRAŽIVANJE ULOGE PONAVLJAJUĆEG SLIJEDA (HEAT REPEAT) U PROTEINU HUNTINGTINU

ASSESSING FUNCTIONS OF THE HEAT REPEAT IN HUNTINGTIN PROTEIN

Voditelj projekta: dr. sc. Oliver Vugrek
Tel: ++385 1 4560 946 e-mail: ovugrek@irb.hr

Suradnici na projektu:

Igor Jurak, dipl. inž. biol., znanstveni novak, mlađi asistent (do 23.7.2002.)
Oliver Vugrek, doktor biol. znanosti, viši asistent

Program rada i rezultati na projektu:

Dokazano je da proteini koji su vezani uz mikrotubule (MAPs) iz TOGp-XMAP215 skupine imaju važnu ulogu pri organizaciji mikrotubula. U takvim MAP-proteinima nalazi se slijed amino kiselina, tzv. HEAT repeat, koji postoje i u drugim proteinima kao npr. Huntingtin. Mutacija u Heat ponavljajućoj regiji izaziva dezorganizaciju cijelog mikrotubularnog sustava. Nova spoznaja pokazuje postojeću interakciju Huntingtin proteina sa mikrotubularnim sustavom. Nastavak istraživačkog rada ima primarni cilj bolje razumjevanje uloge Huntingtin

proteina i važnosti domene Heat repeata u neuralnim stanicama te razjašnjavanje uloge Huntingtin proteina u mehanizmima dinamičnih procesa vezanih uz citoskelet. Eksperimentalni rad je u početnoj fazi, tj. uspostavljena je stanična kultura (insektne stanice Sf9) potrebno za korištenje Baculovirus tehnologije, te pripreme za stvaranje Knock-Out mutanti na staničnom nivou te modelnim organizmima i praćenje fenotipskih promjena uzrokovanih delecijom heat repeata.

Research programme and results:

The general goal of our project is to continue research on proteins, which are containing heat repeats, e.g. Huntingtin protein. We are proposing investigations of possible interactions of Huntingtin with the cellular microtubules system in general and in particular with the cytoskeleton of neurons.

The purpose of suggested project should lead to a better understanding of Huntingtin protein itself and should shed light on the functions of the heat repeat domain regarding involvement in dynamic processes such as cytoskeleton organisation and cell development. New discoveries regarding the neurodegenerative Huntington's disease, which is related to prion diseases or Alzheimer's disease, should contribute to the understanding of degenerative processes in neurons.

OKSIDATIVNI STRES I ZLOČUDNE BOLESTI OXIDATIVE STRESS AND MALIGNANT DISEASES

Voditelj projekta: dr. sc. Neven Žarković

Tel: ++385 1 4560 937 e-mail: zarkovic@irb.hr

Suradnici na projektu:

Marija Poljak-Blaži, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica

Suzana Borović, doktorica biol. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Ana Čipak, dipl. inž. biol., znanstvena novakinja

Neven Žarković, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehničke suradnice:

Tea Kališnik, inž. biokemije, viša tehničarka

Nevenka Hiršl, samostalna tehničarka

Suradnici iz drugih ustanova:

Fiorella Biasi, doktorica med. znanosti, Institute of Biological and Medical Sciences, University of Torino, Italija, konzultantica

Mircea Cazacu, doktor med. znanosti, University Surgical Clinics, Cluj, Rumunjska, konzultant

Toni Hanich, dr. med., Opća bolnica, Našice

Suzana Kukulj, doktorica med. znanosti, Klinička bolnica Jordanovac, Zagreb

Giusseppe Poli, doktor med. znanosti, redovni profesor, Institute of Biological and Medical Sciences, University of Torino, Italija, konzultant

Rudolf Jorg Schaur, doktor biokem. znanosti, redovni profesor, Institute of Biochemistry, Microbiology and Molecular Biology, Karl-Franzens University of Graz, Austrija

Ivo Soldo, magistar biol. znanosti, Opća bolnica Sv. Duh, Zagreb

Igor Stipančić, doktor med. znanosti, Klinička bolnica Dubrava, Zagreb

Svorad Štolc, doktor kem. znanosti, redovni profesor, Institute of Experimental

Neuropharmacology, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovačka, konzultant

Franz Tatzber, doktor biol. znanosti, Tatzber KEG, reagents and recycling, Beč, Austrija, konzultant

Manfred Tillian, doktor vet. znanosti, izvanredni profesor, Institute of Biochemistry,

Microbiology and Molecular Biology, Karl-Franzens University of Graz, Austrija, konzultant

Kamelija Žarković, doktorica med. znanosti, izvanredna profesorica, Zavod za neuropatologiju, Medicinski fakultet, KBC "Zagreb", Zagreb, konzultantica
Renate Wildburger, doktorica med. znanosti, redovna profesorica, University Clinic of Traumatology, LKH, Graz, Austrija, konzultantica

Program rada i rezultati na projektu:

Osnovno područje rada se temelji na izučavanju pojavnosti oksidativnog stresa u in vitro i in vivo uvjetima srodnim patofiziološkim stanjima vezanim uz ljudske bolesti. Tako su proučavani učinci 4-hidroksinonenala (HNE), završnog produkta lipidne peroksidacije, na proliferaciju i diferencijaciju stanica te ekspresiju gena. Stanice mezenhimalnog porijekla međusobno su se razlikovale u svojoj osjetljivosti na HNE tako da su maligne osteosarkomske stanice bile osjetljivije na njegov učinak nego normalni osteoblasti. Slično tome, HNE je utjecao na proliferaciju malignih CEM-NKR leukemijskih stanica i normalnih ljudskih limfocita (HPBM) pri čemu je primjećena jasna razlika u odgovoru na HNE koja je ovisna o dozi. HNE je imao značajne citotoksične učinke na sintezu DNA i mitohondrijsku aktivnost CEM-NKR stanica, dok su učinci na HPBM stanice bili zanemarivi. Višekratno izlaganje HNEu kočilo je diferencijaciju osteosarkomskih stanica, dok su diferencirane osteosarkomske stanice bile osjetljivije na njegov učinak od nediferenciranih. HNE je također različito utjecao na sintezu proteina u stanicama, mjenjajući ovisno o dozi HNEa i vrsti mezenhimalnih stanica sintezu c-Fos, c-Myc proteina i IGF-1. Interakcija HNEa i faktora rasta in vivo najviše je proučavana u slučaju TGF-beta i njegovih receptora. Poznato je da je poremećena regulacija receptora za TGF-beta značajka mnogih malignih tumora. Analizom uzoraka ljudskih karcinoma kolona zaključili smo da je izbjegavanje tumorskih stanica TGF-beta posredovanoj inhibiciji rasta povezano sa smanjenjem receptora za TGF-beta, konstantno niskom koncentracijom citokina u tumorskoj masi te niskoj koncentraciji reaktivnih aldehida, produkata lipidne peroksidacije. Ove koncentracije su bile niže nego u zdravom tkivu i vjerojatno predstavljaju manji stimulans za sintezu TGF-beta u neoplastičkom području i povoljne uvjete za rast tumora. Dobiveni rezultati ukazuju na kompleksnu ulogu HNEa u procesima proliferacije i diferencijacije stanica i tumorigenezu. Daljnja istraživanja svakako su neophodna kako bi se pojasnila uloga HNEa u ovim procesima. Budući da je željezo esencijalni element koji je i jedan od glavnih medijatora oksidativnog stresa i potencijalni karcinogen, istražujemo potencijalne mogućnosti korištenje željeza u kontroli tumorskog rasta.

Research programme and results:

Major research topic is evaluation of oxidative stress under experimental conditions in vitro and in vivo that resemble clinical disorders based on oxidative stress. Primarily, effects of 4-hydroxynonenal (HNE), the end-product of lipid peroxidation, were studied on proliferation and differentiation of normal and malignant cells and their gene expression. HNE differently influenced proliferation of malignant CEM-NKR leukemic cells and normal human lymphocytes (HPBM). There was clear difference in dose-dependent response to HNE which had significant cytotoxic effects on DNA-synthesis and mitochondrial activity of CEM-NKR cells, where effects on HPBM were very weak. Cells of mesenchymal origin differed in sensitivity to HNE. Hence, malignant osteosarcoma cells were more sensitive to HNE than normal osteoblasts. Repeated exposure to HNE prevented differentiation of osteosarcoma cells, while differentiated osteosarcoma cells were more sensitive to HNE than undifferentiated cells. HNE also influenced synthesis of different regulatory proteins in cells, depending on the HNE concentration and origin of mesenchymal cells, changing synthesis of c-Fos, c-Myc and IGF-1 protein. Interaction of HNE and growth factors was particularly studied in the case of TGF- β 1 and its receptors. It is known that disturbed regulation of TGF-beta receptors is a feature of many tumors. Analysing samples of human colon carcinoma we concluded that escape of tumor cells escape TGF- β 1-induced growth inhibition was related with decreased presence of TGF-beta receptors, low concentration of cytokines in tumor mass and low concentration of

reactive aldehydes (also HNE). These concentrations were lower than in healthy tissue and probably present lower stimulus for TGF-beta synthesis in neoplastic tissue thus favoring tumor growth.

Results obtained indicated on complex role of HNE in processes of cell proliferation and differentiation and tumorigenesis, while additional studies are needed to further clarify role of HNE in cell growth control. Because iron is not only essential element but also one of major mediators of oxidative stress, we investigate control of tumor cell growth through perturbation of cellular iron metabolism. This might lead to as a potentially novel strategies in cancer therapy.

**Projekt HITRA:
PROIZVODNJA KOŽNIH PRESADAKA IN VITRO
ORGANOTYPIC SKIN CULTURE IN VITRO**

(od. 1.1.2002. do 31.12.2002.)

Voditelj projekta: dr. sc. Milivoj Boranić

Tel: ++385 1 4561 011 e-mail: boranic@irb.hr

Suradnici na temi:

Milivoj Boranić, doktor med. znanosti, znanstveni savjetnik, redovni profesor, Medicinski fakultet Sveučilišta u Osijeku

Marija Zekušić, dipl. prof. biol. (od 28.1.2002.)

Program rada i rezultati na temi:

Ispitali su se i definirali optimalni uvjeti za uzgoj keratinocita iz uzoraka ljudske kože u selektivnom mediju i na potpornom sloju fibroblasta. Kulture keratinocita uzgojene su u količinama koje omogućuju pripremljanje arteficialnih transplantata za kliničku primjenu.

Research programme and results:

Optimal conditions for the cultivation of human skin epithelial cells in selective medium and at a fibroblast feeder layer have been studied and defined. Keratinocyte cultures have been produced in quantities permitting production of artificial skin transplants for potential clinical use.

PRILOZI:

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Bakija-Konsuo, Ana; Basta-Juzbašić, Aleksandra; Rudan, Igor; Šitum, Mirna; Nardelli-Kovačić, Magdalena; Levanat, Sonja; Fischer, Judith; Hohl, Daniel; Lončarić, Davorin; Seiwerth, Sven; Campbell, Harry. Mal de Meleda: genetic haplotype analysis and clinopathological findings in cases originating from the Island of Mljet (Meleda), Croatia. // *Dermatology*. 205 (2002); 32-39.
2. Barišić, Igor; Wilhelm, Vladimir; Štambuk, Nikola; Karaman, Ksenija; Janković, Stipan; Konjevoda, Paško; Pokrić, Biserka. Machine learning based analysis of biochemical and morphologic parameters in patients with dialysis related amyloidosis. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 4; 935-944.
3. Barišić, Nina; Martin-Kleiner, Irena; Malčić, Ivan; Papa, Jurica; Boranić, Milivoj. Spinal dysraphism associated with congenital heart disorder in a girl with MELAS syndrome and point mutation at nucleotide 3271 of the mitochondrial DNA. // *Croatian medical journal*. 43 (2002), 1; 37-41.

4. Biasi, Fiorella; Tessitore, Luciana; Zanetti, Daniella; Cutrin, J. C.; Zingaro, B.; Chiarpotto, Ellena; Žarković, Neven; Serviddio, G.; Poli, Giuseppe. Associated changes of lipid peroxidation and transforming growth factor b1 levels in human colon cancer during tumour progression. // *Gut*. 50 (2002); 361-367.
5. Dogan Koruznjak, Jasna; Slade, Neda; Zamola, Branimir; Pavelić, Krešimir; Karminski-Zamola, Grace. Synthesis, photochemical synthesis and antitumor evaluation of novel derivatives of thieno(3',2':4,5)thieno(2,3-c)quinolones. // *Chemical and pharmaceutical bulletin*. 50 (2002), 5; 656-660.
6. Grdiša, Mira; White, Martyn K. Molecular and biochemical events during differentiation of HD3 chicken erythroblastic cell line. // *International journal of biochemistry and cell biology*. 1421 (2002); 1-10.
7. Hećimović, Silva; Bago, Ružica; Mužinić, Dubravka; Begović, Davor; Pavelić, Krešimir. The first case of the FRAXE form of inherited mental retardation in Croatia. // *European journal of pediatrics*. 161 (2002), 2; 112-113.
8. Hećimović, Silva; Klepac, Nataša; Vlašić, Jelena; Vojta, Aleksandar; Janko, Dolores; Škarpa-Prpić, Ingrid; Canki-Klain, Nina; Marković, Dubravko; Božikov, Jadranka; Relja, Maja; Pavelić, Krešimir. Genetic background of Huntington disease in Croatia: molecular analysis of CAG, CCG, and delta 642 (E2642del) polymorphisms. // *Human mutation*. 1 (2002), 1; 10-15.
9. Hećimović, Silva; Petek Tarnik, Iva; Barić, Ivo; Čakarun, Željko; Pavelić, Krešimir. Screening for fragile X syndrome: results from a school for mentally retarded children. // *Acta paediatrica*. 91 (2002), 5; 535-539.
10. Martin-Kleiner, Irena; Gabrilovac, Jelka. The kappa-opioid agonist U-69593 affect intracellular calcium level in R1.1 mouse thymoma cell line. // *International Immunopharmacology*. 2 (2002); 975-980.
11. Martin-Kleiner, Irena. The effect of opioid agonists of delta-class DSLET, mu-class DAMGO, kappa-class U-69593 and an opioid antagonist, naloxone, on MTT activity of NALM-1 leukemic cells. // *Biomedicine & pharmacotherapy*. 56 (2002); 458-462.
12. Mikuš, Darko; Sikirić, Predrag; Seiwert, Sven; Petričević, Ante; Aralica, Gorana; Družijančić, Nikolas; Ručman, Rudolf; Petek, Marijan; Pigac, Biserka; Perović, Darko; Kolombo, Mladen; Kokić, Neven; Mikuš, Sanja; Duplančić, Branimir; Fattorini, Iva; Turković, Branko; Rotkvić, Ivo; Miše, Stjepan; Prkačin, Ingrid; Konjevoda, Paško; Štambuk, Nikola. Pentadecapeptide BPC 157 cream improves burn-wound healing and attenuates burn-gastric lesions in mice. // *Burns*. 27 (2001), 8; 817-27.
13. Muck-Šeler, Dorotea; Peričić, Danka. Binding of dihydroergosine to 5-HT1A receptors of human and rat brain. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 1; 235-245.
14. Muck-Šeler, Dorotea; Pivac, Nela; Šagud, Marina; Jakovljević, Miro; Mihaljević-Peješ, Alma. The effects of paroxetine and tianeptine on peripheral biochemical markers in major depression. // *Progress in neuro-psychopharmacology & biological psychiatry*. 26 (2002), 7-8; 1235-1243.
15. Pavelić, Jasminka; Pavelić, Ljubomir; Karadža, Jerolim; Križanac, Šimun; Unešić, Josip; Spaventi, Šime; Pavelić, Krešimir. Insulin-like growth factor family and combined antisense approach in therapy of lung carcinoma. // *Molecular medicine*. 8 (2002), 3; 149-

157.

16. Pavelić, Krešimir; Katić, Maša; Šverko, Višnja; Marotti, Tanja; Bošnjak, Berislav; Balog, Tihomir; Stojković, Ranko; Radačić, Marko; Čolić, Miroslav; Poljak-Blaži, Marija. Immunostimulatory effect of natural clinoptilolite as a possible mechanism of its antimetastatic ability. // *Journal of cancer research clinical oncology*. 128 (2002); 37-44.
17. Pavelić, Krešimir; Buković, Damir; Pavelić, Jasminka. The role of insulin-like growth factor 2 and its receptors in human tumors. // *Molecular medicine*. 8 (2002); 881-780.
18. Pećina-Šlaus, Nives; Gall-Trošelj, Koraljka; Kapitanović, Sanja; Pavelić, Jasminka; Pavelić, Krešimir. Novel alleles of the D16S752 polymorphic genetic marker linked to E-cadherin gene - a potential population marker. // *Collegium antropologicum*. 26 (2002), 1; 85-88.
19. Peričić, Danka; Švob, Dubravka. Interaction of stress and noradrenergic drugs in the control of picrotoxin-induced seizures. // *Epilepsy research*. 51 (2002), 1-2; 179-187.
20. Pivac, Nela; Muck-Šeler, Dorotea; Šagud, Marina; Jakovljević, Miro. Platelet serotonergic markers in posttraumatic stress disorder. // *Progress in neuro-psychopharmacology & biological psychiatry*. 36 (2002), 6; 1193-1198.
21. Ragland, William L.; Novak, Renata; El-Attrache, John; Savić, Vladimir; Ester, Katja. Chicken anemia virus and infectious bursal disease virus interfere with transcription of chicken IFN-alpha and IFN-gamma mRNA. // *Journal of interferon and cytokine research*. 22 (2002), 4; 437-441.
22. Semlitsch, Thomas; Tillian, Hilmar Manfred; Žarković, Neven; Borović, Suzana; Purtscher, Martin; Hohenwarter, Otmar; Schaur, Rudolf Jeorg. Differential influence of the lipid peroxidation product 4-hydroxynonenal on the growth of human lymphatic leukaemia cells and human peripheral blood lymphocytes. // *Anticancer research*. 22 (2002); 1689-1697.
23. Skerlev, Mihael; Grce, Magdalena; Sirotković-Skerlev, Maja; Husnjak, Koraljka; Lipozenčić, Jasna. Human papillomavirus male genital infections: clinical variations and the significance of DNA typing. // *Clinics in dermatology*. 20 (2002); 173-178.
24. Stojković, Ranko; Radačić, Marko. Cell killing of melanoma B16 in vivo by hyperthermia and cytotoxins. // *International journal of hyperthermia*. 18 (2002), 1; 62-71.
25. Šagud, Marina; Pivac, Nela; Mück-Šeler, Dorotea; Jakovljević, Miro; Mihaljević-Peješ, Alma; Koršić, Mirko. Effects of sertaline treatment on plasma cortisol, prolactin and thyroid hormones in female depressed patients. // *Neuropsychobiology*. 45 (2002); 139-143.
26. Šitum, Mirna; Poje, Goran; Grahovac, Blaženka; Marinović, Branka; Levanat, Sonja. Diagnosis of Lyme borreliosis by polymerase chain reaction. // *Clinics in dermatology*. 20 (2002), 2; 147-155.
27. Štambuk, Nikola; Konjevoda, Paško. Relationship of plasma creatine kinase and cardiovascular function in myocardial infarction. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 4; 891-898.
28. Štambuk, Nikola; Konjevoda, Paško; Pokrić, Biserka; Barišić, Igor; Martinić, Roko; Mrljak, Vladimir; Ramadan, Pero. Resonant recognition model defines the secondary structure of

- bioactive proteins. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 4; 899-908.
29. Šverko, Višnja; Balog, Tihomir; Sobočanec, Sandra; Gavella, Mirjana; Marotti, Tatjana. Age-associated alteration of lipid peroxidation and superoxide dismutase activity in CBA and AKR mice. // *Experimental gerontology*. 37 (2002); 1031-1039.
30. Šverko, Višnja; Sobočanec, Sandra; Balog, Tihomir; Marotti Tatjana. Met-enkephalin modulates lipid peroxidation and total sialic acid level in CBA mice age- and sex-dependent manners. // *Experimental gerontology*. 37 (2002); 1413-1421.
31. Vugrek, Oliver; Frank, Stefan; Menzel, Didriek. Suppressor tRNA mediated bacterial expression system for *Acetabularia* (Dasycladales, Chlorophyta) genes containing UAA and UAG glutamine codons. // *Phycologia*. 41 (2002), 6; 590-593.
32. Vugrek, Oliver; Moepps, Barbara. Hamyo3, a novel type 100kD myosin from sunflower. // *Journal of experimental botany*. 53 (2002), 369; 769-771.
33. Zaika, Alex I.; Slade, Neda; Erster, Susan H.; Sansome, Christine; Joseph, Troy W.; Pearl, Michael; Chalas, Eva; Moll, Ute M. Delta Np73, a dominant-negative inhibitor of wild-type p53 and TAp73, is up-regulated in human tumors. // *Journal of experimental medicine*. 196 (2002), 6; 765-780.

Ostali radovi u časopisima:

1. Alajbeg, Ivan; Ivanković, Siniša; Alajbeg, Ž. Iva; Ivanković, Dušica; Jurin, Mislav. Antiproliferative effect of non-aromatic oil fractions on squamous cell carcinoma VII: in vitro and preliminary in vivo results. // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 1; 89-94.
2. Alajbeg, Ivan; Ivanković, Siniša; Jurin, Mislav; Alajbeg, Ž. Iva; Rošin-Grget, Kata; Cekić-Arambašin, Ana. Non-aromatic naphthalene as a potential healing medium. // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 1; 81-87.
3. Čolić, Miroslav; Pavelić, Krešimir. Molecular, celular and medical aspects of the action of nutraceuticals and small molecules therapeutics: from chemoprevention to new drug development. // *Drugs under experimental and clinical research*. 28 (2002), 5; 169-175.
4. Graovac, Ante; Pokrić, Biserka; Vikić-Topić, Dražen. Foreword: Proceedings of the 16th Dubrovnik International Course & Conference MATH/CHEM/COMP 2001. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 4; VII-VIII.
5. Grce, Magdalena. Kritički osvrt na različite metode dijagnostike papiloma virusa. // *Medix*. 8 (2002), 41/42; 82-83.
6. Muck-Šeler, Dorotea; Pivac, Nela. 23. međunarodni neuropsihofarmakološki kongres. // *Medix. Studeni* (2002), 44; 15.
7. Pavelić, Jasminka; Zeljko, Žarko. Prostata - promjene prelazne zone. Etiologija, regulacija rasta, čimbenici rasta, genetičke promjene. // *Liječnički vjesnik*. 124 (2002); 211-219.
8. Pećina-Šlaus, Nives; Gall-Trošelj, Koraljka; Pavelić, Krešimir; Pavelić, Jasminka. Multivariate statistical analysis of molecular data on APC CDH1 gene involvement in renal cell carcinoma and clinical parameters of the disease. // *Acta clinica croatica*. 41 (2002), 2; 172-173.

9. Pivac, Nela; Muck-Šeler, Dorotea. Collegium Internationale Neuro-Psychopharmacologicum (C.I.N.P.) XXIIIrd Congress, Montreal, Canada, 23-27 June 2002. // *Psychiatria Danubina*. 14 (2002), 3-4; 231-242.
10. Pivac, Nela; Muck-Šeler, Dorotea. Collegium Internationale Neuro-Psychopharmacologicum - 23rd Congress. // *The Investigational drugs journal*. 5 (2002), 8; 768-775.
11. Pivac, Nela; Muck-Šeler, Dorotea. Third Croatian Congress of Pharmacology with International Participation, Zagreb, Croatia, 18 to 21 September 2001. // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 1; 3-9.
12. Poljak-Blaži, Marija. A role of iron in carcinogenesis and anticarcinogenic effect of iron compounds. Part 1. Association of iron with cercinogenesis. // *Mikroelementi v medicine (Trace elements in medicine)*. 3 (2002), 1; 20-28.
13. Poljak-Blaži, Marija. Role of iron in carcinogenesis, and anticarcinogenic effect of iron compounds. Part II. Iron metabolism regulation in mammals. Anticarcinogenic effect of iron compounds. // *Mikroelementi v medicine (Trace elements in medicine)*. 3 (2002), 3; 2-11.
14. Štambuk, Nikola; Konjevoda, Paško; Gotovac, Nikola. Nucleotide coding of amino acid polarity and protein structure. // *Acta Universitatis Debreceniensis de Ludovico Kossuth Nominatae, Seria Physica et Chimica*. 34-35 (2002); 171-188.

Doktorske disertacije:

1. Borović, Suzana. Učinak oksidativnog stresa uzrokovanog 4-hidroksinonenalom na proliferaciju i diferencijaciju stanica in vitro. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 8.4.2002., 176 str., voditelj: Žarković, Neven.
2. Herak Bosnar, Maja. Uloga gena nm23 u proliferaciji i diferencijaciji stanica in vitro. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 10.5.2002., 98 str., voditeljica: Pavelić, Jasminka.
3. Katić, Maša. Molekularni mehanizam djelovanja klinoptilolita na tumorske stanice. Zagreb : Prirodoslovno matematički fakultet, 26.6.2002., 99 str., voditelj: Đikić, Ivan.
4. Kolak, Toni. Inzulinu sličan čimbenik rasta II u karcinomima želuca. Zagreb : Medicinski fakultet, 24.6.2002., 95 str., voditelj: Pavelić, Krešimir.
5. Rajić, Ljubica. Praćenje citolitičke aktivnosti NK-stanica u djece s akutnom limfatičnom leukemijom (ALL) tijekom bolesti. Zagreb : Medicinski fakultet, 30.4.2002., 107 str., voditeljica: Gabrilovac, Jelka.
6. Stipčević, Tamara. The Effect of di-rahmnolipid BAC-3 on the healing of burn wounds. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 14.2.2002., 182 str., voditelj: Rivkah Isseroff.

Magistarski radovi:

1. Matovina, Mihaela. Molekularne metode u otkrivanju bakterijskih infekcija u placenti spontano pobačenih plodova. Zagreb : Prirodoslovno matematički fakultet, 27.6.2002., 68 str., voditeljica: Grce, Magdalena.

Diplomski radovi:

1. Babarović, Paula. Polimorfizam alela alfa lanca receptora za IFN-gama u osoba zaraženih bakterijom *Mycobacterium tuberculosis*. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 26.9.2002., 44 str., voditeljica: Pavelić, Jasminka.

2. Horvat, Tomislav. Gubitak genomskog upisa (genomic imprinting) za čimbenik rasta Igf-2 u tumorima želuca čovjeka. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 13.11.2002., 49 str., voditeljica: Gall-Trošelj, Koraljka.
3. Piljić, Alen. Unutarstanični smještaj proteina Nm23. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 12.4.2002., 61 str., voditeljica: Pavelić, Jasminka.
4. Pokupčić, Nikola. Analiza polimorfizma ljudskog kromosoma 9 regije p21. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 18.6.2002., 39 str., voditeljica: Levanat, Sonja.
5. Vojta, Aleksandar. Učestalost i raspodjela polimorfni biljega CCG i delta2642 u genu HD za Huntingtonovu bolest. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 26.6.2002., 32 str., voditeljica: Pavelić, Jasminka.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

Novak Kujundžić, R.: Ptičji hormon timusa, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 18.4.2002.

Kapitanović, S.: Nasljedni karcinom kolona: molekularna genetika i prevencija, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 16.5.2002.

Šuman, L.: Antigen H-Y, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 27.5.2002.

Kušić, B.: Limfociti sluznice želuca osoba pozitivnih na *Helicobacter pylori* i nastanak limfoma, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 6.6.2002.

Martin-Kleiner, I.: Opioidi: prijenos signala, regulacija rasta, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 20.6.2002.

Bagatin M., Handžić-Čuk, J.: Rascijepi usne i nepca: od epidemiologije do genetike, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, 27.6.2002.

Gabrilovac, J.: Uloga unutarstaničnog Ca⁺⁺ u signalizaciji dynorphina-A u T limfocitima, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 22.7.2002.

Štambuk, N.: Primjena teorije molekularnog prepoznavanja u biomedicini, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 5.9.2002.

Žarković, N.: 1992. - HNE! 2002. - HEN? ili: Naših deset godina oksidacijskog stresa. 12.9.2002.

Hadžija, M.: Temeljne stanice: potraga za svetim vrčem dijabetičara, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 7.11.2002.

Slade, N.: TAp73 i deltaNp73 – dva produkta gena p73, Seminar Zavoda za molekularnu medicinu, nastupno predavanje, 12.12.2002.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama

Grce, M.: Humani papiloma virusi, Tribina udruge studenata farmacije i medicinske biokemije, Farmaceutsko biokemijski fakultet, Zagreb, Hrvatska, 20.3.2002.

Grce, M.: Genetska predispozicija infekcije HPV i raka vrata maternice, Hrvatsko društvo za humanu genetiku, Hrvatski liječnički zbor, Zagreb, Hrvatska, 15.4.2002.

Kralj, M.: Gensko liječenje tumora supresorskim genima, Hrvatski liječnički zbor, Hrvatsko društvo za humanu genetiku, Zagreb, Hrvatska, 15.4.2002.

Žarković, N.: Overview on preclinical research on Isorel, Isorel symposium, Temišvar, Rumunjska 20.4.2002.

Pavelić, J.: New trends in gene therapy, Ioannina Biomedical Research Institute, Ioannina, Grčka, 2.6.2002.

Žarković, N.: Overview on preclinical research on Isorel, Isorel symposium, Constanza, Rumunjska 7.9.2002.

Pavelić, J.: Apoptoza - mehanizam zloćudne preobrazbe, Medicinski fakultet, Osijek, Hrvatska, 10.9.2002.

Pavelić, J.: Genski imprinting, Medicinski fakultet, Osijek, Hrvatska, 14.10.2002.

Balog T.: NEP/CD10 i APN/CD13 u dijagnozi tumora nadbubrežne žlijezde, sastanak Hrvatskog biokemijskog društva, Zagreb, Hrvatska, 15.10.2002.

Pavelić, K.: Molecular mechanisms of clinoptilolite action at cellular level, Institute of Mineralogy, University of Salzburg, Salzburg, Austrija, 23.10.2002.

Hadžija, M.: Transplantacija izoliranih Langerhansovih otočića, Klinička bolnica Dubrava, Zagreb, 5.11.2002.
Pavelić, K.: The role of insulin-like growth factor family in cancer development and growth, Technical University Dresden, Institute for Zoology, Faculty of Science, Department of Biology, Dresden, Njemačka, 19.11.2002.
Pavelić, J.: Gensko liječenje oboljelih od tumora, Društvo za kliničku genetiku Hrvatske, Zagreb, Hrvatska, 25.11.2002.
Vugrek, O.: Muscle proteins in plants, Technical University Dresden, Institute for Zoology, Faculty of Science, Department of Biology, Dresden, Njemačka, 2.12.2002.
Pavelić, J.: Upotreba imprintinga u genskom liječenju, Institute of Experimental Pharmacology, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovačka, 9.12.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu

Grce, M.: Tečaj molekularnih metoda i epidemiologije tuberkuloze, Institut Pasteur, Pariz, Francuska, 2-13.09.2002.
Hećimović, S.: Washington University Medical School, St. Louis, SAD, od 25.8.2001.
Katić, M.: Harvard Medical School, Boston, SAD, od 20.11.2002.
Slade, N.: State University of New York at Stony Brook, Department of Pathology, New York, SAD, 4.6.2001.

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje

Gall-Trošelj, K: Barths and The London – Queen Mary's School of Medicine and Dentistry, London, Velika Britanija, 17.6.-3.7.2002.
Husnjak, K.: Ludwig Institute for Cancer Research, Uppsala, Švedska, 23.7.-22.10.2002., od 1.12.2002.
Zekušić, Marija, Sveučilišna bolnica Ružinov, Bratislava, Slovačka, 1.–31.7.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

TUMOR PREVENTION AND GENETICS 2002

St. Gallen, Švicarska, 14-16. 2.2002.
Sudionice: Kapitanović, S., Popović Hadžija, M.

Prilozi:

S. Kapitanović, T. Čačev, S. Radošević, R. Spaventi, K. Pavelić. APC tumor suppressor gene in sporadic colon cancer, poster.
M. Popović Hadžija, S. Kapitanović, S. Radošević, R. Spaventi, M. Hadžija, K. Pavelić. Alterations of the DPC4 tumor suppressor gene in sporadic colon carcinoma: identification of novel somatic mutation in tumor from Croatian patient, poster.

91ST ANNUAL MEETING OF THE USCAP

Chicago, SAD, 23.2.-1.3.2002.

Prilog:

Krušlin, B.; Gall-Trošelj, K.; Čizmić, A.; Turčić, M.; Belicza, M.: LOH of p53 in congenital sacrococcygeal teratomas, poster.

38TH CONGRESS OF THE TRANSNATIONAL RADICAL PARTY

Geneva, Švicarska, 4-7.4.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Globalization and scientific freedom in molecular medicine, pozvano predavanje.

4. SIMPOZIJ O SPOLNO PRENOSIVIM BOLESTIMA S MEĐUNARODNIM SUDJELOVANJEM

Dubrovnik, Hrvatska, 15-17.4.2002.

Prilog:

Kotrulja, L.; Šitum, M.; Kostović, K.; Grce, M.: Genitalne infekcije humanim papiloma virusima (HPV) kod muškaraca i žena, poster.

EXPERIMENTAL BIOLOGY 2002

New Orleans, SAD, 20-24.4.2002.

Sudionici: Ester, K., Ragland, W. L.

Prilog:

Ragland, W. L.; Savić, V.; Novak, R.; Ester, K.: Abundance of ChIFN-alpha and ChIFN-gamma mRNA in blood of broiler chickens during an outbreak of chicken infectious anaemia, poster.

SCANDINAVIAN SOCIETY FOR IMMUNOLOGY 33RD ANNUAL MEETING AND
SCANDINAVIAN SOCIETY FOR IMMUNOLOGY 18TH SUMMER SCHOOL

Bergen, Norveška, 23-28.4.2002.

Sudionici: Knežević, J.

Prilozi:

Knežević, J.; Pavelić, J.; Kušić, B.; Mataković-Mileusnić, N.; Beg-Zec, Z.; Pavelić, K.; Dembić, Z.: The structure and polymorphism of the human IFN-gama receptor ligand-binding chain gene, poster.

Korbler, T.; Gršković, M.; Kušić, B.; Dominis, M.; Antica, M.: mRNA isolation from archive paraffin-embedded lymphatic tissue specimens for transcription factor expression analysis, poster.

3RD INTERNATIONAL CONGRESS ON MALFORMATIONS AND RARE TUMORS OF HEAD
AND NECK

Santos, Brazil, 30.4.-1.5.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Aberration of FHIT gene is associated with increased tumor proliferation and decreased apoptosis – clinical evidence in head and neck carcinomas, pozvano predavanje.

COST ACTION 839 "IMMUNOSUPPRESSIVE VIRAL DISEASE IN POULTRY" WORKING
GROUP3/WORKING GROUP 4 JOINT-MEETING: "MEASUREMENT OF PROTECTION"

Cavtat, Hrvatska, 9-11.5.2002.

Prilozi:

Biđin, Z.; Pokrić, B.; Lojkić, I.; Amšel-Zelenika, T.: Testing of the efficacy of broiler protection against IBDV by serological immune response and mortality under the field conditions, predavanje

Biđin, Z.; Pokrić, B.; Lojkić, I.; Amšel Zelenika, T.: Testing of the efficacy of broiler protection against IBDV by serological immune response and mortality under the field conditions, predavanje.

Hohšteter, M.; Kutnjak, H.; Novak, R.; Mazija, H.; Ragland, W. L.: Chicken Anaemia Viral Infection of MSB1 Cells Is Sensitive to rChIFN-alpha, predavanje.

6. HRVATSKI KONGRES KLINIČKE MIKROBIOLOGIJE S MEĐUNARODNIM
SUDJELOVANJEM

Zagreb, Hrvatska, 15-17.5.2002.

Sudionice: Grce, M., Matovina M.; Milutin, N.

Prilozi:

Grce, M.: Genitalna infekcija papilomavirusa u Hrvatskoj u proteklih deset godina, predavanje.

Matovina, M.; Husnjak, K.; Grce, M.: Detekcija bakterijskih infekcija metodom lančane reakcije polimerazom (PCR) u korionskim resicama spontano pobačenih ljudskih plodova, poster.

Milutin, N.; Katalinić Janković, V.; Grce, M.: Genotipizacija Mycobacterium tuberculosis

metodom ligazom posredovane lančane reakcije polimerazom (LMPCR), poster.

SECOND CONGRESS OF CROATIAN DERMATOVENEROLOGISTS

Opatija, Hrvatska, 16-19.5.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Skin cancer in postgenomic era, pozvano predavanje.

3RD INTERNATIONAL CONFERENCE ON SIGNAL TRANSDUCTION

Cavtat, Hrvatska, 17-23.5.2002.

Sudionici: Čačev, T.; Grdiša, M.; Herak Bosnar, M.; Husnjak, K.; Katić, M.; Komar, A.;

Levanat, S.; Musani, V.; Škrabalo, A.

Prilozi:

Bošnjak, B.; Katić, M.; Pavelić, K.; Poljak-Blaži, M.: Serum of TNF-alfa and activation of (NF-kB) in macrophages and spleen cells of wistar rats treated with ferric sorbitol citrate (FSC), poster

Grdiša, M.; Cymbalista, F.: Introduction of apoptosis in B-cell cells by different signal transduction pathways, poster

Komar, A.; Slade, N.; Pavelić, J.; Štorga-Tomić, D.; Birkmayer, D.G.: Extracellular NADH and NAD⁺ downregulate the proliferation of human tumor cell lines, poster.

Pećina-Šlaus, N.; Gall-Trošelj, K.; Kapitanović, S.; Radić, K.; Pavelić, K.; Pavelić, J.: Genetic instabilities of the E-cadherin and APC genes in renal cell carcinoma, poster.

Popović, M.; Grdiša, M.; Hrženjak, T.: Influence of growth factors on wound healing and tissue regeneration, poster.

Škrabalo, A.: Probable diagram of interactions among gene products previously reported to have altered expression in schizophrenia, poster.

EUROPEAN HUMAN GENETICS CONFERENCE 2002

Strasbourg, Francuska, 25-29.5.2002.

Prilog:

Jelušić, M.; Gall-Trošelj, K.; Jurak, I.; Pavelić, K.; Kniewald, H.; Rojnić Putarek, N.; Malčić, I.: Genetic analysis of hypertrophic cardiomyopathy in 12 Croatian families, poster.

29th EUROPEAN SYMPOSIUM ON CALCIFIED TISSUES

Zagreb, Hrvatska, 25-29.5.2002.

Sudjelovanje na workshop-u "Functional Genomics"

Sudionice: Čačev, T.; Husnjak, K.

6TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE OCCURRENCE, PROPERTIES AND UTILIZATION OF NATURAL ZEOLITES

Solun, Grčka, 3-7.6.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Adjuvant effect of natural clinoptilolite in anticancer therapy, pozvano predavanje.

3. CROATIAN CONGRESS OF PEDIATRIC SURGERY WITH INTERNATIONAL PARTICIPATION

Rovinj, Hrvatska, 5-9.6.2002.

Sudionici: Boranić, M.; Zekušić, M.

3. KONGRES HRVATSKOG NEUROLOŠKOG DRUŠTVA

Zagreb, Hrvatska, 6-8.6.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: New advances in molecular genetics of brain tumors, pozvano predavanje.

7TH CONGRESS OF THE EUROPEAN HEMATOLOGY ASSOCIATION (EHA-7)

Firenca, Italija, 6-9.6.2002.

Sudionica: Grdiša, M.

Prilog:

Grdiša, M.; Cymbalista, F.: Immunosensitivity of B-cells in chronic lymphocytic leukemia and correlation with expression of the cell cycle regulatory proteins, poster.

13TH LJUDEVIT JURAK INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPARATIVE PATHOLOGY

Zagreb, Hrvatska, 7-8.6.2002.

Sudionici: Gall-Trošelj, K.; Pavelić, K.

Prilog:

Gall-Trošelj, K.; Pavelić, K.: Recent advances in molecular genetics of breast cancer, pozvano predavanje.

1ST EUROPEAN CONFERENCE ON CERVICAL CANCER SCREENING IN EUROPE

Tübingen, Njemačka, 7-8.6.2002.

Sudionica: Grce, M.

17TH MEETING OF THE EUROPEAN ASSOCIATION FOR CANCER RESEARCH

Granada, Španjolska, 8-11.6.2002.

Sudionica: Levanat, S.

Prilog:

Levanat, S.; Crnić, I.; Orešković, S.; Musani, V.; Komar, A.; Babić, D.: Patched in development malformations and cancer. Alterations of patched in ovarian fibromas and non inflammatory cysts, poster.

1ST CROATIAN CONGRESS ON MOLECULAR LIFE SCIENCES

Opatija, Hrvatska, 9-13.6.2002.

Sudionici: Balog, T.; Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Fragile chromosomes in cancer: causes and consequences, pozvano predavanje.

Šverko, V.; Sobočanec, S.; Balog, T.; Marotti, T.: Does met-enkephalin modulate age-associated changes of lipid peroxidation and total sialic acid level in both sexes of CBA mice?, poster.

3RD CENTRAL EUROPEAN ONCOLOGY CONGRESS

Opatija, Hrvatska, 19-22.6.2002.

Sudionici: Pavelić, K.; Pavelić, J.

Prilog:

Pavelić, K.: New developments in molecular oncology, pozvano predavanje.

23RD ANNUAL CONGRESS OF THE EUROPEAN SOCIETY OF MYCOBACTERIOLOGY

Dubrovnik, Hrvatska, 23-26.6.2002.

Sudionice: Grce, M.; Milutin, N.

Prilog:

Milutin, N.; Katalinić Janković, V.; Grce, M.: Genotyping of resistant and sensitive strains of Mycobacterium tuberculosis by ligation-mediated polymerase chain reaction (LMPCR), poster.

XXIIIRD COLLEGIUM INTERNATIONALE NEURO-PSYCHOPHARMACOLOGICUM
(CINP) CONGRESS

Montreal, Kanada, 23-27.6.2002.

Sudionice: Muck-Šeler, D.; Pivac, N.

Prilog:

Kozarić-Kovačić, D.; Muck-Šeler, D.; Pivac, N.; Vidošić, S.; Tomić, Z.: Olanzapine or fluphenazine in patients with psychotic combat-related posttraumatic stress disorder, poster.

Muck-Šeler, D.; Pivac, N.; Šagud, M.; Jakovljević, M.: Plasma hormones and platelet serotonin in healthy women, depressed and schizophrenic patients, poster.

Peričić, D.; Švob, D.; Mirković Kos, K.: Interaction of stress and noradrenergic drugs in the control of picrotoxin-induced seizures, poster.

Pivac, N.; Muck-Šeler, D.; Jakovljević, M.; Šagud, M.; Mihaljević-Peleš, A.; Junaci, S.: The effects of olanzapine or fluphenazine on peripheral biochemical markers in schizophrenic patients, poster.

Šagud, M.; Jakovljević, M.; Mihaljević-Peleš, A.; Hotujac, Lj.; Pivac, N.; Muck-Šeler, D.:

Successful treatment of risperidone-induced sexual dysfunction with bromocriptine, poster.

MATH/CHEM/COMP 2002 - THE 17TH DUBROVNIK INTERNATIONAL COURSE & CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATHEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCES

Dubrovnik, Hrvatska, 24-29.6.2002.

Sudionici: Pokrić, B.; Štambuk, N.

Prilozi:

Milošević, D.; Batinić, D.; Konjevoda, P.; Blau, N.; Štambuk, N.; Votava-Raić, A.; Nižić, Lj.; Vrljičak, K.; Batinić, D.: Machine learning analysis of calcium, oxalate and citrate interaction in idiopathic calcium urolithiasis in children, poster.

Štambuk, N.; Barišić, I.; Wilhem, V.; Janković, S.; Konjevoda, P.; Pokrić, B.: Machine learning based analysis of biochemical and morphological parameters in patients with dialysis related amyloidosis, poster.

Štambuk, N.; Konjevoda, P.; Gotovac, N.; Pokrić, B.: Prediction of protein folding types from the primary nucleotide sequences, pozvano predavanje.

Štambuk, N.; Pavan, J.; Konjevoda, P.; Pavan, D.: Latanoprost monotherapy is effective antiglaucoma treatment for patients resistant to beta-blockers, poster.

4th INTERNATIONAL CONGRESS OF PATHOPHYSIOLOGY

Budimpešta, Mađarska, 29.6.-5.7.2002.

Prilog:

Sirotković-Skerlev, M.; Križanac, Š.; Pavelić, K.; Kapitanović, S.: Comparison of expression of oncogenes and tumor suppressor genes in benign and malignant breast lesions, poster.

18TH UICC INTERNATIONAL CANCER CONGRESS

Oslo, Norveška, 29.6.-6.7.2002.

Sudionice: Čačev, T.; Husnjak, K.; Kapitanović, S.; Kralj, M.

Prilozi:

Čačev, T.; Spaventi, R.; Pavelić, K.; Kapitanović, S.: Genetic changes of APC, beta-catenin and E-cadherin genes in colon cancer, poster.

Kapitanović, S.; Čačev, T.; Spaventi, R.; Pavelić, K.: NF1 tumor suppressor gene in colon cancer: loss of heterozygosity, poster.

FOURTH CONGRESS OF THE INTERNATIONAL SOCIETY FOR THEORETICAL CHEMICAL PHYSICS (ICTCP-IV)

Marly-le-Roi, Francuska, 9-16.7.2002.

Sudionik: Štambuk, N.

Prilozi:

Konjevoda, P.; Štambuk, N.; Gotovac, N.: New expert system for the prediction of protein folding types, poster.

Štambuk, N.; Konjevoda, P.; Gotovac, N.: Binary coding of the secondary protein structure,

predavanje.

FIRST INTERNATIONAL MEETING OF THE HNE-CLUB: 4-HYDROXYNONENAL AND OTHER LIPID PEROXIDATION PRODUCTS

Salzburg, Austrija, 13-15.7.2002.

Sudionici: Borović, S.; Čipak, A.; Žarković, N.

Prilozi:

Borović, S.; Čipak, A.; Skala, H.; Kejla, Z.; Perović, D.; Wildburger, R.; Žarković, N.: The influence of 4-hydroxynonenal on proliferation and differentiation of mesenchymal cells in vitro, poster.

Čipak, A.; Brasgen, N.; Šćukanec, M.; Kirac, I.; Eckl, P.; Žarković, N.: 4-hydroxynonenal and splenic cells modify in vitro growth of rat hepatocytes, poster.

Lončarić, I.; Stolc, S.; Žarković, K.; Vuković, T.; Matijević, T.; Waeg, G.; Žarković, N.: Experimental modification of 4-hydroxynonenal-protein conjugates in rat brain in vitro by neuroprotective pyri-doindole derivative stobadine, poster.

Nikolić, V.; Tatzber, F.; Živković, M.; Hiršl, N.; Poljak-Blaži, M.; Vrkić, N.; Lončarić, I.; Wonisch, W.; Topić, E.; Žarković, N.: Monitoring oxidative stress by novel clinically applicable screening assays in cardiac patients treated by primary percutaneous coronary angioplasty, poster.

Prutki, M.; Poljak-Blaži, M.; Žarković, K.; Krušlin, B.; Waeg, G.; Žarković, N.: HNE and transferrin receptors on cells of colorectal carcinoma and CaCo2 cells treated with iron compound, poster.

Sabolović, S.; Stipančić, I.; Martinac, P.; Romić, Ž.; Mayer, L.; Bušić, Z.; Ivanković, S.; Žarković, N.: Surgical and oxidative stress after radical surgery in patients with colorectal carcinoma, poster.

Sobočanec, S.; Balog, T.; Šverko, V.; Marotti, T.: Age- and sex-associated changes in oxidative/antioxidative status in different organs of CBA mice, poster.

Žarković, K.; Jurić, G.; Waeg, G.; Kolenc, D.; Škrinjar, Lj.; Žarković, N.: Immunohistochemical appearance of HNE-protein conjugates in human astrocytoma, poster.

Žarković, N.; Schaur, R. J.: 4-hydroxynonenal as a marker of pathophysiological processes, pozvano predavanje.

13TH CONGRESS OF THE EUROPEAN ANTHROPOLOGICAL ASSOCIATION. A QUARTER OF CENTURY OF EUROPEAN ANTHROPOLOGICAL ASSOCIATION: REFLECTIONS AND PERSPECTIVES

Zagreb, Hrvatska, 27.8.2002.

Prilog:

Pećina-Šlaus, N.; Gall-Trošelj, K.; Fischer-Žigmund, M.; Šlaus, M.: Two distinct genetic polymorphisms as potential anthropological/population markers, poster.

XVII INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON MEDICINAL CHEMISTRY

Barcelona, Španjolska, 1-5.9.2002.

Prilozi:

Dogan Koružnjak, J.; Slade, N.; Zamola, B.; Pavelić, K.; Karminski-Zamola, G.: Synthesis of some new biologically active thieno[3,2-b:4,5-b']thieno-[2,3-c]quinolones, poster.

Karminski-Zamola, G.; Racane, L.; Stojković, R.; Tralić-Kulenović, V.; Pavelić, K.: Novel 2-(substituted-phenyl)-6-amino-benzothiazole hydrochlorides; synthesis and antitumor activity, poster.

INTERNATIONAL COURSE ON THYROID SURGERY

Zagreb, Hrvatska, 6-8.9.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Molecular biology of thyroid gland cancer, pozvano predavanje.

XV INTERNATIONAL ROUND TABLE "NUCLEOSIDES, NUCLEOTIDES AND NUCLEIC ACIDS"

Leuven, Belgija, 10-14.9.2002.

Sudionici: Grdiša, M.; Grce, M.; Kraljević, S.

Prilog:

Džolić, Z.; Kristafor, V.; Cetina, M.; Nagl, A.; Hergold-Brundić, A.; Mrvos-Semrek, D.; Grdiša, M.; Slade, N.; Pavelić, K.; Balzarini, J.; DeClerque, E.; Mintas, M.: The novel spaced cyclopropyl nucleoside analogues: synthesis, structural studies and biological evaluation of the purine substituted 1-aminocyclopropane-1-carboxylic acids and 1-amino-1-hydroximethylcyclopropanes, poster.

TREĆI HRVATSKI PSIHIJATRIJSKI KONGRES: "ZA DUŠEVNO ZDRAVLJE I MEĐUSOBNO RAZUMIJEVANJE"

Osijek, Hrvatska, 25-28.9.2002.

Sudionice: Muck-Šeler, D.; Pivac, N.

Prilog:

Muck-Šeler, D.; Pivac, N.; Šagud, M.; Mihaljević-Peleš, A.; Jakovljević, M.: Učinak setralina na periferne serotoninске pokazatelje u depresivnih bolesnika, poster.

Šagud, M.; Mihaljević-Peleš, A.; Popović-Knapić, V.; Pivac, N.; Muck-Šeler, D.; Jakovljević, M.: Primjena olanzapina u kliničkoj praksi- naturalistička studija, poster.

5TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON BIOTECHNOLOGY AND PUBLIC HEALTH: EXPECTATIONS, GAINS AND COSTS

Zagreb, Hrvatska, 26-28.9.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Latest achievements in the molecular oncology, pozvano predavanje.

XII. ZNANSTVENI SASTANAK "BOLESTI DOJKE"

Zagreb, Hrvatska, 3.10.2002.

Sudionici: Kapitanović, S.; Pavelić, K.

Prilog:

Kapitanović, S.: Obitelj erbB-2/HER-2 receptora i njihovih liganada u nastanku i napredovanju raka dojke, pozvano predavanje.

Pavelić, K.: Temeljni aspekti istraživanja onkogenog HER2/neu, pozvano predavanje.

5. KONGRES HRVATSKOG PEDIJATRIJSKOG DRUŠTVA

Šibenik, Hrvatska, 4-6.10.2002.

Prilog:

Senečić-Čala, I.; Dujšin, M.; Vuković, J.; Brkić, T.; Kapitanović, S.: Obiteljska polipoza crijeva u 5-godišnje djevojčice, poster.

20th INTERNATIONAL PAPILLOMAVIRUS CONFERENCE

Pariz, Francuska, 4.-9.10.2002.

Sudionica: Grce, M.

Prilog:

Husnjak, K.; Milutin, N.; Pavelić, K.; Grce, M.: Identification of HPV genotypes by PCR amplification and RFLP analysis among Croatian women, poster.

2ND INTERNATIONAL CONFERENCE ON MECHANISMS AND ACTIONS OF NUTRACEUTICALS

Krems, Austrija, 6-9.10.2002.

Sudionici: Pavelić, J.; Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Could medicine benefit from zeolites: Molecular mechanisms of clinoptilolite activity, pozvano predavanje.

WORKSHOP ON MOLECULAR PATHOGENESIS OF MAREK'S DISEASE AND AVIAN IMMUNOLOGY

Limassol, Cipar, 6-11.10.2002.

Sudionici: Ester, K.; Ragland, W. L.

Prilog:

Quere, P.; Rivas, C.; Ester, K.; Novak, R.; Ragland, W. L.: Blood IFN-alpha and IFN-gamma mRNA abundance as a measure of systemic immunosuppression in Marek's disease ?, poster.

EMBO CONFERENCE IN FRONTIERS OF MOLECULAR BIOLOGY

Oslo, Norveška, 11-14.10.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Involvement of insulin-like growth factor family of genes in human cancer, pozvano predavanje.

2ND MEETING OF THE MOLECULAR MEDICINE NETWORK IN SOUTH EAST EUROPE

Skopje, Makedonija, 18.10.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Molecular genetics of breast cancer, plenarno predavanje

SOCIETY FOR NEUROSCIENCE 32ND ANNUAL MEETING

Orlando, Florida, SAD, 2-7.11.2002.

Sudionica: Hećimović, S.

Prilog:

Hećimović, S.; Wang, J.; Martinez, M.; Goate, A. M.: A β and S3-like cleavage are independent processes within the TM-domain of APP, predavanje.

INTERNATIONAL CONFERENCE ON BIOETHICS IN CENTRAL AND EASTERN EUROPE

Vilnius, Litva, 11-12.11.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Discussion on ethical dilemmas about molecular medicine, pozvano predavanje.

8TH ALPE-ADRIA + DANUBE CONGRESS ON SEXUALLY TRANSMITTED DISEASES AND INFECTION OF THE SKIN

Kranjska Gora, Slovenija, 15-17.11.2002.

Sudionica: Grce, M.

Prilog:

Kotrulja, L.; Šitum, M.; Tomas, D.; Belicza, M.; Grce, M.: Gigatski kondilomi Buschke-Loewenstein. Prikaz slučaja, poster.

LASER U MEDICINI I STOMATOLOGIJI – PRVI HRVATSKI SIMPOZIJ S MEĐUNARODNIM UČEŠĆEM

Zagreb, 22–24.11.2002.

Sudionik: Jurin, M.

Prilog:

Jurin, M.: Biološki učinci lasera, pozvano predavanje.

CROATIAN IMMUNOLOGICAL SOCIETY ANNUAL MEETING 2002

Trakošćan, Hrvatska, 22-24.11.2002.

Sudionici: Buza-Vidas, B.; Hadžija, M.; Korolija, M.; Kušić, B.; Martin-Kleiner, I.; Pešun, I.; Popović Hadžija, M.; Slijepčević, M.; Šuman, L.

Prilozi:

Antica, M.; Kušić, B.; Hranilović, D.; Dietz, A. B; Vuk-Pavlović, S.: DDPCR and RACE on developing lymphocytes reveal a new mouse gene, poster.

Gabrilovac, J.; Buza-Vidas, B.; Breljak, D.: Membrane expression and enzyme activity of CD13/APN on cells of HL-60 line treated with interferon-gamma, poster.

Gabrilovac, J.; Zekušić, M.; Martin-Kleiner, I.; Breljak, D.; Buza-Vidas, B.; Jakić-Razumović, J.; Boranić, M.: CD10 and CD13 expression on cultured human keratinocytes, poster.

Korbler, T.; Vardić, I.; Kušić, B.; Antica, M.: Helios gene expression in human lymphoproliferative disorders, poster.

Popović Hadžija, M.; Korolija, M.; Baričević, M.; Pešun, I.; Slijepčević, M.; Hadžija, M., *In vitro* generation of embryoid bodies from mouse embryonic stem cells: potential source of insulin-secreting structures, poster.

Živković, M.; Žarković, K.; Škrinjar, Lj.; Strunjak, G.; Poljak-Blaži, M.; Waeg, G.; Jorg Schaur, R.; Egger, G.; Nagy, B.; Žarković, N.: Immunodetection of 4-hydroxy-2-nonenal-histidine conjugates in rat leukocytes, poster.

**ZNANSTVENO-STRUČNI SEMINAR: SUVREMENA FARMAKOTERAPIJA EPILEPSIJE
KLINIKA ZA DJEČJE BOLESTI**

Zagreb, Hrvatska, 6.12.2002.

Sudionik: Štambuk, N.

Prilog:

Štambuk, N. Neuroimunomodulacija, pozvano predavanje.

MELANOM NOVE SPOZNAJE I USKLAĐIVANJE PROTOKOLA LIJEČENJA

Zagreb, Hrvatska, 13.12.2002.

Sudionica: Levanat, S.

Prilog:

Levanat, S.: Molekularna biologija melanoma, pozvano predavanje.

NANOZNANOSTI I TEHNOLOGIJA

Zagreb, Hrvatska, 17.12.2002.

Sudionik: Pavelić, K.

Prilog:

Pavelić, K.: Primjena nanoznanosti u medicini, pozvano predavanje.

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija

Pavelić, K.: delegat Hrvatske u EMBC. 33. redovna sjednica I dio, 12-13.6.2002., Heidelberg, Njemačka.

Pavelić, K.: delegat Hrvatske u EMBC. 33. redovna sjednica II dio, 18-19.11.2002., Hamburg, Njemačka

Štambuk, N.: Član međunarodnog upravnog odbora International Ocular Inflammation Society.

Žarković, N. The international 4-Hydroxynonenal Club, member of the steering committee, 13-15.7.2002.

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama

Antica, M., Kušić, B. i Čvorišćec, B.: Specifična imunoterapija i ispitivanje mehanizama alergijske upale, (br. 129003) Ministarstvo znanosti i tehnologije Republike Hrvatske, Medicinski fakultet, Opća bolnica Sveti Duh i Laboratorij za staničnu i molekularnu imunologiju, Molekularna Medicina, IRB, Zagreb.

Antica, M., Kušić, B. i Katičić, M.: Epidemiologija, dijagnostika i terapija H. pylori infekcije, (br.108104) Ministarstvo znanosti i tehnologije Republike Hrvatske, Medicinski fakultet, Zagreb i KBC i Laboratorij za staničnu i molekularnu imunologiju, Molekularna Medicina, IRB, Zagreb.

Antica, M. i Vuk-Pavlović, S.: T lymphocyte commitment and development from stem cells, Mayo Cancer Foundation, Rochester, Min, SAD i Laboratorij za staničnu i molekularnu imunologiju, Molekularna Medicina, IRB, Zagreb.

Boranić, M., Martin-Kleiner, I.: Ispitivanje mutacija mitohondrijske DNK/Mutations in mitochondrial DNA, bilateralni hrvatsko-talijanski ugovor između Instituta Ruđer Bošković (putem MZT) i National Neurologic Institute, Carlo Besta, Milano, Italija.

Boranić, M., Marušić, M.: Proizvodnja kožnih presađaka za transplantaciju/ Organotypic skin cultures for transplantation, bilateralni hrvatsko-talijanski ugovor između Instituta Ruđer Bošković (putem MZT) i Istituto dermatologico dell'Immacolata, Pomezia kraj Rima, Italija.

Levanat, S.; Frischauf A. M.: Uloga SHH/PTCH/SMO signalnog puta u onkogenezi.

Mehanizmi regulacije u različitim patološkim stanjima. (The role of the SHH/PTCH/SMO pathway in oncogenesis. Mechanisms of regulation of the SHH/PTCH/SMO pathway in different pathological conditions). Bilateralni hrvatsko-austrijski projekt između Instituta za genetiku i biologiju Sveučilišta u Salzburgu i Instituta Ruđer Bošković (putem MZT RH).

Žarković, N. Biological effects of "Isorel", Novipharma Pharma GmbH, Pörschach, Austrija, od 1987.

Žarković, N. Biological effects of "Polyerga" HorFerVit Pharma GmbH, Oldenburg, Njemačka, od 1989.

Žarković, N. Agreement on scientific cooperation in the research on local and systemic effects of trauma, shock and sepsis. Ludwig-Boltzmann-Institute of Experimental and Clinical Traumatology, Beč, Austrija (od 1994.)

Žarković, N. Agreement on scientific cooperation in the research on oxidative stress and novel antioxidants. Institute of Experimental Pharmacology of the Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovačka (od 1995.)

Žarković, N. Development of novel biochemical technology in research of oxidative stress. Biomedica GmbH, Graz, Austrija (od 1998.)

Žarković, N. Development of novel biochemical technology in research of oxidative stress. ServoLab GmbH, Graz, Austrija (od 1998.)

Žarković, N. Joint venture on development on novel diagnostic assays. Elitec and Tatzber KEG, Beč, Austrija (od 2000.)

Žarković, N. Agreement on scientific cooperation in the research on 1,4-dihydropyridine derivatives and derivatives of taurine. Latvian Institute of Organic Synthesis, Riga, Latvija (od 2001.)

Žarković, N., Poljak-Blaži, M., Borović, S., Čipak, A., Vuković, T., Hiršl, N. Bilateralni Hrvatsko-austrijski projekt Cellular adaptation to oxidative stress: The Yeast Approach. Suradna ustanova: Institute of Molecular Biology, Biochemistry and Microbiology, Karl Franz University Graz, Austria (project partner - prof. dr. Sepp Kohlwein)

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu „Ruđer Bošković“

Heidi Hahn, Institute of Human Genetics, University of Goettingen, Goettingen, Njemačka, 8-10.2.2002.

Sepp D. Kohlwein, Department of Molecular Biology, Biochemistry and Microbiology SFB Biomembrane Research Center University Graz, Austrija, 11.03.2002.

Tatjana Tudyka, Affymetrix, SAD, 30.4.2002.

Brew Fiona, Affymetrix, SAD, 30.4.2002.

Herwig E. Reichl, Haemosan Life Science Services, Ilz, Austrija, 17.5.2002.

Krishna Murthy, Department of Virology/Immunology, Southwest Foundation for Biomedical Research, San Antonio, Teksas, SAD, 25.7.2002.

Znanstveni skupovi u organizaciji IRB

MATH/CHEM/COMP/2001, THE 17TH DUBROVNIK INTERNATIONAL COURSE & CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATHEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCES
Dubrovnik, Hrvatska, 24-29.6.2002.

COST ACTION 839 "IMMUNOSUPPRESSIVE VIRAL DISEASES IN POULTRY"
Cavtat, Hrvatska, 9-11.5.2002.

<http://more.cim.irb.hr/>

**ZAVOD ZA ISTRAŽIVANJE MORA
CENTER FOR MARINE RESEARCH**

Dr.sc. Nenad Smoldaka, predstojnik zavoda

Tel: ++385 (0)52 830 401, fax: ++385 (0)52 813 496

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za ekologiju i sistematiku, dr. sc. Ana Travizi, voditeljica laboratorija

Laboratorij za procese u ekosustavu mora, dr. sc. Danilo Degobbis, voditelj laboratorija

Laboratorij za ekofiziologiju i toksikologiju, dr. sc. Čedomil Lucu, voditelj laboratorija

Laboratorij za morsku molekularnu toksikologiju, dr. sc. Renato Batel, voditelj laboratorija

Laboratorij za ekotoksikologiju, dr. sc. Bartolo Ozretić, voditelj laboratorija

Tajništvo Zavoda, Alemka Hrelja, tajnica

Istraživačke plovne jedinice, Rudolf Marić, voditelj, zapovjednik IB "Vila Velebita"

Akvarij, Dragoslav Turković, voditelj

Služba održavanja

U okviru Zavoda do 30. 6. 2002. provodila su se istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

**ISTRAŽIVANJE PROCESA I EKOLOŠKIH ODNOSA U JADRANU
RESEARCH OF PROCESSES AND ECOLOGICAL RELATIONSHIPS IN THE
ADRIATIC**

Direktor programa: dr. sc. Renato Batel

Teme u sastavu Programa:

Biološka raznolikost odabranih područja Jadranskog mora, dr. sc. Ana Travizi, voditeljica teme

Mehanizam dugoročnih promjena kruženja organske tvari u ekosustavu sjevernog Jadrana, dr. sc. Danilo Degobbis, voditelj teme

Satelitska detekcija i matematičko modeliranje Jadrana, dr. sc. Milivoj Kuzmić, voditelj teme

Programirane biosinteze i genotoksični rizik, dr. sc. Renato Batel, voditelj teme

Toksičnost i biokemijski odgovor organizama na zagađenje, dr. sc. Bartolo Ozretić, voditelj teme

Ekofiziološka istraživanja i transportni mehanizmi metala, dr. sc. Čedomil Lucu, voditelj teme

Program rada:

Opći cilj programa je dobro poznavanje Jadranskog mora imajući u vidu potrebe gospodarstva Republike Hrvatske i očuvanje okoliša. Preduvjet za utvrđivanje stanja i trendova promjena uvjetovanih prirodnim i antropogenim čimbenicima je poznavanje temeljnih zakonitosti međuodnosa i procesa u ekosustavima i morskim organizmima. Stoga se predviđaju složena terenska i laboratorijska istraživanja usmjerena na: a) utvrđivanje fizikalnih, kemijskih i bioloških značajki Jadranskog mora i pojedinih njegovih dijelova; b) studij i praćenje dinamike pelagičkog ekosustava, posebno sjevernog Jadrana; c) osnovne studije bentoskih ekosustava i utvrđivanje biološke raznolikosti; d) međusobne ovisnosti pelagičkih i bentoskih ekosustava s posebnim osvrtom na "cvjetanje mora"; e) proučavanje zagađivala i mehanizama njihovog djelovanja na razini DNA, enzima i drugih biokemijskih značajki organizama; f) biokemijska i fiziološka istraživanja morskih organizama uz razvoj metoda za utvrđivanje toksikološkog stresa; g) studij prijenosa osmolita i toksičnih metala u morskih organizama; h) pronalaženje mjera prihvatljivog

gospodarenja i zaštite odabranih područja i organizama Jadranskog mora; i) izobrazba mladih stručnjaka.

Research programme:

The general scope of the program is a better knowledge of the Adriatic Sea taking into account the economical demands of the Republic of Croatia and environmental protection. A prerequisite for the determination of the state and trends in changes conditioned by natural and anthropogenic factors is the knowledge of basic interrelationships and processes in ecosystems and marine organisms. Therefore, complex field and laboratory researches are planned focussed on the: a) determination of physical, chemical and biological characteristics of the Adriatic Sea and its particular areas; b) fundamental study and monitoring of the pelagic ecosystem dynamics, particularly in the northern Adriatic; c) basic studies of benthic ecosystems and biodiversity determination; d) interdependence of pelagic and benthic ecosystems with special regard to "sea blooming"; e) study of pollutants and activity mechanisms at DNA, enzyme and other biochemical characteristics organism levels; f) biochemical and physiological research of marine organisms and development of methods for the determination of toxicological stress; g) study of osmolyte and toxic metals transport in marine organisms; h) efforts in an acceptable management and protection of Adriatic selected areas and organisms; i) education in marine sciences.

**BIOLOŠKA RAZNOLIKOST ODABRANIH PODRUČJA JADRANSKOG MORA
BIOLOGICAL DIVERSITY OF SELECTED ADRIATIC SEA AREAS**

Voditeljica teme: dr. sc. Ana Travizi

Tel. ++385 (0)52 804 769 e-mail:ana.travizi@cim.irb.hr

Suradnici na temi:

Mirjana Fonjak, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tea Gluhak, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Ljiljana Iveša, magistrica oceanol. znanosti, asistentica

Andrej Jaklin, magistar oceanol. znanosti, asistent (do 23.4.2002.)

Željka Labura, magistrica vet. znanosti, asistentica (do 22.4.2002.)

Davorin Medaković, doktor biol. znanosti, viši asistent

Vedrana Nerlović, dipl. inž. pomorsko-ribarske tehnol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Ana Travizi, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Tehnička suradnica:

Rosella Sanković, samostalna tehničarka

Suradnici iz drugih ustanova:

Jasna Vidaković, izvanredna profesorica, Pedagoški fakultet, Osijek

Elvis Zahtila, doktor biol. znanosti, Javna ustanova Nacionalni park "Brijuni", Fažana

Program rada i rezultati na temi:

Glavni se cilj ovog projekta odnosio na utvrđivanje biološke raznolikosti bentoske flore i faune u osjetljivim, ugroženim i nedovoljno istraženim dijelovima ekosustava. Istraživanja su bila usmjerena na bentosku makrofloru, meio- i makrofaunu. Površina zahvaćena algom *Caulerpa taxifolia* (Malinska, otok Krk) smanjena je u odnosu na prethodne godine za oko 90 %, a vjerojatni je razlog duže trajanje nižih zimskih temperatura. Latentno stanje potrajalo je do sredine srpnja, kada se alga počela sporadično pojavljivati na istraženim lokalitetima. Početak vegetacijskog ciklusa kasnio je oko mjesec i pol. Tijekom jeseni utvrđeno je značajno smanjenje broja filoida (666 vs 2160 filoida/m²) i biomase alge (38 vs 243 g suhe težine/ m²), usporen

je rast filoida (94 vs 178 mm), te je uočena smanjena vitalnost vrste u odnosu na prethodne godine. Prostorna raspodjela meio- i nematofaune pučinskog dijela sjevernog Jadrana i plitke infralitoralne zone u okolici Rovinja pretežno je ovisila o granulometrijskom sastavu sedimenta. Mješoviti tipovi sedimenta (siltosni pijesak, pjeskoviti silt i glinasto-pjeskoviti silt) odlikovali su se sličnim kvalitativnim i kvantitativnim sastavom meiofaune na većim (~ 30 m) i manjim dubinama (< 10 m), a razlikovali su se od šljunkovitog i sitnozrnastog pijeska nižom gustoćom i većom biološkom raznolikošću. Brojnošću i raznovrсноšću isticala se meiofauna srednje-zrnastog pijeska. Sezonske fluktuacije brojnosti utvrđene kod pojedinih taksona, koji ulaze u sastav meiofaune, nisu značajnije utjecale na dinamiku cjelokupne zajednice, pa se njena vremenska raspodjela tijekom jednogodišnjeg razdoblja može smatrati stabilnom. Prikupljanjem i obradom uzoraka sa slabo poznatih staništa, odnosno nedovoljno istraženih zajednica u Velikom i Malom Jezeru, kompletirano je istraživanje faune Bryozoa u akvatoriju NP "Mljet". Analiziran je doprinos ove taksonomske skupine ukupnoj biološkoj raznolikosti na području Nacionalnog parka. Završeno je praćenje životnog i uzgojnog ciklusa kamenice (*Ostrea edulis*) s naglaskom na kvalitativni i kvantitativni aspekt izvaljivanja ličinki u većem broju mrijesnih serija. Analizirane su različite kombinacije fitoplanktonskih vrsta koje utječu na rast i otpornost ličinačkih stadija, s posebnim osvrtom na utjecaj vrste *Tetraselmis suecica*. Nastavljena su istraživanja mineralnog sastava ljuštura, skeleta i kalcificiranih dijelova većeg broja morskih organizama (alge, školjkaši, puževi, mnogočetinaši, rakovi vitičari, ježinci) u cilju kompletiranja mineraloške baze podataka. Ustanovljen je utjecaj tributilkositra na procese biomineralizacije i promjene mineralnog sastava egzoskeleta rakova vitičara *Balanus amphitrite* i *B. perforatus*. Započelo je istraživanje utjecaja tributilkositra na pojavu imposeksa i proces biomineralizacije u populaciji puža *Hexaplex trunculus* s rovinjskog područja.

Research programme and results:

This project aimed to assess the biodiversity of benthic flora and fauna in the sensitive, endangered, and insufficiently investigated parts of the ecosystem. The research was focused on benthic macroflora, meio- and macrofauna. The area affected by the algae *Caulerpa taxifolia* (Malinska, Krk island) was reduced for about 90 % in comparison to the previous years, probably due to a prolonged period of low winter temperatures. The latent phase was recorded up to mid July, when *Caulerpa* began a sporadic growth within the area investigated. The start of the growing season was overdue by a month and half. During autumn, a significant decrease in the number of algal fronds (666 vs. 2160 fronds/m²) and standing crop (38 vs. 243 g dry weight/ m²) was found out; the fronds growth was slowed down and algal vitality declined in comparison with the previous years. Spatial distribution of meio- and nematofauna in the northern Adriatic offshore area and shallow subtidal zone in the vicinity of Rovinj mainly depended on the granulometric composition of the sediment. Mixed sediment types (silty-sand, sandy-silt and clayey-sandy-silt), both in the deeper region (depths ~ 30 m) and shallow coastal area (depths < 10 m), were characterized by a similar qualitative and quantitative composition of meiobenthos, and distinguished from gravely and coarse sands by a higher abundance and lower biodiversity. The highest abundance and diversity values were recorded for the medium-granulated sand. The seasonal fluctuations in abundance of several meiofauna taxocenes did not influence the dynamics of the community. Therefore, the temporal distribution of the meiobenthos during the one-year period is considered to be stable. By collecting and processing of samples from poorly known biotopes, regarding to insufficiently investigated biocenosis in the "Lakes" and on the outer stations of the coastal area in the aquatorium of the National park "Mljet" the investigation of the bryozoan fauna was completed. Concerning the overall biodiversity of the National Park area, a contribution of this taxonomic group was analyzed. The study on the life and rearing cycle of the oyster (*Ostrea edulis*) was

completed. The emphasis was given to the qualitative and quantitative aspects of larval spawning in a rather high number of spawning lines. The influence of different phytoplankton species affecting the larval growth and resistance was studied. Special attention was paid to the influence of *Tetraselmis suecica*. Mineral components in different marine organisms (algae, bivalves, snails, polychaetes, barnacles and sea-urchins) were studied using biological and instrumental methods. The influence of TBT on the biomineralization process and changes in the mineral composition of shell-plates in barnacles *Balanus amphitrite* and *B. perforatus* was established. Research of TBT influence on imposex and biomineralization in the snail *Hexaplex trunculus* population from the Rovinj coastal area was started.

MEHANIZAM DUGOROČNIH PROMJENA U EKOSUSTAVU JADRANSKOG MORA

MECHANISM OF LONG-TERM CHANGES IN THE ADRIATIC SEA ECOSYSTEM

Voditelj teme: dr. sc. Danilo Degobbis

Tel: ++385 52 804 744 e-mail: degobbis@cim.irb.hr

Suradnici na temi:

Maria Blažina, dipl. inž. kem., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
 Danilo Degobbis, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
 Tamara Đakovac, dipl. inž. kem., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
 Dragica Fuks, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica
 Ingrid Ivančić, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
 Romina Kraus, magistrica oceanologije, znanstvena novakinja
 Jadranka Krstulović, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
 Danijela Milić, dipl. inž. biol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja
 Mirjana Najdek, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
 Osvin Pečar, dipl. inž. biol., mlađi asistent, znanstveni novak
 Robert Precali, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
 Tomislav Radić, magistar oceanologije, znanstveni novak
 Nenad Smodlaka, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik
 Nastjenjka Supić, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica

Tehnički suradnici:

Ana Bakota, samostalna tehničarka
 Ivan Korenić, samostalni tehničar
 Romano Rabak, samostalni tehničar

Program rada i rezultati na temi:

Opisni model mehanizma dugoročnih promjena u ekosustavu sjevernog Jadrana provjerava se i nadograđuje podacima pokusa *in situ* i u laboratoriju, te stalnim praćenjem u jadranskom ekosustavu u okviru Programa trajnog istraživanja "Istraživanje procesa i ekoloških odnosa u Jadranu" (tema 00981303), Projekta "Mehanizam dugoročnih promjena u ekosustavu Jadranskog mora" (0098111), Projekta "Jadran", te Projekta MAT. Od listopada 2002. započeo je rad na projektu ADRICOSM. Stečenim saznanjima procjenjuje se relativna važnost prirodnih (prvenstveno klimatskih) i antropogenih utjecaja na ekosustav, trend eutrofikacije, te uloga ovih procesa u neuobičajenim pojavama, kao što su iznimno intenzivni cvatovi fitoplanktona, prekomjerno stvaranje sluzavih nakupina ("cvjetanje mora") i razmnožavanje planktonskih organizama, anoksije u pridnenom sloju i sl. Dobiveni podaci korisni su i za procjenu veličine bioloških resursa. Tijekom 2002. mjereni su osnovni fizički, kemijski i biološki oceanografski parametri, hranjive soli, prozirne egzopolimerne čestice (TEP), sastav zajednica fitoplanktona i mikrobne petlje, te primarna i sekundarna proizvodnja organske tvari, uz sakupljanje i analizu "morskog

snijega" i sluzavih megaagregata za 20 krstarenja u otvorenim vodama sjevernog Jadrana (14 u području između Rovinja i ušća rijeke Po i 6 između Poreča i Venecije), te 15 u obalnim područjima zapadne Istre, Kvarnera, Riječkog i Bakarskog zaljeva, te Podvelebitskog kanala. Tijekom krstarenja prikupljeni su i obrađeni video zapisi vodenog stupca i dna. U priobalnom moru provjeravani su kriteriji za procjenu ekološkog stanja (shodno Okvirnoj direktivi o vodama EU) prema stupnju eutrofikacije primjenom trofičkog indeksa (TRIX) i drugih DPSIR indikatora. Unatoč niskom donosu hranjivih soli rijekom Po, u siječnju 2002. godine zabilježen je intenzivan cvat dijatomeje *Asterionellopsis glacialis* (nije uočen od 1966.). Uz izraženiji transport zaslađene vode prema istoku, koji je opažen već u ožujku, prevladavale su vrste roda *Chaetoceros* (prvenstveno neidentificirana skupina jedne ili više vrsta iz roda *Chaetoceros*), te su izmjerene najviše koncentracije prozirnih egzopolimernih čestica (TEP) u zadnje četiri godine. Vrtložno strujanje, koje se 2002. uspostavilo ranije nego inače, pogodovalo je povećanju proizvodnje organske tvari sve do istočnih dijelova sjevernog Jadrana, ali ne i u obalnim vodama zapadne Istre gdje je proizvodnja bila uglavnom niska tijekom cijele godine. Stvaranjem anticiklonalnog sustava cirkulacije u sjevernom Jadranu, u kojem se zadržavaju zaslađene vode, pokrenuta je i Istarska obalna protustruja. U kasno proljeće donosi slatke vode doveli su do uobičajenih fitoplanktonskih cvatova u zapadnim vodama, te su se smanjile i koncentracije TEP-a, usporedo sa stvaranjem sluzavih megaagregata ("cvjetanje mora"). Tijekom ljeta brojnost cijanobakterija (do 80% biomase ukupnog pikoplanktona), bila je znatno viša nego što je uobičajeno, ali je takav debalans u mikrobnoj petlji opažen i u prošlosti prilikom pojave "cvjetanja mora". Osim toga cilijati (predatori piko- i nanofrakcije planktona) na većem dijelu transekta bili su skoro odsutni, što ukazuje da je stvorena organska tvar u većoj mjeri kružila unutar mikrobne petlje. Iako je u većini agregata od polovice lipnja dominirala epipelnička dijatomeja *Cylindrotheca closterium*, kromatografskom analizom bakterijskih masnih kiselina utvrđeno je da je sluzavi materijal bio svježije stvoren, jer nije bio koloniziran specifičnim bakterijskim skupinama ili je tek bio u početnoj fazi degradacije (početak kolovoza). Krajem kolovoza ponovo su uzorkovani svježije nastali agregati. Pretpostavlja se da *Cylindrotheca closterium* osim što kolonizira agregate sudjeluje aktivno i u njihovom nastajanju. U rujnu se povećala fitoplanktonska biomasa sve do istočnog dijela sjevernog Jadrana, te su heterotrofne bakterije dostigle maksimalnu aktivnost. Nagomilavanje organske tvari već od kraja zime dovelo je do znatne potrošnje kisika u ekosustavu sjevernog Jadrana, odnosno do izražene hipoksije u pridnenom sloju većeg dijela područja.

Research programme and results:

The descriptive model of long-term changes in the ecosystem of the northern Adriatic Sea has been verified and improved by monitoring of the Adriatic ecosystem, laboratory and *in situ* experiments in the framework of the program of long-term research "Research of processes and ecological relationships in the Adriatic" (00981303), the project "Mechanism of the long-term changes in the Adriatic Sea ecosystem" (00981111), Project "Jadran" and Project MAT. The Project ADRICOSM started in December 2002. The results will contribute to the estimation of the relative importance of natural (primarily climatic) and anthropogenic influences on the ecosystem, eutrophication trends and the role of this process in unusual phenomena that occur in the Adriatic Sea (e.g. mucilage and anoxia events). During 2002, physical, chemical and biological oceanographic parameters, nutrients, transparent exopolymer particles (TEP), phytoplankton and microbial loop composition, primary and secondary production rates, marine snow and mucilaginous aggregate samples were analyzed during 20 cruises on the open northern Adriatic waters (14 at the Rovinj - Po delta profile and 6 between Poreč and Venice) and 15 cruises in the coastal region of Istria, Kvarner, Rijeka and Bakar bays and Podvelebitki kanal. During cruises video records of the water column and bottom were taken. The criteria

for the evaluation of the ecological condition and eutrophication status (water framework directive EU) were checked in coastal sea areas by TRIX and other DPSIR indicators. Although the input of nutrients by the Po River was low in January 2002, an intense bloom of *Asterionellopsis glacialis* occurred (not observed since 1966). A significant transverse transport of diluted water toward the east occurred in March with a dominance of *Chaetoceros* species. At that time the highest concentration of TEP in the last four years was also measured. The eddy circulation was established earlier than usual and supported the enhanced production of organic matter in the eastern part of northern Adriatic although not in the Istrian coastal waters where the production was low. The accumulation of diluted water was further supported by the formation of an anticyclonal circulation and the Istrian coastal countercurrent (ICCC). In late spring a freshwater input resulted in usual phytoplankton blooms in the western waters, TEP concentration decreased at the same time as the mucilaginous aggregates appeared. During summer the cyanobacteria abundance (up to 80 % of total picoplankton) was significantly higher than usual. Such an unbalance in the microbial loop occurred during mucilage events. In addition, ciliates (predators of pico- and nanofraction) on the major part of the transect were almost absent indicating an organic matter flux mainly inside the microbial loop. Although most aggregates since late June were dominated by the epipelagic diatom *Cylindrotheca closterium*, the GC/MS analysis of bacterial fatty acids showed that the mucilaginous matrix freshly formed was not colonized with specific bacterial groups or ageing (beginning of August). At the end of August freshly formed aggregates were sampled again. It was assumed that *Cylindrotheca closterium* not only colonises the aged aggregates but also actively participate in mucilage production. In September the phytoplankton biomass increased toward the eastern part of the northern Adriatic and heterotrophic bacteria achieved a maximum activity. The accumulation of organic matter during the entire year caused a significant oxygen depletion in the northern Adriatic ecosystem and marked hypoxia in the near-bottom layer of most part of the region.

SATELITSKA DETEKCIJA I MATEMATIČKO MODELIRANJE JADRANA REMOTE SENSING AND MATHEMATICAL MODELING OF THE ADRIATIC

Voditelj teme: dr. sc. Milivoj Kuzmić

Tel: ++385 (0)1 456 1139 e-mail: kuzmic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Ivica Janeković, magistar oceanol. znanosti, asistent

Valter Krajcar, doktor fiz. znanosti, viši asistent

Program rada i rezultati na temi:

Bitna odrednica teme bila je njena utemeljenost na metodološkom tronošcu koji čine teorija, empirija i računalne simulacije. Empirijska sastavnica uključivala je prikupljanje arhiviranih, te novih *in situ* i daljinskih (satelitskih) podataka, a računalne su simulacije obavljane uporabom nelinearnog, trodimenzionalnog, hidro-dinamičkog matematičkog modela. U završnoj godini programa na modelerskom planu aktivnost je bila usmjerena na matematičko modeliranje i asimilaciju empirijskih podataka o morskim mijenama Jadranskog mora. Rabljen je matematički cirkulacijski model Quoddy uz primjenu postupka inkrementalne asimilacije. Kroz završni niz računalnih eksperimenata privedeno je kraju istraživanje djelovanja dominantne dnevne (K1) i poludnevne (M2) komponente plimnog potencijala. Rezultati simulacija pokazali su značajna poboljšanja u usporedbi s rezultatima prijašnjih istraživanja ovog problema. Na empirijskom planu primijenjene su i uspoređene dvije metode (po Wunsch i Fominu) određivanja apsolutnih geostrofičkih struja, pri čemu je Fominova metoda dala rezultate bliže odgovarajuće filtriranim vrijednostima eulerijanskih mjerenja

struja. Rezultat je relevantan u kontekstu istraživanja dugoročnih promjena hidrografskih svostava i strujanja u sjevernom Jadranu.

Research programme and results:

This research theme was founded on the methodological tripod consisting of theory, experiment and computer simulations. The empirical part included the collection of archived and new *in situ* and remotely sensed data; computer simulations were performed using a non-linear, three-dimensional, hydrodynamic model. In the final year of the program the research activity was focused on mathematical modelling and assimilation of tidal data. A use was made of the mathematical, circulation model Quoddy, and an incremental assimilation procedure. The work centred on the dominant diurnal (K1) and semi-diurnal (M2) components of the tidal potential was completed in the final sequence of numerical experiments. Results of the simulations have shown a significant improvement over the previously published research of this problem. On the empirical side two methods of calculating absolute geostrophic currents (due to Wunsch and Fomin) were applied and compared; the Fomin method produced results closer to the appropriately filtered values of Eulerian current measurements. This result is particularly relevant in the research framework of long-term changes in hydrographic characteristics and circulation of the northern Adriatic.

**PROGRAMIRANE BIOSINTEZE I GENOTOKSIČNI RIZIK
PROGRAMMED BIOSYNTHESIS AND GENOTOXIC RISK**

Voditelj teme: dr. sc. Renato Batel

tel: ++385 (0)52 804 729 e-mail: batel@cim.irb.hr

Suradnici na temi:

Renato Batel, doktor. kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Nevenka Bihari, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Milena Mičić, doktorica biol. znanosti, viša asistentica
Željko Jakšić, doktor biotehn. znanosti, viši asistent
Maja Fafanđel, doktorica biol. znanosti, viša asistentica
Bojan Hamer, doktor biol. znanosti, viši asistent

Tehnički suradnik:

Draško Maros, samostalni tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Werner, E.G. Müller, doktor biol. znanosti, red. profesor, Odjel za primijenjenu molekularnu biologiju, Institut za fiziološku kemiju, Sveučilište Johannes Gutenberg, Mainz, Njemačka
Rudolf K. Zahn, doktor med. znanosti, profesor em., Akademija znanosti i literature, Mainz, Njemačka

Program rada i rezultati na temi:

Istraživana je indukcija gena uključenih u popravak DNA, programiranu staničnu smrt i aktivaciju genotoksičnih spojeva. Nastavljena su istraživanja utjecaja modelnih zagađivala na ser/tre kinazu morske spužve *Suberites domuncula*, te indukcije stresnog proteina Hsp70 dagnje *Mytilus galloprovincialis* kao biomarkera zagađenja organskim spojevima i metalima. Izmjerena su oštećenja DNA u škrgama dagnji tzv. FAST MIKROMETODOM na 30-ak postaja duž jadranske obale od Limskog kanala do Rijeke Dubrovačke, te ustanovljen smanjeni integritet DNA na postajama pod utjecajem urbanog i industrijskog otpada. U okviru hrvatskog nacionalnog monitoring programa analizirana je toksičnost i genotoksičnost uzoraka morske vode. Nalazi ukazuju na povećanu opterećenost mora toksičnim i/ili genotoksičnim spojevima u

ljetnim mjesecima u odnosu na zimske u područjima najveće antropogene djelatnosti (utjecaj urbanog i industrijskog otpada).

Research programme and results:

The scientific work was focused on investigations of mechanisms of interaction of living cells and pollutants on molecular and cellular levels, as well as on the genotoxic risk assessment in the marine environment. Special emphasis was devoted to inductions of genes included in DNA repair, programmed cell death and genotoxin activation. The effect of model contaminants on ser/thre kinase in the marine sponge *Suberites domuncula* as well as the induction of the stress protein Hsp70 in the mussel *Mytilus galloprovincialis* as a biomarker of pollution was investigated. An increased DNA damage in gills of mussels living on polluted hot spots was detected using the FAST MICROMETHOD. The toxicity and genotoxicity of seawater was analysed at 30 sampling sites along the Adriatic coast from Limski kanal to Rijeka Dubrovačka. Increased toxic and/or genotoxic impacts were detected in summer at sampling sites with higher anthropogenic activities.

**TOKSIČNOST I BIOKEMIJSKI ODGOVOR ORGANIZAMA NA ZAGAĐENJE
TOXICITY AND BIOCHEMICAL RESPONSE OF ORGANISMS ON POLLUTION
IMPACT**

Voditelj projekta: dr. sc. Bartolo Ozretić

Tel: ++385 (0)52 804 717 e-mail: bozretic@cim.irb.hr

Suradnici na projektu:

Bartolo Ozretić, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Siniša Petrović, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik (do 15.12.2002.)

Lorena Semenčić, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Vanjske suradnice:

Mirjana Ozretić, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica, u mirovini

Dragica Bobinac, doktorica medicinskih znanosti, izvanredna profesorica, u mirovini

Program rada i rezultati na temi:

Za praćenje rasta i razvoja lubina u uzgoju kao i u toksikološkim studijama analizirani su hematološko-biokemijski parametri u krvi lubina te su primjećene sezonske varijacije ukupnih proteina i lipida. Korištenjem selektivne inaktivacije izoenzima AAT iz tkiva cipla razvijen je test za određivanje izoenzima u serumu i u homogenatima tkiva. Bitan sastojak antivegetativnih premaza je bakar, a njegova toksičnost ispitana je na embrionalnom razvoju ježinaca. Metoda utvrđivanja toksičnosti bakra na sintezu DNA i ehinokroma pogodna je za biomonitoring u lukama i marinama. U okviru programa "Jadran" mjerena je stabilnost lizosomalne membrane i metalotioneina u probavnoj žljezdi dagnji kao biomarkera općeg i specifičnog stresa. Mjerena je aktivnost enzima aspartat aminotransferaze i acetilkolinesteraze u škrgama i probavnoj žljezdi dagnji zbog mogućeg poremećaja u metabolizmu zbog zagađenja organofosfornim spojevima.

Research programme and results:

The control of growth rate in farmed sea bass and in toxicological studies haematological and biochemical parameters were analysed in the blood and seasonal variations were observed in total proteins and lipids. Using selective inactivation of AAT isoenzymes the test for measurement of isoenzymes activity in sera and tissue of grey mullet was developed. The copper is one of essential antivegetative additives in the antifouling paints and their toxicity were investigated on embryonal development of the sea urchin. The method for measuring toxicity of copper on

delayed synthesis of DNA and echinochrome is recommended for biomonitoring in the harbours and marinas.

In biomonitoring programme "Jadran" the lysosomal membrane stability and metallothionein production in the digestive gland of mussels were measured as indicator of general and specific stress. The measurement of enzyme activity of aspartate aminotransferase and acetylcholinesterase in digestive gland and gills of mussels used as biomarkers for metabolic disorder due to pollution with organophosphorus compounds.

EKOFIZIOLOŠKA ISTRAŽIVANJA I TRANSPORTNI MEHANIZMI METALA ECOPHYSIOLOGICAL STUDIES AND TRANSPORT MECHANISMS OF METALS

Voditelj teme: dr. sc. Čedomil Lucu

Tel. ++385 (0)52 804 725 e-mail:lucu@cim.irb.hr

Suradnici na temi:

Massimo Devescovi, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Čedomil Lucu, doktor biol. znanosti, znanstveni savjetnik

Dijana Pavičić-Hamer, magistrica biol. znanosti, asistentica

Tehnički suradnik:

Bela Jagić, samostalni tehničar

Suradnik iz druge ustanove:

Gert Flik, profesor, Sveučilište u Nijmegenu, Nijmegen, Nizozemska

Program rada i rezultati na temi:

Istraživačka tema nudi nove spoznaje o ekofiziološkim mehanizmima morskih organizama o transportu biološki aktivnih iona i toksičnih metala u tragovima u funkciji promjena čimbenika okoline. Istraživanjima želimo odgovoriti na pitanje kako morski organizmi podešavaju osmoregulacijske mehanizme pod utjecajem stresa i u povoljnim životnim uvjetima. Utvrđena je korelacija između specifične aktivnosti enzima Na,K-ATPaze i ionoregulacijskog kapaciteta (razlika u koncentraciji natrija u hemolimfi i morskoj vodi) u 12 vrsti morskih i bočatih rakova – osmoregulatora i osmokonformera ($r = 0.65$). U recentnih vrsti rakova osmoregulatora dolazi do aktivacije enzima Na,K-ATPaze u razrijeđenoj morskoj vodi, dok u onih čija je geološka povijest starija, uglavnom konformera, ne dolazi do aktivacije enzima. Aktivacija Na,K-ATPaze je preduvjet migracija desetonožnih rakova u bočate i slatke vode.

Research programme and results:

We studied ecophysiological mechanisms of biologically active ions and trace metal transport in marine organisms under conditions of environmentally induced changes. How do marine organisms regulate transport mechanisms under optimum and stress conditions. One of the major steps in the evolution of homeostatic control in osmoregulating Crustacea is the development of ionic and osmotic composition of the extracellular fluids different from seawater. In the most primitive osmotic conformers, the internal environment is almost totally dependent upon the external one. During acclimation in narrow salinity ranges the Na,K-ATPase is not involved in the antisosmotic regulation of the haemolymph, but rather plays a role in maintaining the intracellular homeostasis. Based on literature data and our results, we have reported a correlation coefficient of 0.65 between specific activity of Na, K-ATPase and a sodium difference between haemolymph and seawater, between 12 species of osmoregulating and osmoconforming Crustacea. During evolution, hyperosmoregulating Crustacea have achieved internal osmolyte gradients

generated by Na, K-ATPase and lowering their surface gill permeability. However, these adaptive characteristics are not present in marine osmoconforming Crustacea, restraining them to migrate into brackish water habitats.

Nakon 1. 7. 2002. u okviru Zavoda provodila su se istraživanja u okviru sljedećih znanstvenoistraživačkih projekata:

MEHANIZAM DUGOROČNIH PROMJENA U EKOSUSTAVU JADRANSKOG MORA

MECHANISM OF LONG-TERM CHANGES IN THE ADRIATIC SEA ECOSYSTEM

Voditelj projekta: dr. sc. Danilo Degobbis

Tel: ++385 (0)52 804 744

e-mail: degobbis@cim.irb.hr

Suradnici na projektu:

Mirjana Fonjak, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tea Gluhak, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Ljiljana Iveša, magistrica oceanol. znanosti, asistentica

Davorin Medaković, doktor biol. znanosti, viši asistent

Barbara Mikac, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 1.8.2002.)

Vedrana Nerlović, dipl. inž. pomorsko-ribarske tehnol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Ana Travizi, doktorica biol. znanosti, viša asistentica

Tehnička suradnica:

Rosella Sanković, samostalna tehničarka

Program rada i rezultati na projektu:

Jedan je od glavnih ciljeva u sklopu projekta "Mehanizam dugoročnih promjena u ekosustavu Jadranskog mora" (0098111) upoznavanje s aktualnim stanjem bentoskih naselja u osjetljivim, ugroženim i zaštićenim područjima ekosustava. S ciljem utvrđivanja dugoročnih promjena u strukturi i biološkoj raznovrsnosti bentoskih zajednica, rezultati rada na ovom projektu bit će uspoređeni s rezultatima istraživanja provedenih prije 10 i/ili 20 godina. Istraživanje će se temeljiti na kvalitativnom i kvantitativnom sastavu makroflore, mezo- i makrofaune. Usporednom analizom bit će obuhvaćeni populacioni (gustoća, dominantnost, učestalost, prostorna raspodjela, uzrasna struktura) i cenološki parametri (taksonomski sastav, brojnost, bogatstvo vrsta, ravnomjernost raspodjele, bioraznolikost, trofičke kategorije i floristička/faunistička sličnost). Posebna će se pozornost posvetiti staništima izloženim utjecaju akutnog ili kroničnog stresnog stanja (eutrofikacija, pojave anoksije i hipoksije, unošenje invazivnih i alohtonih vrsta, antropogeni utjecaj), te organizmima (makrofitske alge, morske cvijetnice, oblici, školjkaši, mnogočetinaši, bodljikaši) koji se općenito mogu smatrati dobrim pokazateljima poremećaja ili oporavka. S obzirom na rasutući trend destabilizacije, zapažen tijekom posljednjih 20-ak godina u sjevernojadranskom dijelu ekosustava, očekuje se da će se bentoske zajednice obrađene za potrebe ovoga projekta odlikovati smanjenjem biološke raznolikosti, promjenama trofičke strukture; gubitkom osjetljivijih vrsta, smanjenjem njihovih naselja ili slabijom zastupljenošću, te s druge strane porastom udjela tolerantnih i oportunističkih vrsta u ukupnoj strukturi zajednica. Međutim, u usporedbi s kasnim 80-im i 90-im godinama, na razini pojedinih taksocena mogu se očekivati i promjene suprotnog predznaka, tj. repopulacija pojedinih vrsta i revitalizacija pridnenih

zajednica. Jedan od prioriteta zadatka unutar programa je procjena pravca i veličine promjena u bentoskim zajednicama (kvalitativni i kvantitativni aspekt), te njeno dovođenje u vezu s globalnim i dugoročnim promjenama u ekosustavu.

Research programme and results:

One of the main objectives within the project "Mechanism of the long-term changes in the Adriatic Sea ecosystem" (0098111) is the screening of the actual state of benthic communities in sensitive endangered and protected areas of the ecosystem. In order to reveal long-term changes in the structure and biodiversity of benthic communities, recent results will be compared with those from 10 and/or 20 years ago. The qualitative and quantitative composition of macroflora, meiofauna and macrofauna will be studied. A comparative analysis will be focused to main population parameters (density, dominance, frequency, spatial distribution, age classes) and to coenological parameters (composition, abundance, species richness, evenness, biodiversity, feeding categories and similarity). Special attention will be paid to biotopes under acute and/or chronic stress conditions (eutrophication, hypoxic and anoxic events, introduction of invasive species, anthropogenic impact) and to organisms (macrophytic seaweeds, seagrasses, nematodes, bivalves, polychaetes, echinoderms) generally considered to be suitable bioindicators of a disturbance or recovery process. Due to a increased destabilization in the northern Adriatic during the last two decades, one can expect that benthic communities which will be analysed for the purpose of this project will be displayed by a decrease in biodiversity, changes of the trophic structure, disappearance or diminishing of sensitive species accompanied by a reduction of their settlements, as well as by an increase of tolerant and/or opportunistic species in the overall community structure. However, in comparison with the late 80's and 90's, an opposite trend of alterations, *i.e.* repopulation of certain species and full recovery of benthic communities couldn be expected. A direction and extent of alterations in benthic communities, including their relation to global and long-term changes of the ecosystem will be one of the main project issues.

PROGRAMIRANE BIOSINTEZE I GENOTOKSIČNI RIZIK PROGRAMMED BIOSYNTHESIS AND GENOTOXIC RISK ASSESSMENTS

Voditelj projekta: dr. sc. Renato Batel

Ttel: ++385 (0)52 804 729 e-mail: batel@cim.irb.hr

Suradnici na projektu:

Renato Batel, doktor. kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Nevenka Bihari, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Maja Fafandel, doktorica biol. znanosti, viša asistentica
Bojan Hamer, doktor biol. znanosti, viši asistent
Željko Jakšić, doktor biotehn. znanosti, viši asistent
Milena Mičić, doktorica biol. znanosti, viši asistent
Mauro Štifanić, magistar biol. znanosti, asistent (od 21.6.2002.)

Tehnički suradnik:

Draško Maros, samostalni tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Werner, E.G. Müller, doktor biol. znanosti, red. profesor, Odjel za primijenjenu molekularnu biologiju, Institut za fiziološku kemiju, Sveučilište Johannes Gutenberg, Mainz, Njemačka (konzultant)

Rudolf K. Zahn, doktor med. znanosti, profesor em., Akademija znanosti i literature, Mainz, Njemačka (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Dugoročni je cilj ovoga projekta istražiti mehanizme djelovanja genotoksičnih zagađivala na morske organizme na molekularnoj razini, posebno mehanizme oštećivanja i popravka DNA, te procjena genotoksičnog rizika kojemu su izloženi morski organizmi zbog onečišćenja mora. Posebna pažnja u istraživanju na projektu posvetit će se razvoju pouzdanijih molekularnih biomarkera za praćenje učinka onečišćenja i drugih stresnih čimbenika na morske organizme. Interakcije žive stanice i zagađivala na molekularnoj razini proučit će se u morskih beskralješnjaka, prvenstveno školjkaša i spužvi. Istraživanja će obuhvatiti mjerenja učinka modelnih zagađivala na promjene u staničnom ciklusu i integritetu DNA odabranih organizama u laboratorijskim uvjetima, ali i onih koji obitavaju zagađena i nezagađena područja našeg priobalja. Proučit će se i utjecaj oksidativnog i toplinskog stresa na indukciju stresnih proteina porodice Hsp70 i aktivnost sre/tre kinaze u dagnje i spužve. Započet će istraživanja genske strukture AIF locusa (allograft inflamatorni faktor) u spužvi, te sekvencioniranje pojedinih dijelova pridruženih gena. Nastavit će se pilot uzgoj spužvi u Limskom kanalu po Arcon-tehnologiji, kao i proučavanje biološke i genetičke raznolikosti u biološkoj zajednici Limskog kanala. Proučavanja toksičnosti i genotoksičnosti uzoraka morske vode bakterijskim testovima omogućit će procjenu opterećenosti priobalja, kao i analizu trendova porasta ili smanjenja opterećenja pojedinih postaja opasnim zagađivalima.

Research programme and results:

The long-term scientific work of this project has been focused on investigations of mechanisms of interaction of marine organisms and pollutants on the molecular and cellular level, as well as on the genotoxic risk assessment in the marine environment. Special emphasis will be devoted to the development and application of new biological markers in order to better predict the impact of groups of pollutants with toxic and/or genotoxic properties on marine organisms. Interactions of living cells and pollutants will be investigated in sessile marine invertebrates, mainly sponges and mussels. Investigations will include analysis of DNA integrity and cell cycles in marine invertebrates exposed to model pollutants in laboratory and environmental pollutants in field. The impact of oxidative and thermal stress on the induction of Hsp70 proteins and ser/ther kinase activity will be investigated in mussels and sponges, respectively. The genetic structure and gene sequences of the AIF locus (allograft inflammatory factor) in a marine sponge will be investigated. The group will continue its activities in pilot farming of marine sponges using the Arcon-technology, as well as its investigations of biological and genetic diversity in the national reservat Limski kanal. Measurements of toxic and genotoxic activities of sea water extracts using short term bacterial systems will provide the possibility for trend analysis in hot spots along the Croatian coast with respect to changes in their pollution loads.

FIZIOLOŠKI I BIOKEMIJSKI INDIKATORI TOKSIKOLOŠKOG STRESA U MORSKIH ORGANIZAMA

Voditelj projekta: dr. sc. Bartolo Ozretić

Tel: ++385 (0)52 804 717 e-mail: bozretic@cim.irb.hr

Suradnici na projektu:

Bartolo Ozretić, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Siniša Petrović, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik (do 15.12.2002.)

Lorena Semencić, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Vanjske suradnice:

Mirjana Ozretić, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica, u mirovini
Dragica Bobinac, doktorica medicinskih znanosti, izvanredna profesorica, u mirovini

Program rada i rezultati na projektu:

U laboratorijskim uvjetima ispitan je učinak organofosfornih pesticida diklorovosa i trichlorfona na promjenu aktivnosti AChE i AAT u ekstraktima probavne žlijezde i škrga dagnji (*Mytilus galloprovincialis*). Utvrđeno je da subletalne koncentracije tih pesticida značajno snizuju aktivnost AChE, dok iste koncentracije nisu imale značajniji utjecaj na aktivnost AAT. Procesi inhibicije su reverzibilni i već nakon 7 dana aktivnost tih enzima vraćena je na razinu kontrolne skupine. Pored mjerenja u laboratorijskim uvjetima, u rovinjskom akvatoriju izabrane su dvije postaje: kontrolna u Limskom kanalu, a u Marini postaja izložena onečišćenju, gdje su postavljene dvije skupine dagnji istog porijekla. Na tim skupinama praćeno je godišnje kolebanje aktivnosti istih enzima u odnosu na promjene temperature, saliniteta, zasićenosti kisikom, pH i ciklusa spolne aktivnosti u dagnje. Ta su mjerenja poslužila za "kalibraciju" i za optimizaciju spomenutih metoda radi primjene u biomonitoringu na raznim staništima u priobalnim vodama. Primjenom "image analyser-a" znatno je ubrzana i objektivizirana analiza histoloških preparata za procjenu stabilnosti lizosomskih membrana (LMS). Istom metodom uhodana je i analiza koncentracije lipofuscina i neutralnih masti kao biomarkera ambijentalnog stresa. U priobalnom području zapadne obale Istre i Kvarnera nastavljeno je praćenje već uhodanih biomarkera općeg stresa u probavnoj žlijezdi dagnji (LMS, lipofuscin i neutralne masti) i potvrđena je njihova značajnost za procjenu opterećenja morske vode nespecifičnim onečišćenjima.

Research program and results:

Dichlorvos and trichlorphone were applied in laboratory experimental conditions to check their effect on the activity of AChE and AAT in extracts from the digestive gland and gills of the Mediterranean mussel (*Mytilus galloprovincialis*). Sublethal concentrations of these pesticides did inhibit the activity of AChE, while the AAT activity was not significantly decreased. Besides, a control group of mussels situated in Limski kanal and a pollution exposed group was displayed the in the Rovinj marina. In both groups, annual variations of AChE and AAT were measured in relation to the changing of environmental conditions, mainly salinity, temperature, oxygen saturation and pH, and particularly in relation to their sexual and spawning cycle. These measurements were particularly necessary for the calibration and optimisation of the methods used, required for their application in biomonitoring routine in coastal waters. The PC image analysis of the histological slices has improved the speed and objectivity of the lysosome membrane stability (LMS) evaluation. The same method was as well applied to check the concentration of lipofuscin and neutral fats as biomarkers of environmental stress. Along the west Istrian and kvarnerine coastal waters we continued to measure the mentioned biomarkers (LMS, lipofuscin, neutral fats) in mussel digestive glands and their significance in biomonitoring was confirmed.

**EKOFIZIOLOŠKA ISTRAŽIVANJA I ODGOVOR NA STRES U MORSKIH ORGANIZAMA
ECOPHYSIOLOGICAL STUDIES AND STRESS RESPONSE IN MARINE ORGANISMS**

Voditelj projekta: dr. sc. Čedomil Lucu
Tel. ++385 (0)52 804 725 e-mail:lucu@cim.irb.hr

Suradnici na projektu:

Massimo Devescovi, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik
Čedomil Lucu, doktor biol. znanosti, znanstveni savjetnik
Dijana Pavičić-Hamer, magistrica biol. znanosti, asistentica

Tehnički suradnik:

Bela Jagić, samostalni tehničar

Suradnik iz druge ustanove:

Gert Flik, profesor, Sveučilište u Nijmegenu, Nijmegen, Nizozemska

Program rada i rezultati na projektu:

Ovim istraživanjima želimo odgovoriti na pitanja, da li nakon hiposmotskog stresa u gospodarstveno važnih organizama hlapova dolazi do prilagodbi u umjereno eurihalnim uvjetima, o brzini rasta hlapova od juvenilnih do odraslih tijekom faza presvlačenja. Da li je povećana aktivnost enzima Na, K-ATPase u branhijalnom kompleksu nakon hiposmotskog stresa rezultat povećane sinteze katalitičke alfa podjedinice enzima? Istražit ćemo indukciju ugljikove anhidraze, važnog enzima u respiraciji, acido-baznoj regulaciji i opskrbi osmolita simpornim i antiportnim ionima. Nove spoznaje o aktivaciji enzima Na, K-ATPaze od temeljne su važnosti za uspoređivanje univerzalnog mehanizma s onima u kralježnjaka uključiv i čovjeka (biomedicina). Predikcije o rastu hlapova dat će važan odgovor koji će se moći primijeniti u gospodarenju morem. Očekuju se prijedlozi u zakonu zaštite prirodnih dobara i unaprijeđenja prirodne repopulacije hlapova u njihovim staništima. Nastavak istraživanja djelovanja toksičnih metala u morskim organizmima. Ustanovili smo aktivaciju enzima ugljikove anhidraze tijekom prilagodbi hlapova u razrijeđenoj morskoj vodi. U tijeku su istraživanja indeksa kondicije hlapova – odnos između koncentracije bakra u hemolimfi i mase tkiva.

Research programme and results:

By the proposed project we will evaluate the effect of hyposmotic stress on commercially important lobsters and their adaptation under moderate euryhaline conditions. Furthermore, the growth rate during moulting phases from juvenile to adults will be studied. In the branchial cavity tissues we will investigate the induction of the alpha catalytic subunit of the enzyme Na, K-ATPase. By comparative studies of the regulatory mechanisms of Na, K-ATPase in invertebrates with those in vertebrates, we will try to advance them to biomedically important knowledge. Moreover, the aim of the project is to study growth patterns of the lobsters from juvenile to adults. Our results could be applied in the field of legislation as well as in policy of repopulation of the lobsters in natural habitats. After acclimation of lobsters to dilute seawater, activation of carbonic anhydrase in the branchial cavity tissues was found. In progress are studies on the relationship between haemolymph copper concentration and tissue weights as a reliable method to determine nutritional conditions of lobsters.

TAJNIŠTVO, AKVARIJ, ISTRAŽIVAČKE PLOVNE JEDINICE, SLUŽBA ODRŽAVANJA**Administrativno i tehničko osoblje:**

Alemka Hrelja, tajnica
Džemila Jošić, sezonska blagajnica
Dolores Smoljan, sezonska blagajnica (1.6.-15.12.2002.)
Dragoslav Turković, voditelj Akvarija

Dario Devescovi, voditelj IB "Burin"
Igor Jergović, voditelj broskog stroja
Rudolf Marić, zapovjednik IB "Vila Velebita"
David Soldatić, mornar-kuhar
Milan Stupar, kormilar (od 1.8.2002.)
Milan Antić, električar
Ema Damijanić, spremačica
Vesna Čačić, spremačica

Prikaz rada:

Tajništvo je vodilo prepisku, sudjelovalo u pripremi spisa i organizaciji domaćih i međunarodnih sastanaka, te vodilo financijsko-administrativne poslove (platni promet, nabavke, obračuni naknada zaposlenicima, personalna dokumentacija i dr.). Istraživački brod "Vila Velebita" korišten je za terenski rad u okviru programa i projekata Ministarstva znanosti i tehnologije i Ministarstva zaštite okoliša i prostornog uređenja. Korišten je i u terenskim istraživanjima hrvatsko-talijanske suradnje (ICRAM, IRPEM). Istraživačka brodica "Burin" isto je tako korištena za terenski rad u okviru programa Ministarstva znanosti i tehnologije. Iznajmljivan je domaćim i stranim studentskim grupama na terenskoj nastavi u Rovinju. Od 10. svibnja do 15. listopada 2002. godine boravilo je 15 studentskih grupa sa sveučilišta i gimnazija iz Hrvatske (Zagreb, Osijek), Austrije (Beč, Salzburg) i Njemačke (München, Bayreuth, Weingarten, Stuttgart, Hagen, Bonn, Hamburg) sa sveukupno 320 učenika. Izložbeni akvarij posjetilo je oko 70.000 gostiju. Služba održavanja obavljala je manje popravke u i na zgradi (elektro- i vodovodne instalacije, bijeljenje), prevozila istraživače i opremu, brinula o grijanju, čistila zgradu i društveni prostor u "Domu".

PRILOZI**Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:**

1. Bihari, Nevenka; Batel, Renato; Jakšić, Željko; Mueller, W.E.G.; Waldmann, Petra; Zahn, R.K. Comparison between the Comet assay and Fast Micromethod for measuring DNA damage in HeLa cells. // *Croatica chemica acta*. 75 (2002), 3; 793-804.
2. Bihari, Nevenka; Hamer, Bojan; Jakšić, Željko; Fafandžel, Maja; Mičić, Milena; Batel, Renato. Application of alkaline elution, fast micromethod and flow cytometry in detection of marine contamination. // *Cellular and molecular biology*. 48 (2002), 4; 373-377.
3. Krasko, Anatolij; Schroder, Heinz C; Batel, Renato; Grebenjuk Vladislav, A; Steffen, Renate; Muller, Isabel M; Muller, Werner EG. Iron induces proliferation and morphogenesis in primmorphs from the marine sponge *Suberites domuncula*. // *DNA and cell biology*. 21 (2002), 1; 67-80.
4. Medaković, Davorin; Slapnik, Rajko; Popović, Stanko; Gržeta, Biserka. Mineralogy of shells from two freshwater snails *Belgrandiella fontinalis* and *B. kuesteri*. // *Comparative biochemistry and physiology part A*. 134 (2003); 121-127.
5. Mičić, Milena; Bihari, Nevenka; Jakšić, Željko; Mueller, Werner E.G.; Batel, Renato. DNA damage and apoptosis in mussel *Mytilus galloprovincialis*. //

Marine environmental research. 53 (2002); 243-262.

6. Muller, Werner EG; Krasko, Anatolij; Skorokhod A. Bunz C.; Grebenjuk VA. Steffen Renate; Batel, Renato; Schroder Heinz C. Histocompatibility reaction in tissue and cells of the marine sponge *Suberites domuncula* in vitro and in vivo: central role of the allograft inflammatory factor 1. // *Immunogenetics*. 54 (2002), 1; 48-58.
7. Najdek, Mirjana; Degobbis, Danilo; Mioković, Danijela; Ivančić, Ingrid. Fatty acid and phytoplankton composition of different types of mucilaginous aggregates in the northern Adriatic. // *Journal of plankton research*. 24 (2002), 5; 429-441.
8. Stupnišek-Lisac, Ema; Gazivoda, Anita; Madžarac, Maria. Evaluation of non-toxic corrosion inhibitors for copper in sulphuric acid. // *Electrochimica acta*. 47 (2002); 4189-4194.

Ostali radovi u časopisima:

1. Fafanđel, Maja; Bihari, Nevenka; Muller, W.E.G; Batel, Renato. Accumulation and removal of cyclobutane pyrimidine dimers in *Isochrysis galbana* cells exposed to artificial UV and solar irradiation. // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 4; 451-456.
2. Peharda, Melita; Hrs-Brenko, Mirjana; Bogner, Danijela; Lučić, Davor; Onofri, Vladimir; Benović, Adam. Spatial distribution of live and dead bivalves in saltwater lake Malo jezero (Mljet National Park). // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 2; 115-122.
3. Peharda, Melita; Hrs-Brenko, Mirjana; Onofri, Vladimir; Lučić, Davor; Benović, Adam. A visual census of bivalve distributions in the saltwater lake Malo jezero (Mljet National Park, South Adriatic Sea). // *Acta adriatica*. 43 (2002), 1; 65-75.
4. Supić, Nastjenjka; Ivančić, Ingrid. Hydrographic conditions in the northern adriatic in relation to surface fluxes and Po river discharge rates (1966-1992). // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 2; 203-209.
5. Viličić, Damir; Marasović, Ivona; Mioković, Daniela. Checklist of phytoplankton in the eastern Adriatic Sea. // *Acta botanica croatica*. 61 (2002), 1; 57-91.
6. Zavodnik, Nevenka; Iveša, Ljiljana; Travizi, Ana. Note on recolonisation by fucoid algae *Cystoseira* spp. and *Fucus virsoides* in the North Adriatic Sea. // *Acta adriatica*. 43 (2002), 1; 25-32.

Doktorske disertacije:

1. Jakšić, Željko. Razvoj i primjena brze mikrometode određivanja i praćenja oštećenja DNA u škrgama dagnje *Mytilus galloprovincialis* (Lamarck, 1819). Zagreb: Prehrambeno- biotehnološki fakultet, 18.7.2002., 137 str., Voditelj: Batel, Renato.
2. Fafanđel, Maja. Indukcija KRS_SD serin/treonin kinaze u morskoj spužvi *Suberites domuncula* Olivi, 1792 u uvjetima stresa. Zagreb: Prirodoslovno-matematički fakultet, 5.12.2002, 98 str., Voditelj: Batel, Renato.
3. Hamer, Bojan. Stresni proteini HSP70 u dagnje *Mytilus galloprovincialis* Lamarck, 1819 kao biološki pokazatelji onečišćenja morske vode. Zagreb:

Prirodoslovno-matematički fakultet, 5.12.2002, 129 str., Voditelj: Batel, Renato.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

Supić, N.: Long term variability of geostrophic circulation in the northern Adriatic. The case of the istrian coastal countercurrent (ICCC), 4.3.2002.
Fuks, D.: Mikrobna kontrola toka ugljika u Jadranu – Mikrobna petlja, 13.3.2002.
Ozretić, B.: Ekologija, znanost o zbrinjavanju smeća, 13.6.2002.
Petrović, S.: Odabrani biomarkeri kao pokazatelji zagađenja na području Istre i Kvarnera, 17.7.2002.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

Lucu, Č.: Potassium channels in epipodite of homarids, Department of Animal Physiology, University of Nijmegen, Nijmegen, Nizozemska, 1.7.2002.
Ozretić, B.: The use of biomarkers and biomonitoring of coastal waters, Istituto nazionale tumori, Napulj, Italija, 12.7.2002.
Medaković, D.: Znanstvena istraživanja na Anktartici, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet organizacije i informatike, Varaždin, Hrvatska, 27.9.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

Nerlović, V., Ecole Nationale Vétérinaire de Nantes (ENVN), Pays de Loire, Loire Atlantique, 15.10.2001.-1.3.2002.
Nerlović, V., Institut Français de la Recherche pour l'Exploitation de la Mer (IFREMER), Laboratoire de Génétique et Pathologie, La Tremblade, 4.3.-28.6.2002.
Nerlović, V., Institut Français de la Recherche pour l'Exploitation de la Mer (IFREMER), Direction de l'Environnement et de l'aménagement Littoral, La Tremblade, 1.7.-29.8.2002.

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje:

Lucu, Č. Sveučilište u Nijmegenu, Zavod za animalnu fiziologiju, Nijmegen, Nizozemska, 20.5.-3.7.2002.
Batel, R., Institut za fiziološku kemiju, Sveučilište Johannes Gutenberg, Mainz, Njemačka, 1-30.11.2002.
Maros, D., Institut za fiziološku kemiju, Sveučilište Johannes Gutenberg, Mainz, Njemačka, 1-30.11.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

KAVEZNI UZGOJ RIBE I OKOLIŠ
Zadar, Hrvatska, 23-24.1.2002.
Sudionik: Smolaka, N.

ADRIATIC SEA INTEGRATED COASTAL AREAS AND RIVER BASIN
MANAGEMENT SYSTEM PILOT PROJECT (ADRICOSM)
Trst, Italija, 11-12.2.2002.
Sudionik: Smolaka, N.

13th INTERNATIONAL CONFERENCE ON INFORMATION AND INTELLIGENT
SYSTEMS. WORKSHOP ON THE PROMOTION OF SCIENCE AND
COMMUNICATION ABOUT SCIENCE IN THE MEDIA
Varaždin, Hrvatska, 29.2.2002.
Sudionik: Medaković, D.

ADRIATIC SEA: ENVIRONMENT, CLIMATE AND RESOURCES
Trst, Italija: 25.3.2002.

Sudionici: Degobbis, D.; Smodlaka, N.

EEA-ETC WATER/IONET WORKSHOP ON PROGRESS ON EUROWATERNET,
INDICATORS AND STREAMLINED REPORTINGS

Atena, Grčka, 8-13.4.2002.

Sudionik: Smodlaka, N.

EUROPEAN DIRECTORY OF THE INITIAL OCEAN-OBSERVING SYSTEM
(EDIOS): FIRST WORKSHOP

Trst, Italija, 10-11.4.2002

Sudionik: Degobbis, D.

MUCILLAGINI E PESCA–ILLUSTRAZIONI DEI RISULTATI DI UNA RICERCA
SUGLI EFFETTI DELLE MUCILLAGINI NELLE ATTIVITÀ DI PESCA

Grado, Italija, 11.5.2002.

Sudionik: Smodlaka, N.

FIRST CROATIAN CONGRESS ON MOLECULAR LIFE SCIENCES

Opatija, Hrvatska, 9-13.6.2002

Sudionici: Batel, R.; Bihari, N.; Fafanđel, M.; Hamer, B.; Jakšić, Ž.; Maros, D.; Mičić, M.; Štifanić, M.

Prilozi:

Bihari, N.; Batel, R. Development of methods for DNA damage determination in marine invertebrates and their application in marine environmental biomonitoring, pozvano predavanje

Fafanđel, M.; Bihari, N.; Batel, R. Cyclobutane pyrimidine dimers detection in marine phytoplankton *Isochrysis galbana* following UV irradiation life sciences, poster

Hamer, B.; Batel, R. Heat shock proteins (HSP-70) in marine mussel *Mytilus galloprovincialis* as a biomarker of environmental contamination, poster

Jakšić, Ž.; Batel, R. DNA damage determination in gills of the mussel *mytilus galloprovincialis* Lam. (Mollusca:Bivalvia) by Fast micromethod, poster

Maros, D.; Batel, R. A simple method for sea water extraction and its application in environmental monitoring programmes, poster

Mičić, M.; Bihari, N., Batel, R. Cell cycling alternations in the blue mussel *Mytilus galloprovincialis* caused by environmental contamination, poster

Štifanić, M.; Grebenyuk, V.; Mueller, W.E.G.; Batel, R. The allograft inflammatory factor (AIF) locus in seawater sponge *Suberites domuncula*, poster

PRVI HRVATSKI KONGRES MOLEKULARNE BIOZNAOSTI

Opatija, Hrvatska, 9-13.6.2002.

Sudionica: Semenčić, L.

QUASIMEME WORKSHOP ON THE ANALYSIS OF CHLOROPHYLL *a* IN SEA WATER

Oostende, Belgija, 1-2.7.2002.

Sudionik: Precali, R.

PROGETTO DI MONITORAGGIO E STUDIO DELLE MUCILLAGINI
NELL'ADRIATICO E NEL TIRRENO (MAT). WORKSHOP "OCEANOGRAFIA
FISICA E CHIMICA DELL'ADRIATICO"

Chioggia, Italija, 16.7.2002.

Sudionici: Degobbis, D.; Precali, R.

PRVI WORKSHOP HRVATSKOG NACIONALNOG MONITORING PROGRAMA
"SUSTAVNO ISTRAŽIVANJE JADRANSKOG MORA KAO OSNOVA ODRŽIVOG

RAZVITKA REPUBLIKE HRVATSKE"

Malinska, Hrvatska, 23-26.9.2002.

Sudionici: Batel, R.; Blažina, M.; Degobbis, D.; Fuks, D.; Gluhak, T.; Ivančić, I.; Iveša, Lj.; Kraus, R.; Lucu, Č.; Mikac, B.; Najdek, M.; Ozretić, B.; Pečar, O.; Precali, R.; Smodlaka, N.; Supić, N.; Travizi, A.

PROGETTO DI MONITORAGGIO E STUDIO DELLE MUCILLAGINI NELL'ADRIATICO E NEL TIRRENO(MAT). WORKSHOP "OCEANOGRAFIA CHIMICA DELL'ADRIATICO: ANDAMENTO DELLA SOSTANZA ORGANICA NEL PERIODO GIUGNO 2001-LUGLIO 2002"

Malinska, Hrvatska, 26-27.9.2002

Sudionici: Degobbis, D.; Precali, R.

JADRANSKO-JONSKA INICIJATIVA

Bari, Italija, 5-9.10.2002.

Sudionik: Smodlaka, N.

VITH INTERNATIONAL SPONGE CONFERENCE

Genova, Italia, 29.9.-5.10.2002

Sudionik: Batel, R.

Prilog:

Schillak, L.; Holz, A.; Zucht, W.; Sidri, M.; Batel, R., Brummer, F. Open water mariculture with marine sponges in Limski kanal (Rovinj, Croatia, Northern Adriatic sea), predavanje

SECOND INTERNATIONAL CONFERENCE: OCEANOGRAPHY OF THE EASTERN MEDITERRANEAN AND BLACK SEA

Ankara, Turska, 14-18.10.2002.

Sudionici: Ahel, M.; Terzić, S.

Prilog:

Ahel, M.; Tepić, N.; Precali, R.; Terzić, S. Relationships between phytoplankton crop, primary production and accumulation of carbohydrates in the northern Adriatic, poster

Terzić, S.; Ahel, M.; Đakovac, T.; Degobbis, D. Phytoplankton responses to nutrient dynamics in the northern Adriatic as reflected by biomarker pigments, poster

ADRIATIC SEA INTEGRATED COASTAL AREAS AND RIVER BASIN MANAGEMENT SYSTEM PILOT PROJECT (ADRICOSM)

Bologna, Italija, 15-17.10.2002.

Sudionici: Lyons, D.M.; Smodlaka, N.

PROGETTO DI MONITORAGGIO E STUDIO DELLE MUCILLAGINI NELL'ADRIATICO E NEL TIRRENO (MAT). WORKSHOP "CARATTERISTICHE IDROLOGICHE E BIOLOGICHE NELL'ADRIATICO SETTENTRIONALE NEL PERIODO GIUGNO 2001-LUGLIO 2002"

Chioggia, Italija, 22-23.11.2002.

Sudionici: Degobbis, D., Precali, R., Kraus, R.

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija:

Precali, R.: Experts Consultation Meeting for MED POL Database Management, Atena, Grčka, 14-15.3.2002.

Precali, R.: Experts Consultation for MED POL Eutrophication Monitoring Strategy, Atena, Grčka, 20-21.9.2002.

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Batel, R.; Bažulić, D.: Razrada i validacija HPLC metode određivanja sulfadiazina i trimetoprima u tkivima različitih životinja (Utvrđivanje mogućih štetnih učinaka sulfadiazina i trimetoprima kroz promjenu integriteta DNA ciljanih organa lubina), Institut "Ruđer Bošković" i Hrvatski veterinarski institut, Zagreb (putem MP RH)

Batel, R.; Müller, WEG.: Molekulare Biotechnologie und Wirkstoffe mariner Schwämme sowie Schwamm-assoziierten Mikroorganismen (Akronym: Kompetenzzentrum "Biotech-Marin"), Project: Schwämme aus Rovinj (Kroatien)-Extractbereitstellung und Marikultur, hrvatsko-njemački poticajni pilot projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Instituta za fiziološku kemiju, Sveučilište Johannes Gutenberg, Mainz (putem MZT RH)

Batel, R.; Müller, WEG.: Biosensor methods for the assessment of the effects pollution, bilateralni hrvatsko-njemački znanstveni projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Instituta za fiziološku kemiju, Sveučilište Johannes Gutenberg, Mainz (putem MZT RH)

Degobbis, D.: Progetto di monitoraggio e studio delle mucillagini nell'Adriatico e nel Tirreno (MAT), Ministero per l'Ambiente e territorio della Repubblica Italiana

Iveša, Lj.; De Rosa, S.: Secondary metabolites chemistry of marine organisms in Adriatic Sea and their pharmacology, bilateralni hrvatsko-talijanski projekt između Instituta "Ruđer Bošković", i Istituto per la Chimica di Molecole di interesse Biologico CNR, Arco Felice, Napulj (putem MZT RH)

Kuzmić, M.: Field Trials Planning Meeting, Planning Team Meeting, SACLANCEN, La Spezia, Italija

Medaković, D.; Kerovec, M.: Povezanost hrvatske i slovenske podzemne faune na modelu triju istarskih jama, bilateralni hrvatsko-slovenski projekt između Instituta "Ruđer Bošković", Biološkog zavoda PMF-a, Zagreb i Znanstvenoraziskovalni Center Slovenske Akademije Znanosti in Umetnosti, Biološki Inštitut, Ljubljana (putem MZT RH)

Medaković, D.; Pavšić J.: Stabilni izotopi u tropskoj algi *Caulerpa taxifolia*, bilateralni hrvatsko-slovenski projekt između Instituta "Ruđer Bošković" i Naravoslovnotehniška fakulteta, Oddelek za Geologiju, Ljubljana (putem MZT RH)

Ozretić, B.; Pagano, G.: Evaluation of Effluent Toxicity in Four Leather Tanning Plants, NATO Science programme (SA/Est.CLG.978615/)

Smodlaka, N.: Adriatic Sea Integrated Coastal Areas and River Basin Management System Pilot Project (ADRICOSM), Ministero per l'Ambiente e territorio della Repubblica Italiana

Smodlaka, N.: Regional Collaboration in Environmental Monitoring and Forecasting in the Northern Adriatic Sea, NOAA, SAD

Posjeti inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

Giulio Catalano, Stefano Cozzi, Istituto Sperimentale Talassografico, Trst, Italija, 16.1.2002.

Marco Faimali, Istituto per la Corrosione Marine dei Metalli, CNR, Genova, Italija, 3-18.5.2002.

Francesca Garaventa, Istituto per la Corrosione Marine dei Metalli, CNR, Genova, Italija, 3-18.5.2002.

Salvatore De Rosa, Istituto per la Chimica di Molecole di interesse Biologico CNR, Arco Felice, Napulj, Italija, 7-10.5.2002.

Ranieri Urbani, Paola Sist, Dipartimento di Biochimica, Università degli Studi di Trieste, Trst, Italija, 31.5.2002.

Stefano Cozzi, Istituto Sperimentale Talassografico, Trst, Italija, 17-20.6.2002.

Tom S. Hopkins, Department of Marine, Earth and Atmospheric Sciences, North Carolina State University, Raleigh, North Carolina, SAD, 22.7-3.8.2002.

Salvatore De Rosa, Istituto per la Chimica di Molecole di interesse Biologico CNR, Arco Felice, Napulj, Italija, 21-24.8.2002.

Werner E.G. Müller, Odjel za primijenjenu molekularnu biologiju, Institut za fiziološku kemiju, Sveučilište Johannes Gutenberg, Mainz, Njemačka, 1-15.9.2002.
Farooq Azam, Scripps Institution of Oceanography, UCSD, La Jolla, California, SAD, 7-9.10.2002.

Znanstveni skupovi u organizaciji Instituta Ruđer Bošković:

BIOTECMARINE ROVINJ 2002: MODERN DEVELOPMENTS IN MARINE BIOTECHNOLOGY
Rovinj, Hrvatska, 21-24.8.2002.

PRVI WORKSHOP HRVATSKOG NACIONALNOG MONITORING PROGRAMA
"SUSTAVNO ISTRAŽIVANJE JADRANSKOG MORA KAO OSNOVA ODRŽIVOG
RAZVITKA REPUBLIKE HRVATSKE"
Malinska, Hrvatska, 23-26.9.2002.

<http://faust.irb.hr/~pecar/cimz.html>

ZAVOD ZA ISTRAŽIVANJE MORA I OKOLIŠA
CENTER FOR MARINE AND ENVIRONMENTAL RESEARCH

Dr. sc. Božena Ćosović, predstojnica Zavoda

Tel: ++385 1 4680 127 fax: ++385 1 4680 242

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za biogeokemiju organskih spojeva, dr. sc. Marijan Ahel, voditelj laboratorija

Laboratorij za fizičku kemiju tragova, dr. sc. Goran Kniewald, voditelj laboratorija

Laboratorij za fizičko-kemijske separacije, dr. sc. Božena Ćosović, voditeljica laboratorija

Laboratorij za istraživanje i razvoj akvakulture, dr. sc. Emin Teskeredžić, voditelj laboratorija

Laboratorij za radioekologiju, dr. sc. Stipe Lulić, voditelj laboratorija

Laboratorij za elektrokemiju i površinsku kemiju, dr. sc. Marijan Vuković, voditelj laboratorija

Laboratorij za ekološko modeliranje, dr. sc. Vera Žutić, voditeljica laboratorija

Laboratorij za molekularnu ekotoksikologiju, dr. sc. Smiljana Britvić, voditeljica laboratorija

Laboratorij za biološke učinke metala, dr. sc. Biserka Raspor, voditeljica laboratorija

Grupa za satelitsku oceanografiju, dr. sc. Milivoj Kuzmić, voditelj grupe

Tajništvo, Ljiljana Ćepulić, Marija Kumbatović, dipl. prof.

U okviru Zavoda provodila su se do 30.6.2002. godine istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

ISTRAŽIVANJE OKOLIŠNOG RIZIKA U JADRANSKOM I KOPNENOM DIJELU HRVATSKE
ENVIRONMENTAL RISK STUDIES IN THE ADRIATIC AND CONTINENTAL REGIONS OF CROATIA

Direktorica programa: dr. sc. Božena Ćosović

Teme u sastavu programa:

Biogeokemija organskih spojeva u prirodnim vodama, dr. sc. Marijan Ahel, voditelj teme

Fizikalna i bio-geo-kemija tragova metala u vodenim sustavima, dr. sc. Marko Branica, voditelj teme

Priroda i reaktivnost organskih tvari u moru i kopnenim vodama, dr. sc. Božena Ćosović, voditeljica teme

Elektroanalitička kemija, dr. sc. Milivoj Lovrić, voditelj teme

Modeliranje procesa u vodi i na granicama faza, dr. sc. Ivica Ružić, voditelj teme

Organizmi, bioindikator kvalitete vode u kojoj žive, dr. sc. Emin Teskeredžić, voditelj teme

Granica faza čvrsto/tekuće, dr. sc. Marijan Vuković, voditelj teme

Eutrofikacija i procesi na međupovršinama, dr. sc. Vera Žutić, voditeljica teme

Kretanje i sudbina radionuklida i mikroelemenata, dr. sc. Stipe Lulić, voditelj teme

Multiksenobiotička rezistencija u procjeni okolišnog rizika, dr. sc. Smiljana Britvić, voditeljica teme

Istraživanje učinka metala na organizme putem biomarkera, dr. sc. Biserka Raspor, voditeljica teme

Ugroženost voda ratnim otpadom na području krša, dr. sc. Mladen Picer, voditelj teme

Tema izvan programa:

Satelitska detekcija i matematičko modeliranje Jadrana, dr. sc. Milivoj Kuzmić, voditelj teme

Poticajni projekti znanstvenih novaka i asistenata u okviru tema:

Razvoj i primjena automatskog voltometrijskog mjerenja fizičko-kemijskih vrsta tragova metala, dr. sc. Dario Omanović, nositelj projekta

Specijacija sumpora u moru i intersticijskoj vodi morskog sedimenta, dr. sc. Irena Ciglonečki-Jušić, nositeljica projekta

Ksenoestrogeni pesticidi kao supstrati mehanizma multiksenobiotičke otpornosti vodenih organizama, dr. sc. Branka Pivčević, nositeljica projekta
Istraživanje kemijske reaktivnosti metaltioneina, dr. sc. Marijana Erk, nositeljica projekta
IS za procjenu kvalitete vodotokova sliva rijeke Dunav, dr. sc. Jadranka Pečar-Ilić, nositeljica projekta

Program rada:

Program objedinjuje dugoročna ciljana istraživanja vodenih sustava i prirodnih voda, koja se provode u Zavodu za istraživanje mora i okoliša, sa svrhom određivanja prirodnih karakteristika i posebnosti Jadranskog mora i kopnenih voda Hrvatske, utvrđivanje antropogenih utjecaja, te stvaranje znanstvene osnove za korištenje i upravljanje vodama i drugim prirodnim resursima. Istraživači unutar ovog Programa mogu svojim metodama prepoznati značajke okoliša (biodiverzitet, biogeokemijski ciklus tvari, kvantifikacija i kritični putevi kretanja zagađivala, prihvatni kapacitet akvatorija, kvaliteta života, vrste, zajednica, područja...) koje bi mogle biti ugrožene antropogenim utjecajem i time po zahtjevima tehnologije Procjene okolišnog rizika, kvalificirati da postanu subjekti zaštite. Za analizu rizika koristi se metodologija biomarkera ekspozicije (koji kvantificiraju biološki relevantnu izloženost organskim zagađivalima i ionima metala) i biomarkerima efekta (koji mjere najrelevantniji efekt u okolišu – promjenu biodiverziteta). Sustavna dugoročna istraživanja fizičko-kemijskih svojstava anorganskih i organskih tvari i biogeokemijskih procesa obuhvaćaju laboratorijska, eksperimentalna i teorijska istraživanja, te terenska istraživanja u Jadranskom moru i pripadajućim ušćima, te vodama dunavskog i savskog sliva. Naglašeno je razvijanje multidisciplinarnog i interdisciplinarnog pristupa u istraživanjima vodenih sustava, te obrazovanju znanstvenih novaka u području prirodnih znanosti, posebice oceanologije.

Research programme:

The long term research programme of the Centre for marine and environmental research is focused on the investigation of the biogeochemical cycles of inorganic and organic constituents and natural characteristics of the Adriatic Sea and freshwater systems in Croatia, evaluation of the anthropogenic influence by modelling distribution and behaviour of substances and their speciation in water and at natural phase boundaries and assessment of the impact of inorganic and organic pollution on biological species and communities (ecological risk assessment) using methodology of exposure biomarkers and effect biomarkers and monitoring health condition of aquatic organisms.

These investigations are aimed to give new scientific knowledge for environmental management, water quality management and water use in Croatia. To achieve this goal model laboratory experiments are used together with field observations that are performed in the Adriatic Sea and adjacent estuaries and in the continental surface and groundwaters of the Sava and Danube river basins. Multidisciplinary and interdisciplinary approaches are developed with special attention to education of young scientists in the field of natural sciences, particularly in Oceanography.

BIOGEOKEMIJA SPECIFIČNIH BIOGENIH I ANTROPOGENIH ORGANSKIH SPOJEVA U MORU I KOPNENIM VODAMA**BIOGEOCHEMISTRY OF SPECIFIC BIOGENIC AND ANTHROPOGENIC ORGANIC COMPOUNDS IN THE MARINE AND FRESHWATER SYSTEMS**

Voditelj teme: dr. sc. Marijan Ahel

Tel: ++385 1 4561 042 e-mail: ahel@rudjer.irb.hr

Marijan Ahel, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Ana Begonja, magistrica bioteh. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja (porodiljni dopust od 30.6.2002.)

Dubravka Hršak, doktorica bioteh. znanosti, viša znanstvena suradnica

Nataša Tepić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Senka Terzić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Nikolina Udiković, dipl. inž. biotehnologije, znanstvena novakinja

Tehnički suradnik:

Nenad Muhin, tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Damir Viličić, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Biološki Zavod Prirodoslovno-matematičkog fakulteta, Zagreb (konzultant)

Ivan Mijatović, doktor bioteh. znanosti, izvanredni profesor, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Zagreb (konzultant)

Program rada i rezultati na temi:

Cilj teme je sustavno istraživanje biogeokemijskog ponašanja specifičnih biogenih i antropogenih organskih spojeva s posebnim naglaskom na one spojeve koji su značajni za Jadran i kopnene vode Hrvatske. Istraživanja obuhvaćaju proučavanje raspodjele i ponašanja odabranih organskih spojeva u poredbeno važnim morskim i kopnenim ekosustavima uz upotrebu pouzdanih visokospecifičnih metoda koje uključuju primjenu plinske i tekućinske kromatografije te spektrometrije masa. Od biogenih sastojaka posebna je pozornost posvećena fotosintetskim pigmentima i njihovim razgradnim proizvodima te ugljikohidratima. Fotosintetski pigmenti poslužili su za kemotaksonomsko praćenje sezonske dinamike i prostorne raspodjele fitoplanktona sjevernom Jadranu, estuarijima rijeka Krke i Zrmanje te u Rogozničkom jezeru. Primjenom biomarkerskih pigmenata omogućen je bolji uvid u sastav sitnijih frakcija fitoplanktona koje je teško analizirati svjetlosnim mikroskopom. Višegodišnja opažanja sezonske i prostorne raspodjele ugljikohidrata pokazala su da su godine u kojima dolazi do intenzivnog nastajanja sluzavih agregata karakterizirane povišenim koncentracijama ugljikohidrata što je ukazalo na njihovu važnu ulogu prilikom nastajanja te pojave. Istraživanja antropogenih spojeva usmjerena su na molekularnu karakterizaciju organskog zagađenja u odlagalištima otpada i podzemnim vodama pod njihovim utjecajem te u otpadnim vodama, a poseban je naglasak stavljen na neionske i anionske tenzide te nekoliko novih tipova zagađivala porijeklom iz farmaceutske industrije. Nastavljena su istraživanja kojima je osnovni zadatak pridonijeti boljem poznavanju uloge i značenja metanotrofnih bakterija u kruženju metana i biološkoj transformaciji različitih organskih zagađivala, napose ksenobiotika. Provedena je izolacija metanotrofnih bakterija iz različitih staništa s ciljem procjene njihove zastupljenosti u okolišu, napose onom koji je pod utjecajem čovjekove aktivnosti. Do sada postignuti rezultati potvrđuju da se pri uzgoju i identifikaciji metanotrofnih bakterija u laboratorijskim uvjetima javljaju brojne poteškoće zbog kojih je izolacija tih specifičnih bakterija iz okoliša, napose morskog okoliša još uvijek vrlo ograničena.

Research programme and results:

The aim of this project is a systematic investigation of biogeochemical behaviour of biogenic and anthropogenic organic compounds in different freshwater and marine environments using highly specific analytical techniques such as high-resolution gas chromatography, high-performance liquid chromatography and mass spectrometry. Among biogenic compounds studied, a special attention was paid to photosynthetic pigments and their breakdown products, which have been proven as useful biomarkers of phytoplankton biomass, and to carbohydrates that play an important role in the formation of gelatinous macroaggregates. Photosynthetic pigments were applied to investigate phytoplankton dynamics in the northern Adriatic, highly stratified estuaries of the Krka and Zrmanja Rivers and the saline Rogoznica Lake. Application of biomarker pigments allowed a better insight into the smaller size-fractions of phytoplankton, which are not easily accessible by classical light microscopy. Pluriannual observations of the carbohydrate distribution have revealed a link between the enhanced carbohydrate accumulation during the stratified period and the

development of the mucilage phenomenon. Investigations of anthropogenic compounds have been focused on their molecular characterisation in municipal solid waste, soil, landfill leachate-polluted groundwater and municipal wastewater. Among specific xenobiotic compounds, a special emphasis was on anionic and nonionic surfactants and several new pollutants of pharmaceutical origin such as phenazone analgesics and antibiotics. Further research was performed in order to elucidate possible importance and the role of methane utilising bacteria in global methane cycling and pollutant transformation. To evaluate the distribution of methane utilising bacteria in a variety of environments, the enrichment and isolation of these bacteria were performed from different samples (meadow soil, landfill leachate, eutrophicated saline lake sediment, and marine coastal sediments). Results obtained so far showed that the fraction of methane utilising bacteria recovered from environmental samples is only a small fraction of the total bacteria present, and revealed some difficulties in their cultivation, isolation and identification, especially from the marine environment.

FIZIKALNA KEMIJA I BIOGEOKEMIJSKE RAVNOTEŽE I PROCESI TRAGOVA METALA U MODELNIM I PRIRODNIM VODENIM SUSTAVIMA
PHYSICAL CHEMISTRY AND BIOGEOCHEMICAL EQUILIBRIUM AND PROCESSES OF TRACE METALS IN MODEL AND NATURAL AQUATIC SYSTEMS

Voditelj teme: dr.sc. Marko Branica

Tel: ++385 1 4680 231 e-mail: branica@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Marko Branica, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Vlado Cuculić, magistar oceanol. znanosti, asistent

Neven Cukrov, magistar geol. znanosti, asistent, znanstveni novak (od 15.1.2002.)

Renata Đogić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Goran Kniewald, doktor geol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Goran Mihelčić, doktor geol. znanosti, viši asistent (mirovanje prava)

Nevenka Mikac, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Marina Mlakar, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Dario Omanović, doktor kem. znanosti, viši asistent, znanstveni novak

Ivanka Pižeta, doktorica elektroteh. znanosti, viša znanstvena suradnica

Vesna Stipaničev-Žic, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnici:

Željko Kwokal, tehničar suradnik

Željko Peharec, tehničar suradnik

Program rada i rezultati na temi:

Laboratorijska istraživanja vršena su na modelnim elektrolitnim otopinama čiji se sastav približava prirodnim uvjetima vodenog stupca u prirodi. Osim toga, dobiveni su novi rezultati raspodjele tragova metala između prirodnih sustava vode, sedimenta i živih organizama - školjaka.

Također su istraživane interakcije iona metala s makro- i mikrokonstituentima vodene faze, te sedimentima i biotom. Mjerene su konstante ravnoteže pojedinačnih procesa, te su izračunavane raspodjele kemijskih oblika i brzine transformacije metala iz jednih u druge kemijske oblike. Pri obradi rezultata mjerenja primijenjeni su posebno razvijeni ravnotežni i kinetički biogeokemijski modeli.

Rezultati znanstvenih istraživanja doprinose tumačenju ravnotežnih uvjeta i interakcije tragova pojedinih metala u širokom koncentracijskom području koje odgovara uvjetima prirodnih - čistih vodenih sustava kao i onim u zagađenim vodama. Uz detaljnu razradu, razvijeni su i primijenjeni novi analitički postupci koji su pouzdani (uz visoku osjetljivost) za

određivanje tragova metala, odnosno kapaciteta kompleksiranja tragova metala u raznim vodama.

Sistematski su istraživani modelni eksperimentalni sustavi pomoću novo-razvijenih postupaka elektrokemijskih mjerenja kod koncentracijskih uvjeta u prirodnim vodama (10^{-7} - 10^{-10} mol/L). Proučavane su hidratacija, hidroliza, kompleksiranje i adsorpcija/desorpcija, redoks stanje i promjene raspodjele oblika tragova metala u vodenim sustavima.

Ostale aktivnosti na projektu bile su:

- Specijacija organometalnih spojeva (žive i olova) u prirodnim uzorcima vode, sedimenata i organizama (dagnje).
- Procjena mogućnosti uspostave dugotrajne pohrane prirodnih uzoraka iz morske sredine (marine specimen banking).
- Interakcija otopljenog urana s krutim fazama (koloidi, čestice i elektrodna površina).
- Znatno povećanje osjetljivosti primjenom (na ovoj temi novo-razvijene metode) "sinergetske adsorpcije" metala na krutim površinama.
- Pronalaženje i izrada povoljnog oblika uz ispitivanje pogodnih elektrokemijskih ćelija za određivanje vrlo niskih koncentracija i oblika tragova metala (niže od 10^{-10} mol/L) u vodenim sustavima.
- Utvrđivanje uvjeta i izrada ćelije elektrokemijskog sustava koji izbjegavaju promjenu koncentracije otopljenih tragova metala u prirodnim uzorcima vode ili zbog adsorpcije ili zagađenja uzorka.
- Značajno povećanje pouzdanosti i osjetljivosti određivanja tragova metala i kapaciteta kompleksiranja uz primjenu standardnog dodatka "modelnog" redoks para.
- Daljnja razrada i primjena matematičkog odjeljivanja dva bliska signala.

Research programme and results:

Laboratory measurements were performed in model electrolyte solutions which composition is close to natural conditions of the water column. The results of the distribution of trace metals between natural waters, sediments and living organisms -mussels, were obtained. Hydration, hydrolysis, metal complexing capacity, adsorption/desorption processes, redox state as well as the rearrangement of the distribution of chemical forms of trace metals in aquatic systems were studied. Prevailing biogeochemical processes of trace metals in natural and polluted waters have been studied in detail. Interactions of ionic forms between macro- and microconstituents of the water phase, as well as sediments and biota have been established. Equilibrium constants of each predominant process have been measured, wherefrom the distribution of each chemical form as well as the exchange rate between different chemical forms were studied. Based on these data, the distribution of the species in aqueous phase is evaluated.

The results obtained contribute to the knowledge of the equilibrated conditions, trace metals interactions in a broad concentration range which corresponds to natural - pristine aquatic systems as well as to the conditions prevailing in polluted waters. Newly developed, highly sensitive analytical procedures for the trace metals determination as well as their speciation and metal complexing capacity were experimentally successfully applied on natural water samples.

Ample research studies on model experimental systems, using recently developed home-made electrochemical procedures, in the concentration range between 10^{-7} and 10^{-10} mol/L that correspond to natural concentration levels, are envisaged. Other activities are as follows:

- Speciation of organometallic compounds (mercury and lead) in natural aquatic samples (water, sediments, and mussels).
- Assessment of a long-term storage of marine environmental samples - marine specimen banking.
- Interaction of dissolved uranyl species on solid phases (colloids, particles and electrode surface)

- Essential improvement of the sensitivity of the newly developed method for "synergetic adsorption" of trace metals complexes on the electrode surface.
- Development and utilization of the appropriate material for the electrochemical cell for the determination of very low concentration levels of trace metals as well as their chemical forms (below 10^{-10} mol/L) in natural water systems.
- Determination of the conditions under which the material of the electrochemical cell as well as of the entire system does not influence actual trace metals concentrations in natural water samples due to adsorption and/or contamination.
- Significant improvement of the reproducibility and sensitivity of the determination of trace metals and metal complexing capacity with the standard addition of a "model" redox pair. Elaboration of mathematical treatment of two overlapping signals.

Poticajni projekt u okviru teme:

RAZVOJ I PRIMJENA AUTOMATSKOG VOLTAMETRIJSKOG MJERENJA FIZIČKO-KEMIJSKIH VRSTA TRAGOVA METALA
DEVELOPMENT AND APPLICATION OF AUTOMATED VOLTAMMETRIC MEASUREMENTS OF TRACE METALS
Nositelj projekta: dr. sc. Dario Omanović

**PRIRODA I REAKTIVNOST ORGANSKIH TVARI U MORU I KOPNENIM VODAMA
NATURE AND REACTIVITY OF ORGANIC SUBSTANCES IN MARINE AND FRESHWATER SYSTEMS**

Voditeljica teme: dr. sc. Božena Ćosović

Tel: ++385 1 46-80-127 e-mail: cosovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Irena Cignelečki-Jušić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Božena Ćosović, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Sanja Frka, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Blaženka Gašparović, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Zlatica Kozarac, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Damir Krznarić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Marta Plavšić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Vjeročka Vojvodić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Tehnički suradnik:

Zdeslav Zovko, tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Marina Carić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica, Institut za oceanografiju i ribarstvo, Dubrovnik
Frane Kršinić, doktor biol. znanosti, znanstveni savjetnik, Institut za oceanografiju i ribarstvo, Dubrovnik
Damir Viličić, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Palma Orlović Leko, doktorica tehničkih znanosti, viša asistentica, Rudarsko-geološko-naftni fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Program rada i rezultati na temi:

Najvažniji rezultati rada na ovoj Temi mogu se u završnoj godini financiranja navesti kako slijedi:

Postignuta su nova saznanja o termodinamskim i kinetičkim parametrima adsorpcije odabranih organskih tvari, kako prirodnog porijekla tako i zagađivala, na raznim granicama faza.

Razvijena je nova nedestruktivna i brza metoda za grubu karakterizaciju organskih tvari u morskoj vodi korištenjem o-nitrofenola kao elektrokemijske probe.

Ispitana je sezonska i prostorna promjenjivost otopljenih organskih tvari i površinski aktivnih tvari u sjevernom Jadranu i ustanovljena njihova povezanost sa biološkom aktivnosti mora te neposrednim i posrednim utjecajima donosa tvari s kopna.

Nova saznanja o specijaciji sumpornih vrsta u oksičnim i anoksičnim uvjetima u moru, o zastupljenosti sumpora (o) i interakciji sumpornih vrsta sa organskih tvarima.

Doprinos poznavanju kvalitete naših kopnenih voda s obzirom na zastupljenost i karakteristike organskih tvari, procjenu infiltracije i širenja zagađenja u podzemne vode, te utvrđivanje utjecaja odlagališta otpada na kvalitetu podzemnih voda.

Research programme and results:

The main results obtained in the framework of this Project can be summarized in the final year as follows:

Thermodynamic and kinetic parameters of adsorption are determined for selected organic substances, of natural origin as well as pollutants, at different model and natural phase boundaries.

New method is developed, rapid and nondestructive, for a rough characterization of organic matter in seawater, by using o-nitrophenol as an electrochemical probe.

Seasonal and spatial variability of dissolved organic matter and surface active substances in the Northern Adriatic Sea was investigated and correlated with the biological activity of the sea and possible anthropogenic influences from the land based sources.

Sulfur speciation studies were performed in the oxic and anoxic marine environments and brought new knowledge about abundance of sulfur (o) and organosulfur species.

Our results contributed to a better understanding of the role of organic matter in water quality of freshwater systems, especially regarding the impact of contamination from a municipal solid waste landfill.

Poticajni projekt u okviru teme:

SPECIJACIJA SUMPORA U MORU I INTERSTICIJSKOJ VODI MORSKOG SEDIMENTA
SULFUR SPECIATION IN THE SEAWATER COLUMN AND MARINE POREWATERS

Nositeljica projekta: dr. sc. Irena Ciglonečki-Jušić

STUDIJ ELEKTROKEMIJSKIH REAKCIJA U ANALITIČKE SVRHE STUDY OF ELEKTROCHEMICAL REACTIONS IN ANALYTICAL PURPOSES

Voditelj teme: dr. sc. Milivoj Lovrić

Tel: ++385 1 4561 046 e-mail: slovrice@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Šebojka Komorsky-Lovrić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Milivoj Lovrić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Marina Zelić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Program rada i rezultati na temi:

Rad na temi dovršen je 30.6 2002. objavljivanjem 5 znanstvenih radova. Istraživanja se mogu podijeliti u tri grupe:

- kinetika površinskih redoks reakcija,
- CE i EC mehanizmi i
- teorija pravokutnovalne voltametrije.

Određene su standardne konstante brzine redoks reakcije cinolina adsorbiranog na površini živine elektrode: $k_s = 65 \pm 25 \text{ s}^{-1}$ (pH 9,2), $455 \pm 110 \text{ s}^{-1}$ (pH 7) i $300 \pm 75 \text{ s}^{-1}$ (pH 4,65).

Razvijen je teorijski model odziva adsorbiranog reaktanta u pravokutnovalnoj voltametriji i analiziran je utjecaj međusobnog privlačenja ili odbijanja adsorbiranih molekula na oblike odziva. Teorijski i eksperimentalno je proučavana redoks reakcija drugog reda: $2 L^- (\text{ads.}) \leftrightarrow 2 L^- (\text{aq.}) + \text{Hg} (\text{l}) \leftrightarrow \text{Hg}L_2 (\text{s}) + 2 e^-$ u kojoj površinski aktivni ligand L^- stvara tanki sloj netopive živine soli na površini elektrode. Matematički model reakcije uspoređen je s odzivima 6-propil-2-tiouracila u pravokutnovalnoj voltametriji. Kvazireverzibilni elektroodni procesi kojima prethodi ili koje slijedi homogena kemijska reakcija istraživani su matematičkim modelima za pravokutnovalnu voltametriju. Konačno, analiziran je i utjecaj debljine živinog sloja na mirnoj disk elektrodi na odzive metala koji stvaraju amalgam u pravokutnovalnoj voltametriji.

Research programme and results:

The work on the theme was finished on 30.06 2002. by publishing 5 scientific papers. The work can be divided in three groups:

- a) kinetics of surface redox reactions,
- b) CE and EC mechanisms and
- c) theory of square wave voltammetry.

The standard redox reaction rate constants of cinnoline adsorbed on mercury electrode were determined: $k_s = 65 \pm 25 \text{ s}^{-1}$ (pH 9.2), $455 \pm 110 \text{ s}^{-1}$ (pH 7) and $300 \pm 75 \text{ s}^{-1}$ (pH 4.65). A theoretical model of square-wave voltammetry (SWV) combined with the adsorptive accumulation of the reactant is developed. Attraction forces in the monolayer increase the difference between the potentials of the maxima of the post-peak and the main peak, and they may cause the splitting of the post-peak, while repulsion prevents the separation of these two peaks. A new theory of a second order cathodic stripping reaction accompanied by adsorption of the reacting ligand is developed under conditions of SWV. A mathematical model is developed for the following reaction: $2 L^- (\text{ads.}) \leftrightarrow 2 L^- (\text{aq.}) + \text{Hg} (\text{l}) \leftrightarrow \text{Hg}L_2 (\text{s}) + 2 e^-$. The theoretical results are qualitatively compared with the SW voltammograms of 6-propyl-2-thiouracil. The electrochemical behaviour of systems complicated by electrode kinetics and quasi-reversible preceding, or following homogeneous chemical reactions under SWV conditions was analysed theoretically. Finally, a model of reversible redox reaction of an amalgam forming metal ion, measured by both a direct and an anodic stripping SWV, on a thin mercury film covered solid stationary disk electrode was developed.

MODELIRANJE FIZIČKIH I KEMIJSKIH PROCESA U VODI I NA GRANICAMA FAZA SIMULATION OF PHYSICAL AND CHEMICAL PROCESSES IN WATER AND AT SOLID/LIQUID INTERFACES

Voditelj teme: dr. sc. Ivica Ružić

Tel.: ++385 1 4561 140 Mobitel: 098-480 671 Fax: ++385 14680 117

e-mail: ruzic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Zoran Ereš, dipl. inž. elektrotehnike, stručni suradnik (od 17.6.2002)

Jadranka Pečar-Ilić, doktorica elektroteh. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Ivica Ružić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Bogdan Sekulić, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Program rada i rezultati na temi:

Nastavljen je razvoj informacijskih sustava o okolišu. Nastavljen je razvoj integriranog sustava za nadzor unutrašnjih plovinih puteva. Izrađena je vektroska digitalna karta rijeke Dunava i dijela rijeke Drave od Osijeka do ušća u Dunav razmjera 1:10000. Digitalna karta biti će integrirana sa relacijskom bazom podataka o plovnom putu, preprekama na plovnom putu, navigacijskim oznakama i hidrološkim informacijama od značaja za riječnu plovidbu.

Procjenjen je ukupni bilans unosa slatkih voda u Jadran. Procjenom su obuhvaćeni svi vodotoci, podzemne vode, kao i površinska spiranja s najužeg dijela litorala.

Research programme and results:

Development of information systems for environmental management is continued. Development of the integral system for river traffic management was continued. Vector digital map of the Danube river and a part of Drava river from Osijek to the mouth of Drava into the Danube was produced in the scale of 1:10000. This digital map will be integrated with relational database on fairway, obstacles to navigation, navigation marks and relevant hydrological information. Total balance of fresh water input into the Adriatic Sea is estimated. All important surface and ground-waters (including complete surface runoff) from the coastal regions are taken into account.

Poticajni projekt u okviru teme:

IS ZA PROCJENU KVALITETE VODOTOKOVA SLIVA RIJEKE DUNAV
INFORMATION SYSTEM FOR WATER QUALITY ASSESSMENT OF DANUBE BASIN
WATERCOURSES

Nositeljica projekta: dr. sc. Jadranka Pečar-Ilić

**ORGANIZMI, BIOINDIKATORI KVALITETE VODE U KOJOJ ŽIVE
ORGANISMS AS BIOINDICATORS OF WATER QUALITY IN WHICH THEY LIVE**

Voditelj teme: dr. sc. Emin Teskeredžić

Tel/Fax: ++385 1 4680 943 e-mail: etesker@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Rozelinda Čož-Rakovac, doktorica biomed. znanosti, viša asistentica
Mato Hacmanjek, doktor biomed. znanosti, viši asistent
Božidar Kurtović, doktor vet. med., asistent, znanstveni novak
Ivančica Strunjak-Perović, doktorica vet. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja
Emin Teskeredžić, doktor biotehnol. znanosti, znanstveni savjetnik
Zlatica Teskeredžić, doktorica biotehnol. znanosti, znanstvena savjetnica
Marija Tomec, doktorica biol. znanosti, viša asistentica
Natalija Topić-Popović, magistrica oceanol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnici:

Zdenko Roman, viši tehničar
Zvezdana Šoštarić, tehničarka
Branislav Španović, viši tehničar
Ružica Jurić, tehničarka (do 1.3.2002.)

Program rada i rezultati na temi:

Kakvoća vode utječe na patofiziološku sliku organizama, te je kontrolirano njihovo stanje s obzirom na pojavu morbiditeta. U tu svrhu provedena su istraživanja patohistološkog statusa, biokemijskih parametara, resorpcije hranjivih sastojaka, pojave bakterijskih, virusnih i parazitarne bolesti, tehnologije uzgoja i ishrane uzgajanih i divljih populacija riba.

Research programme and results:

The water quality influence on patophysiological conditions of aquatic organisms, and health conditions of aquatic organisms has been controlled for the occurrence of diseases. To this purpose investigations were performed of biochemical parameters, resorption of nutrients, occurrence of bacterial, viral and parasitic diseases as well as the investigations of the technology of culture and nourishment of cultured organisms.

**POVRŠINSKO - KEMIJSKA I ELEKTROKEMIJSKA SVOJSTVA GRANICA FAZA
ČVRSTO/TEKUĆE
SURFACE - CHEMICAL AND ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF THE
SOLID/LIQUID INTERFACE**

Voditelj teme: dr. sc. Marijan Vuković

Tel: ++3851 4680 124, e-mail: mvukovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Dunja Čukman, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Višnja Horvat-Radošević, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Krešimir Kvastek, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Momir Milunović, dipl. inž. elektroteh., stručni suradnik

Ivan Sondi, doktor geol. znanosti, viši asistent, znanstveni novak (mirovanje prava)

Neda Vdović, doktorica geol. znanosti, viša asistentica

Marijan Vuković, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Srećko Karašić, samostalni tehničar

Program rada i rezultati na temi:

Cilj istraživanja su nova saznanja o površinsko-kemijskim i elektrokemijskim svojstvima granica faza čvrsto/tekuće na materijalima prirodnog i umjetnog podrijetla.

U okviru sistematskog istraživanja elektrokemijskih svojstava plemenitih metala u različitim eksperimentalnim uvjetima, istraživana su svojstva rodijevih elektroda (pripremljenih elektrodepozicijom u formi višeslojnih filmova) u širokom području polarizacijskih potencijala. Korištene su tehnike elektrokemijske impedancijske spektroskopije i cikličke voltametrije.

Kinetika reakcije izdvajanja vodika (HER) na rodijevim elektrodama istraživana je u otopini sumporne kiseline. Rezultati su ukazali na značajna elektrokatalitička svojstva površine rodija (nadmašena samo s platinom) i odvijanje absorpcije vodika unutar sloja metala. U tzv. području potencijala "dvostrukog sloja", rodijeve elektrode su istraživane u različitim otopinama elektrolita, uključivši i otopinu perklorne kiseline, gdje su rodijeve elektrode pokazale značajnu ulogu u elektrokatalitičkoj reakciji redukcije perklorata.

Research programme and results

The aim of research is the new insight into surface-chemical and electrochemical properties of the solid/liquid interface on the materials of natural and artificial origins.

Within the frame of systematic investigations of electrochemical properties of noble metal electrodes in various experimental conditions, the rhodium electrodes (prepared as multi-layer films by an electrodeposition procedure) were studied over a broad range of polarisation potentials. Electrochemical impedance spectroscopy and cyclic voltammetry were used as experimental techniques. Kinetics of the hydrogen evolution reaction (HER) at rhodium electrodes was studied in the sulphuric acid solution. The results have indicated significant electrocatalytic properties of rhodium surfaces for the HER (that are surpassed only by platinum), and some absorption of hydrogen within the metal layer. In the so called "double layer region" of potentials, rhodium electrodes were investigated in various electrolyte solutions, including perchloric acid, where rhodium electrodes showed a remarkable electrocatalytic reaction reduction of perchlorate.

**EUTROFIKACIJA I PROCESI NA MEĐUPOVRŠINAMA
EUTROPHICATION AND INTERFACIAL PROCESSES**

Voditeljica teme: dr. sc. Vera Žutić

tel: ++ 385 1 4561 128 e-mail: zutic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Sunčana Geček, magistrica mat. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja
Amela Hozić, dipl. inž. kem. tehnologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Nadica Ivošević, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Solveg Kovač, doktorica bioteh. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja (do 2.5.2002.)
Tarzan Legović, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Vesna Svetličić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Helena Štorek, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 1.8.2002.)
Vera Žutić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehnička suradnica:

Dubravka Mutvar, peračica suđa

Suradnici iz drugih ustanova:

Zvonko Gržetić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik, Državni hidrografski institut, Split
Nenad Leder, magistar oceanol. znanosti, asistent, Državni hidrografski institut, Split
Ante Smirčić, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik, Državni hidrografski institut, Split

Program rada i rezultati na temi

Istraživanja na ovoj temi usmjerena su na stvaranje novih spoznaja o eutrofikaciji i procesima agregacije organskih čestica u moru; razvoj i primjenu novih metoda mjerenja i modeliranja; direktno mjerenje međupovršinskih svojstava i interakcija mikroskopskih čestica odgovornih za makroskopske pojave u akvatičkom okolišu. Posljedica povećanog donosa hranjivih tvari u ušća i priobalna mora su prekomjerni cvatovi fitoplanktona uz znatan porast koncentracije otopljene organske tvari i organskih čestica. Fizikalno-kemijski procesi agregacije, uz biološke interakcije prehrambenog lanca, određuju sudbinu organskih čestica u akvatoriju. Rad na temi sastojao se od laboratorijskih istraživanja, terenskih mjerenja i modeliranja. Udio biofizičkih procesa samoorganiziranja biopolimera i faznih promjena sol-gel prilikom pojave masovnog nastajanja makroagregata u Sjevernom Jadranu istraživan je u seriji mikrokozmos eksperimenata koji su planirani u suradnji sa grupom iz Scripps Institution of Oceanography i izvedeni u Laboratoriju za morsku biologiju Sveučilišta u Trstu. Za razumjevanje važnih međupovršinskih procesa u moru, koji se odvijaju na mikroskali, potrebne je primijeniti nove koncepte i mjerne tehnike. Primijenjen je novi tip elektrokemijskog senzora koji smo razvili za istraživanje i monitoring organskih čestica u akvatičkom okolišu. Razvoj senzora je rezultat fundamentalnih istraživanja adhezije organskih kapljica i prijanjanja stanica morskih mikroorganizama na modelnim međupovršinama gdje se naboj i površinska napetost mogu kontrolirati.

Iz užeg područja ekološkog modeliranja radilo se na modelima utjecaja dotoka slatke vode na ekosustav priobalnog mora. Nastavljen je rad na razvoju numeričkih iterativnih metoda za rješavanje velikih linearnih sistema koji su imanentni diskretizirajućim tehnikama parcijalnih diferencijalnih jednačini, s primjenom na biofizičke modele koji uključuju reakcijske i transportne procese tvari i čestica.

Research programme and results:

The theme is focused on developing new concepts in understanding and research of eutrophication and aggregation processes of organic particles in estuaries and coastal sea. The emphasis is on development and applications of new measurement and modeling methods. Increasing antropogenic inputs of nutrients to estuaries and coastal sea cause increase in phytoplankton production and higher concentrations of organic particles in the size range from nanoparticles to macroaggregates. Biophysical processes such as biopolymer self-assembly and phase transition sol-gel are responsible for massive macroaggregation episodes in the Northern Adriatic. These events are so far the most obvious manifestations of eutrophication and interfacial processes coupling in the coastal sea. The importance of biophysical processes in the macroaggregation phenomena has been studied in a series of mesocosm experiments that were planned with the group from Scripps

Institution of oceanography and performed within an NSF workshop in the Marine Biology laboratory of the University of Trieste. In order to understand the importance of marine interfacial processes on a microscale novel concepts and measurement techniques should be introduced. We have applied the novel electrochemical sensor that was developed for research and monitoring of reactive particles in aquatic environment. The electrochemical sensor is based on adsorption of organic particles at the charged electrode/seawater interface, which results in the well-defined electrical signals. The developed sensor is a result of fundamental studies of adsorption of organic droplets and attachment of marine microorganisms at the model interface where surface charge density and interfacial tension can be varied at will. Ecological modelling work was directed toward development of models for estimation of impact of freshwater on a coastal sea ecosystem and towards development of iterative numerical methods for solving large linear systems inherent to biophysical models involved in reactions and transport processes of particulate matter.

**KRETANJE I SUDBINA RADIONUKLIDA I MIKROELEMENTA U PRIRODNIM
SUSTAVIMA
CYCLING AND THE BEHAVIOUR OF RADIONUCLIDES AND MICROELEMENTS IN
ENVIRONMENTAL SAMPLES**

Voditelj teme: dr. sc. Stipe Lulić

Tel: ++385 1 4680 227 e-mail: lulic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Delko Barišić, doktor geol. znanosti, viši znanstveni suradnik
Željko Grahek, doktor kem. znanosti, viši asistent
Katarina Košutić, magistrica kem. znanosti, asistentica, stručna suradnica
Stipe Lulić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Martina Rožmarić Mačefat, dipl.inž. kemije, znanstvena novakinja
Astrea Vertačnik, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Tehnički suradnici:

Tomislav Kardum, tehničar
Rajko Kušić, samostalni tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Mihovil Hus, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik, Šumarski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb
Mladen Juračić, doktor geol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb
Nikola Kezić, doktor vet. znanosti, redoviti profesor, Agronomski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb
Petar Kraljević, doktor vet. znanosti, redoviti profesor, Veterinarski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb
Esad Prohić, doktor geol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb
Zvonimir Seletković, doktor šum. znanosti, redoviti profesor, Šumarski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Program rada i rezultati na temi:

Predmet predloženih istraživanja je kretanje radionuklida u prirodnim sustavima, raspodjela pojedinih mikroelemenata i mehanizam i brzina njihovog širenja, te procesi vezivanja na suspendirani materijal, sediment, tlo i biotu. - Primjena radioaktivnih obilježivača u svrhu određivanja kritičnih puteva širenja zagađenja podzemnih vodonosnih horizonata. - Ispitivanje sorpcijskih sposobnosti geološkog materijala i određivanje koeficijenta distribucije mikroelemenata. - Ispitivanja načina obrade prirodnih uzoraka te razvijanje tehnika mjerenja

radioaktivnosti u svrhu povećanja osjetljivosti mjerenja. Ispitivanja obuhvaćaju metode za mjerenje alfa, beta i gama radioaktivnosti. Rezultati istraživanja služe u provjeri stupnja opasnosti od mogućeg radioaktivnog zagađenja i donošenja propisa sa ciljem zaštite vodenih resursa, čovjeka i njegovog okoliša. Istraživana je razina radioaktivnosti, njezino širenje i akumuliranje u prirodnom sustavu. Razvijene su nove analitičke metode separacije umjetnih radionuklida u prirodnim sustavima. U cilju izrade radiokemijske karte Republike Hrvatske obavljena su in situ mjerenja prirodne i umjetne radioaktivnosti koja se nalazi u tlu. Razvijane su metode ranog otkrivanja i širenja radioaktivnog zagađenja putem zraka. Započet je razvoj mreže mjernih uređaja za rano otkrivanje nuklearnih i drugih nesreća s radiološkim posljedicama na teritoriju Republike Hrvatske. Na osnovu mjerenja sadržaja mikroelemenata u prirodnim uzorcima određivan je stupanj zagađenja pojedinih područja Republike Hrvatske (Gorski Kotar). Započet je rad na praćenju promjena koncentracija mikroelemenata, te nekih prirodnih i umjetnih radionuklida u različitim dijelovima fragmenata najmlađih izrasta jela na području Zagrebačke gore.

Research programme and results:

The purpose of proposed research is to reveal the distribution of certain microelements and radionuclides in natural systems, their spreading mechanisms velocities, as well as binding processes including suspended matter, sediment, soil and biota. In order to accomplish the task, the following research would be done: - The determination of pollution critical pathways in underground water-bearing horizons by radioactive tracer methods. - The determination of geological materials sorption capacity and microelement distribution coefficients. - The improvement of natural samples treatment methods and development of radioactivity measurement techniques in order to increase the sensitivity. The studies include methods for alpha, beta and gamma measurements. The results would be used in assessment of possible radioactive contamination risk degree, as well as in creation of legal provisions in order to protect water resources, the public and the environment. Radioactivity levels, it's spreading and accumulations in natural system were followed. New analytical methods for separation of artificial radionuclides in natural systems were developed. In order to make radiometric map of the Republic of Croatia territory, in situ measurements of artificial and natural radioactivity in soils have been done. Methods for early detection and aerial spreading of radioactive contamination have been developed. The development of network for early warning of nuclear and other accidents with radiological consequences on the Republic of Croatia territory has been started. Concentrations of some microelements in natural samples from interesting non-polluted areas was followed (Gorski Kotar). The research on temporal changes of artificial and natural radioactivity levels, as well as microelement concentrations in fragments of youngest fir-shoots has been started (Zagrebačka gora).

**MULTIKSENOBIOTIČKA REZISTENCIJA U PROCJENI OKOLIŠNOG RIZIKA
MULTIXENOBOTIC RESISTANCE IN ENVIRONMENTAL RISK ASSESSMENT**

Voditeljica teme: dr. sc. Smiljana Britvić

Tel: ++385 1 4561 088

fax: ++385 1 4680 243

e-mail: britvic@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Smiljana Britvić, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica

Sanja Krča, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica

Branka Pivčević, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica

Tvrtko Smital, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Roberta Sauerborn, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnik:

Dalibor Jelaska, samostalni tehničar

Suradnik iz druge ustanove:

Branimir Hackenberger Kutuzović, doktor biol. znanosti, viši asistent, Pedagoški fakultet Sveučilišta u Osijeku, Osijek

Program rada i rezultati:

Predmet istraživanja u okviru ove Teme jest istraživanje i vrednovanje ekotoksikološkog značaja prisustva i funkcije obrambenog mehanizma tzv. multiksenobiotičke otpornosti (MXR) u vodenih organizama. Najvažniji rezultata rada u završnoj godini finaciranja ove Teme su: (1) razvijanje metode za određivanje aktivnosti P-glikoproteina u jetri vodenih kralješnjaka (riba); (2) uvođenje *in vitro* metode za određivanje estrogenih učinaka okolišno relevantnih zagađivala; te (3) određivanje brzine i razine indukcije MXR-aktivnosti pod utjecajem organskog zagađenja u stvarnim uvjetima okoliša. Zaključno, rezultati istraživanja u okviru ove Teme predstavljaju neophodan, znanstveno utemeljen doprinos vrednovanju MXR-a kao vjerodostojnog biomarkera kvalitete vodenog okoliša.

Research program and results:

The primary goal of this project was the explanation of the ecotoxicological significance of the presence and function of the multixenobiotic resistance (MXR) defence system in aquatic organisms. The main results obtained in the final year of this Project are: (1) Development of the method for determination of P-glycoprotein activity in livers of aquatic vertebrates (fish species); (2) transfer of the *in vitro* method for determination of the estrogenic effects of environmentally relevant pollutants; (3) determination of the rate and the level of induction of MXR activity as a response to organic pollution in real environmental conditions. As a general conclusion results obtained within this Project represents a valuable scientific contribution leading to the evaluation of MXR as a reliable indicator of environmental quality.

Poticajni projekt u okviru teme:

KSENOESTROGENI PESTICIDI KAO SUPSTRATI MEHANIZMA MULTIKSENOBIOTIČKE OTPORNOSTI VODENIH ORGANIZAMA
XENOESTROGEN PESTICIDES AS SUBSTRATES OF MULTIXENOBOTIC RESISTANT MECHANISM OF AQUATIC ORGANISMS
Nositeljica projekta: dr.sc. Branka Pivčević

**ISTRAŽIVANJE UČINKA METALA NA ORGANIZME PUTEM BIOMARKERA
BIOMARKERS AND THE BIOLOGICAL EFFECTS OF METALS ON ORGANISMS**

Voditeljica teme: dr. sc. Biserka Raspor

Tel: ++385 1 4680 216 e-mail: rasp@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Marijana Erk, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Vlatka Filipović, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Dušica Ivanković, magistrica biol. znanosti, stručna suradnica (od 2.5.2002.)
Sonja Kozar, doktorica kem. znanosti, viša asistentica
Jasenka Pavičić, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica
Biserka Raspor, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehnički suradnik:

Branislav Iljadica, tehničar

Suradnik iz druge ustanove:

Roko Žaja, dipl. inž. biologije, stručni suradnik Pedagoškog fakulteta, Sveučilišta J.J. Strossmayer u Osijeku

Program rada i rezultati na temi:

Provode se interdisciplinarna istraživanja biomarkera, radi praćenja štetnog učinka metala na odabrane vodne organizme. Biomarkeri predstavljaju biokemijski odnosno molekularni odgovor organizma na zagađivala, koja doprijevši do mjesta toksičnog djelovanja izazivaju mjerljivi i specifični učinak, pobudnom sintezom biomarkera. Svrha je ustanoviti postoji li mjerljivi biokemijski učinak toksičnih metala na staničnoj razini u vodnih organizama, radi procjene njihove izloženosti metalima.

Polimorfizam metalotioneina (MT), koji je bio izoliran iz probavne žlijezde prirodne skupine dagnji (*M. galloprovincialis*) i skupine izložene kadmiju, izučavan je razlučivanjem proteina tekućinskom kromatografijom na Sephadex koloni (G-75 i DEAE A-25) i elektrokemijskim određivanjem koncentracije Cd, Zn i Cu u kromatografskim frakcijama. Kromatografski su razlučene dvije MT izoforme, tj. monomer (MT-10) i dimer (MT-20). Ustanovljeno je da je u tkivu dagnji, koje su bile izložene kadmiju, veći udio kadmija vezan u MT-20 nego u MT-10 izoformi. Stoga se dimer smatra pobudno sintetiziranom MT isoformom, koja je manje zastupljena u prirodnim uvjetima. U prirodnoj skupini dagnji prisutna je pretežito MT-10 izoforma. Ona sadrži 100 puta veću koncentraciju Zn, 10 puta veću koncentraciju Cu u usporedbi s Cd. S pomoću anionsko-izmjenjivačke kromatografije svaka od ove dvije izoforme bila je dodatno razlučena u sedam frakcija koje sadrže različite udjele metala. Ovi rezultati potvrđuju da su MT izoforme izolirane iz probavne žlijezde dagnji, roda *Mytilus*, mnogobrojne što ima izuzetni ekotoksikološki značaj.

Supernatant S50, koji sadrži ukupne citosolske proteine, izoliran je iz probavne žlijezde dagnji, koje su bile izložene kadmiju. Supernatant je pročišćen na tri načina tj. toplinskom obradom na 70°C i 85°C odnosno taloženjem s organskim otapalima. Frakcije eluirane s gelske kolone bile su združene u 4 skupine, od visoko do nisko molekularnih sastojaka. Sadržaj proteina, izražen kao MT, bio je određen modificiranom Brdičkinom metodom. Statističkom obradom podataka (za $p < 0.01$) ustanovljena je statistički značajna razlika u sadržaju MT za sve tri metode pročišćavanja supernatanta. Postupcima toplinske obrade i taloženja s organskim otapalima iz supernatanta se djelotvorno uklanjaju proteini visoke molekulske mase. Koncentracija MT-10 izoforme ne mijenja se bez obzira je li supernatant nepročišćen ili pročišćen (toplinskim postupkom odnosno postupkom taloženja organskim otapalima). Nasuprot tome, koncentracija MT-20 izoforme se značajno smanjuje primjenom toplinske obrade, a drastično smanjuje taloženjem s organskim otapalima. Prethodnim izučavanjima ustanovljeno je da je MT-20 izoforma pobudno sintetizirana, zbog čega se preporučuje upotrijebiti onaj postupak pročišćavanja S50 supernatanta, kojim se manje uklanja inducibilna MT-20 izoforma, a to je toplinska obrada.

Research programme and results:

Interdisciplinary research on biomarkers has been performed with the intention to determine the adverse effect of metals on the aquatic organisms. Biomarkers reflect the response at the biochemical and molecular level of organisms, after the position for toxic action of pollutant has been reached. The effect is reflected as the induced and measurable amount of a specific biomarker. The intention is to assess the exposure of aquatic organisms to metals by means of a measurable biochemical effect at the cellular level.

Polymorphism of metallothionein (MT) in the digestive gland of naturally occurring (control) and Cd-exposed mussels, *M. galloprovincialis*, was studied applying conventional methods of Sephadex column liquid chromatography (G-75 and DEAE A-25), in combination with the electrochemical determination (DPASV) of Cd, Zn and Cu concentrations in chromatographic fractions. By means of Sephadex G-75 gel-filtration chromatography two distinct molecular mass components, MT monomer (MT-10) and dimer (MT-20), were resolved. In Cd-exposed mussels the larger proportion of Cd was bound to the MT-20 than to the MT-10 isoform, suggesting that the dimer is primarily inducible MT isoform, not highly expressed under basal conditions. In control mussels MT-10 component was prevalent and contained 100 times higher constitutive level of Zn and 10 times higher constitutive level of Cu than of Cd. Each of these two MT isoforms was further resolved into seven metal rich peaks by means of anion-exchange chromatography. These results confirm high multiplicity

of mussel MT isoforms from the *Mytilus* genus, which is of ecotoxicological significance in biomonitoring studies.

S50 supernatant, which contains total cytosolic proteins, was isolated from the digestive gland of Cd-exposed mussels (*Mytilus galloprovincialis*) and was purified by heat treatment at 70°C, 85°C and by solvent precipitation. Applying gel-filtration chromatography elution fractions were pooled to 4 components from high to low molecular mass. Protein content related to MT was determined by modified Brdička method. Statistical treatment indicates (at $p < 0.01$) that significant differences in MT concentrations were obtained when three purification treatments were applied. Both heat treatment and solvent precipitation are effective in removing high molecular mass proteins from the S50 supernatant. In untreated as well as in heat or solvent treated supernatant, concentration of MT-10 (monomer) does not change. On the contrary, MT-20 (dimer) concentration is significantly reduced by heat treatment and drastically reduced by solvent precipitation. Due to the fact that MT-20 is considered as Cd-inducible MT isoform, it is recommended to purify S50 supernatant by heat treatment, because such treatment affects less the concentration of MT-20 isoform.

Poticajni projekt u okviru teme:

ISTRAŽIVANJE KEMIJSKE REAKTIVNOSTI METALOTIONEINA
STUDY ON CHEMICAL REACTIVITY OF METALLOTHIONEINS
Nositeljica projekta: dr. sc. Marijana Erk

Istraživanja izvan programa trajne istraživačke djelatnosti:

Provode se sustavna određivanja biomarkera u dagnjama skupljenim na priobalnim morskim i estuarijskim postajama dalmatinskog područja u okviru potprojekta 1.5 Razina i utjecaj onečišćenja na području većih naselja "vruće točke", kao dijela projekta Jadran ugovorenog s Vladom Republike Hrvatske.

U okviru suradnje na međunarodnom projektu s NIVA-om, u listopadu 2002. obavljeno je zajedničko uzorkovanje dagnji i trlja u Kaštelanskom zaljevu i Splitskom kanalu, a provedeno je i kavezno izlaganje dagnji i lubina u istom području. Na širem području Osijeka u svibnju i listopadu 2002. obavljeno je uzorkovanje slatkovodnih riba. Istražena je mogućnost kaveznog izlaganje šarana i bezupki na Dravi i u Kopačkom ritu. U uzorcima tkiva određuju se biomarkeri koji pokazuju učinke i organskih i anorganskih zagađivala, radi procjene kombiniranih učinaka zagađivala na vodne organizme.

Raspor B. sudjeluje u izvršavanju obveza referentnog ovlaštenog laboratorija te prema ugovoru s Državnom upravom za vode sudjeluje u nadzoru i unapređenju rada ovlaštenih laboratorija koji ispituju razne vrste voda u Republici Hrvatskoj.

ISTRAŽIVANJE UGROŽENOSTI VODA I POSTUPAKA ODSTRANJIVANJA VISOKOSTABILNIH ORGANSKIH ZAGAĐIVALA KAO POSLJEDICA RATA NA PODRUČJU KRŠA

RESEARCH OF JEOPARDIZED WATER AND ELIMINATION (CLEANING UP OF) HIGHLY STABLE ORGANIC COMPOUNDS AS A REMEDY OF WAR IN KARST REGION

Voditelj teme: dr. sc. Mladen Picer

Tel: ++385 1 4561 003 e-mail: picer@rudjer.irb.hr

Suradnici na temi:

Mladen Picer, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Nevenka Picer, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Ana Škrilin, dip. inž. biotehnologije, znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Marija Hibić, peračica suđa

Program rada i rezultati na temi:

Područje krša Hrvatske s obzirom na ugroženost općenito otpadom zavređuje posebnu pozornost zbog izvanredno ekološki osjetljivog krša, a sada još i više zbog dodatnih posljedica ratnih razaranja. Postoji velika bojazan kao i konkretni dokazi da tokom ratnih stradanja značajne količine niza vrlo opasnih tvari i njihovih ostataka, ulazi u okoliš. Na osnovi dosadašnjih saznanja postoje dosta jake indikacije da je na nekoliko lokacija u krškom području došlo do prodora polikloriranih bifenila, poliaromatskih ugljikovodika te eksploziva i njihovih ostataka u okoliš. Zbog toga je potrebno što racionalnije prići problemu procjene realne ugroženosti izvorišta voda i mora na tim lokacijama na osnovi istraživanja razina ovih zagađivala u vodi i zemljištu kao i sorpcijskih osobina zemljišta, te procijeniti mogućnosti i prioritete njihovog eliminiranja iz otpada pa prema potrebi iz zemljišta i vode. U okviru istraživanja posljedica ratnih razaranja na pojavu povišenih razina polikloriranih bifenila u zemljištu kraj raketiranog trafo postrojenja Zadar, analiziran je sadržaj PCB u zemljišnim uzorcima sakupljenih na dvadeset i šest postaja. Na šest postaja uzorci su sakupljeni na dvije dubine (površinski sloj 0-5 cm i dubinski sloj 15 – 20 cm). U vezi istraživanja razina kloriranih ugljikovodika u dagnjama priobalnih postaja istočne obale Jadrana u sklopu Programa procjene i kontrole onečišćenja Mediterana, Nacionalni program za Hrvatsku suradnici Projekta sudjelovali su u interkalibraciji metoda analiza polikloriranih bifenila i kloriranih insecticida prema izvanredno zahtjevnom Programu QUASIMEME Laboratory Performance Studies – Round 28. Povodom raspisanog natječaja Europske Komisije u okviru "The fifth framework Programme (Call Identifier ICFP501A2PR02) učinjeni su veliki napor pri koordinaciji tzv. pregovornih materijala koji su uspješno doveli do potpisivanja Projekta s Europskom Komisijom: "Assessment of the Selected POPs (PCBs, PCDDs/F, OCPs) in the Atmosphere and Water Ecosystems from the Waste Materials Generated by Warfare in Area of Former Yugoslavia". Projekt će se raditi u 12 institucija s područja Hrvatske (3 institucije), Bosne i Hercegovine, Slovenije, SR Jugoslavije, Austrije, Grčke i Češke Republike. Znanstveni koordinator Projekta je dr. M. Picer, dok financijski koordinator je Masaryk University, Brno, Češka. "Ruđer Bošković" nije mogao biti financijski koordinator Projekta jer Hrvatska još nije punopravan pridruženi član Europske Unije.

Research programme and results:

The karstic area of Croatia warrants particular attention because of its exceptional ecological sensitivity to technology and hazardous wastes. The territory that was encompassed by warfare is in even greater jeopardy due to the unscrupulous destruction of natural resources, infrastructures, homes, enterprises etc. during the recent war in Croatia. During this war, enormous amounts of wastes and many hazardous materials were generated. There are great fears and concrete evidence those significant quantities of polychlorinated biphenyls; polyaromatic hydrocarbons, various flame-retardants, explosives and their by-products were released into the environment during warfare. It is very important to estimate the real threat of these substances to the endangered water ecosystems by inspection of the terrain at the polluted sites and control of the pollution levels of these with the assessment of the subterranean penetration of the pollutants based on existing hydrogeological data. Based on the results of the investigations described, it will be possible to prepare a specific program for the necessary hydrogeological investigation of the endangered areas and provide guidelines for remedial measures.

During 2002 within the Subproject of investigation the levels of DDTs and polychlorinated biphenyls in the mussels collected from the eastern Adriatic coastal waters within Programme for the assessment and control of pollution in the Mediterranean region, National monitoring programme, Croatia, laboratory staff was involved into the intercalibration exercises due to very challenging Program QUASIMEME Laboratory Performance Studies – Round 28.

It has been stressed that very large effort and time was spent in co-ordination of so called negotiations period which was finished signing the Contract with European Commission the Project: "Assessment of the Selected POPs (PCBs, PCDDs/F, OCPs) in the Atmosphere and Water Ecosystems from the Waste Materials Generated by Warfare in Area of Former Yugoslavia " as answer of European Commission "The fifth framework Programme (Call

Identifier ICFP501A2PR02). The Project will be done in 12 institutions from Croatia (3 institutions), Slovenia, Bosnia and Herzegovina, Kosovo, Serbia and Monte Negro, Austria, Czech Republic and Greece. Scientific co-ordinator of the Project is Dr.sc. Mladen Picer and financial co-ordinator is institution from Czech Republic. Rudjer Boskovic Institute is not financial co-ordinator because Croatia is not full associate country of the European Union.

Istraživanja izvan programa trajne istraživačke djelatnosti:

U Zavodu se također provode primijenjena istraživanja i praćenje stanja okoliša, Jadranskog mora i kopnenih voda u Hrvatskoj, prema projektima ugovorenim s Vladom Republike Hrvatske, Ministarstvom zaštite okoliša i prostornog uređenja, Državnom upravom za vode, Ministarstvom za promet i veze, te ostalih naručitelja. Prati se razina radioaktivnosti u okolišu, vezano uz rad nuklearnih elektrana, utvrđuje se utjecaj anorganskog i organskog zagađenja na kvalitetu vode i mora, tla i vodenih organizama, te provodi kontrola kvalitete u akvakulturi. Kao referentni i ovlašteni znanstveni laboratorij od Državne uprave za vode, Zavod koordinira i unapređuje rad ovlaštenih laboratorija za vode u Republici Hrvatskoj. Nastavljen je razvoj informacijskih sustava o okolišu, te razvoj integriranog sustava za nadzor unutrašnjih plovnih puteva za dio rijeke Dunav i Drava.

Research activities out of the continuous research programme:

In the Center for Marine and Environmental Research applied research and monitoring programme in the Adriatic Sea and in the continental regions of Croatia are carried out in the framework of the projects supported by the Government of the Republic of Croatia, the Ministry of Environmental Protection and Physical Planning, the State Water Directorate, the Ministry of Transportation and Communications and other contractors. Monitoring of radioactivity levels in the environment is carried out in connection with the operation of nuclear power plants, impact of inorganic and organic pollutants on the quality of freshwater, seawater, soil and aquatic organisms is investigated, and quality control in aquaculture is maintained. As authorized national reference laboratory appointed by the State Water Directorate, the Center coordinates and maintains high standards of the national laboratory network for water quality control in Croatia. Development of information systems for environmental management is continued as well as the development of integral system for river traffic management for the parts of the Danube and Drava rivers.

U realizaciji ovih istraživanja uz ranije navedene djelatnike Zavoda sudjelovali su:

Nikola Bošković, dipl. inž. kemijske tehnologije, stručni suradnik

Elvira Bura Nakić, dipl. inž. kemije

Dušica Jurić, magistrica biol. znanosti, stručna suradnica

Luka Mikelić, dipl. inž. kemije, stručni suradnik

Višnja Oreščanin, magistrica biol. znanosti, stručna suradnica

Od 1.7.2002. godine u okviru Zavoda provode se istraživanja na sljedećim znanstveno-istraživačkim projektima:

**ISTRAŽIVANJE PLIMNE I DUŽEPERIODIČNE DINAMIKE SJEVERNOG JADRANA
TIDAL AND LONGER-PERIOD DYNAMICS OF THE NORTHERN ADRIATIC**

Voditelj projekta: dr. sc. Milivoj Kuzmić

Tel: +385 1 456 1139

e-mail: kuzmic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Ivica Janeković, magistar oceanol. znanosti, asistent
Valter Krajcar, doktor fiz. znanosti, viši asistent
Nastjenjka Supić, doktorica fiz. znanosti, viša asistentica
Igor Tomažić, dipl. inž. fizike, mlađi asistent, znanstveni novak (od 1.9.2002.)

Suradnici iz drugih ustanova:

Joško Bobanović, doktor fizičke oceanografije (Dalhousie University), Kanada (konzultant)
Branka Ivančan-Picek, doktorica fiz. znanosti, DHMZ, Zagreb (konzultantica)

Program rada i rezultati na projektu:

Okrajnja mora poput Jadranskog područja su u kojima se fizički i biogeokemijski procesi odvijaju pod naglašenim utjecajem prirodnih granica, uz istovremenu izloženost štetnim posljedicama ljudskih aktivnosti. Tri čimbenika dominiraju njihovom dinamikom. To su vjetar, riječni izljevi te morska doba. U sjevernom Jadranu pretežu prva dva, a ni treći nije zanemariv. Sjeverni Jadran je izložen intenzivnim singularnim događajima (izuzetni izljevi rijeke Po, epizode jake bure) koji izazivaju naglašene prostorne i vremenske gradijente fizikalnih veličina. Takovi gradijenti uzrokuju akutne i naknadne promjene pa je važno odrediti fizički odziv sustava na više prostornih i vremenskih skala. Pristup koji obećava najbolje izgleda za uspjeh je predložena kombinacija izravne interpretacije in situ i daljinskih mjerenja te matematičkog modeliranja, uz asimilaciju podataka. Središnji očekivani rezultat je bolje razumijevanje dinamike tri odabrana segmenta gibanja u sjevernom Jadranu, kao i njihovog zbirnog djelovanja, te razvitak skupa sjeverno-jadranskih modela korisnih u primjeni i daljnjim istraživanjima. Specifični očekivani rezultati su što točnija modelska reprodukcija strujnog polja izazvanog djelovanjem plimotvorne sile, dokumentiranje i interpretacija odziva, prvenstveno priobalja zapadne Istre, na buru i druge vjetrove, modelska i empirijska reprodukcija sezonske promjenjivosti geostrofičke cirkulacije te izdvajanje karakterističnih prostornih oblika i vremenskih ritmova na temelju daljinski detektirane temperature Jadrana. Značenje predloženog istraživanja je u novim saznanjima o izabranim segmentima dinamike sjevernog Jadrana, u doprinosu prognostičkom razumijevanju, promjeni i zaštiti njegova ekosustava, te u kontinuitetu potpore pruženom primjeni daljinskog pronicanja mora, u nas još uvijek deficitarne aktivnosti. Tijekom 2002. godine (kolovoz – prosinac) pokrenuta su intenzivna in situ mjerenja, i lokalni prijem satelitskih podataka, te započeta priprema matematičkih modela za potrebe istraživanja odabranih segmenta gibanja u Jadranskom moru.

Research programme and results:

In marginal seas like Adriatic physical and biogeochemical processes are under pronounced influence of the natural boundaries, simultaneously exposed to harmful consequences of human activities. Three factors dominate marginal sea dynamics: sea surface fluxes, river discharges and tides. In the northern Adriatic (nA) the first two are prominent, but the third can not be ignored either. The nA is exposed to intense singular events (e.g. excessive Po river discharges, strong bora episodes) which provoke pronounced spatial and temporal gradients of physical variables. Those gradients cause immediate and delayed changes necessitating identification of the system's response at several spatial and temporal scales. The most promising solution approach appears to be a combination of in situ and remote measurements with numerical modeling and data assimilation. The principal expected result is an improved understanding of the three nA flow segments and their interactions, plus development of modeling tools to aid future applications and research. Specific expected improvements include better model reconstruction of the nA tidal current field, better documentation of the west Istrian coastal zone response (in particular) to bora and other major winds, modeling and empirical reconstruction of seasonal variability of the geostrophic circulation, and extraction of characteristic spatial patterns and temporal rhythms (interannual variability) based on remotely sensed Adriatic SST. This research is expected to advance our understanding of the three parts in the nA spectrum of motions, as well as

contribute to development of predictive capabilities in Adriatic ecosystem protection programs. Last but not least, the project promotes, often ignored but much needed, development of local (Croatian) remote sensing capabilities. During the year 2002. (August – December) an intensive in situ measurements and local reception of satellite data have been started, and preparation of numerical models initiate to study the selected segments of the Adriatic Sea dynamics.

ANALITIKA I BIOGEOKEMIJA ORGANSKIH SPOJEVA U VODENOM OKOLIŠU ANALYSIS AND BIOGEOCHEMISTRY OF ORGANIC COMPOUNDS IN THE AQUATIC ENVIRONMENT

Voditelj projekta: dr. sc. Marijan Ahel
Tel: ++385 1 4561 042, e-mail: ahel@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Marijan Ahel, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik
Tvrtko Smital, doktor biol. znanosti, Zavod za istraživanje mora i okoliša (konzultant)
Nataša Tepić, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Senka Terzić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Tehnički suradnik:

Nenad Muhin, tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Damir Viličić, doktor biol. znanosti, redovni profesor, Biološki odsjek Prirodoslovno-matematičkog fakulteta, Zagreb
Mira Petrović, doktorica kem. znanosti, IIQAB-CSIC, Barcelona, Španjolska
Alenka Malej, doktorica biol. znanosti, profesor, Morska biološka postaja, Piran, Slovenija (konzultantica)
Walter Giger, doktor kem. znanosti, profesor, EAWAG, Duebendorf, Švicarska (konzultant)

Program rada i rezultati

Za pravovremenu i ispravnu procjenu okolišnog rizika i poduzimanje mjera za njegovo smanjenje potrebno je visokoselektivnim metodama identificirati ekotoksikološki najopasnije skupine spojeva i ograničiti njihovu upotrebu prije nego li započne njihova masovna industrijska proizvodnja ili dođe do opasnih ekoloških incidenata. Racionalno planiranje potrebnih mjera temelji se na poznavanju biogeokemijskog ponašanja pojedinih spojeva pri čemu je nužno razumjeti složene mehanizme i procese koji određuju njihovu raspodjelu i transformaciju u okolišu te identificirati tzv. kritične puteve s obzirom na moguće štetne posljedice. Cilj ovog projekta je identifikacija novih potencijalno štetnih tipova zagađivala okoliša s posebnim naglaskom na perzistentne spojeve polarnijeg karaktera koji zbog svoje veće topljivosti u vodi pokazuju veliku pokretljivost u vodenim ekosustavima. Od antropogenih spojeva posebna će pozornost biti posvećena spojevima farmaceutskog porijekla, tenzidima i njihovim razgradnim proizvodima te spojevima s endokrinim djelovanjem. Prirodni organski spojevi, poput fotosintetskih pigmenata i ugljikohidrata, odlični su pokazatelji eutrofikacijskih procesa. U okviru ovog projekta bit će nastavljena istraživanja raspodjele fotosintetskih pigmenata i ugljikohidrata u estuarijima i priobalnom moru, a posebna će pozornost biti posvećena detaljnijoj kvalitativnoj karakterizaciji ugljikohidrata. Istraživanja dinamike fitoplanktona primjenom kemotaksonomskih pigmenata bit će proširena na neke nove biomarkerske pigmente (divinilklorofil a), koji bi trebali omogućiti bolji uvid u sastav pikoplanktona. Posebna pozornost bit će i nadalje posvećena odnosu ugljikohidrata i fotosintetskih pigmenata i njihovoj ulozi u nastajanju sluzavih agregata u sjevernom Jadranu.

Research program and results

For a timely and rational assessment of the environmental risk and risk reduction management it is essential to identify all classes of organic compounds that might be of environmental concern before starting their massive production and before serious ecological accidents begin to happen. A rational planning of risk reduction measures for a given contaminant must be based upon the knowledge on environmental processes, which govern its biogeochemical behaviour. The specific goal of the proposed project is the identification of new classes of potentially toxic aquatic contaminants and possible critical patterns leading to harmful effects. A special emphasis will be on more polar compounds, which, due to their high solubility in water, display an enhanced mobility in the aquatic environment. A special attention will be paid to pharmaceutical compounds, nonionic surfactants and their metabolites and endocrine-disrupting compounds. Natural organic compounds, such as photosynthetic pigments and carbohydrates, are excellent markers of eutrophication processes. Within the proposed project we shall continue our comprehensive investigations into the distribution of these compound classes in estuaries and coastal waters. A more detailed characterisation of monosaccharide composition will be performed. Investigation of phytoplankton dynamics using the chemotaxonomic biomarker approach will be improved by considering divinyl chlorophyll a. This should allow a better insight into the importance of prochlorophytic picoplankton. Furthermore, a special attention will be paid to the relationship between carbohydrates and photosynthetic pigments, in particular their role in the formation of mucous aggregates in the northern Adriatic.

FIZIKALNA I BIOGEO-KEMIJA TRAGOVA METALA U VODENIM SUSTAVIMA PHYSICAL CHEMISTRY AND BIOGEOCHEMISTRY OF TRACE METALS IN AQUATIC SYSTEMS

Voditelj projekta: dr.sc. Marko Branica

Tel: ++385 1 4680 231 e-mail: branica@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Marko Branica, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Vlado Cuculić, magistar oceanol. znanosti, asistent

Neven Cukrov, magistar geol. znanosti, asistent, znanstveni novak

Renata Đogić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Dario Omanović, doktor kem. znanosti, viši asistent, znanstveni novak

Ivanka Pižeta, doktorica elektroteh. znanosti, viša znanstvena suradnica

Vesna Stipaničev-Žic, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnici:

Željko Kwokal, tehničar suradnik

Željko Peharec, tehničar suradnik

Program rada i rezultati na projektu:

Proučavana su fizičko-kemijska svojstva tragova metala, kinetika kao i biogeokemijske ravnoteže, što uključuje hidrataciju, hidrolizu, kompleksiranje, adsorpciju/desorpciju, redoks stanja i promjene raspodjele oblika tragova metala u vodenim sustavima uzrokovane prirodnim i antropogenim utjecajima. Istraživani su dominantni biogeokemijski putevi i procesi tragova metala u prirodnim i zagađenim vodenim sustavima. Neki su osnova za održavanje života na zemlji (Fe, Zn, Cu, I) dok su drugi ekotoksični (Hg, Cd, Pb, U). Mjerene su konstante ravnoteže pojedinačnih reakcija, te su izračunavane raspodjele kemijskih vrsta i brzine transformacije metala iz jednih u druge kemijske vrste. Usavršavana je automatizacija postupaka i metoda mjerenja. Provjera rezultata bazirana je na usporedbi s drugim nezavisno dobivenim rezultatima, kao i provjerama na modelnim otopinama i standardima. Istraživane su interakcije iona metala s makro- i mikrokonstituentima vodene faze, sedimentima i biotom u prirodi.

- Nastavljen je rad na automatizaciji elektroanalitičkih mjerenja i razvoju programa za obradu i prezentaciju rezultata mjerenja,
- Detaljno je istraživano ponašanje kompleksa željeza, cinka, kadmija, olova, bakra, žive i dr. metala u modelnim vodenim medijima,
- Nastavljeno je praćenje raspodjele žive u okolišu i razumijevanje njenog biogeokemijskog kruženja u prirodnim vodenim sustavima,
- Utvrđene su raspodjele jodida, jodata i organskih kompleksa (spojeva) joda u estuariju rijeke Krke i Rogozničkom jezeru, te su utvrđivani procesi koji se zbivaju u dodirnom sloju riječne i morske vode u estuariju te granici oksija-anoksija i voda-sediment u Rogozničkom jezeru,
- sistematskim istraživanjem određeni su osnovni parametri koji definiraju osjetljivost i ponovljivost mjerenja s mikroelektrodama,
- dobivena su nova saznanja i poboljšano razumijevanje fizičko-kemijskih čimbenika koji utječu na raspodjelu uranskih vrsta u vodenom okolišu.

Research programme and results:

Physico-chemical characteristics of trace metals were studied, as well as their reaction kinetics and biogeochemical equilibria, including hydration, hydrolysis, complexation, adsorption/desorption, redox states and changes in speciation of trace metals in aquatic systems influenced by natural and anthropogenic processes. The dominant biogeochemical reaction pathways and processes of trace metals were studied in natural and contaminated aqueous environments. Some of these elements are essential to sustain life (Fe, Zn, Cu, I) while others are ecotoxic (Hg, Cd, Pb, U). Equilibrium constants of specific reactions were measured and speciations were calculated including the rates of transformation of metals between different chemical species. Further development of automation processes and measurement methods was done. The data quality assessment is based on their comparison with results obtained by independent methods, as well on studies of model systems and reference standards. Interactions of metal ions with major and minor constituents of aquatic phases, sediments and biota were studied.

Specific research activities on the project involved also:

- continuation of development of automation of electroanalytic measurements, including the development of software tools for data handling and presentation;
- the behaviour of complex species of Fe, Zn, Cd, Pb, Cu, Hg etc. in model aqueous media was studied in detail;
- continuation of studies on the behaviour of mercury in the environment, including its biogeochemical cycle in natural aquatic environments;
- studies on the distribution of iodide, iodate and organic iodine species in the Krka river estuary and the Rogoznica lake were continued. Processes occurring on the interfaces in the estuary (fresh/saline water) and in the Rogoznica lake (oxic/anoxic and sediment/water) were investigated;
- systematic studies were done to identify the basic parameters which control the sensitivity and reproducibility of measurements using microelectrodes;
- new understanding of the physico-chemical characteristics and behaviour of uranium and its distribution in aquatic environments.

PRIRODA I REAKTIVNOST ORGANSKIH TVARI U MORU I OKOLIŠU NATURE AND REACTIVITY OF ORGANIC SUBSTANCES IN MARINE AND ENVIRONMENT

Voditeljica projekta: dr. sc. Božena Čosović

Tel: ++385 1 46-80-127 e-mail: cosovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Irena Ciglenečki Jušić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Božena Čosović, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Sanja Frka, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Blaženka Gašparović, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Zlatica Kozarac, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Damir Krznarić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik
Marta Plavšić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Vjeročka Vojvodić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Nikola Bošković, dipl.inž. kemije (konzultant)
Dubravko Risović, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik (konzultant)

Tehnički suradnik:

Zdeslav Zovko, samostalni tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Palma Orlović Leko, doktorica tehn. znanosti, viša asistentica, Rudarsko-geološko-naftni fakultet, Sveučilište u Zagrebu
Cindy Lee, doktorica kem. znanosti, redovita profesorica, Mar. Sci. Res. Center, SUNY, New York, NY, SAD (konzultantica)
Paul Wassmann, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, University of Tromso, Tromso, Norveška (konzultant)
Dietmar Möbius, doktor kem. znanosti, Max-Planck Institut für biophysikalische Chemie, Göttingen, Njemačka (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Organska tvar je važan ali nedovoljno ispitan sastojak prirodnih voda, koji ima dominantnu ulogu u mnogim procesima: biološkim (primarna proizvodnja, mikrobiološka razgradnja), geološkim (sedimentacija) i kemijskim (kompleksiranje metala, fotokemijski i oksido-redukcijski procesi, flokulacija, adsorpcijske pojave). Kako je reaktivnost organskih tvari mnogo važnija u biogeokemijskim procesima nego ukupna količina, u ovom projektu će se istraživanjima povezati mjerenje reaktivnosti i koncentracije, tako da bi se utvrdio udio visoko reaktivnih sastojaka u ukupnoj količini organskih tvari. Usporedit će se adsorpcijska svojstva organskih tvari s koncentracijama otopljenog organskog ugljika (DOC) i partikulatnog organskog ugljika (POC) u uzorcima morske vode, mikrosloju površine mora i pornoj vodi sedimenta. Ispitat će se doprinos raznih tipova spojeva površinskoj aktivnosti uzorka, s obzirom na molekulsku masu i hidrofobnost pojedinih komponenata u složenoj smjesi organskih tvari, te procijeniti moguće uloge reduciranih oblika sumpora i iona kalcija i magnezija u procesu polimerizacije organskih tvari u moru. Istraživanje će se obavljati paralelno u nekoliko smjerova: (a) laboratorijska ispitivanja modelnih tvari i njihovih smjesa, te ispitivanje uvjeta mjerenja i korištenje elektrokemijskih proba, koje se zatim primjenjuje kod ispitivanja stvarnih uzoraka vode, (b) usporedba adsorpcijskih pojava organskih tvari na raznim tipovima površine, strukture adsorbiranih slojeva i njihova fraktalna svojstva, (c) fizičko-kemijska svojstva monoslojeva na granici zrak/voda, te razvoj od laboratorijskih mjerenja do in situ ispitivanja mikrosloja površine mora, (d) ispitivanje interakcije organskih tvari s metalima i sumporom, (e) terenska ispitivanja specijacije, raspodjele i sezonskih promjena organskih tvari u moru i ušću, i (f) terenska ispitivanja kopnenih voda s posebnim naglaskom na kvalitetu podzemnih voda i određivanje organskih tvari u oborinama (kiša, snijeg).

Research program and results:

Organic matter is an important yet insufficiently investigated constituent of natural waters which has a dominant role in many processes: biological (primary production, microbial degradation), geological (sedimentation) and chemical processes (complexation of metals, photochemical and oxidoreduction processes, flocculation, adsorption phenomena). Since the reactivity of organic substances is often more important in biogeochemical processes than the amount present, the aim of the research is to combine the measurements of

reactivity and concentration so that the percent of the total amount present that is highly reactive could be determined. It is intended to investigate organic substances with surface active properties in the pool of dissolved (DOC) and particulate organic carbon in seawater samples, sea surface microlayer and sediment and pore water. The investigations are especially expected to result in providing new insight in the dynamics of physicochemical transformations between the dissolved, particulate and colloid organic matter in the Adriatic Sea as well as on the distribution of total organic matter according to molecular mass, hydrophobic-hydrophilic properties and representation of specific functional groups. Investigation will be run in parallel in several directions: (a) laboratory examinations of model substances and their mixtures, as well as examinations of measurement conditions and usage of electrochemical probes, which will subsequently be applied in examinations of natural water samples, (b) comparison between organic substances adsorption on different types of surfaces, the structure of adsorbed layers and their fractal properties, (c) physicochemical properties of monolayers at the air/water interface and development from laboratory measurements to in situ examinations of the sea surface layers, (d) investigations of organic substances interaction with metals and sulfur, (e) field investigations of the speciation, spatial distribution and seasonal variations of organic substances in marine and estuarine waters, and (f) field investigations of aquatic systems in the continental region with special emphasis on water quality of groundwaters and determination of organic substances in atmospheric precipitations (rain, snow).

ELEKTROANALITIČKA ISTRAŽIVANJA U TEKUĆIM I KRUTIM ELEKTROLITIMA ELECTROANALYTICAL RESEARCH IN LIQUID AND SOLID ELECTROLYTES

Voditelj projekta: dr.sc. Milivoj Lovrić

Tel: ++385 1 45 61 046 email: slovric@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Šebojka Komorsky-Lovrić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Milivoj Lovrić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Marina Zelić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj projekta je opće unapređenje znanja u granama elektrokemije i analitičke kemije. Svrha rada je istraživanje elektrokemijskih procesa na različitim tipovima elektroda radi razvoja novih analitičkih metoda. Razvijat će se elektroanalitičke metode primjenom voltametrijskih i potenciometrijskih tehnika u kombinaciji s raznim fizičkokemijskim postupcima akumulacije analita na površini elektrode. Proučavat će se svojstva krutih tvari koje su elektronski i ionski vodiči i procesi prijenosa iona preko granice dviju tekućih faza.

Rad na projektu započeo je 1.VIII 2002., a prvi rezultati istraživanja objavljeni su u 7 znanstvenih radova. Nastavljen je rad na površinskim redoks reakcijama i CE i EC mehanizmima u polarografiji i pravokutnoj voltametriji. Mjerene su energije prijelaza organskih aniona iz vode u nitrobenzen. Određivane su konstante stabilnosti metalnih kompleksa u vodenim otopinama različite kiselosti.

Istražen je utjecaj lateralnih interakcija među adsorbiranim molekulama reaktanta na odzive reverzibilnih redoks reakcija u cikličkoj stepenastoj voltametriji. Razvijeni su matematički modeli kvazireverzibilnih CE i EC mehanizama na sferičnim mikroelektrodama pod uvjetima pravokutnovalne voltametrije. Analizirana je kinetika dehidracije karbonilnih spojeva i određene su konstante brzina dehidracije acetaldehida, piruvične i glioksilne kiseline i formaldehida. Izmjerene su standardne Gibbsove energije prijelaza iz vode u nitrobenzen slijedećih organskih aniona: formiat, acetat, propionat, butirat, valeriat, kapronat, oenantat, kaprilat, pelargonat, kaprinat, benzoat, salicilat i acetilsalicilat. Diskutiran je utjecaj pH otopine na pomak poluvalnog potencijala polarograma kinetički labilnih metalnih kompleksa pri konstantnom omjeru koncentracija metala i liganda. Određeni su uvjeti pod kojima je

moгуće odrediti dominantni kompleksni ion i diskutirane su moguće greške u interpretaciji rezultata ako se navedeni uvjeti zanemare.

Research programme and results:

A goal of the project is to extend the knowledge in the fields of electrochemistry and analytical chemistry. The purpose of the work is to investigate electrochemical processes on various types of electrodes in order to develop new analytical methods. Using voltammetric and potentiometric techniques combined with various physicochemical procedures for the accumulation of analytes on the surface of electrodes, the new electroanalytical methods will be developed. The properties of solids that are both electronic and ionic conductors, as well as the processes of ion transfer across liquid/liquid interfaces will be investigated. The work on the project started on 1.VIII 2002. and the first results of the research were published in 7 scientific papers. The work on surface redox reactions, as well as on CE and EC mechanisms in polarography and square-wave voltammetry (SWV) was continued. The energy of transfer of organic anions from water into nitrobenzene was measured. The stability constants of metal complexes were determined in aqueous solutions of various pH. The influence of lateral interactions between adsorbed molecules of the reactant on the responses of reversible redox reactions in cyclic staircase voltammetry was investigated. Mathematical models for quasi-reversible EC and CE mechanisms on spherical microelectrodes were developed for SWV. The kinetics of dehydration of carbonyl compounds was analysed and the dehydration rate constants of acetaldehyde, pyruvic and glyoxylic acids and formaldehyde were determined. The standard Gibbs energies of transfer across the water/nitrobenzene interface were measured for the following organic anions: formiate, acetate, propionate, butyrate, valerate, capronate, oenanthate, caprylate, pelargonate, caprinate, benzoate, salicylate and acetylsalicylate. The influence of pH of solutions on the shift of half-wave potentials of polarograms of kinetically labile metal complexes at a constant ligand to metal ratio was discussed. The conditions for identification of the major complex species were postulated, and possible errors in the interpretation of results, if these conditions were neglected, were described.

MODELIRANJE I INFORMACIJSKI SUSTAV ZAŠTITE VODA I NADZORA PLOVIDBE MODELS AND INFO. SYSTEMS FOR ENVIRONMENTAL PROTECTION AND NAVIGATION MANAGEMENT

Voditelj projekta: dr. sc. Ivica Ružić

Tel.: ++385 1 4561 140 Mobitel: 098-480 671 Fax: ++385 14680 117 e-mail:
ruzic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Sonja Beč, dipl. inž. elektrotehnike, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 1.12.2002)

Zoran Ereš, dipl. inž. elektrotehnike, stručni suradnik (od 17.6.2002)

Jadranka Pečar-Ilić, doktorica elektroteh. znanosti, viša znanstvena asistentica, znanstvena novakinja

Ivica Ružić, doktor. kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Bogdan Sekulić, doktor biol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Program rada i rezultati na projektu:

Modeliranje rasprostranjenja zagađivala u površinskim i podzemnim vodama i moru. Razvoj matematičkih modela kemijskih reakcija u otopinama i na granicama faza kruto-tekuće i njihove primjene za interpretaciju eksperimentalnih podataka o takvim procesima. Razvoj informacijskih i komunikacijskih sustava za istraživanje prirodnih voda. Primjena GIS i digitalnog procesiranja slike u istraživanju prirodnih voda i nadzoru plovidbe. Procjena unosa nutrijenata, ugljikovodika i teških metala, od strane antropogenih izvora na priobalnim i otočnim općinama (stanovništvo, turisti i industrija) u more Republike Hrvatske. Razvoj informacijskih sustava za nadzor plovidbe. Razvoj nacionalnog standarda i kataloga objekata

tipova i odgovarajućih atributa za Republiku Hrvatsku. Harmonizacija nacionalnih standarda sa standardima UNECE i Europskim standardom za Inland ECDIS.

Nastavljen je razvoj informacijskih sustava o okolišu i nadzoru plovidbe. Nastavljen je razvoj distribuiranog i multimedijskog integralnog informacijskog sustava za upravljanje podacima o kvaliteti površinskih voda i nadzor riječnih plovnih putova s direktnim pristupom bazama podataka i prikazom aplikacija koristeći Internet i dinamičku WWW tehnologiju. Izrađena je baza podataka o znakovima i oznakama na vektorskoj digitalnoj karti rijeke Dunava i dijela rijeke Drave od Osijeka do ušća u Dunav, razmjera 1:10000. Digitalna karta integrirana je sa relacijskom bazom podataka o plovnom putu, preprekama na plovnom putu, navigacijskim oznakama i hidrološkim informacijama od značaja za riječnu plovidbu. Započet je razvoj modela podataka za informacijski sustav plovnog puta. Izrađen je prijedlog kodiranja znakova i oznaka na riječnim plovnim putovima koji uključuje primjenu i proširenje Europskih propisa CEVNI. Izrađen je također i prijedlog kataloga objektnih tipova i odgovarajućih atributa koji uključuje Europski standard Inland ECDIS, CROTIS i sustav koji se razvija u okviru GIS Forum Danube.

Nastavljen je rad na analizi antropogenih i prirodnih izvora zagađenja, te procjene količina zagađivala koja otpadnim vodama i prirodnim vodotocima dopjevaju u Jadransko more. Procjene se vrše na razini naselja, regije i cijelog akvatorija Jadrana.

Research programme and results:

Modelling of spreading of pollutants in surface and ground waters and the sea. Development of mathematical models of chemical reactions in solutions, at the solid-liquid interfaces and their application for the interpretation of experimental results about natural waters.

Application of GIS and digital image processing in investigation of natural waters and navigation surveillance. Assessment of the input of nutrients, hydrocarbons and heavy metals of antropogenic origin from the coastal region and islands into the sea.

Development of information systems in navigation surveillance. Development of a national standard and object types catalogue with corresponding Attributes for the Republic of Croatia. Harmonisation of national standard with standards of UNECE and European Standards for Inland ECDIS.

Development of information systems for environmental management and navigation surveillance is continued. Development of distributed multimedia integral information system for management of data on water quality and river navigation surveillance is continued which will enable direct access to databases and application development by using Internet and dynamic Web technology.

A special database for signs and marking of waterways on vector digital map of the Danube river and a part of Drava river from Osijek to the mouth of Drava into the Danube was produced in the scale of 1:10000. This digital map is integrated with relational database on fairway, obstacles to navigation, navigation marks and relevant hydrological information. On the basis of digital map produced detailed surveillance of the fairway is performed.

Development of data model for the information system on river navigation was initiated.

Proposal for coding of signs and marking of waterways which include the use and extension of European CEVNI Code is produced. A proposal for the catalogue of object classes and corresponding attributes, including European Inland ECDIS Standard, CROTIS and a system under development by GIS Forum Danube is created as well.

Analysis of anthropogenic and natural sources of pollution is continued, and the quantities of pollutants in waste water and natural waters which are transported from individual settlements, local communities and regions into the Adriatic aquatorium are estimated.

AKVAKULTURA I OČUVANJE EKOLOŠKE OSOBITOSTI AKVATORIJA PROTECTION OF BIOCOENOTIC BALANCE IN AQUACULTURE RECEIVING WATERS

Voditelj projekta: dr. sc. Emin Teskeredžić

Tel/Fax: ++385 1 4680 943 e-mail: etesker@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Božidar Kurtović, magistar oceanol. znanosti, asistent, znanstveni novak
Emin Teskeredžić, doktor biotehno. znanosti, znanstveni savjetnik
Zlatica Teskeredžić, doktorica biotehno. znanosti, znanstvena savjetnica
Marija Tomec, doktorica biol. znanosti, viša asistentica
Irena Vardić, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 2.12.2002.)

Tehnički suradnici:

Zdenko Roman, viši tehničar
Zvezdana Šošarić, kemijska tehničarka
Branislav Španović, viši tehničar

Suradnik iz druge ustanove:

Ewen McLean, doktor biol. znanosti, Virginia Polytechnic Institute and State University,
Department of Fisheries and Wildlife Sciences, Blacksburg, SAD (konzultant)

Program rada i rezultata projekta:

Budući da kakvoća vode utječe na patofiziološku sliku organizama, kontrolirano je njihovo stanje s obzirom na pojavu morbiditeta. U tu svrhu provedena su istraživanja patohistološkog statusa, biokemijskih parametara, resorpcije hranjivih sastojaka, pojave bakterijskih, virusnih i parazitarne bolesti, tehnologije uzgoja i ishrane uzgajanih i divljih populacija riba.

Rezultati laboratorijskih pretraga uzetih materijala jetre, slezene i bubrega od cipla i lubina, a nasađenih na morske TSA podloge pokazali su prisustvo rodova *Pasteurela*, *Aeromonas*, *Pseudomonas* i *Streptococcus*. Parazitološkom pretragom nativnih preparata kože, škrga i peraja ustanovljeno je prisustvo ektoparazita *Gyrodactylus* sp. I *Ichthyophthirius multifiliis*.

Histološkom pretragom u jetri lubina je utvrđena masna infiltracija. Prosječan broj melanomakrofagnih centara (MMC) je bio povećan u jetri lubina. Upalne promjene u jetri su utvrđene kod 40 lubina. Prosječan broj MMC-a je bio povećan u slezeni lubina. U bubregu lubina su utvrđeni atrofija i liza glomerula te degenerativne i nekrotične promjene na tubulima. Granulomatozne su promjene utvrđene kod 4 lubina.

Na osnovu rezultata kemijske analize mesa cipala ustanovljeno je da se količina vlage kretala između minimalno 69,28% i maksimalno 75,34%, količina proteina od 22,19-26,28%, pepela od 1,57-1,76%, dok je količina masti varirala između 0,35 i 10,32%. S obzirom na dobivene rezultate možemo zaključiti da su ulovljeni uzorci cipla bogati na količini proteina uz relativno niske vrijednosti masti koje su upravo proporcionalne s količinom vlage. Na osnovu rezultata kemijskih analiza mesa lubina ustanovljeno je da se količina vlage kretala između minimalno 68,74% i maksimalno 80,23%, količina proteina od 17,48-25,19%, pepela od 1,06-2,38%, dok je količina masti varirala između 0,10 i 5,99%. S obzirom na dobivene rezultate možemo zaključiti da su ulovljeni primjerci lubina bogati na količini proteina uz relativno niske vrijednosti masti koje su upravo proporcionalne s količinom vlage. Na osnovu rezultata kemijske analize mesa klana ustanovljeno je da se količina vlage kretala od minimalno 77,11 % do maksimalno 78,79 %. Količina je pepela bila između 1,09% i 1,76% , količina je proteina bila minimalno 19,62%, a maksimalno 21,30%. Količina je masti bila je od 0,16% do maksimalno 1,38%.

Na osnovu rezultata kemijske analize mesa mreke ustanovljeno je da se količina vlage kretala od minimalno 74,39 % do maksimalno 75,00 %, a u prosjeku je iznosila 74,74%. Količina je pepela bila između 1,29 i 1,46% sa prosjekom od 1,35%. Količina je proteina bila minimalno 21,92%, a maksimalno 23,65% što je u prosjeku iznosilo 22,61%. Prosječna količina masti bila je 1,15%, a kretala se od minimalno 0,35% do maksimalno 1,68%. Na osnovu rezultata kemijske analize mesa podusta ustanovljeno je da se količina vlage kretala od minimalno 74,16 % do maksimalno 76,38 %, a u prosjeku je iznosila 75,03%. Količina je pepela bila između 1,06 i 1,29% sa prosjekom od 1,16%. Količina je proteina bila minimalno 20,33%, a maksimalno 22,78% što je u prosjeku iznosilo 21,62%. Prosječna količina masti bila je 2,07%, a kretala se od minimalno 1,20% do maksimalno 3,59%. Rezultati analiza uzoraka mrežnog fitoplanktona (Jadran) ukazali su na dominantnost Bacillariophyceae , kao i

na veću koncentraciju jedne vrste (*Ceratium furca* - Dinophyceae) što može biti povezano s povećanom koncentracijom nutrienata u vrijeme istraživanja ili sezonskim ritmom primarne produkcije. U uzorcima bentosa rijeke Save prevladavale su mikrofitske alge iz skupine Bacillariophyceae, koje ukazuju na beta-mesosaprobni karakter istraživanih lokaliteta. Analizom crijevnog sadržaja riba (mrena, podust i klen) utvrđene su uglavnom Bacillariophyceae, te biljni i životinjski detritus.

Research programme and results:

Considering the known influence of water quality on pathophysiological conditions of aquatic organisms, health conditions of aquatic organisms has been controlled for the occurrence of diseases. To this purpose investigations were performed of biochemical parameters, resorption of nutrients, occurrence of bacterial, viral and parasitic diseases as well as the investigations of the technology of culture and nourishment of cultured and wild organisms. The results of the laboratory examination of liver, spleen and kidney tissues of mullets and seabass (on TSA agar) shown the presence of *Pasteurela*, *Aeromonas*, *Pseudomonas* and *Streptococcus*. By parasitological examination ectoparasites were determined, *Gyrodactylus* sp. and *Ichthyophthirius multifiliis*.

Histological examination revealed fat degeneration in the liver of sea bass. Mean number of melaomacrophage centers (MMC) was increased in the liver of sea bass. Accumulation of inflammatory cells was detected in 40 sea bass. Mean number of MMC was increased in the spleen of sea bass. In kidney were detected atrophy and lysis of glomerular tufts and degenerative changes in the tubules. Granulomes were detected in 4 fish.

Based on the chemical analyses of mullet meat it was determined the level of water varied between 69.28% and 75.34%, protein level from 22.19% to 26.28%, ash from 1.57%-1.76%, and fat level from 0.35% and 10.32%. Based on the obtained results of chemical analyses of seabass meat it was determined the water level of minimal 68.74% and maximal 80.23%, protein level from 17.48% - 25.19%, ash from 1.06%- 2.38%, and fat level varied between 0.10% and 5.99%. Based on the obtained results mullets and seabass belong to the group of fish with high level of protein contain. Based on the chemical analyses of chub meat it was determined the level of water varied between 77.11% and 78.79%, protein level from 19.62% to 21.30%, ash from 1.09% to 1.76%, and fat level from 0.16% to 1.38%. Based on the chemical analyses of bream meat it was determined the level of water varied between 74.39% and 75.00% , protein level from 21.92% to 23.65%, ash from 1.29% to 1.46%, and fat level from 0.35% to 1.68%. Based on the chemical analyses of nose-carp meat it was determined the level of water varied between 74.16% and 76.38%, protein level from 20.33% to 22.78%, ash from 1.06% to 1.29%, and fat level from 1.20% to 3.59%. The results of the analyses of net phytoplankton (Adriatic Sea) shown the dominant presence of Bacillariophyceae as well as higher concentration of species *Ceratium furca* – Dinophyceae what could be connected with higher concentration of nutrients at that time of investigations. In the river Sava benthos Bacillariophyceae were dominant, which point to beta-mesosaprobic degree of investigated locality. The results of the analyses of gut contents of fish (bream, nose-carp and chub) shown presence of Bacillariophyceae, and plants and animals detritus.

PRIPRAVA I SVOJSTVA POVRŠINA METALA OD ZNAČAJA U ZAŠTITI OKOLIŠA PREPARATION AND PROPERTIES OF METAL SURFACES IN THE ENVIRONMENTAL PROTECTION

Voditelj projekta: dr. sc. Marijan Vuković

Tel: ++3851 4680 124 e-mail: mvukovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Dunja Čukman, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Višnja Horvat-Radošević, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Krešimir Kvastek, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Momir Milunović, dipl. inž. elektroteh., stručni suradnik

Ivan Sondi, doktor geol. znanosti, znanstveni suradnik
Marijan Vuković, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Srećko Karašić, samostalni tehničar

Program rada i rezultati na projektu:

Od rada na Projektu očekuju se nova saznanja o korelaciji između parametara pripreme i specifičnih svojstava površina tankih filmova i monodisperzija nanočestica metala i metalnih spojeva. Definirat će se načini pripreme za formiranje površina s izrazitim kapacitorskim i /ili elektrokatalitičkim svojstvima izuzetno visoke električne vodljivosti kao i specifikacija nužnih pretpostavki za moguću primjenu ovih površina u elektrokemijskim uređajima od posebnog značenja u zaštiti okoliša.

Research programme and results:

From the work on the Project new insights are expected about the correlation between parameters of preparation of thin films and monodispersion of nanoparticles of metals and metal compounds and properties of specifically prepared surfaces. Preparation methods that make surfaces of pronounced electrocatalytical or capacitor properties and highly electrically conductive, will be defined, as well as specification of necessary conditions for possible application of specifically prepared surfaces in electrochemical devices relevant to the environmental protection.

**MEĐUPOVRŠINSKI PROCESI I EUTROFIKACIJA
INTERFACIAL PROCESSES AND EUTROPHICATION**

Voditeljica projekta: dr. sc. Vera Žutić

tel: ++ 385 1 4561 128 e-mail: zutic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Amela Hozić, dipl. inž. kemijske tehnologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja
Nadica Ivošević, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Vesna Svetličić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Helena Štorek, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 1.8.2002.)
Vera Žutić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica
Goran Baranović, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik (konzultant)
Mladen Martinis, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik
Mirjana Petranović, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica (konzultantica)

Tehnička suradnica:

Marija Hibić, peračica

Suradnici iz drugih ustanova:

Nenad Leder, magistar oceanol. znanosti, Državni hidrografski institut, Split
Damir Viličić, doktor biol. znanosti, redovni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultant)
Laszlo Sipos, doktor kem. znanosti, izvanredni profesor, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb (konzultant)
Jean Chevalet, doktor kem. znanosti, Universite P.-M. Curie, Pariz, Francuska (konzultant)
Eric Balnois, doktor kem. znanosti, Universite P.-M. Curie, Pariz, Francuska (konzultant)
Farooq Azam, doktor biol. znanosti, redovni profesor, Scripps Institution of Oceanography, University of San Diego, SAD (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Do sada najizraženiju manifestaciju povezanosti međupovršinskih procesa i eutrofikacije u obalnom moru predstavlja fenomen masovnog nastajanja makroagregata u Sjevernom Jadranu. Pojava je za sada jedinstvena za Sjeverni Jadran, s globalnim klimatskim promjenama i povećanom eutrofikacijom za očekivati je širenje ovog fenomena i na ostala područja Sredozemlja. Usprkos intenzivnim istraživanjima, od satelitskih obzervacija do istraživanja na mikroskali, mehanizam ove pojave još nije razjašnjen. U ovom interdisciplinarno koncipiranom projektu istražiti ćemo novoustanovljene biofizičke procese samoorganiziranja biopolimera u čestice mikrometerske veličine i mehanizme sol-gel faznih promjena, putem kojih nakupljene mikročestice postaju prijeteća makroskopska formacija (biofizički scenario). Ova istraživanja zahtijevaju primjenu novih mjernih tehnika i u sklopu toga razvoj elektrokemijskog adhezijskog senzora za direktnu karakterizaciju mikročestica u svrhu ranog predviđanja masovne pojave makroagregata i pronalaženja kontrolnih mjera za ublažavanje pojave. Razvoj adhezijskog elektrokemijskog senzora odvijat će se tako da se živina kapajuća elektroda zamijeni stacionarnim živinim i krutim elektrodama, automatiziranjem registracije i obrade stohastičkih elektrokemijskih signala. Pomak granice detekcije prema submikronskim česticama ostvarit će se uvođenjem mikroelektroda. Za kontrolu izvedbe senzora predviđamo AFM metodu.

Primjenom elektrokemijskog adhezijskog senzora odredit će se koncentracije reaktivnih mikročestica u svim predviđenim fazama istraživanja, laboratorijski modeli, mezokozmos eksperiment, more. Laboratorijska istraživanja adhezije i mehanizma agregacije provest će se u disperzijama polisaharidnih gelova i vezikula u morskoj vodi; u suspenzijama bakterija odabranih svojstava stanične stijenke, jednostaničnih algi i želatinoznog mikrozooplanktona. Karakterizacija gel faze ispitati će se mikroskopijom atomskih sila (AFM) i infracrvenom spektroskopijom (FT-IR).

Terenska istraživanja u Sjevernom Jadranu poslužit će za testiranje elektrokemijskog senzora i za provjeru predloženog biofizičkog scenarija.

Research programme and results

The most dramatic manifestation of the link between interfacial processes and eutrophication in coastal seas is the phenomenon of massive macroaggregation in the Northern Adriatic. The phenomenon has so far been specific for Northern Adriatic but with the global climatic change and increasing eutrophication it could be anticipated to spread over other coastal seas of Mediterranean. In spite of intensive research efforts, ranging from satellite observations to micro-scale studies, the mechanism of this phenomenon is still unknown. The main objective of here proposed interdisciplinary project are newly postulated biophysical processes of biopolymer self-organization into microparticles and mechanism of sol-gel phase transitions. These processes are held responsible for transformation of dissolved biopolymers and microparticles to a threatening macroscopic phase (biophysical scenario). These studies require involvement of novel and innovative measurement techniques, such as development of electrochemical adhesion sensor for direct characterization of reactive microparticles in order to predict critical macroaggregation events and provide control and remediation measures.

Development of electrochemical adhesion sensor will be achieved by replacing dropping mercury electrode with stationary one or solid electrodes, and by automation of recording and storing electrical signals of random events. We will expand the detection limit towards submicro particles using microelectrodes. Design of sensor body will be tested using AFM. The concentration of reactive microparticles using electrochemical adhesion sensor will be determined in all research phases, laboratory models, mesocosmos experiment, sea. Laboratory study of adhesion and aggregation mechanism will be carried out in polysaccharide gel dispersions and vesicles in seawater; in suspensions of bacteria with selected characteristics of cell wall, unicellular algae and jelly microzooplankton. We will characterize the gel phase by using atomic force microscopy (AFM) and infrared spectroscopy (FT-IR). The applicability of electrochemical techniques and verification of laboratory models will be tested during the field work in Northern Adriatic.

RADIONUKLIDI U PRIRODNIM SUSTAVIMA

RADIONUCLIDES IN ENVIRONMENTAL SYSTEMS

Voditelj projekta: dr. sc. Delko Barišić

Tel: ++385 1 45 60 931 e-mail: dbarisic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Delko Barišić, doktor geol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Željko Grahek, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Goran Kniewald, doktor geol. znanosti, viši znanstveni suradnik

Katarina Košutić, magistrica kem. znanosti, stručna suradnica

Stipe Lulić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Luka Mikelić, dipl. inž. kemije, stručni suradnik (od 6.8.2002.)

Višnja Oreščanin, magistrica biol. znanosti, stručna suradnica (od 6.12.2002.)

Martina Rožmarić-Mačefat, dipl. inž. kemije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Astrea Vertačnik, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Tehnički suradnici:

Tomislav Kardum, tehničar

Rajko Kušić, samostalni tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Vladimir Bermanec, doktor geol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Jerry J. Bromenshenk, doktor kem. znanosti, redoviti profesor, University of Montana, Missoula, SAD (konzultant)

Štefica Cerjan-Stefanović, doktorica kem. znanosti, redovita profesorica, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultantica)

Mihovil Hus, doktor kem. znanosti, docent, Šumarski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Mladen Juračić, doktor geol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Nikola Kezić, doktor vet. znanosti, redoviti profesor, Agronomski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Petar Kraljević, doktor vet. znanosti, redoviti profesor, Veterinarski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Esad Prohić, doktor geol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Zvonko Seletković, doktor šum. znanosti, redoviti profesor, Šumarski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb (konzultant)

Petar Strohal, doktor kem. znanosti, izvanredni profesor u mirovini (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Potencijalni zdravstveni rizici i negativan utjecaj zračenja na zdravlje ljudi rezultirali su povećanim interesom za poznavanjem koncentracija i biogeokemijskog ponašanje prirodnih i umjetnih radionuklida u okolišu, te izvora, efekata i rizika od ionizirajućih zračenja.

Translokaciju, distribuciju ili akumulaciju radionuklida u tlima, vodama, sedimentima ili bioti uvjetuje čitav niz složenih fizikalnih, geoloških, kemijskih i bioloških procesa. Opći cilj predloženih istraživanja je doprinos poznavanju biogeokemijskog ponašanja i distribucije prirodnih i umjetnih radionuklida u različitim prirodnim sustavima (vode, stari i recentni sedimentacijski prostori, tla i stijenski materijali, organizmi i biološki materijali), te daljnji razvoj i unapređivanje metoda i postupaka mjerenja alfa, beta i gama radioaktivnosti. Dok za kvalitativno i kvantitativno određivanje gama emitera nije potrebna prethodna kemijska izolacija, čiste alfa ili beta-emitere kao što su npr. ^{239}Pu i ^{90}Sr je nemoguće određivati bez prethodne kemijske izolacije iz prirodnog uzorka. To podrazumijeva njihovo odjeljivanje od svih smetajućih elemenata, primjenom svih raspoloživih fizikalno kemijskih postupaka odjeljivanja. Uobičajeni postupak određivanja podrazumijeva kemijsku izolaciju radioaktivnih

izotopa iz uzorka te, detekciju na odgovarajućem detektoru odnosno brojaču. U posljednje vrijeme posebno se radi na razvoju kromatografskih postupaka koji omogućuju kontinuirano selektivno odjeljivanje pojedinih elemenata te povezivanje s alfa ili beta-protočnim detektorima s ciljem određivanja izotopa u jednom stupnju. Ovakav način pogodan je kod određivanja u uzorcima s visokom aktivnošću. Kod određivanja u uzorcima s niskom aktivnošću ovakav način određivanja može biti kompliciran pa se zamjenjuje s postupkom u kojem su kromatografsko odjeljivanje i detekcija odvojeni. Očekivani rezultati istraživanja kao i predvidivi razvoj mjernih postupaka i metoda bit će primijenjeni u programu radiološkog praćenja stanja okoliša u Hrvatskoj, kao i posebnim programima monitoringa rada NE Krško i NE Paks. Razvoj novih tehnika odjeljivanja izotopa također omogućuje njihovu primjenu i u nuklearnoj medicini.

Projektom predložena istraživanja nastavak su istraživanja obuhvaćenih temom 00981509, "Kretanje i sudbina radionuklida i mikroelemenata u prirodnom sustavu". Nastavljen je rad na praćenju stanja radioaktivnosti pojedinih dijelova okoliša na području Republike Hrvatske, s posebnim težištem na stanje radioaktivnosti u Savi i Dunavu. Dosadašnja istraživanja bioindikatorskih posebnosti različitih vrsta medova i crnogoričnog materijala (jela, smreka) sa težištem istraživanja na području Gorskog Kotara su nastavljena, a obavljena su i prva probna uzorkovanja na području nacionalnog parka Plitvička jezera. Posebna se pažnja posvećuje izdavanju potencijalnih bioindikatora (dagnje, divlje svinje, različite vrste gljiva) pogodnih za praćenje stanja radioaktivnosti okoliša u hrvatskim uvjetima. Laboratorij je uključen u izvođenje programa praćenja stanja radioaktivnosti mediteranskih obalnih voda (Mediterranean Mussel Watch project – MMW), pri čemu je školjka dagnja (*Mytilus galloprovincialis*) odabrana kao bioindikatorski organizam. Nastavljen je rad na razvoju kromatografskih tehnika odjeljivanja elemenata, razvoju metoda detekcije alfa i beta emitera na scintilacijskom brojaču, te razvoju ionkromatografskog sustava za izolaciju i određivanje alfa i beta emitera.

Research programme and results:

Potential health risk and radiation negative impact result in increased interest for levels and biogeochemical behaviour of natural and artificial radionuclides in the environment, their sources, effects and risks. Translocation, distribution or accumulation of radionuclides in soils, waters, sediments or biota are conditioned by various complex physical, geological, chemical and biological processes. The general goal of proposed is the contribution to the knowledge of biogeochemical behaviour and natural and artificial radionuclide distribution in various parts of natural system (waters, ancient and recent sedimentation areas, soils and rock materials, organisms and biological materials). The goal is further development and advancement of methods and procedures for alpha, beta and gamma radioactivity measurements. While gamma emitters can be determined without previous chemical isolation, pure alpha or beta emitters (like ^{239}Pu and ^{90}Sr) are impossible to determine without isolation from all interfering elements, using all physicochemical separation procedures available. Usual determination procedure involves chemical isolation of radioactive isotopes from the sample and the detection on suitable detector.

Chromatographic procedures are developed recently which enable continual selective separation of elements and connection with alpha or beta-flow detectors in order to determine isotopes in only one step. Such the routine is suitable for high activity samples, but for low activity samples, it may be complicated, so the procedure where chromatographic separation and detection are severed. The special attention is paid to the detection, and the counting technique with liquid scintillators is being used. Expected results will be used in existing permanent radiological environmental monitoring program in Croatia, as well as in specific NPP Krško and NPP Paks monitoring programs. New techniques of isotope separation make their application in nuclear medicine possible.

The proposed research is the continuation of the project "Migration and fate of radionuclides and microelements in natural systems", No. 0098509. Monitoring of radioactivity status in some parts of the environment in Croatia is continued, with especialy attention on the radioactivity monitoring of Sava and Danube rivers. Research proposed by this project are

continued with long-term investigations of bio indicator possibilities of various honey types and coniferous material (fir, spruce) in area of Gorski Kotar. The first samples are taken in national park Plitvice lakes including this area in research programme also. Special attention is given on research of potential bio indicators (*Mytilus galloprovincialis*, wild boars, various mushroom specie) suitable for environmental radioactivity monitoring under Croatian circumstances. The Laboratory is included in The Mediterranean Mussel Watch (MMW) project of the radioactive monitoring of Mediterranean coastal waters. Mussel *Mytilus galloprovincialis* is selected as bio indicator in this project. The work and efforts on development of elemental chromatographic separation techniques, development of alpha and beta emitter detection methods on scintillation detector, and development of ion-chromatographic system for isolation and determination of alpha and beta emitters, are continued also.

METALI I STANIČNI BIOMARKERI METALS AND CELLULAR BIOMARKERS

Voditeljica projekta: dr. sc. Biserka Raspor

Tel: ++385 1 4680 216, fax: ++385 1 4680 262 e-mail: raspor@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Zrinka Dragun, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja (od 2.12.2002.)

Marijana Erk, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Vlatka Filipović, dipl. inž. biologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Dušica Ivanković, magistrica biol. znanosti, stručna suradnica (od 2.5.2002.)

Sonja Kozar, doktorica kem. znanosti, viša asistentica

Jasenka Pavičić, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica

Biserka Raspor, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Tehnički suradnik:

Branislav Iljadica, tehničar

Suradnik iz druge ustanove:

Roko Žaja, dipl. inž. biologije, stručni suradnik Pedagoškog fakulteta, Sveučilišta J.J. Strossmayer u Osijeku (od 15.7. do 15.12.2002.)

Program rada i rezultati na projektu:

Projektom je predloženo interdisciplinarno izučavanje staničnih biomarkera pobuđenih subletalnim koncentracijama metala u tkivima indikatorskih morskih i estuarijskih organizama, kao što su školjkaši i ribe. Biomarkeri daju informaciju o biokemijskim promjenama na staničnoj razini, nakon izlaganja vodnih organizama metalima. U prirodnim uvjetima, razina biomarkera može se mijenjati zbog promjena abiotičkih (godišnje doba) i biotičkih uvjeta (reprodukcijско razdoblje, uvjeti prehrane). Neophodno je ustanoviti uobičajenu razinu biomarkera i njihovu periodičnost kao posljedicu prirodnih, abiotičkih stresova uzrokovanih promjenama temperature i saliniteta vode te odabrati razdoblje izučavanja u kojem su ti utjecaji neznatni. Za ostvarenje ciljeva projekta bit će odabrani postupci izolacije i određivanja biomarkera, kojima je varijancija manja od varijancije mjerljivog učinka pobuđenog djelovanjem prirodnih i antropogenih stresova. Odredit ćemo bazalnu razinu biomarkera u tkivu određenih indikatorskih organizama, koji su rasprostranjeni u jadranskom području, a imaju i gospodarstvenu važnost, te provesti izučavanja na organizmima u juvenilnom stadiju ili u razdoblju nakon mrijesta. Naglasak će biti stavljen na praćenje prirodne razine staničnih biomarkera za detoksikaciju metala, kao što su metalotioneini, glutation, oksidaze miješanih funkcija, u indikatorskim organizmima različitih trofičkih razina, s ciljem povezivanja biomarkera koji ukazuju na izloženost organizama metalima. Temeljem prikupljenih vremenskih nizova podataka odabrat ćemo područje izučavanja, te mjerenja provoditi u optimalnom vremenskom razdoblju. Primijenit

ćemo kavezno izlaganje odabranih vrsta školjkaša i riba u onečišćenom i referentnom morskom odnosno estuarijskom području, radi smanjenja učinka endemske otpornosti i promjenljivosti, koja je povezana s različitom starosti organizama, prethodnom izloženosti, uvjetima prehrane i sl. Očekujemo, da će pristup istovremenog izučavanja više biomarkera u indikatorskim organizmima različitih trofičkih razina, iz morskih priobalnih i estuarijskih područja, pružiti mogućnosti dijagnosticiranja i predskazivanja rizika izloženosti školjkaša i riba metalima. S tim u svezi predviđa se razrada i primjena informatičkog sustava za iskazivanje uobičajenih raspona razina biomarkera u svrhu ocjene kakvoće morskih i estuarijskih bioloških resursa.

Research programme and results:

Project is focused on the interdisciplinary study of cellular biomarkers, induced with the sublethal concentration of metals in the tissue of marine and estuarine indicator organisms, like the bivalves and benthic fishes. Biomarkers give the information on the biochemical changes at the cellular level, after metal exposure of the aquatic organisms. Under natural conditions, the level of biomarkers varies due to changes in abiotic (seasonal) and biotic conditions (reproduction phase, nutrition). It is necessary to define the usual level of biomarkers and their variability as the consequence of natural, abiotic factors of stress which are caused with temperature and salinity changes and to select that period for conducting the study when these factors have negligible influence. For the accomplishment of the aim of the project those isolation and determination procedures will be selected with variance smaller than the variance of the observed effect, caused natural and anthropogenic stressors. The constitutive level of biomarkers will be determined in the tissue of the indicator organisms which are abundant in the Adriatic coastal area and are of economic significance, too. The study will be conducted with organisms in the juvenil phase or after spawning. The attention will be focused on the survey of constitutive level of cellular biomarkers for detoxification of metals, like the metallothioneins, glutathione, mixed function oxidase, in indicator organisms at various trophic levels, with the aim to correlate them with metal exposure. Based on the collected time series data the study area will be selected to perform the measurements in the optimal season. The cage exposure of selected species of bivalves and fishes will be conducted in the relatively clean and contaminated marine and estuarine areas, with the purpose to reduce the effect of endemic species immunity and variability related to different age of the organisms, as well as previous exposure, feeding conditions and similar effects. It is expected that the simultaneous application of several biomarkers in indicator organisms at various trophic levels, in coastal marine and estuarine areas, will enable to diagnose the risk of exposure of bivalves and fishes to metals. The informatic system will be developed to bring out the usual levels of biomarkers with the aim to estimate the quality of marine and estuarine biological resources.

PERZISTENTNA ORGANOHALOGENA ZAGAĐIVALA U NEKIM OBALNIM PODRUČJIMA DALMACIJE PERSISTENT ORGANOHALOGEN POLLUTANTS IN SOME COASTAL AREA OF DALMATIA

Voditelj projekta: dr. sc. Mladen Picer

Tel: ++385 1 4561 003 e-mail: picer@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Mladen Picer, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Nevenka Picer, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Ana Škrliin, dip. inž. biotehnologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnička suradnica:

Hibić Marija, peračica suđa

Suradnici iz drugih ustanova

Ivan Holoubek, doktor kem. znanosti, RECETOX-TOCOEN, Brno, Češka (konzultant)
Mirjana Vojinović-Miloradov, doktorica znanosti, Sveučilište u Novom Sadu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Srbija i Crna Gora (konzultantica)
Ernest Vončina, doktor kem. znanosti, Institut za javno zdravstvo, Maribor, Slovenija (konzultant)
Sanja Kapelj, doktorica geol. znanosti, znanstveni suradnik, Geološki institut, Zagreb, Hrvatska (konzultantica)

Program istraživanja i rezultati na projektu:

Za vrijeme rata na Balkanu (Hrvatska, Bosna i Hercegovina) i operacije "Udružene sile" u proljeće 1999., spaljivanje i razaranje industrijskih i vojnih objekata rezultiralo je ispuštanjem velikog broja kemikalija u okoliš. Postoji bojazan i konkretni dokazi da su tijekom rata značajne količine polikloriranih bifenila (PCB), različitih usporivača gorenja, eksploziva i njihovih nusprodukata ispušteni u okoliš. Za dobivanje relevantnih podataka o ovim ekološkim štetama u Hrvatskoj, unutar ovog Projekta bit će provedena sljedeća istraživanja:

1) Sakupljanje podataka o unosu perzistentnih organskih zagađivala (POPs) na ratom zahvaćenom području Dalmacije. Utvrđivanje opasnih mjesta bit će provedeno djelomično u suradnji s lokalnim vlastima, a djelomično u razgovoru s odgovornim osobama u većini relevantnih industrijskih objekata i postrojenja na tom području.

2) Sakupljanje uzoraka tla i drugih čvrstih uzoraka, te uzoraka atmosfere i njihova analiza na sadržaj POPs. U skladu sa procjenom ugroženosti tla i zagađenja atmosfere istraživanog područja, bit će utvrđene postaje uzorkovanja na područjima gdje je dokazano ili se barem sumnja da je došlo do ozbiljnijeg zagađenja PCB. Osobita pažnja bit će posvećena osjetljivom krškom području i svim mjestima gdje su uništene trafostanice i ostali industrijski objekti za koje se sumnja da je došlo do prodora PCB u okoliš. Na mjestima za koja se sumnja da su zagađena PCB i drugim POP, izvršit će se sakupljanje uzoraka i analiza PCB i kloriranih insekticida u tlu i drugim čvrstim uzorcima. U posebnim slučajevima ekstrakt čvrstog uzorka bit će poslan u druge laboratorije uključene u Projekt, na analizu polikloriranih dioksina i furana.

3) Hidrogeološka istraživanja i mapiranje štetnosti na Zadarskom području. Provest će se detaljno hidrogeološko mapiranje područja površine oko 20 km², u mjerilu 1: 5 000. Također će se izvršiti:

- a) Satelitska snimanja geoloških, morfoloških, strukturalnih, vegetacijskih i urbanističkih karakteristika istraživanog područja (satelitski prikaz i interpretacija)
- b) Priprava i interpretacija hidrogeoloških mapa, i mapa rizika, te strukturiranje podataka
- c) Digitalizacija i priprema hidrogeoloških mapa na bazi GIS (Geografski informacijski sustav) i relevantnih sustava

U okviru istraživanja posljedica ratnih razaranja na pojavu povišenih razina polikloriranih bifenila u zemljištu kraj raketiranog trafo-postrojenja Zadar, nastavljeno je analiziranje sadržaja PCB u zemljišnim uzorcima sakupljenih na dvadeset i šest postaja. Na šest postaja uzorci su sakupljeni na dvije dubine (površinski sloj 0-5 cm i dubinski sloj 15 – 20 cm). Raspon razina PCB prema Arochlor 1254 je vrlo velik (0,059-115 mg/kg (ppm)). U usporedbi sa ranijim uzorkovanjima (1996. i 2001. g.), nađene razine PCB općenito su niže. Međutim, obzirom na izrazitu varijabilnost razine zagađivala u površinskom sloju, nije moguće utvrditi statistički značajan utjecaj vremena uzorkovanja na razinu PCB u površinskom sloju istraživanog područja.

Research programme and results:

During Balkan wars (Croatia, Bosnia and Herzegovina) and operation "Allied Force" in the spring of 1999, the burning or damaging of industrial and military targets in the Former Republic of Yugoslavia, resulted in the release of a large number of chemicals into the environment. There are great fears and concrete evidence these significant quantities of polychlorinated biphenyls (PCB); various flame-retardants, explosives, and their by-products

were released in the environment during warfare. For obtaining relevant data about these ecological damages inside this Project will be performed next investigations:

1. Collection of data about entering POPs in Dalmatia, attacked during the last war. Hazard identification will be performed partly in co-operation with local authorities and partly by interview with responsible persons in most present relevant industrial objects and facilities.
2. Collection and measurement the level of high persistent halogenated hydrocarbons pollutants in soil and various marine samples. In connection to evaluation soil and marine environment pollution of the investigated area, collection stations will be established on areas on which there are proved or at least suspicious about serious PCB and other POPs pollution. Especially diligent attention will be paid to vulnerable karstic areas and all places where E.T.S. or other industrial objects were destroyed. On the suspicious places contaminated with PCBs and other POPs, collection of soil and other solid samples will be performed and send to other laboratories involved in the Project for chlorinated dioxines and furans analysis.
3. Hydrogeological field investigations and hazard mapping on Zadar area. Detailed hydrogeological mapping of approximately 20 km² area, scale 1:5 000 will be performed. Remote sensing analysis of geological, morphological, structural, vegetation and urbanised characteristics of studied area (satellite images processes and interpretation). Preparation and interpretation of hydrogeological and hazard map, structuring the data. Digitalisation and preparation of the hydrogeological map on the basis of the GIS (Geographic Information System) and relevant data bank will be prepared.

The investigation of war consequences on the level of PCBs in soil samples obtained from the vicinity of the 110/35 kV Zadar Electrical Transformer Station was continued by sampling soil samples from twenty six stations. On twenty stations samples were collected only from 0-5 cm level, but from 6 stations samples were collected from two levels (0 – 5 cm and 15-20 cm). Range of levels total PCBs as Arochlor 1254 are very high (0,059-115 mg/kg (ppm)). In comparison with earlier sampling periods (1996., 2001.) observed levels are generally lower. But due to extremely variable levels of pollutants considering distribution of PCB levels in surface of soil, it is not possible to conclude statistic significance the influence the period of time of sampling on level of PCBs in the surface of investigated area.

GEOKEMIJA RECENTNIH I STARIH SEDIMENTACIJSKIH SUSTAVA JADRANSKE PLATFORME GEOCHEMISTRY OF RECENT AND ANCIENT SEDIMENTARY SYSTEMS OF THE ADRIATIC PLATFORM

Voditelj projekta: dr. sc. Goran Kniewald

Tel: ++385 1 4561036, e-mail: kniewald@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Delko Barišić, doktor geol. znanosti, viši znanstveni suradnik
Željka Kerouš, dipl. inž.geologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 2.1.2003)
Goran Kniewald, doktor geol. znanosti, viši znanstveni suradnik
Goran Mihelčić, doktor geol. znanosti, viši asistent (mirovanje prava)
Nevenka Mikac, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica
Marina Mlakar, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica
Neda Vdović, doktorica geol. znanosti, znanstvena suradnica

Suradnici iz drugih ustanova:

Vladimir Bermanec, doktor geol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultant)
Mladen Juračić, doktor geol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultant)
Esad Prohić, doktor geol. znanosti, redoviti profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultant)

Sonja Lojen, doktorica geol. znanosti, znanstvena suradnica, Institut Jožef Štefan, Ljubljana (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Sedimenti koji se talože u vodenim sustavima (akvatički sedimenti) su vrlo važan, ali još uvijek nedovoljno istražen odjeljak prirodnih vodenih sustava. Osim njihovog značaja za mnoge biogeokemijske i geološke procese u moru, sedimenti predstavljaju i životnu sredinu mnogih sesilnih organizama i tvore različite biotope. Sedimenti predstavljaju prihvatnu sredinu a često i konačno odlagalište antropogenih tvari među kojima su brojna ekotoksična onečišćivala i zagadivala (teške kovine, radionuklidi, organska onečišćivala itd.). Cilj projekta je detaljno upoznavanje geokemijskih karakteristika recentnih i starih sedimentacijskih sustava na području Jadranske karbonatne platforme. Osnovna je hipoteza da se na temelju detaljnih informacija o koncentracijama i raspodjeli specifičnih elemenata i grupa elemenata, mogu procijeniti antropogeni unos ekotoksičnih tvari (metala, nuklida) u recentne sedimentacijske sredine, te dijagenetski procesi koji dovode do njihove preraspodjele i eventualno povećane biološke dostupnosti u recentnim i starim sedimentima. Započelo se s ispitivanjima koncentracije većeg broja elemenata u recentnim sedimentima, peloidima, karbonatnim stijenkama te porinim i nadležecim vodama, primjenom analitičkih metoda za multielementnu analizu (ICP-MS), te drugih spektrometrijskih i elektrokemijskih metoda. Ispitivani će uzorci biti karakterizirani s obzirom na prisutne mineralne faze, organsku tvar i osnovne sedimentološke značajke. Mehanizmi taloženja karbonatnih mineralnih faza, sorpcijskih procesa i ugradnje elemenata u tragovima, ispitivat će se na modelnim sustavima. Nastojati će se odrediti opterećenost ispitivanih sedimentacijskih sustava zagadivalima (ekotoksični metali, radionuklidi) čije je prisustvo povezano i s ratnim djelovanjima na području Hrvatske u proteklom desetljeću. Dobiveni rezultati bi trebali doprinijeti utvrđivanju najboljih strategija usmjerenih na ograničavanje antropogenog unosa ekotoksičnih elemenata u recentne sedimentacijske sustave – od kojih mnogi predstavljaju dalekosežno nezagadjena prirodna područja, vrlo vrijedna za održivi gospodarski razvitak Hrvatske. Projekt integrira temeljne znanstvene spoznaje različitih geoznanstvenih disciplina i dostignuća na području kemije/geokemije prirodnih voda i sedimentacijskih sustava. Ostvarenje rezultata projekta od velike je važnosti za daljnji razvoj suvremenih i sustavnih znanstvenih istraživanja geokemijskih i biogeokemijskih značajki morske sredine i hidroloških resursa Hrvatske.

Specifične aktivnosti na projektu su vezane uz:

- istraživanje ekstraktabilnosti živinih sulfida (cinabarita i metacinabarita) pomoću klorovodične kiseline
- istraživanje termičke stabilnosti i vibracijskih spektara tuzlaita, kao predstavnika boratnih minerala sa slojevitom strukturom
- instalacija i početna umjeravanja spektrometra masa s induktivno spregnutom plazmom (ICP-MS)

Research programme and results:

Aquatic sediments are a very important, yet not sufficiently understood component of natural water systems. Apart from their importance for various biogeochemical and geological processes in the marine environment, sediments provide the habitat for various forms of life in different biotopes. Sediments are often the final depositional environments (sink) for a number of ecotoxic substances (heavy metals, radionuclides, organics). The proposed project aims at providing data for a more detailed understanding of the geochemical characteristics and "patterns" of recent and ancient sedimentation systems of the Adriatic Carbonate Platform in Croatia. The principal hypothesis of the proposed project is that detailed information on the concentration and distribution of specific elements and groups of elements in various sediment matrices can provide the requisite framework for assessing the anthropogenic input (and flux) of ecotoxic substances (heavy metals and radionuclides) into recent and contemporary sedimentary environments, and for an understanding of diagenetic

process causing redistribution of these substances and their increased bioavailability in recent and ancient sedimentation systems.

The commenced research will encompass determination of concentration of a wide range of elements in recent sediments, peloids, carbonate rocks and associated aqueous phases by ICP-MS and other spectroscopic and electrochemical techniques. The samples will be characterised for their mineralogical composition, organic matter content and sedimentological properties. Precipitation mechanisms for carbonate phases, sorption processes and trace element incorporation abilities will also be studied and provide the basis for equilibrium calculations using appropriate computer codes. It will be attempted to assess the environmental risk of hazardous chemical contamination as a consequence of the war in Croatia. The studies undertaken can provide a basis for environmental risk assessment studies, and contribute to the selection of best strategies aimed at the limiting the discharge of hazardous substances into natural aquatic environments, crucial for the protection of water resources as one of the basic requirements for sustainable development planning in Croatia.

Specific research activities on the projects involved:

- studies on the extractability of mercury sulfides (cinnabar and meta-cinnabar) by hydrochloric acid
- investigations on the thermal stability and vibrational spectra of the mineral tuzlaite, representing a borate mineral phase with a specific sheet structure
- installation and initial calibration procedures of the newly acquired ICP mass spectrometer

EKOLOŠKI MODELI AKVATIČKIH EKOSUSTAVA MODELS OF AQUATIC ECOSYSTEMS

Voditelj projekta: dr. sc. Tarzan Legović

tel: ++ 385 1 46 80 230 e-mail: legovic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Tarzan Legović, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik

Sunčana Geček, magistrica mat. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Suradnici iz drugih ustanova:

Ante Smirčić, doktor oceanol. znanosti, Državni hidrografski institut, Split (konzultant)

Damir Viličić, doktor biol. znanosti, redovni profesor, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultant)

Branimir Hackenberger, doktor biol. znanosti, viši asistent, Pedagoški fakultet, Osijek (konzultant)

Dražen Horvat, doktor kem. znanosti, izvanredni profesor, Prehrambeno-tehnološki fakultet, Zagreb (konzultant)

Lovorka Gotal, magistrica informat. znanosti, asistent, Fakultet organizacije i informatike, Varaždin (konzultantica)

Damir Kasum, dipl. inž. fizike, stručni suradnik, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb (konzultant)

Tatjana Hitrec Račić, dipl. inž. fizike, asistent, Poljoprivredni fakultet, Zagreb (konzultantica)

Program rada i rezultati na projektu:

Istraživanja na ovoj temi obuhvaćaju modeliranje ekoloških sustava slatkih voda i mora.

Istraživanja su usmjerena ka otkrivanju novih spoznaja o procesima eutrofikacije, nastanka hipoksije i anoksije na dnu, nastanka velikih koncentracija fitoplanktona i zooplanktona u vodenom stupcu.

Planiraju se slijedeća kvalitativna poboljšanja ekoloških modela:

a) istovremeno uzimanje više hranjivih tvari od strane fitoplanktona;

b) rast fitoplanktona kao proces u dva koraka: brzo uzimanje hranjive tvari i relativno spori rast;

- c) odluka o ograničavajućoj hranjivoj tvari na temelju Liebigova zakona;
- d) hranidbene mreže s nelinearnim tokovima suglasno Michaelis-Mentenovoj interakciji s pravilom vezanja opisanim u Legović (1989).
- e) razmotriti da li Redfield-ov omjer u fitoplanktonu inducira isti omjer u vodi;
- f) primjeniti modele na obalno more.

Preliminarni rezultati pokazuju da, suprotno uobičajenoj hipotezi u oceanologiji, Redfield-ov omjer u fitoplanktonu ne inducira isti omjer u vodi čak ni u oligotrofnom moru. Štoviše, taj je omjer ovisan o brzini uzimanja hranjive tvari od strane fitoplanktona.

Istraživanja metodološkog karaktera modeliranja usmjerena su na ispitivanje brzih metoda integracije sustava paraboločnih parcijalnih diferencijalnih jednadžbi koje se pojavljuju u modeliranju transporta tvari.

Primjena ekoloških modela na upravljanje slatkim vodama i morem usmjeruju se u sugasnosti s interesom društvene zajednice u prvom redu potrebom predviđanja utjecaja planiranih objekata na okoliš. U ovom segmentu valja istaknuti predviđanja: a) utjecaja slatkovodnog izvora na more te b) gradnju modela za utjecaj akvakulture na vodeni stupac i pridnene zajednice

Research programme and results:

Research on this theme contains modelling ecological systems of freshwaters and coastal seas. Investigation is directed toward understanding eutrophication processes, occurrence of hypoxia and anoxia on the bottom, occurrence of dense populations of phytoplankton and zooplankton.

Following improvements of ecological models are planned:

- a) concurrent uptake of several nutrients by phytoplankton.
- b) growth of phytoplankton as a two stage process;
- c) decision on the limiting nutrient by the Liebig law;
- d) food webs with nonlinear transport in agreement with Michaelis-Menten interaction and using rules of coupling by Legović (Ecol. Model., 48 (1989), 267)
- e) consider whether the Redfield ratio in phytoplankton induces the same ratio in water ;
- f) apply models to costal sea.

Preliminary results indicate that, contrary to widespread hypotesis used in oceanography, Redfield ratio in phytoplankton does not induce the same ratio in water even in oligotrophic sea. In addition, the ratio seems to depend on the uptake rate.

Research into modelling techniques are directed toward finding faster methods of integration of systems of parabolic partial differential equations which are used to model transport of substances in aquatic media.

Application of ecological models toward management of fresh water and sea are dictated by the need to predict effects of planned industrial activities in the environment. In the moment we are in the process of constructing models to predict effects of fresh water source and effect of aquaculture on marine ecosystems.

MIKROBNE ZAJEDNICE KATALIZATORI BIOLOŠKIH TRANSFORMACIJA MICROBIAL COMMUNITIES AS CATALYSTS IN BIOTRANSFORMATION PROCESSES

Voditeljica projekta: dr. sc. Dubravka Hršak

Tel: ++385 1 46 80 944 e-mail: hrsak@mail.irb.hr

Suradnici na projektu:

Dubravka Hršak, doktorica biotehničkih znanosti, viša znanstvena suradnica

Ana Begonja Kolar, magistrica bioteh. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Nikolina Udiković, dipl. inž. biotehnologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnik:

Nenad Muhin, tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Vlasta Drevenkar, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb (konzultantica)

Zoran Zgaga, doktor bioteh. znanosti, izvanredni profesor, Prehrambeno-biotehnološki fakultet Sveučilišta u Zagrebu (konzultant)

Angela Lindner, doktorica bioteh. znanosti, izvanredna profesorica, Department of Environmental Engineering Sciences, University of Florida, USA (konzultantica)

Želimira Pavlić, dipl. inž. biologije, Zavod za javno zdravstvo grada Zagreba

Lea Ulm, magistrica biol. znanosti, Zavod za javno zdravstvo grada Zagreba

Program rada i rezultati na projektu:

Znanstveno-istraživački rad na projektu započeo je 2002. izolacijom i karakterizacijom bakterijskih zajednica porijeklom iz prirodnih staništa i zagađenih ekosustava. Slijediti će daljnja karakterizacija i selekcija bakterijskih zajednica koje pokažu specifičnu kataboličku aktivnost prema ksenobiotičima, napose polikloriranim bifenilima (PCB), prema sljedećem programu:

- a) razvijati molekularne metode za identifikaciju i karakterizaciju mikrobnih populacija (PCR, DGGE, *in situ* rRNA hybridization)
- b) istraživati kataboličku aktivnost bakterijskih zajednica i odabrati najaktivnije mikrobnje zajednice
- c) proučavati strukturu odabranih mikrobnih zajednica
- d) istraživati kinetičke pokazatelje rasta odabranih mikrobnih zajednica tijekom uzgoja u podlozi s PCB (sa i bez dodatka izvora ugljika i energije)
- e) izolirati pojedinačne članove zajednice i provjeriti njihovu kataboličku aktivnost
- f) proučavati interakcije među pojedinim članovima o kojima ovisi rast i katabolička aktivnost mikrobnje zajednice
- g) provesti modelna istraživanja mehanizma razgradnje odabranih kongenera PCB

Očekuje se da će predložena istraživanja doprinijeti boljem razumijevanju temeljnih principa biološke transformacije kompleksnih organskih spojeva (ksenobiotika) i uloge mikrobnih zajednice kao katalizatora biotransformacijskih procesa. O tim temeljnim saznanjima ovisi razvoj biotehnoloških postupaka za uklanjanje ksenobiotika izravno u okolišu (*in-situ*) te poboljšanje učinkovitosti do sada primjenjivanih biotehnoloških postupaka za obradu različitih otpadnih tvari.

Research programme and results:

Investigations started in 2002. by the isolation and characterisation of bacterial communities originating from natural habitats and ecosystems polluted by polychlorinated aromatic compounds. Further characterisation and selection of those communities which show to be the most active in PCBs degradation will continue and the succession of investigation is envisaged as follows:

- a) development of molecular methods for identification and characterisation of microbial communities (PCR, DGGE, "in situ" rRNA hybridization)
- b) screening of bacterial communities showing PCB transformation activity and selection of the most active communities
- c) study of the structure of selected communities
- d) growth kinetic studies of the selected bacterial communities during cultivation in mineral medium with PCBs as the only carbon and energy source and with the addition of supplementary carbon source;
- e) isolation of individual community members and checking their catabolic activity,
- f) study of the interactions between individual community members which regulate the growth and catabolic activity of microbial community
- g) model transformation study of the selected PCB congeners.

It is expected that the research proposed within this project, for obtaining more insight characterisation of microbial communities and better elucidation of the specific interactions between community members that regulate their catabolic activities, should contribute to better understanding of the general principles of biotransformation processes. This is the

prerequisite for optimisation of existing and development of new biotechnological procedures for xenobiotics removal from polluted sites and the basis for improving the efficiency of traditional waste water treatment procedures since domestic and industrial waste waters more frequently and increasingly contain various xenobiotics.

MEHANIZAM MULTIKSENOBIOTIČKE OTPORNOSTI KAO POKAZATELJ KVALITETE VODENOG OKOLIŠA MULTIXENOBIOTIC RESISTANCE MECHANISM AS A BIOMARKER OF ENVIRONMENTAL QUALITY

Voditelj projekta: dr. sc. Tvrtko Smital

Tel: ++385 1 4561 088

fax: ++385 1 4680 243

e-mail: smital@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Smiljana Britvić, doktorica biol. znanosti, viša znanstvena suradnica

Sanja Krča, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica

Branka Pivčević, doktorica biol. znanosti, znanstvena suradnica

Roberta Sauerborn, magistrica biol. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Tvrtko Smital, doktor biol. znanosti, znanstveni suradnik

Maja Osmak, doktorica biol. znanosti, znanstvena savjetnica (konzultantica)

Tarzan Legović, doktor fiz. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Marijan Ahel, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik (konzultant)

Tehnički suradnik:

Dalibor Jelaska, samostalni tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Branimir Hackenberger Kutuzović, doktor biol. znanosti, viši asistent na Pedagoškom fakultetu Sveučilišta u Osijeku (suradnik)

David Epel, doktor biol. znanosti, redoviti profesor, Hopkins Marine station of Stanford University, CA, SAD (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Novija saznanja ukazuju da fenomen multiksenobiotičke otpornosti (engl., MXR) vodenih organizama po svemu sudeći nije posredovan aktivnošću samo jednog proteina (Pgp), prema čijoj su kakarakterizaciji bila usmjerena naša dosadašnja istraživanja. Među nekoliko novih transportnih proteina nedavno identificiranih u različitim humanim i životinjskim tkivima najviše se zna o tzv. multidrug resistance-associated proteinu (engl., MRP). Pretpostavljamo da bi MRP mogao biti prisutan i u stanicama vodenih organizama, odnosno da bi MXR kao fenomen u cjelini mogao biti posredovan aktivnošću bar dva različita proteina. U ekotoksikološkom smislu ključne uloge tih proteina bile bi izbacivanje ksenobiotika iz stanica vodenih organizama i/ili transport detoksikacijskih produkata (metabolita faze I. i II.) izvan stanice. Stoga ćemo u okviru ovog Projekta nastojati: (1) imunokemijski identificirati transportne proteine uključene u MXR sustav vodenih organizama i razviti odgovarajuće *in vitro* (kultura MXR-stanica) i *in vivo* (beskralješnjaci i kralješnjaci) metode za funkcionalno mjerenje transportne aktivnosti ovih proteina, odnosno mjerenje koncentracije MXR-inhibitora; (2) objasniti ulogu MXR-transportnih proteina kao integralnog dijela staničnog detoksikacijskog sustava; i (3) pokazati da će inhibicija MXR mehanizma dovesti do povećanja akumulacije i učinka genotoksičnih, ksenoestrogenih i drugih toksičnih ksenobiotika i njihovih metabolita prisutnih u vodenom okolišu. Primarno značenje predloženog istraživanja jest pružanje znanstvene podloge za afirmaciju mjerenja aktivnosti MXR mehanizma kao relevantnog biomarkera kvalitete okoliša. Prvi rezultati naših istraživanja u okviru ovog Projekta jasno ukazuju na prisustvo gena MRP porodice transportnih proteina u jetri i tankom crijevu slatkovodnih (*Cyprinus carpio*, *Salmo trutta*) i morskih riba (*Mullus barbatus*).

Research programme and results:

Recent evidences suggest that multixenobiotic resistance (MXR) phenomenon in aquatic organisms could also be mediated by the activity of other, non-Pgp transport proteins. Based on the main characteristics and on the tissue distribution of recently discovered transport proteins we presume that the members of the so-called multidrug resistance-associated protein (MRP) family, may also be present in aquatic organisms. Consequently, the MXR phenomenon in general could be mediated by the activity of at least two different transport proteins. From the ecotoxicological perspective the key role of those proteins would be the transport of xenobiotics and/or detoxification products (phase I. and II. metabolites) out of cell. In order to prove these hypothesis our work would be directed to: (1) immunochemical identification of transport proteins involved in MXR of aquatic organisms, and development of both in vitro and in vivo methods for the functional determination of their transport activity; (2) explanation of the role of MXR transport proteins as an integral part of cell detoxification system; (3) we will try to demonstrate that the inhibition of MXR mechanism may result in the increase in accumulation and effect of genotoxic, xenoestrogenic or other toxic xenobiotics or their metabolites present in aquatic environment. General aim of the proposed investigation is to offer a scientific argumentation for the validation of MXR as a relevant biomarker of environmental quality. First results of investigations performed within this Project clearly showed that the gene encoding for MRP related proteins are present in liver and intestine tissue of several freshwater (*Cyprinus carpio*, *Salmo trutta*) and marine (*Mullus barbatus*) fish species.

PROJEKTI HITRA:**RAZVOJ NOVOG TIPA ELEKTROKEMIJSKOG SENZORA I UREĐAJA ZA MJERENJE REAKTIVNIH MIKROČESTICA****DEVELOPMENT OF NEW TYPE OF ELECTROCHEMICAL SENSOR AND MEASUREMENT SYSTEM FOR REACTIVE MICROPARTICLES**

Voditeljica projekta: dr. sc. Vera Žutić

tel: ++ 385 1 4561 128 e-mail: zutic@rudjer.irb.hr

Suradnici na projektu:

Božidar Vojnović, doktor elektroteh. znanosti, znanstveni savjetnik

Vesna Svetličić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Nadica Ivošević, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Solveg Kovač, doktorica bioteh. znanosti, viša asistentica, znanstvena novakinja (do 2.5.2002.)

Branka Medved-Rogina, doktorica elektroteh. znanosti, znanstvena suradnica

Sunčana Geček, magistrica mat. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Amela Hoznić, dipl. inž. kem. tehnol., mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Helena Štorek, dipl. kemijskog inženjerstva, mlađa asistentica, znanstvena novakinja (od 1.8.2002.)

Tehnički suradnik:

Ivan Kontušić, tenhičar

Suradnik iz druge ustanove:

Jean Chevalet, doktor kem. znanosti, Universite P.-M. Curie, Pariz, Francuska (konzultant)

Sažetak:

Razvoj i izrada prototipa elektrokemijsko-elektroničkog uređaja koji se osniva na novom tipu elektrokemijskog adhezivskog senzora za analizu i monitoring reaktivnih mikročestica u akvatičkom okolišu, te na posebnoj obradi stohastičkih signala iz senzora, a s primjenom u monitoringu obalnog mora, prirodnih i zagađenih kopnenih voda, naftnoj industriji i biotehnologiji.

Summary:

Development and prototype construction of electrochemical-electronic instrument for analysis and monitoring of reactive microparticles in aquatic environments. The device includes specific treatment of stochastic signals from the electrochemical adhesion sensor. The application of the new class of electrochemical instrumentation is aimed for areas such as: monitoring pollution of coastal sea and other aquatic systems, oil industry and biotechnology.

**IDEJNO RJEŠENJE BIOTEHNOLOŠKOG POSTUPKA ZA OBRADU OTPADNIH VODA IZ PROIZVODNJE ATRAZINA
CONCEPTUAL MODEL FOR BIOLOGICAL TREATMENT OF EFFLUENTS FROM ATRAZINE PRODUCTION**

Voditeljica projekta: dr. sc. Dubravka Hršak

Tel: ++385 1 46 80 944 e-mail: hrsak@mail.irb.hr

Suradnici na projektu:

Dubravka Hršak, doktorica bioteh. znanosti, viša znanstvena suradnica

Ana Begonja Kolar, magistrica bioteh. znanosti, asistentica, znanstvena novakinja

Nikolina Udiković, dipl. inž. biotehnologije, mlađa asistentica, znanstvena novakinja

Tehnički suradnik:

Nenad Muhin, tehničar

Suradnici iz drugih ustanova:

Vlasta Drevenkar, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb (konzultantica)

Želimira Vasilić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

Sanja Fingler Nuskern, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

Gordana Mendaš, magistra kem. znanosti, asistentica, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

Ivan Smolčić, magistar teh. znanosti, "Herbos" d.d., Sisak

Bosiljka Petrić, dipl. inž. kemije, "Herbos" d.d., Sisak

Program rada i rezultati na projektu:

Cilj projekta je izrada znanstveno-stručne podloge za projektiranje uređaja za pročišćavanje otpadnih voda iz proizvodnje atrazina, djelotvornog herbicida koji ima široku primjenu u zaštiti bilja već više od 30 godina. Smanjenje koncentracije atrazina u otpadnoj vodi na vrijednosti koje nemaju štetni učinak na vodeni ekosustav je imperativ daljnje proizvodnje tog herbicida u tvornici "Herbos" d.d., Sisak najvećem proizvođaču sredstava za zaštitu bilja u Hrvatskoj. Izgradnjom uređaja za pročišćavanje tehnoloških otpadnih voda ujedno se otvara mogućnost povećanja proizvodnje atrazina.

Laboratorijska istraživanja su započela određivanjem osnovnih pokazatelja kakvoće tehnološke otpadne vode te izolacijom mikrobnih kultura iz različitih staništa (tlo tretirano atrazinom, sediment i otpadna voda iz proizvodnje atrazina) i provjerom kataboličke aktivnosti tih kultura. Odabrane kulture upotrijebit će se za istraživanje utjecaja fizikalno-kemijskih i drugih čimbenika na kinetiku rasta i kinetiku transformacije atrazina (pH,

koncentracija natrijevog klorida, temperatura, otopljeni kisik, dodatak izvora ugljika, dušika i fosfora, te hranjivih tvari/faktora rasta). Modelna istraživanja mehanizma transformacije atrazina tijekom šaržnog i kontinuiranog uzgoja mikrobnih kultura u kontroliranim uvjetima poslužit će za procjenu brzine mineralizacije atrazina u uvjetima koji se predlažu za rad uređaja za obradu tehnoloških otpadnih voda.

Research programme and results:

The aim of this project is to provide the data necessary for designing the biological treatment plant for elimination of atrazine from herbicide factory effluents. Atrazine is one of the most frequently used herbicides worldwide over the last 30 years and Herbos d.d. Sisak is the most important producer of plant protection product in Croatia, with atrazine as primary product. Development and construction of specific industrial wastewater facility in Herbos is indispensable to reduce atrazine concentration in technological effluents down to the limits following the regulations in force on the one hand and to provide the conditions for increased production of this herbicide on the other hand.

Laboratory experiments started by isolation and characterization of microbial cultures from polluted environments (soil treated with atrazine, sediment and wastewater from atrazine production), especially by checking their capability for atrazine transformation. The most active cultures will be used to determine the optimum conditions for bacterial growth and atrazine transformation. Model growth kinetic experiments of the selected microbial cultures as well as kinetic experiments of atrazine transformation will provide the data necessary for designing the wastewater facility and for optimizing proposed biotechnological procedure.

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Erk, Marijana; Ivanković, Dušica; Raspor, Biserka; Pavičić, Jasenka. Evaluation of different purification procedures for the electrochemical quantification of mussel metallothioneins. // *Talanta*. 57 (2002); 1211-1218.
2. Garay, Fernando; Lovrić, Milivoj. Quasi-reversible EC reactions at spherical microelectrodes analysed by square-wave voltammetry. // *Journal of electroanalytical chemistry*. 527 (2002); 85-92.
3. Garay, Fernando; Lovrić, Milivoj. Square-wave voltammetry of quasi-reversible electrode processes with coupled homogeneous chemical reactions. // *Journal of electroanalytical chemistry*. 518 (2002); 91-102.
4. Garay, Fernando; Lovrić, Milivoj. Square-wave voltammetry of quasi-reversible CE reactions at spherical microelectrodes. // *Electroanalysis*. 14 (2002), 23; 1635-1643.
5. Gulaboski, Rubin; Mirčeski, Valentin; Komorsky-Lovrić, Šebojka. Square-wave voltammetry of second order cathodic stripping process coupled by adsorption of the reactant ligand. // *Electroanalysis*. 14 (2002), 5; 345-355
6. Horvat-Radošević, Višnja; Kvastek, Krešimir. Some aspects of the EIS study of the rhodium electrode in the hydrogen evolution region. // *Electrochimica acta*. 48 (2002), 4; 311-322.
7. Ivanković, Dušica; Pavičić, Jasenka; Kozar, Sonja; Raspor, Biserka. Multiple forms of metallothionein from the digestive gland of naturally occurring and cadmium exposed mussels, *Mytilus galloprovincialis*. // *Helgoland marine research*. 56 (2002); 95-101.

8. Ivanković, Dušica; Pavičić, Jasenka; Raspor, Biserka; Falnoga, Ingrid; Tušek-Žnidarič, Magda. Comparison of two SH-based methods for estimation of metallothionein level in the digestive gland of naturally occurring mussels, *Mytilus galloprovincialis*. // *International journal of environmental analytical chemistry*. 83 (2002), 3; 219-231.
9. Joguet, Laurent; Sondi, Ivan; Matijević, Egon. Preparation of nanosized drug particles by the coating of inorganic particles: naproxen and ketoprofen on alumina. // *Journal of colloid and interface science*. 251 (2002); 284-287.
10. Komorsky-Lovrić, Šebojka; Riedel, K.; Gulabosky, R.; Mirčeski, Valentin; Scholz, F. Determination of standard gibbs energies of transfer of organic anions across the water/nitrobenzene interface. // *Langmuir*. 18 (2002); 8000-8005.
11. Komorsky-Lovrić, Šebojka. Kinetics of the cinnoline surface redox reaction. // *Electroanalysis*. 14 (2002), 13; 888-891.
12. Komorsky-Lovrić, Šebojka. Measurements of kinetics of adsorbed cinnoline by square-wave voltammetry. // *Analytical and bioanalytical chemistry*. 373 (2002); 777-780.
13. Krznarić, Damir. Influence of triton X-100 on the reconstruction of Au(111) in chloride solution. // *Electroanalysis*. 14 (2002), 10; 657-664.
14. Kwokal, Željko; Frančišković-Bilinski, Stanislav; Bilinski, Halka; Branica, Marko. A comparison of anthropogenic mercury pollution in Kaštela Bay (Croatia) with pristine estuaries in Öre (Sweden) and Krka (Croatia). // *Marine pollution bulletin*. 44 (2002), 10; 1150-1155.
15. Lovrić, Milivoj. Reactant adsorption in cyclic staircase voltammetry on spherical microelectrodes. Reversible redox reactions. // *Analytical and bioanalytical chemistry*. 373 (2002); 781-786.
16. Lovrić, Milivoj. Theory of square-wave voltammetry of a reversible redox reaction complicated by the reactant adsorption. // *Electroanalysis*. 14 (2002), 6; 405-414.
17. Mikac, Nevenka; Foucher, D.; Niessen, S.; Fisher, J.-C. Extractability of HgS (cinnabar and metacinnabar) by hydrochloric acid. // *Analytical and bioanalytical chemistry*. 374 (2002), 6; 1028-1033.
18. Plavšić, Marta; Terzić, Senka; Ahel, Marijan; van den Berg, C.M.G. Folic acid in coastal waters of the Adriatic sea. // *Marine and freshwater research*. 53 (2002), 8; 1245-1252.
19. Risović, Dubravko; Gašparović, Blaženka; Čosović, Božena. The impact of fractal geometry on permittivity and related quantities. // *Journal of physical chemistry B*. 106 (2002); 9810-9814.
20. Smital, Tvrtko; Sauerborn, Roberta. Measurement of the activity of multixenobiotic resistance mechanism in the common carp *Cyprinus carpio*. // *Marine environmental research*. 54 (2002); 449-453.
21. Striegler, Harald; Krznarić, Damir; Kolb, D. M. Two-dimensional condensation of camphor and its derivatives on Au(111) electrodes. // *Journal of electroanalytical*

chemistry. 532 (2002); 227-235.

22. Svetličić, Vesna; Hozić, Amela. Probing cell surface charge by scanning electrode potential. // *Electrophoresis*. 23 (2002), 13; 2080-2086.
23. Tur`yan, Y.; Lovrić, Milivoj. Proceeding chemical reactions in dc polarography : different approaches to the analysis of the carbonyl compounds dehydration kinetics. // *Journal of electroanalytical chemistry*. 531 (2002); 147-154.
24. Zelić, Marina. ΔE_p vs. pH plot as a source of information in polarographic studies of kinetically labile metal complexes at a constant ligand to metal ratio. // *Electroanalysis*. 14 (2002), 18; 1262 - 1268.
25. Živko-Babić, Jasenka; Pandurić, Josip; Jerolimov, Vjekoslav; Mioč, Maris; Pižeta, Ivanka; Jakovac, Marko. Bite force in subjects with complete dentition. // *Collegium antropologicum*. 26 (2002), 1; 293-302.

Knjige i poglavlja u knjigama:

1. Barišić, Delko; Bromenshenk, J. J.; Kezić, Nikola; Vertačnik, Astrea. The role of honey bees in environmental monitoring in Croatia // *Honey bees : estimating the environmental impact of chemicals* / Devillers, J.; Pham-Delegue, M.-H. (ur.). London; New York : Taylor & Francis, 2002. 332.
2. Ivošević, Nadica; Žutić, Vera. Effect of electrical potential on adhesion, spreading and detachment of organic droplets at aqueous metallic interface // *Effect of electrical potential on adhesion, spreading and detachment of organic droplets at aqueous metallic interface* / Mittal, K. L. (ur.). Utrecht, Boston : VSP, 2002. 549-561.
3. Komorsky-Lovrić, Šebojka. Electrodes and electrolytes // *Electroanalytical methods* / Scholz, F. (ur.). Heidelberg : Springer, 2002. 243-260.
4. Komorsky-Lovrić, Šebojka. Electrolytes // *Electroanalytical methods* / Scholz, F. (ur.). Heidelberg : Springer, 2002. 279-300.
5. Lovrić, Milivoj. Square-wave voltammetry // *Electroanalytical methods* / Scholz, F. (ur.). Heidelberg : Springer, 2002. 111-136.
6. Lovrić, Milivoj. Stripping voltammetry // *Electroanalytical methods* / Scholz, F. (ur.). Heidelberg : Springer, 2002. 191-210.
7. Sonđi, Ivan; Pravdić, Velimir. Electrokinetic investigations of clay mineral particles // *Interfacial electrokinetics and electrophoresis* / Delgado, Angel V. (ur.). New York : Marcel Dekker, 2002. 773-797.
8. Sonđi, Ivan; Pravdić, Velimir. Electrokinetic of clay mineral surfaces // *Encyclopedia of surface and colloid science* / Hubbard, A. (ur.). New York : Marcel Dekker, 2002. 1887-1893.

Ostali radovi u časopisima:

1. Cuculić, Vlado; Branica, Marko. Voltametrijia s katodnim otapanjem - elektrokemijska metoda određivanja tragova metala u vodenim sustavima. // *Kemija u industriji*. 51 (2002), 5; 213-220.

2. Čož-Rakovac, Rozelindra; Strunjak-Perović, Ivančica. Aminotransferase responses of coho salmon (*Oncorhynchus kisutch*, Walbaum) to sea water challenge test in relation to temperature and salinity. // *Periodicum biologorum*. 104 (2002), 2; 211-215.
3. Čož-Rakovac, Rozelindra; Strunjak-Perović, Ivančica; Topić Popović, Natalija; Hacmanjek, Mato; Šimpraga, Borka. Health status of wild and cultured sea bass in the northern Adriatic Sea. // *Veterinary medicine - Czech*. 47 (2002), 8; 222-226.
4. Kozarac, Zlatica. Nacionalni referentni laboratoriji u zemljama Dunavskog sliva. // *Hrvatska vodoprivreda*. 11 (2002), 113; 14-16.
5. Kozarac, Zlatica. Program zaštite rijeke Dunava. // *Hrvatska vodoprivreda*. 11 (2002), 112; 20-26.
6. Lovrić, Milivoj. Pravokutnovalna voltometrija reverzibilne redoks reakcije na tankoslojnoj živinoj elektrodi. // *Kemija u Industriji*. 51 (2002), 5; 205-211.
7. Sekulić, Bogdan. Geografija jučer, danas, sutra. // *Acta geographica croatica*. 34 (2002); 157-172.
8. Sekulić, Bogdan. Poznavanje kvalitete i količine otpadnih voda preduvjet za izgradnju uređaja za pročišćavanje voda. // *EGE (energetika, gospodarstvo, ekologija, etika)*. 2 (2002); 132-136.
9. Sekulić, Bogdan; Grahek, Željko; Rožmarić Mačefat, M.; Peharec, Željko. Usporedna mjerenja teških metala u organskim i anorganskim uzorcima. // *EGE (energetika, gospodarstvo, ekologija, etika)*. 1 (2002); 116-120.

Znanstveni radovi u tisku:

1. Ciglencečki, Irena; Helz, G. R. Voltammetric behavior of MoS₄²⁻ and SbS₄³⁻, possible components of "dissolved sulfide" in oxic natural waters. // *Electroanalysis*.
2. Omanović, Dario; Branica, Marko. Pseudopolarography of trace metals. Part 1. The automatic ASV measurements of reversible electrode reactions. // *Journal of electroanalytical chemistry*.
3. Pižeta, Ivanka; Billon, Gabriel; Fischer, J.-C.; Wartel, M. Solid microelectrodes for in situ voltammetric measurements. // *Electroanalysis*.

Radovi objavljeni u zbornicima skupova:

1. Beč, Sonja; Pečar-Ilić, Jadranka; Skočir, Zoran; Ružić, Ivica. Design of an object-relational database on river navigation // *International conference on software, telecommunications & computer networks - SoftCOM 2002 / Rožić N., Begušić D. (ur.). Split : FESB, 2002. 406-410.*
2. Bermanec, Vladimir; Scholz, R.; Palinkaš, Ladislav; Barišić, Delko; Kniewald, Goran. Solid inclusions of Th-minerals in blue fluor-apatite from Ipira pegmatite, Bahia, Brazil. // *11th quadrennial IAGOD symposium and GEOCONGRESS 2002*. 1 (2002); 20 (kongresno priopćenje, znanstveni rad).
3. Kniewald, Goran; Barišić, Delko. Investigations related to the monitoring of bivalves and other marine organisms on the Eastern Adriatic coast (Croatia). // *CIESM workshop series n°15 / Briand, Frederic (ur.). Monaco : CIESM, 2002. 77-78.*

4. Mikac, Nevenka. Bioaccumulation of inorganic and organic mercury and organolead compounds in marine organisms // Metal and radionuclides bioaccumulation in marine organisms / Briand, F. (ur.). Monaco : CIESM, 2002. 89-91.
5. Pečar-Ilić, Jadranka; Ružić, Ivica; Skočir, Zoran. Object-relational database as a data source for interactive dynamic web application // Environmental communication in the information society – Part 2 / Pillmann W., Tochtermann K. (ur.). Vienna : IGU/ISEP (International Society for Environmental Protection), 2002. 540-547.
6. Pečar-Ilić, Jadranka; Skočir, Zoran; Ružić, Ivica. The concept of dynamic temporal and spatial data presentations on the web // Proceeding of the international conference on telecommunications – ICT 2002, Volume 1 of 3 / Jintong L. (ur.). Beijing : Publishing House of Electronics Industry, 2002. 718-722.
7. Tonković, Hrvoje; Pečar-Ilić, Jadranka; Skočir, Zoran; Ružić, Ivica. Web application for analysis of hydrological conditions in river navigation // International conference on software, telecommunications & computer networks - SoftCOM 2002 / Rožić N., Begušić D. (ur.). Split : FESB, 2002. 401-405.
8. Vilić, Marinko; Barišić, Delko; Lulić, Stipe ;Kraljević, Petar. Aktivnost ^{137}Cs u mesu divljih svinja s područja zapadne Slavonije i Gorskog kotara // Zbornik radova V. simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Krajcan Bronić, I.; Miljanić, S.; Obelić, B. (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2003. 341-345.

Elaborati, izvještaji i studije

1. Albaiges, Joan; Abousamra, Fouad; De Felip, Elena; Picer, Mladen; Barakat, Assem; Narbonne, Jean-François; Bruno, Jordi; Iacomelli, Aldo; Diaz, Jordi. Regionally based assessment of persistent toxic substances : Mediterranean regional report. Geneva : Global Environment Facility, 2002.
2. Čosović, Božena; Precali, Robert; Raspor, Biserka; Šolić, Mladen; Teskeredžić, Emin. Nacrt Nacionalnog izvješća o stanju mora, poglavlje 17, www.mzopu.hr, 2002.
3. Erk, Marijana; Filipović, Vlatka; Ivanković, Dušica; Pavičić, Jasenka; Raspor, Biserka. Sustavno određivanje metalotioneina u probavnoj žlijezdi dagnji (Mtion), 2002.
4. Ivanović, Marko; Ravlić, Nenad; Sekulić, Bogdan; Stojić, Petar; Marasović, Katja; Maurović, Željko; Čunko, R. Studija utjecaja na okoliš kanalizacijskog sustava Kaštela-Trogir, 2002.
5. Picer, Mladen; Picer, Nena. Izvješće o analizama organohalogenih spojeva na području Jakuševca i spalionice opasnog otpada "Puto" Zagreb, 2002.
6. Picer, Mladen; Picer, Nena. Monitoring jadrana, monitoring kloriranih ugljikovogika u uzorcima priobalnih voda istočnog jadrana, 2002.
7. Ružić, Ivica; Pečar-Ilić, Jadranka. Hrvatski kodovi za objekte i attribute na unutarnjim plovnim putovima - analiza mogućnosti proširenja iz sustava CROTIS, Verzija 1.0, 2001, Prijedlog, verzija 0.0, 2002.
8. Ružić, Ivica; Pečar-Ilić, Jadranka. Hrvatski kodovi za znakove i oznake na unutarnjim plovnim putovima - Proširenje kodova iz Priloga 7. i 8., CEVNI Europskog propisa za unutarnju plovidbu, Verzija 2, 2002. Prijedlog, verzija 0.0, 2002.

9. Ružić, Ivica; Pečar-Ilić, Jadranka. Izrada integracijskog sustava nadzora plovnog puta na Dravi i Dunavu, Prva privremena situacija, 2002.
10. Ružić, Ivica; Pečar-Ilić, Jadranka. Izrada integracijskog sustava nadzora plovnog puta na Dravi i Dunavu, Druga privremena situacija, 2002.
11. Ružić, Ivica; Pečar-Ilić, Jadranka. Izrada integracijskog sustava nadzora plovnog puta na Dravi i Dunavu, Treća privremena situacija, 2002.
12. Ružić, Ivica; Pečar-Ilić, Jadranka. Izrada integracijskog sustava nadzora plovnog puta na Dravi i Dunavu, Konačni izvještaj, 2002.
13. Raspor, Biserka; Kozarac, Zlatica; Hršak, Dubravka; Ćosović, Božena. Izvještaj o radu Referentnog laboratorija tijekom 2002. godine, 2002.
14. Sekulić, Bogdan. Osnove ekologije mora (skripta), 2002.

Doktorske disertacije:

1. Strunjak-Perović, Ivančica. Virusne bolesti lubina (*Dicentrarchus labrax L.*) i cipala (*Mugil spp.*) u Jadranu. Zagreb : Veterinarski fakultet, 8.2.2002., 98 str., Voditelj: Teskeredžić, Zlatica; Sulimanović, Đuro.
2. Žic, Vesna. Geokemijski ciklus joda i nekih redoks osjetljivih elemenata u Rogozničkom jezeru i estuariju rijeke Krke. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 13.3.2002., 125 str., Voditelj: Branica, Marko.

Magistarski radovi:

1. Geček, Sunčana. Metode Krilovljevog potprostora i optimalno predkondicioniranje. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 18.10.2002., 231 str. Voditelj: Slapničar, Ivan.
2. Kurtović, Božidar. Usporedba histološke slike jetre, slezene i bubrega lubina (*Dicentrarchus labrax*) u uzgajanoj i prirodnoj populaciji. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 13.12.2002., 83 str. Voditelj: Teskeredžić, Emin.
3. Vilić, Marinko. Aktivnost cezija-137 i kalija-40 u mesu i organizmima divljih svinja u Hrvatskoj. Zagreb : Veterinarski fakultet, 30.1.2003., 62 str. Voditelji: Barišić, Delko, Kraljević, Petar.

Diplomski radovi:

1. Beč, Sonja. Oblikovanje objektno-relacijske baze podataka. Zagreb : Fakultet elektrotehnike i računarstva, 10.7.2002., 52 str. Voditelj: Skočir, Zoran.
2. Tonković, Hrvoje. Web aplikacija za vremensko – prostorni prikaz složenih tipova podataka. Zagreb : Fakultet elektrotehnike i računarstva, 12.6.2002., 42 str. Voditelj: Skočir, Zoran.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

Legović, T.: Ekološko modeliranje: sadašnje stanje i razvoj u sljedećih deset godina, 10. kolokvij Hrvatskog društva za teorijsku i matematičku biologiju, 7.2.2002.

Hršak, D.: Mikroorganizmi katalizatori bioloških transformacija, kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša, 20.2.2002.

Vdović, N.: Kalcijev karbonat – karakteristike i interakcije s otopljenim/neotopljenim tvarima, Zavod za istraživanje mora i okoliša, 24.4.2002.

- Terzić, S.: Kemotaksonomska karakterizacija fitoplanktona i njena primjena za proučavanje ciklusa autohtone organske tvari u modelnim i prirodnim sustavima, Zavod za istraživanje mora i okoliša, 15.5.2002.
- Đogić, R. Uran (VI) u modelnim i prirodnim vodenim sustavima, Zavod za istraživanje mora i okoliša, 17.5.2002.
- Hršak, D.: Smjernice za osiguranje kakvoće mikrobioloških ispitivanja, Hrvatsko mikrobiološko društvo, Sekcija za mikrobiologiju, 17.5.2002.
- Ivošević, N.: Utjecaj električnog potencijala na adheziju organskih kapljica na međupovršini živa/vodena otopina elektrolita, Zavod za istraživanje mora i okoliša, 22.5.2002.
- Ciglencečki, I., Elektrokemijsko određivanje sumpornih vrsta u moru, Zavod za istraživanje mora i okoliša, 28.5.2002.
- Gašparović, B.: Elektrokemijska karakterizacija adsorbiranih organskih spojeva na površini živine elektrode, Zavod za istraživanje mora i okoliša, 4.6.2002.
- Kuzmić, M.: Projekt ACE i pridružene aktivnosti, kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša, 5.6.2002.
- Erk, M., Kemijska reaktivnost metalotioneina i njihovo određivanje u istraživanjima okoliša primjenom elektrokemijskih tehnika, kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša, 10.6.2002.
- Topić Popović, N.: Sveučilište Cornell iz perspektive Fulbright stipendistice, kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša, 26.6.2002.
- Sekulić, B.: Teški metali u ljekovitom bilju istočnog dijela Hrvatske, kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša, 1.7.2002.
- Grahek, Ž.: Ionska kromatografija, efekt Čerenkova i određivanje ^{89,90}Sr, kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša, 2.7.2002.
- Pivčević Novak, B.: MXR mehanizam vodenih životinja i razvoj biotesta za detekciju MXR-inhibitora, kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša, 6.11.2002.
- Smital, T.: Multiksenobiotička otpornost (MXR) vodenih organizama kao ekotoksikološki biomarker, kolokvij Zavoda za istraživanje mora i okoliša, 6.11.2002.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

- Ahel, M.: Behaviour of alkylphenol polyethoxylate surfactants in the aquatic environment, Norwegian Institute for Water Research (NIVA), Norveška, 18.3.2002.
- Kniewald, G., Environmental consequences of depleted uranium usage in Kosovo. Norwegian Institute for Water Research (NIVA), Oslo, Norveška, 21.3.2002.
- Kniewald, G.: Minerali kao gemološki materijali. Nastupno predavanje u postupku za izbor u zvanje redovitog profesora. Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu. 7.5.2002.
- Kniewald, G., The redox system of uranium in the marine environment, Universite de Toulon et du Var, 21.11.2002.
- Svetličić, V., Nano-mreža, Institut za fiziku, Zagreb, 16.12.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

- Mikac, N., Universite de Science et Technologie de Lille, Francuska, 1.4.-31.7.2002.
- Pižeta, I., Universite de Science et Technologie de Lille, Francuska, 1.4.-30.6.2002.
- Tepić, N., The International Atomic Energy Agency (IAEA), Marine Environment Laboratory, Monte Carlo, Monako, 10-26.6.2002.
- Pivčević, B., Norwegian Institute for Water Research, Oslo, Norveška, 14-28.7.2002.
- Sondi, I., Center for Advanced Materials Processing, Clarkson University, SAD, 15.7.2001.-31.12.2002.
- Geček, S., Middle East Technical University (METU), NATO Advanced Study Institute: The Ocean Carbon Cycle and Climate, Ankara, Turska, 5-16.8.2002.
- Ivošević, N., University of Trieste, Department of biochemistry, biophysics and chemistry of macromolecules, "Electrochemical detection of gel particles in seawater" Trst, Italija, 15.9.-14.12.2002.

Erk, M., Norwegian Institute for Water Research, Oslo, Norveška, 1.9.-15.12.2002.
Vdović, N. Laboratoire de chimie analytique et marine, Université des sciences et technologies de Lille, Lille, Francuska, 1.5.-31.7.2002. i 1.9.2002.-31.1.2003.

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje:

Komorsky-Lovrić, Š.; Lovrić, M., E.M. Arndt University, Greifswald, Njemačka, 1.11.2001.–31.01.2002.
Svetličić, V., Žutić V., Hozić, A., Université P. et M. Curie, Laboratoire d'Electrochimie, CNRS, Pariz, Francuska, 3-17.4.2002.
Kozarac, Z., Dodatna stipendija Alexandae von Humboldt Zaklade, Max-Planck Institut für Biophysikalische Chemie, Göttingen, Germany, 22.9.-18.10.2002.
Kniewald, G., Fachhochschule Trier, Umweltcampus Birkenfeld, Birkenfeld, Njemačka, 26.10.-10.11.2002.
Kniewald, G., Université de Toulon et du Var, Toulon, Francuska, 15.11.-14.12.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

GEF-UNEP REGIONAL WORKSHOP, "ASSESSMENT OF PTS SOURCES AND CONCENTRATIONS IN THE ENVIRONMENT"

Atena, Grčka, 4-7.2.2002.

Sudionici: Picer, N.; Picer, M.

Prilog:

Picer, M. Persistent toxic substances in the Adriatic sea and its hinterland, pozvano predavanje.

BIOPHYSICAL SOCIETY 46TH ANNUAL MEETING

San Francisco, Kalifornija, SAD, 23-27.2.2002.

Sudionici: Svetličić, V.

Prilog:

Svetličić, V.; Hozić, A.; Žutić, V. Electrochemical imaging of cell adhesion, poster.

TOURISM, WATER MANAGEMENT AND MARINE PROTECTION

Opatija, Hrvatska, 19-22.3.2002.

Sudionik: Legović, T.

Prilog:

Legović, T.: Eutrophication of the sea: Is the dilution a solution? predavanje

GWP-MED REGIONAL CONFERENCE: EFFECTIVE WATER GOVERNANCE

Atena, Grčka, 19-20.3.2002.

Sudionica: Plavšić, M.

GEF-UNEP REGIONAL WORKSHOP, "ASSESSMENT OF (ECO)TOXICOLOGICAL IMPACT OF PTS AND TRANSBOUNDARY TRANSPORT"

Rim, Italija, 3-5.4.2002.

Sudionici: Picer, M.

Prilog:

Picer, M. Contamination of some karstic area of Slovenia and Croatia with PCBS as consequence of incidents, pozvano predavanje.

V. SIMPOZIJ HRVATSKOG DRUŠTVA ZA ZAŠTITU OD ZRAČENJA

Stubičke Toplice, Hrvatska, 9-11.4.2003.

Sudionici: Barišić, D.; Grahek, Ž.; Košutić, K.; Lulić, S.

Prilog:

Vilić, M.; Barišić, D.; Lulić, S.; Kraljević, P. Aktivnost ¹³⁷Cs u mesu divljih svinja s područja

zapadne Slavonije i Gorskog kotara, predavanje.

ENVIRONMENTAL PROBLEMS OF THE MEDITERRANEAN REGION

North Cyprus, 12-15.4.2002.

Sudionik: Legović, T.

Prilozi:

Bayraktaroglu, E., Velasquez, Z.R., Cruzado, A., Legović, T.: Diatoms in oligotrophic versus eutrophic culture, predavanje

Legović, T.: Effects of freshwater release to a marine bay, predavanje

CIESM WORKSHOP SERIES N°15

Marseillies, Francuska, 18.-21.4.2002.

Sudionici: Kniewald, G.

Prilozi:

Kniewald, G.; Barišić, D. Investigations related to the monitoring of bivalves and other marine organisms on the Eastern Adriatic coast (Croatia), pozvano predavanje.

THE SECOND PCB WORKSHOP, RECENT ADVANCES IN THE ENVIRONMENTAL TOXICOLOGY AND HEALTH EFFECTS OF PCBs. EMPHASIS ON THE LATEST ADVANCES AND THE PERSPECTIVE OF CENTRAL AND EASTERN EUROPE

Brno, Češka, 7-11.5.2002.

Sudionici: Picer, N.; Picer, M.

Prilog:

Picer, M.; Holoubek, I. PCBs in the environment of Slovenia and Croatia as consequence of their accidental release, pozvano predavanje.

FOOD SAFETY 2002

Porto, Portugal, 24-25.5.2002.

Sudionik: Ahel, M.

THE WORKSHOP ON COASTAL ZONE MANAGEMENT PROGRAMME: AQUACULTURE IN CROATIA

Stubičke Toplice, Hrvatska, 6-8.6.2002.

Sudionik: Legović, T.

Prilozi:

Legović, T.: Tools for coastal sea management with an emphasis on aquaculture, predavanje

Legović, T.: Natural characteristics of the Velebit Channel, predavanje

DAN ELEKTROKEMIJE

Zagreb, Hrvatska, 7.6.2002

Sudionici: Ciglencečki, I., Čosović, B., Čukman, Đogić, R., Frka, S., D.; Horvat-Radošević, V., Hozić, A., Komorsky-Lovrić, Š., Kozarac, Z., Kvastek, K.; Lovrić, M., Vuković, M., Erk, M.; Filipović, V.; Omanović, D., Raspor, B.; Svetličić, V., Zelić, M., Žaja, R., Žic, V.

Prilozi:

Bošković, N.; Čosović, B.: Adsorpcijska svojstva melanoidina na živinnoj elektrodi, poster
Ciglencečki, I.; Plavšić, M.; Vojvodić, V.; Čosović, B. Elektrokemijski dokaz promjene mukopolisaharida u moru: Uloga anoksičnog mikrookoliša, poster

Čukman, D.; Vuković, M. Elektrokemijsko istraživanje površinskih procesa

elektrodeponiranog rodija, poster

Đogić, R.; Krznarić, D. Adsorpcija tri-n-butil fosfata (TBP) iz vodene otopine NaClO₄ na živinu elektrodu, poster.

Frka, S.; Kozarac, Z.; Čosović, B. Fizikalno-kemijska karakterizacija površinskog mikrosloja mora fazno osjetljivom A.C. voltametrijom, poster.

Horvat-Radošević, V.; Kvastek, K. Elektrokemijska impedancija rodijeve elektrode pri

potencijalima reakcije izdvajanja vodika, poster.

Hojić, A., Svetličić, V. Elektrokemijsko viđenje adhezije stanice, poster

Komorsky-Lovrić, Š.; Vukašinović, N.; Penovski, R. Voltametric determination of micro particles of some local anaesthetic and antithusic immobilised on the graphite electrode, poster.

Kvastek, K.; Horvat-Radošević, V. Srebro-halogenidne i halkogenidne elektrode kao biopotencijalne elektrode za snimanje EEG, poster

Lovrić, M. Pravokutnovalna voltometrija reverzibilne redoks reakcije na tankoslojnoj živinoj elektrode, poster.

Omanović, D.; Branica, M. Pseudopolarografija tragova metala u vodenim otopinama, poster.

Orlović-Leko, P.; Kozarac, Z.; Čosović, B. Istraživanje adsorpcije policikličkih aromatskih spojeva elektrokemijskim metodama, poster.

Zelić, M. Elektrokemijska redukcija europija(3+) pri rastućim koncentracijama anorganskih soli, poster.

Žic, V.; Branica, M. Voltometrijsko određivanje koncentracija jodida i jodata u uzorcima prirodnih voda, poster.

POWER OF MICROBES IN INDUSTRY AND ENVIRONMENT

Opatija, Hrvatska, 7-9.6.2002.

Sudionica: Udiković, N.

Prilog:

Hršak, D., Udiković, N., Begonja K., Ana, Filipčić, D. Enrichment and isolation of atrazine degrading bacteria, poster.

ESEAC 2002; 9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON ELECTROANALYSIS

Krakov, Poljska, 9-13.6.2002.

Sudionici: Komorsky-Lovrić, Š.; Lovrić, M.

Prilozi:

Komorsky-Lovrić, Š., Vukašinović, N.; Penovski, R. Voltammetric determination of micro particles of some local anaesthetics and antithusics immobilised on the graphite electrode, poster.

Lovrić, M. A square-wave voltammetry of reversible redox reactions on the thin mercury film covered solid electrode, poster.

III. NACIONALNO ZNANSTVENO-STRUČNO SAVJETOVANJE S MEĐUNARODNIM SUDJELOVANJEM: "SLATKOVODNO RIBARSTVO HRVATSKE U RAZDOBLJU PRIDRUŽIVANJA EUROPSKOJ UNIJI"

Bizovac, Hrvatska, 20-21.6.2002.

Sudionici: Kurtović, B.; Teskeredžić, E.; Teskeredžić, Z.; Tomec, M.

Prilog:

Kurtović, B., Teskeredžić, E.: Bolesti organizama iz vode, predavanje.

INTERNATIONAL CONFERENCE ON TELECOMMUNICATIONS – ICT 2002

Beijing, Kina, 23-26.6.2002.

Sudionici: Pečar-Ilić, J.; Ružić, I.

Prilozi:

Pečar-Ilić, J.; Skočir, Z.; Ružić, I. The concept of dynamic temporal and spatial data presentations on the web, predavanje.

REGIONAL WORKSHOP, UNEP-GEF-REGION IV, PRIORITY SETTING MEETING

Barcelona, Španjolska, 26-28.6.2002.

Sudionici: Picer, N.; Picer, M.

Prilog:

Picer, M. Levels and trends of PCBS and DDTs in the Mediterranean reageon, pozvano predavanje.

ELEVENTH SLOVENIAN-CROATIAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING

Bohinj, Slovenia, 27-30.6.2002.

Prilozi:

Bermanec, V.; Kniewald, G.; Tomašić, N. Crystal-chemical properties of meta-autunite from Baixa, Brazil, predavanje.

CARBON CYCLE, NSF WORKSHOP

Trst, Italija 11-17.7.2002.

Sudionici: Žutić, V.; Ivošević, N.; Štorek, H.

GEOCONGRESS 2002

Windhoek, Namibia, 22-27.7.2002.

Prilozi:

Bermanec, V.; Scholz, R.; Karfunkel, J.; Palinkaš, L.; Barišić, D.; Kniewald, G. Solid inclusions of Th-minerals in blue fluor-apatite from Ipira pegmatite, Bahia, Brasil, predavanje.

Bermanec, V.; Wegner, R.; Kniewald, G.; Palinkaš, L.; Rajić, M.; Sultan, S. A. Meta-autunite from pegmatites of Boqueirao, Paraib, Brasil, predavanje.

Kniewald, G.; Palinkaš, L.; Bermanec, V. Hydrogeochemical and thermodynamic controls of the redox speciation of uranium in aqueous solutions and U-mineralizations, predavanje.

THE WORLD OF MICROBES, XTH INTERNATIONAL CONGRESS OF BACTERIOLOGY AND APPLIED MICROBIOLOGY

Pariz, Francuska, 27.7.-1.8.2002.

Sudionici: Hršak, D.; Udiković, N.

Prilog:

Hršak, D.; Udiković, N.; Begonja Kolar, A. Enrichment and characterization of atrazine mineralizing bacterial communities, poster.

WRAP-UP CONFERENCE ON BIOLOGICAL EFFECTS OF CONTAMINANTS IN PELAGIC ECOSYSTEMS - BECPELAG

Copenhagen, Danska, 19-21.8.2002.

Sudionici: Erk, M.; Raspor, B.

Prilog:

Erk, M.; Raspor, B. Metallothionein and metal quantification in the whole mussel tissue, predavanje.

WORKSHOP ON THE CROATIAN AND NORWEGIAN COASTAL ZONE: ECOSYSTEM DYNAMICS AND ENVIRONMENTAL CHALLENGE

Tromso, Norveška, 29-30.8.2002.

Sudionici: Ahel, M.; Ciglencečki, I.; Čosović, B.; Filipović, V.; Kozarac, Z.; Plavšić, M.; Raspor, B.; Smital, T.; Teskeredžić, E.; Vojvodić, V.

Prilozi:

Ahel, M. Biogeochemistry of microtidal estuaries of the Krka and Zrmanja Rivers, pozvano predavanje

Ciglencečki, I. Anoxic marine environment, predavanje, predavanje

Čosović, B.; Vojvodić, V. Organic matter and surface active substances in the Adriatic Sea: mucilage phenomena in the north Adriatic, predavanje

Smital, T. Biomarkers in the investigations of Croatian marine and freshwaters ecosystems, predavanje

Teskeredžić, E. Protection of biocenotic balance in aquaculture receiving waters, predavanje

18TH GENERAL MEETING OF THE INTERNATIONAL MINERALOGICAL ASSOCIATION
Edinburgh, Scotland, United Kingdom, 1-6.9.2002.

Prilog:

Bermanec, V.; Tomašić, N.; Kniewald, G.; Back, M. Properties and classification problem of a Nb- and Y-rich mineral of aeschynite mineral group, poster.

THE FOURTH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON AQUATIC ANIMAL HEALTH

New Orleans, Louisiana, USA, 2-6.9.2002.

Prilog:

Getchell, R. G.; Wooster, G. A.; Topić Popović, N.; Culligan, W.J.; Bowser, P. R. Prevalence of the E botulism in fish in the lower Great Lakes, poster.

INTERNATIONAL WORKSHOP ON INLAND ECDIS

Petrograd-Moskva, Rusija, 7-13.9.2002.

Sudionici: I. Ružić

Prilog:

I. Ružić, sudjelovao u raspravi kao delegat Uprave unutarnjeg prometa, Ministarstva pomorstva, prometa i veza RH.

REGIONALNI SASTANAK U OKVIRU EVROPSKOG PROJEKTA COPERNICUS ICA2-CT2002-10007

Novi Sad, Srbija i Crna Gora, 14-15.9.2002.

Sudionici: Picer, N.; Picer, M.

Prilog:

Picer, M. Pregled projekta Copernicus-ICA2-CT2002-10007 (APOPSBAL), pozvano predavanje.

53RD ANNUAL MEETING OF THE INTERNATIONAL SOCIETY OF ELECTROCHEMISTRY:
ELECTROCHEMISTRY IN MOLECULAR AND MICROSCOPIC DIMENSIONS

Duesseldorf, Njemačka, 15-20.9.2002.

Sudionici: Čukman, D., Kozarac, Z.

Prilog:

Čukman, D.; Vuković, M. Electrochemical study of electrodeposited rhodium, poster
Kozarac, Z.; Frka, S.; Čosović, B. Electrochemical investigations of sea-surface microlayer samples, poster.

4TH MEDITERRANEAN BASIN CONFERENCE ON ANALYTICAL CHEMISTRY

Portorož, Slovenija, 15-20.9.2002.

Sudionici: Čosović, B.; Mikac, N.

Prilozi:

Čosović, B. Electrochemical analysis of surface active substances in marine, estuarine and freshwater systems, pozvano predavanje

Foucher, D.; Niessen, S.; Fischer, J.-C.; Kwokal, Z.; Mikac, N.; Ciglenceki, I.; Fajon, V.;

Horvat, M. Influence of sulfur cycle on mercury speciation in solid and dissolved phases on contaminated coastal sediments, poster.

APOPSBAL ICA2 - CT2002-10007, THE FIRST MEETING

Zadar, Hrvatska, 20-21.9.2002.

Sudionici: Picer, M.

Prilozi:

Kapelj, S.; Picer, M.; Miošić, N.; Arbneshi, T. WP2 : the level and hidrogeological fate of some pops in several Croatian, Bosnian & Herzegovinia and Kosovo areas as a consequence of war damages, predavanje.

Picer, M. Opis područja istraživanja u Hrvatskoj, predavanje.

XVITH CONFERENCE OF THE EUROPEAN COLLOID AND INTERFACE SOCIETY

Pariz, Francuska, 22-27.9.2002.

Sudionici: Ivošević, N.

Prilog:

Ivošević, N.; Svetličić, V.; Kovač, S.; Žutić, V.; Frkanec, R.; Tomašić, J. Electrode double layer charge displacement by liposome adhesion, poster.

PRVA RADIONICA U OKVIRU PROJEKTA "JADRAN"

Malinska, Hrvatska, 23-26.9.2002.

Sudionici: Ahel, M.; Ćosović, B.; Filipović, V.; Ivanković, D.; Pavičić, J.; Pivčević, B.; Raspor, B.; Smital, T.; Svetličić, V.; Teskeredžić, E.; Vojvodić, V.; Žutić, V.

Prilog:

Picer, M.; Picer, N. Monitoring Jadrana, monitoring kloriranih ugljikovodika u uzorcima priobalnih voda istočnog Jadrana, predavanje.

ENVIRONMENTAL COMMUNICATION IN THE INFORMATION SOCIETY, 16th**INTERNATIONAL CONFERENCE: INFORMATICS FOR ENVIRONMENTAL****PROTECTION, ENVIROINFO 2002**

Beč, Austrija, 25-27.9.2002.

Sudionici: Pečar-Ilić, J.; Ružić, I.

Prilog:

Pečar-Ilić, J.; Ružić, I.; Skočir, Z. Object-relational database as a data source for interactive dynamic web application, pozvano predavanje.

10TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON SOFTWARE, TELECOMMUNICATIONS &**COMPUTER NETWORKS - SOFTCOM 2002**

Split-Venecija-Ankona-Dubrovnik, Hrvatska, Italija, 8-11.10.2002.

Sudionici: Beč, S.; Pečar-Ilić, J.

Prilozi:

Beč, S.; Pečar-Ilić, J.; Skočir, Z.; Ružić, I. Design of an object-relational database on river navigation, predavanje.

Tonković, H.; Pečar-Ilić, J.; Skočir, Z.; Ružić, I. Web application for analysis of hydrological conditions in river navigation, predavanje.

1. SLOVENSKI GEOLOŠKI KONGRES

Črna na Koroškem, Slovenija, 9-11.10.2002.

Prilog:

Miko, S.; Mesić, S.; Prohić E.; Šparica, M.; Barišić, D. The record of environmental change in the past fifty years inferred from the geochemistry of reservoir sediments from lake Lokvarsko jezero (Croatia), poster.

EUROPEAN RESEARCH CONFERENCE ON «NATURAL WATERS AND WATER**TECHNOLOGY: COLLOIDS IN NATURAL WATERS»**

Spa, Belgija, 12-17.10.2002.

Sudionici: Ciglencečki, I.; Gašparović, B.

Prilog:

Ciglencečki, I.; Plavšić, M.; Vojvodić, V.; Ćosović, B.; Baldi, F. Electrochemical evidence of muco-polysaccharides formation: The role of anoxic microzones, poster.

SECOND INTERNATIONAL CONFERENCE: OCEANOGRAPHY OF THE EASTERN**MEDITERRANEAN AND BLACK SEA**

Ankara, Turska, 14-18.10.2002.

Sudionici: Ahel, M.; Terzić, S.

Prilozi:

Ahel, M.; Tepić, N.; Precali, R.; Terzić, S. Relationships between phytoplankton crop,

primary production and accumulation of carbohydrates in the northern Adriatic, poster.
Terzić, S.; Ahel, M.; Đakovac, T.; Degobbis, D. Phytoplankton responses to nutrient dynamics in the northern Adriatic as reflected by biomarker pigments, poster.

WORKSHOP ON PROTECTION OF CARSTIC ECOLOGICAL SYSTEMS

Zagreb, Hrvatska, 15.10.2002.

Sudionik: Legović, T.

Prilog:

Legović, T.: Biocomplexity and sustainable ecosystem management, predavanje

"AQUACULTURE EUROPE 2002: "SEAFARMING - TODAY AND TOMORROW"

Trst, Italija, 16-19.10.2002.

Sudionik: Kurtović, B.

I. HRVATSKA KONFERENCIJA EKOINŽENJERSTVO 2002

Plitvička jezera, Hrvatska, 22-24.10.2002.

Sudionici: Barišić, D.

Prilozi:

Barišić, D.; Kezić, N.; Bubalo, D. Radioaktivnost medljikovaca petnaest godina nakon černobilske katastrofe, poster.

Barišić, D.; Marović, G.; Senčar, J. Problem pepela i šljake nastalih izgaranjem ugljena - primjer kaštelanskog zaljeva, poster.

Rastovčan-Mioč, A.; Sofilić, T.; Mioč, B.; Grahek, Ž. Radioaktivne tvari u elekropečnoj trosici, poster.

METAL AND RADIONUCLIDES BIOACCUMULATION IN MARINE ORGANISMS

Ancona, Italija, 27-30.10.2002.

Prilog:

Mikac, N. Bioaccumulation of inorganic and organic mercury and organolead compounds in marine organisms, pozvano predavanje.

DANUBE COMMISSION GIS WORKSHOP

Budimpešta, Mađarska, 30-31.10.2002.

Sudionik: I. Ružić

Prilog:

Ružić, I., Pečar-Ilić, J., Grubišić, N., Milković, Ž.: Development of the Croatian Fairway Information System (CROFIS), pozvano predavanje

BOLESTI ORGANIZAMA IZ VODA I LJUDSKO ZDRAVLJE

Zagreb, Hrvatska, 8.11.2002.

Sudionici: Kurtović, B.; Teskeredžić, E.; Teskeredžić, Z.; Tomec, M.

Prilozi:

Teskeredžić, E.: Akvakultura i bolesti, predavanje.

Tomec, M.: Toksičnost algi u ribnjacima, predavanje.

Kurtović, B.: Zoonoze, predavanje.

INTEGRATED COASTAL ZONE MANAGEMENT TRAINING COURSE

Split, Hrvatska, 25-29.11.2002.

Sudionici: Ciglencečki, I.

Prilog:

Ciglencečki, I., Čosović, B.: Rogoznica Lake as a unique karstic phenomenon of Adriatic coast: Protection and coastal management, predavanje

"POKRETANJE AKTIVNOSTI KOJE ĆE OMOGUĆITI PRAVOVREMENU IMPLEMENTACIJU ŠTOKHOLMSKE KONVENCIJE O POSTOJANIM ORGANSKIM

ONEČIŠĆIVALIMA (POPS) U REPUBLICI HRVATSKOJ"

Zagreb, Hrvatska, 26-27.11.2002.

Sudionici: Picer, M.

Prilog:

Picer, M. Dosadašnja iskustva u prikupljanju podataka za UNEP-GEF PTS projekt - mediteranske zemlje (regija iv), pozvano predavanje.

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija:

Branica, M.: Član - EUROMAR Board – EUROMAR.

Branica, M.: Član Academia Europaea (London).

Branica, M.: Predstavnik Republike Hrvatske u CIESM.

Branica, M.: Član Academiae Scientiarum et Artium Europaea (Salzburg).

Čosović, B.: Član ESF-European Environmental Research Organization Committee.

Kniewald, G.: Član međunarodnog odbora International Symposia on Environmental Biogeochemistry (ISEB).

Kniewald, G.: Predstavnik Republike Hrvatske u European Mineralogical Union.

Kniewald, G.: član Technical Committee on Modeling and Control of Environmental Systems, International Federation of Automation and Control.

Kniewald, G.: zamjenik predstavnika Republike Hrvatske u CIESM, Monaco.

Kniewald, G.: Član Komisije za gemologiju, International Mineralogical Association (IMA).

Kniewald, G.: predstavnik Hrvatske i član CIESM Board, CIESM Board meeting, Monaco, 19.12.2002.

Legović, T.: President, International Society for Ecological Modelling (ISEM) Europe.

Legović, T.: Vice-president, International Society for Ecological Modelling (ISEM).

Legović, T.: Member, International Advisory Board and Session Chairman, Environmental Problems of the Mediterranean Region. Near East University, Nicosia, North Cyprus, 12-15.4.2002.

Legović, T.: Member, Technical Advisory Board, EnviroComp Institute, Menlo Park, California, SAD.

Picer, M.: član Regional Team UNEP, Regionally Based Assessment of Persistent Toxic Substances Mediterranean Region, The Second Regional Team meeting, Atena, Grčka, 4-7.2.2002.

Picer, M.: član Regional Team UNEP, Regionally Based Assessment of Persistent Toxic Substances Mediterranean Region, The Third Regional Team meeting, Rim, Italija 3-5.4.2002

Picer, M.: član Regional Team UNEP, Regionally Based Assessment of Persistent Toxic Substances Mediterranean Region, The Forth Regional Team meeting, Kairo, Egipat 1-6.5.2002.

Picer, M.: član Regional Team UNEP, Regionally Based Assessment of Persistent Toxic Substances Mediterranean Region, The Fifth Regional Team meeting, Barcelona, Španjolska, 26-28.6.2002.

Plavšić, M.: Electrochemical methods applied for the study of trace metal organic interactions in natural waters, Postgraduate Course of Oceanography of the National and Kapodistrian University of Athens, Grčka.

Ružić, I.: Delegat Uprave unutarnjeg prometa, Ministarstva pomorstva, prometa i veza RH, na sastancima GIS Forum Danube.

Ružić, I.: predsjedavajući sekcije: Water-European Framework, 16th International Conference: Informatics For Environmental Protection, ENVIROINFO 2002

Ružić, I.: Predstavnik IRB u suradnji sa austrijskim institutom Seibersdorf Research, na Ministarskoj konferenciji Pakta stabilnosti.

Svetličić, V., član, International Union of Pure and applied Biophysics (IUPAB)

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Ahel, M.: Mitigation of environmental consequences of the war in Croatia. Risk assessment of hazardous chemical contamination, bilateralni hrvatsko-norveški projekt (putem norveške Vlade)

Ahel, M., Čosović, B., Tepić, N., Vojvodić, V.: Sudjelovanje u projektu Procesi stvaranja sluzavih nakupina u Jadranskom i Tirenskom moru: Stalno praćenje mora na profilu Rovinj – delta rijeke Po, Hrvatsko-Talijanska bilateralna suradnja.

Branica, M.: Biogeokemijski procesi i elementarno-izotopski sastav u Jadranskom moru. Bilateralna suradnja između IRB i Inštituta "Jožef Štefan", Ljubljana, Slovenija.

Branica, M., Cukrov, N.: Geokemijska istraživanja sedrenih barijera u Nacionalnom parku Krka, Institut Ruđer Bošković i Inštitut "Jožef Štefan"

Britvić, S., Krča, S., Pivčević, B., Sauerborn, R., Smital, T.: An integrated environmental monitoring system for Croatian freshwater, estuarine and coastal marine areas, Project supported by The Research Council of Norway. Participating institutions: Norwegian Institute for Water Research (Oslo, Norway), Ruđer Bošković Institute (Zagreb, Croatia), Faculty of Science (University of Zagreb, Croatia), Faculty of Education (University of Osijek, Croatia)

Čosović, B.: Ecosystem dynamics, marine chemistry, aquaculture and coastal management. Project supported by the Research Council of Norway, Participating institutions: Norwegian College of Fishery Science, Univ. Of Tromso, Tromso, Norway, Ruđer Bošković Institute.

Čosović, B., Cauwet, G.: Sporazum o znanstvenoj suradnji na temi istraživanja organskih tvari u moru, Institut Ruđer Bošković i Université Pierre et Marie Curie, Paris, Francuska.

Giger, W.; Ahel, M.: Aromatic Surfactants and Emerging Chemical Contaminants – Analyses, Occurrence, and Fate in the Aquatic Environment (ASECCO), bilateralni hrvatsko-švicarski projekt između Laboratorija za biogeokemiju organskih spojeva, ZIMO, IRB i Division Chemical Pollutants, Swiss Federal Institute for Environmental Science and Technology (putem švicarskog programa SCOPES)

Hršak, D.: Ugovor o radu Referentnog laboratorija (određivanje ekotoksičnosti, biološke razgradljivosti i bioloških pokazatelja kakvoće prirodnih i otpadnih voda) između Instituta "Ruđer Bošković", Zagreb i Državne uprave za vode, Zagreb.

Hylland, K., Raspor, B., Britvić, S., Hackenberger, B., Klobučar, G.: An integrated Environmental Monitoring System for Croatian Freshwater, Estuarine and Coastal Marine Areas (150463), projekt s Norwegian Institute for Water Research, Oslo, Norveška.

Kniewald, G.: Antropogenic waste loads in nearshore aquatic environments – the Krka estuary. Bilateralna znanstvena suradnja između Republike Hrvatske i Njemačke (njemački partner prof. E.Helmers, Fachhochschule Trier, Umweltcampus Birkenfeld).

Kniewald, G.; Mikac, N.; Vdović, N.: Interactions Contaminants/Organismes Marins a differents niveaux d'organisation biologique (INCOMAR). Partneri u GDRE (Groupement de Recherche Europeene).

Kniewald, G.; Matière Organique Naturelle en Milieu Sale (MONALISA). Groupement de Recherche. Multipartitna suradnja s Université de Toulon et du Var, Université Aix-Marseille III, Université de Bordeaux I, i IFREMER-a.

Kozarac, Z., Nelson, A.: Elektrokemijska ispitivanja površinskih mikroslojeva mora, bilateralni hrvatsko-britanski projekt između Zavoda za istraživanje mora i okoliša, IRB, i Zavoda za organizirane molekularne sisteme Sveučilišta u Leedsu, putem MZT RH i British Councila.

Lulić, S.: Radiološki monitoring u okolici NE Krško za 2002. godinu, Ugovor između Instituta Ruđer Bošković i Nuklearne elektrane Krško.

Lulić, S.: Program istražnih radova mjerenja radioaktivnosti rijeke Dunav u 2002. godini, Ugovor između Instituta Ruđer Bošković i Hrvatske vode – Direkcija, Zagreb.

Mikac, N., Niessen, S., Lojen, S.: Interakcija između biogeokemijskih ciklusa žive i sumpora u akvatičkim sedimentima. Tripartitni hrvatsko-francusko-slovenski projekt (Programme international de cooperation scientifique - PICS) financiran od francuske vlade između Instituta Ruđer Bošković, Zagreb, Sveučilišta u Lille-u, Lille, i Instituta Jozef Stefan, Ljubljana.

Pavičić, J.: Praćenje učinaka metala na morske organizme putem biomarkera, bilateralna suradnja između Instituta "Ruđer Bošković" i Inštituta "Jožef Štefan", Ljubljana, Slovenija.

Picer, M. (znanstveni koordinator), Holoubek, I., Vojinović Miloradov, M., Vončina, M., Rapopsomanikis, S., E., Kralik, Miošić, M., Kapelj, S., Dmitrović, Z., Arbneshi, T.: Projekt APOPSBAL-ICA2002-10007. Institucije: RECETOX-TOCOEN, Brno, Češka Republika; Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska; Geološki institut, Zagreb, Hrvatska; Zavod za javno zdravstvo, Zadar, Hrvatska; Sveučilište u Prištini, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kosovo; Sveučilište u Novom Sadu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek, Srbija i Crna Gora; Sveučilište u Beogradu, Rudarsko-geološki fakultet, Srbija i Crna Gora; Centar za ekotoksikološku dijagnostiku, Institut za javno zdravstvo Srbije, Beograd, Srbija i Crna Gora; Institut za javno zdravstvo, Maribor, Slovenija; Sveučilište Demokritos u Thrace, Tehnološki fakultet, Grčka; Federalna agencija za okoliš, Beč, Austrija; Geološki institut, Sarajevo, Bosna i Hercegovina.

Picer, M.: Ugovor s Europskom Komisijom Copernicus ICA2 - CT- 2002 -10007.u okviru "The fifth framework Programme.

Raspor, B., Erk. M.: Suradnja na međunarodnom projektu BEPELAG (Biological Effect of Contaminants in Pelagic Ecosystems) u organizaciji International Council for the Exploration of the Sea (ICES).

Raspor, B.; Kozarac, Z.; Hršak, D.; Čosović, B.: Izvještaj o radu Referentnog laboratorija tijekom 2002. godine. Ovlašteni referentni laboratorij, Zavod za istraživanje mora i okoliša, pruža usluge Državnoj upravi za vode u uspostavljanju mreže i osiguravanju kakvoće rada ovlaštenih laboratorija za ispitivanje otpadnih, površinskih, podzemnih i voda obalnog more. Ružić, I.; Pečar-Ilić, J.: Izrada integracijskog sustava nadzora plovnog puta za održavanje plovnog puta i sigurnosti plovidbe na Dravi i Dunavu, projekt između Instituta «Ruđer Bošković» i Ministarstva pomorstva prometa i veza Republike Hrvatske.

Svetličić, V., Žutić, V., Landini, P., Zehnder, A.: "Identifikacija bakterijskih struktura važnih za bakterijsku adheziju primjenom elektrokemijskog adhezijskog senzora", Program SCOPES znanstvene suradnje između zemalja istočne Evrope i Švicarske između Instituta Ruđer Bošković, Zagreb i Rovinj i Swiss Institute for Environmental Sciences and Technology, EAWAG, Dübendorf, Švicarska

Žutić, V., Svetličić, V., Chevalet, J., Amatore, C.: "Développement d'un nouveau type de capteur électrochimique pour la recherche et le contrôle de nanoparticules réactives dans le milieu aquatique" (Razvoj novog tipa elektrokemijskog senzora za istraživanje i monitoring reaktivnih nanočestica u akvatičkom okolišu), projekt COCOP, znanstvene suradnja zemalja srednje i istočne Europe s Francuskom, između Instituta Ruđer Bošković, Zagreb i CNRS, Université P.-M. Curie i Ecole Normale Supérieure, Paris, Francuska.

Žutić, V., Azam, F.: "Biofizički aspekti nastajanja makroagregata u Sjevernom Jadranu", bilateralni NSF projekt znanstvene suradnje između Instituta Ruđer Bošković, Zagreb i Scripps Institution of Oceanography, UCSD, San Diego, SAD.

Žutić, V., Turk, V.: "Istraživanje organskih čestica u Sjevernom Jadranu i pojava makroagregata" bilateralni hrvatsko-slovenski projekt između Instituta Ruđer Bošković, Zagreb i Nacionalnog instituta za biologiju, Morska biološka postaja Piran (putem MZT RH)

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

Abbas Syed Sultan, Nacionalna agencija za atomsku energiju (IAEA), Lahore, Pakistan 20.12.2001.-20.3.2002.

Rainer Lichtenthaler, NIVA, Norveška, 2.2. i 24.6-1.7.2002.

Inge Bruheim, NIVA, Norveška, 2.2.2002.

Marit Reigstad, University of Tromsø, Norwegian College of Fishery Science, Tromsø, Norveška, 22-25.2.2002.

Paul Wassmann, University of Tromsø, Norwegian College of Fishery Science, Tromsø, Norveška, 22-25.2. i 23.9.-4.10.2002.

Ketil Hylland, Norwegian Institute for Water Research (NIVA), Oslo, Norveška, 25-26.2.2002.

Anders Ruus, Norwegian Institute for Water Research (NIVA), Oslo, Norveška, 25-26.2.2002.

Fritz Scholz, E.M. Arndt University, Greifswald, Njemačka, 28.5.–2.6.2002.

Dietmar Möbius, Max-Planck Institut für Biophysikalische Chemie, Göttingen, Njemačka, 22-26.6.2002

Cedric Garnier (student), Université de Toulon et du Var, Toulon (La Garde), Laboratory RCMO, Francuska, 9-27.9.2002.

Stephane Mounier, Université de Toulon et du Var, Toulon (La Garde), Laboratory RCMO, Francuska, 9-14.9.2002.

Eckard Helmers, FH Trier, Umwelt Campus Birkenfeld, Birkenfeld, Njemačka, 23-28.9.2002.

Farooq Azam, Scripps Institute of Oceanography, University of California, San Diego, SAD, 6-10.10.2002.

Ingrid Falonga, Odsek za kemijo okolja, Inštitut "Jožef Štefan", Ljubljana, Slovenija, 4-11.11.2002.

Majda Tušek-Žnidarič, Odsek za kemijo okolja, Inštitut "Jožef Štefan", Ljubljana, Slovenija, 4-11.11.2002.

Tahir Arbnesi, Prištinski univerzitet, Priština, Kosovo, 7.11.–31.12.2002.

Paolo Landini, EAWAG/ETH, Dübendorf, Švicarska, 15.11.2002.

Jean Chevalet, CNRS, Paris, Francuska, 22.11.–4.12.2002.

Vlado Zorčec, ThermoFinnigan Nordic, Švedska, 25-30.11.2002.

Ian Winstanley, ThermoFinnigan Ltd., Warrington, Engleska, 25.11.–6.12.2002.

Valentin Mirčeski, Prirodno-matematički fakultet, Skopje, Makedonija, 17-23.12.2002.

Janja Vaupotič, Institut Jožef Štefan, Ljubljana, Slovenija, 23.12.2002.

Ivan Kobal, Institut Jožef Štefan, Ljubljana, Slovenija, 23.12.2002.

Znanstveni skupovi u organizaciji Instituta Ruđer Bošković:

DAN ELEKTROKEMIJE

Zagreb, Hrvatska, 7.6.2002.

Kvastek, K., Član Organizacijskog odbora

APOPSBAL ICA2-CT2002-10007 THE FIRST MEETING

Zadar, Hrvatska, 20-21.9.2002

Picer, M., predsjednik Organizacijskog odbora

BOLESTI ORGANIZAMA IZ VODA I LJUDSKO ZDRAVLJE

Zagreb, Hrvatska, 8.11.2002.

Akademija medicinskih znanosti Hrvatske – Kolegij veterinarske medicine u suradnji s Veterinarskim fakultetom, Hrvatskim veterinarskim institutom, Institutom Ruđer Bošković, Hrvatskom veterinarskom komorom i Hrvatskim veterinarskim društvom 1893. organizirala je znanstveno-stručni skup

Teskeredžić, E., predsjednik Organizacijskog odbora

WORKSHOP "THE CROATIAN AND NORWEGIAN COASTAL ZONE: ECOSYSTEM DYNAMICS AND ENVIRONMENTAL CHALLENGE"

Tromsø, Norveška, 29-30.8.2002.

Organizatori: Wassmann, P., Čosović, B.

CROATIAN - US NSF WORKSHOP "BIOCOMPLEXITY AND SUSTAINABLE ECOSYSTEM MANAGEMENT"

Dubrovnik, Hrvatska, 7-12.10.2002.

Organizatori: William & Mary University, SAD i Institut Ruđer Bošković.

<http://faust.irb.hr/~lair/>

**ZAVOD ZA LASERSKA I ATOMSKA ISTRAŽIVANJA I RAZVOJ
DIVISION OF LASER AND ATOMIC RESEARCH AND DEVELOPMENT**

Dr. sc. Hrvoje Zorc, predstojnik zavoda

Tel.: ++385 1 46 80 246, fax: ++385 1 46 80 104 e-mail: zorc@rudjer.irb.hr

Ustroj Zavoda:

Laboratorij za optiku i tanke slojeve, dr. sc. Hrvoje Zorc, voditelj laboratorija
Višenamjenske radionice, Eduard Švegel, voditelj radionica
Tajništvo, Đurđica Štefičić, dipl. inž. metal.

U okviru Zavoda do 30.6.2002. provodila su se istraživanja na programu trajne istraživačke djelatnosti:

**OPTRONIČKA INSTRUMENTACIJA OBRAMBENIH SUSTAVA
OPTRONIC INSTRUMENTATION OF DEFENSE SYSTEMS**

Direktor programa: dr. sc. Antun Peršin

Tema u sastavu programa:

Optronička instrumentacija obrambenih sustava, dr. sc. Antun Peršin, voditelj teme

Nakon 31.7.2002. u okviru Zavoda provodila su se istraživanja u okviru sljedećeg znanstvenoistraživačkog projekta:

**FOTONIKA SLIKOVNIH I NESLIKOVNIH OPTIČKIH SUSTAVA
PHOTONIC OF IMAGING AND NON IMAGING OPTICAL SYSTEMS**

Voditelj projekta: dr. sc. Antun Peršin

Tel: ++385 1- 46 80 246, e-mail: persin@rudjer.irb.hr

Budući da se radi o logičnom nastavku programa, koji je prešao u projekt vrlo sličnog programa rada, rezultati rada prikazani su za cijelu godinu zajedno.

Program rada:

Fizikalno modeliranje optičkih sustava i podsustava posebne namjene.

Optički i mehanički dizajn optičkih sustava i podsustava posebne namjene.

Analiza tolerancija računalom.

Izrada alata za izradu optičkih elemenata.

Izrada mehaničkih elemenata.

Integracija mehaničkih i optičkih elemenata.

Laboratorijsko ispitivanje i mjerenje karakteristika.

Izrada protokola integracije na platformu.

Izrada protokola terenskih ispitivanja.

Terenska ispitivanja, analiza rezultata, izrada protokola za razvoj.

Slikovna optika: dizajn i analiza refleksnog kolimatorskog ciljnika, studij fluorescentnog optičkog vlakna kao referentne ciljne točke, istraživanje i razvoj tankoslojnih dikroičnih komponenata.

Neslikovna optika: dizajn i grafička analiza hibridnih svjetlosnih koncentratora, usaglašavanje koncentratora i širokog matričnog izvora.

Modernizacija ciljničkih naprava: modernizacija sljedila rakete, primjena nezavisne analize komponenata pri razdvajanju prostorno distribuiranih svjetlosnih izvora.

Research programme:

Physical modeling of the optical systems and subsystems for special applications.

Optical and mechanical design of the optical systems and subsystems for special applications.

Computer assisted analysis of tolerances.
Manufacturing of tools necessary for production of optical components.
Manufacturing of mechanical components.
Integration of mechanical and optical components.
Laboratory testing and determination of characteristics.
Design of the protocol for integration to the platform.
Design of the protocol for the field-testing.
Field-testing, analysis of results and design of the final development protocol.
Imaging optics: the design and analysis of a reflecting collimator aiming device, the studies of a fluorescent fiber cable as a referent aiming point, research and development of thin films dichroic components.
Non-imaging optics: the design and a graphical analysis of hybrid light concentrators, tuning of a concentrator and a large matrix source.
Modernization of aiming devices: an improvement of a rocket tracer, an independent analysis of the components to discriminate distributed light sources.

OPTRONIČKA INSTRUMENTACIJA OBRAMBENIH SUSTAVA OPTRONIC INSTRUMENTATION OF DEFENSE SYSTEMS

Voditelj teme: dr. sc. Anton Peršin
++385-1-4680246 e-mail: persin@rudjer.irb.hr

FOTONIKA SLIKOVNIH I NESLIKOVNIH OPTIČKIH SUSTAVA PHOTONIC OF IMAGING AND NON IMAGING OPTICAL SYSTEMS

Voditelj projekta: dr. sc. Antun Peršin

SPEKTRALNI IZVORI ZA MEDICINSKU PRIMJENU SPECTRAL SOURCES FOR MEDICAL APPLICATION

Voditelj projekta: dr. sc. Antun Peršin

Suradnici na temi i projektima:

Dijana Bogunović, magistrica fiz. znanosti, znanstvena novakinja
Vesna Janicki, magistrica fiz. znanosti
Martin Lončarić, dipl. inž. fizike, znanstveni novak
Dunja Soldo Roudnicky, magistrica fiz. znanosti, stručna suradnica
Vitomir Stanišić, dipl. inž. strojarstva, stručni suradnik
Krešimir Tisaj, dipl. inž. fizike, stručni suradnik
Hrvoje Zorc, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnici:

Nenad Agatić, tehničar
Jurica Devčić, KV strojobrusač
Zdravko Dundović, tehničar
Emilija Đurić, tehničarka
Marijan Horvatiček, tehničar
Joso Lopac, KV glodač
Kristijan Negulić, kovinotokar
Ivica Novak, tehničar
Siniša Pecik, KV kovinotokar
Rajaković Krešimir, tehničar
Boris Severović, tehničar
Zvonimir Šelendić, tehničar
Franjo Špoljar, VKV kovinotokar
Eduard Švegel, tehničar

Branko Uzelac, KV kovinoglođač

Program rada i rezultati:

Tijekom 2002. godine nastavilo se s radom na započetom istraživanju na području slikovne i neslikovne optike, difrakcijske optike i optike tankih slojeva. Istraživački rad se odvijao u sljedećim pravcima:

1. Slikovna optika: U okviru istraživanja optičkih fenomena, napravljen je napredak u teoriji aberacija difrakcijskog polja. Ako se Fresnelova difrakcija prepoznata kao defokusirana Fraunhoferova difrakcija, tada se Fraunhoferov kriterij može točno izraziti kao funkcija dozvoljene tolerancije za defokus. Taj novi kriterij omogućava novu perspektivu koja je korisna optičkim dizajnerima i inženjerima koji redovno koriste tolerancije za udaljenost sve do dalekog područja (gdje je i definirana Fraunhoferova difrakcija) koje se upravo definira prema tolerancijama defokusa za danu aplikaciju. Načinjen je jedan magistarski rad i objavljen članak iz tog područja.
2. Neslikovna optika: U 2002 godini nastavljen je rad na razvoju izvora svjetla za fotodinamičku terapiju tumora. Radilo se na razvoju novog izvora koji će koristiti gusti niz svjetlećih dioda. S maksimumom zračenja na valnoj duljini od 635 nm novi svjetlosni izvor će biti dobar za aktiviranje hematoporfirina (maksimum apsorpcije na 630 nm), a optimalan za aktiviranje protoporfirina IX (maksimum apsorpcije na 635 nm) koji nastaje ubacivanjem 5-ALA-e u stanice.
3. Optika tankih slojeva: Nastavljen je rad na reverznom dizajnu optičkih tankih slojeva u svrhu određivanja njihovog profila indeksa loma. Načinjen je jedan magistarski rad i napisan članak iz tog područja. Započeta je suradnja s institutima u Italiji (ENEA) i Njemačkoj (Fraunhofer institute-Jena).

Research programme and results:

1. Imaging optics: In the frames of research of the optical phenomena we made a progress in theory of aberrations of diffraction field. By recognizing that Fresnel diffraction patterns are merely defocused Fraunhofer diffraction patterns, we show that the Fraunhofer criterion can be written precisely in terms of an allowable tolerance on defocus. This new criterion provides insight that is useful to optical designers and engineers who routinely deal with such tolerances distance until to far-field region (where the Fraunhofer diffraction is defined) can be determined based on the defocus tolerances for some application.
2. Non-imaging optics: In 2002 we made a breakthrough with the development of sources for photodynamic tumor therapy. The new source, based on the high density LED array with the peak radiation wavelength at 635 nm, is very good for use in photodynamic therapy with hematoporphirine and perfect for use with 5-ALA.
3. Optics of thin films: The work on the reverse engineering of the optical thin films has been continued to make a successful refractive index profile. Several oxide materials have been studied and it has been found that each of them has a specific refractive index profile, depending on the intrinsic material properties and deposition conditions respectively.

PRILOZI:**Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:**

1. Bogunović, Dijana; Harvey, J.E.; Krywonos, A. Tolerance on defocus precisely locates the far field (exactly where is that far field anyway?). // Applied optics. 41 (2002), 13; 2586-2588
2. Borjanović, Vesna; Kovačević, Ivana; Zorc, Hrvoje; Pivac, Branko. Irradiation effects on polycrystalline silicon. // Solar energy materials and solar cells. 72 (2002), 1-4;

183-189

3. Janicki, Vesna; Zorc, Hrvoje. Refractive index profiling of CeO₂ thin films using reverse engineering methods. // Thin solid films. 413 (2002), 1-2; 198-202
4. Kopriva, Ivica; Szu, H.; Peršin, Antun. Optical reticle trackers with the multi-source discrimination capability by using independent component analysis. // Optics communications. 203 (2002), 3-6; 197-211
5. Mikšić, Vesna; Pivac, Branko; Rakvin, Boris; Zorc, Hrvoje; Corni, F.; Tonini, R.; Ottaviani, G. DLTS and EPR study of defects in H implanted silicon. // Nuclear instruments & methods in physics research. Section B - Beam interactions with materials & atoms. 186 (2002), 1; 36-40

Magistarski radovi:

1. Bogunović Dijana. A nonparaxial scalar treatment of diffraction grating behavior. Orlando, Florida, SAD : School of Optics, 28.6.2002, 138 str., Voditelj: Harvey, J. E.
2. Janicki, Vesna. Modeliranje profila indeksa loma tankih slojeva. Zagreb : Prirodoslovno-matematički fakultet, 16.7.2002, 86 str., Voditelj: Zorc, H.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

Zorc, H.: Thin films optics in the Rudjer Boskovic Institute, ENEA-Cassaccia, Italija, 1.2.2002.
Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:
Bogunović, D., University of Central Florida, School of Optics/CREOL, Orlando, SAD, do 1.8.2002., postdiplomski studij

Studijski boravci u okviru međunarodne suradnje:

Janicki, V., ENEA, Cassaccia, Italija, 7.1.–7.7.2002. i 8.9.–8.12.2002.

Sudjelovanje na kongresima:

9. MEĐUNARODNI SASTANAK VAKUUMSKA ZNANOST I TEHNIKA
Trakošćan, Hrvatska, 15.5.2002.
sudionik: Zorc, H.

1ST BARCELONA WORKSHOP ON OPTICAL CHARACTERISATION OF MATERIALS
Barcelona, Španjolska, 28-29.10.2002.
sudionica: Janicki, V.

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija

Zorc, H.: član EUREKA – EULASNET koordinirajućeg tijela, Bruxelles, Belgija, 7.11.2002.

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Peršin, A.: Topnička ciljnička grupa, Ministarstvo obrane Republike Hrvatske.

SERVISI

<http://www.nmr.irb.hr/>

CENTAR ZA NUKLEARNU MAGNETSKU REZONANCIJU
CENTER FOR NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE

Voditelj: dr. sc. Dražen Vikić-Topić

Tel. ++385 1 4560 961 Fax: ++385 1 4680 085

e-mail: vikić@irb.hr

Djelatnici:

Željko Marinić, magistar kem. znanosti, stručni suradnik

Vilko Smrečki, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Boris Sokač, samostalni tehničar

Dražen Vikić-Topić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Marijana Vinković, doktorica kem. znanosti, viša asistentica (od 4.6.2002.)

Kristina Wolsperger, dipl. inž. kemije, stručna suradnica

Program rada i rezultati:

NMR centar je zasebna jedinica na nivou Instituta, a raspolaže s tri NMR spektrometra

- Varian Gemini 300 MHz (god. proizvodnje 1990.)

- Bruker Avance 300 MHz (god. proizvodnje 2002.)

- Bruker Avance 600 MHz (god. proizvodnje 2002.)

NMR spektrometri od 300 MHz imaju supravodljive magnete od 7,05T dok je NMR od 600 MHz opremljen supravodljivim magnetom od 14,10T. U centru je smještena i popratna oprema za crtanje, tiskanje i pohranjivanje NMR podataka, kao i radna stanica SUN Sparc 4. Budući da se radi o vrlo skupoj opremi koju je MZT nabavilo za cijelu akademsku zajednicu Hrvatske, NMR centar radi za više stotina korisnika s Instituta Ruđer Bošković i ostalih instituta kao i za Sveučilišta u Zagrebu, Rijeci, Splitu i Osijeku. U centru se obavljaju znanstveno-istraživačka i nastavna djelatnost te znanstveno-uslužna snimanja, istraživačka i rutinska, za industriju: Pliva, Belupo, INA, Fotokemika, Chromos, te neke druge manje državne i privatne firme.

Najčešće se provode snimanja ^1H i ^{13}C jedno- i dvodimenzijских (COSY, NOESY, ROESY, HMBC, HSQC) NMR spektara. Provode se i kvantitativna NOE mjerenja kao i mjerenja diferencijalnih NOE spektara. Prema potrebi mjere se i NMR spektri drugih jezgri kao na primjer ^2H , ^{15}N , ^{19}F , ^{32}P , ^{113}Cd , ^{199}Hg .

NMR centar uglavnom obavlja istraživanja iz područja organske, bioorganske i farmaceutske kemije. Vrlo često se provode istraživanja i iz područja anorganske, fizičke i analitičke kemije. Temeljna istraživanja, u kojima se koristi NMR spektroskopija, uključuju prirodne spojeve, šećere, nukleozide, male peptide. Isto tako istražuju se kompleksiranje, izotopni efekti i supramolekularne interakcije. U suradnji s Zavodom za opću i anorgansku kemiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu provode se istraživanja organometalnih spojeva, posebno organoživinih spojeva, gdje se na temelju interakcija ^1H - ^{199}Hg i ^{13}C - ^{199}Hg , kao i drugih parametara iz NMR spektara utvrđuje struktura i konformacija ovih za utjecaj na okolinu vrlo važnih molekula. Primjenjena NMR istraživanja provode se za potrebe farmaceutske industrije i manjih firmi i zaštićena su ugovorom o tajnosti.

Svi članovi NMR centra suradnici su na MZT projektu 0098059 "Nuklearna magnetska rezonancija i proračuni bioorganskih molekula", koji vodi D. Vikić-Topić. U okviru projekta istražuju se struktura, dinamika i interakcije malih bioorganskih molekula (peptida, kinolona, itd) spektroskopijom nuklearne magnetske rezonancije i računskim metodama. Mjerenja NOE interakcija, izotopno obilježavanje i kompleksiranje koriste se za utvrđivanje struktura i bioaktivnih konformacija.

NMR centar također obavlja nastavnu djelatnost na dodiplomskom i poslijediplomskom nivou za Prirodoslovno-matematički fakultet, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Visoku zdravstvenu školu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije te Prehrambeno-biotehnološki fakultet,

Sveučilišta u Zagrebu. S time u vezi NMR centar je izdao i nekoliko skripata iz područja NMR spektroskopije. Pored predavanja, vježbi i demonstracija iz NMR spektroskopije u NMR centru se izrađuju i diplomski, magistarski i doktorski radovi.

Research programme and results:

Center for NMR spectroscopy at Ruđer Bošković Institute (RBI) is the only academic NMR facility in Croatia. Therefore, even few hundreds of Croatian scientists and researchers from RBI and Universities of Zagreb, Rijeka, Split and Osijek and other governmental institutions use permanently or temporarily the equipment of NMR center. Three NMR spectrometers are in use:

- Varian Gemini 300 MHz (from 1990)
- Bruker Avance 300 MHz (from 2002)
- Bruker Avance 600 MHz (from 2002)

NMR center also possesses SUN Sparc 4 station and different devices for plotting, printing and retrieving of NMR data. Different kinds of measurements of ^1H and ^{13}C one- and twodimensional NMR (COSY, NOESY, ROESY, HMBC, HSQC) are performing as well as measurements of other nuclei such as: ^2H , ^{15}N , ^{19}F , ^{32}P , ^{113}Cd , ^{199}Hg . From time to time the quantitative NOE measurements and differential NOE measurements are also performing. NMR investigations performed in Center covered organic, bioorganic and pharmaceutical chemistry. In addition inorganic, physical and analytical chemistry as well as biochemistry researches are carried out. Basic investigations are conducted on natural compounds, sugars, nucleosides and small peptides. Researches in supramolecular chemistry, metal complexation and isotope effects by NMR spectroscopy are also going on. The members of NMR center participate in Ministry of Science and Technology project No. 0098059 "Nuclear Magnetic Resonance Resonance and Calculations of Bioorganic Molecules" under the conduct of D. Vikić-Topić. The NMR investigation of the structure, dynamics and interactions of small biomolecules (peptides, quinolones, etc.) and quantum chemical calculations has been performed. The conformations important for bioactivity are analyzed by NOE measurements, isotope labelling and complexation. Relatively small number of atoms in these molecules enable the precise quantum chemical calculations of their structure, conformation as well as their properties. Calculated NMR parameters (chemical shifts, spin-spin couplings) are correlated with the experimental NMR data for obtaining deeper insight into the structure and nature of interactions in solution. The investigations are supported by other spectroscopy measurements (IR, UV/VIS, Mass spectrometry and X-ray analysis). The knowledge of the structure, conformation and properties of bioorganic molecules is helpful in studying bioprocesses: protein folding, isomerization, ligand-receptor interactions (intrinsic, extrinsic), hydrogen bonding as well as in pharmacokinetics and drug design. Short peptide fragments, 5 to 13 amino acids, can mimic activity of the whole peptide and sometimes they can be even more bioactive than the whole molecule. Such peptide fragments, which repeat many times in molecule, can be used themselves as a drug or can be the lead compounds for the development of classical drugs. Theoretical calculations of nuclear shielding are also performing. In addition applicative investigations with NMR spectroscopy for pharmaceutical and petrochemical industry are carried out as well.

The staff of NMR center participate in undergraduate and graduate studies at Faculty of Science, Faculty of Pharmacy and Biochemistry, School of Health Studies, Faculty of Chemical Engineering and Technology and Faculty of Food Technology and Biochemistry of the University of Zagreb, Split and Osijek. NMR center has published few scriptae on NMR spectroscopy for undergraduate and graduate studies. In addition to lectures and practical demonstrations in NMR spectroscopy diploma work, master of science and Ph. D. thesis are completed in NMR center as well.

PRILOZI

Znanstveni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u:

1. Jadrijević-Mladar Takač, Milena.; Vikić-Topić, Dražen; Govorčinović, Tihana. FTIR and NMR spectroscopic structural studies of gentisamide isolated from biological material. // European journal of pharmaceutical sciences. 17S (2002); S47- S57.
2. Mlinarić-Majerski, Kata; Vinković, Marijana; Škare, Danko; Marchand, A. P. Experimental evidence in support of transannular interaction in diketones. // Arkivoc 4 (2002); 30-37.
3. Nigović, Biljana.; Kujundžić, Nikola.; Vikić-Topić, Dražen; Sanković, Krešimir. Complex formation between transition metals and 2-pyrrolidone-5-hydroxamic acid. // Acta chimica Slovenica. 49 (2002); 525-535.
4. Pavlović, Gordana; Matijević Sosa, Julija.; Vikić-Topić Dražen; Leban, Ivan. N-(3-chlorophenyl)-2-hydroxy-1-naphthaldimine at 200 K. // Acta crystallographica E. 58 (2002); 317-320.
5. Smrečki, Vilko; Novak, Predrag.; Vikić-Topić, Dražen; Hrenar, Tomislav.; Meić, Zlatko. Deuterium isotope effects in ^{13}C NMR spectra of trans-N-salicylideneaniline isotopomers. // Croatica chemica acta. 75 (2002); 41-49.

Diplomski radovi:

1. Govorčinović, Tihana. Izolacija i spektroskopska karakterizacija metabolita salicilamida. Zagreb. Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, 15.11.2002, 44 str. Voditelji: Milena Jadrijević-Mladar Takač i Dražen Vikić-Topić.

Sudjelovanja na kongresima:**XIXth IUPAC SYMPOSIUM ON PHOTOCHEMISTRY**

Budimpešta, Mađarska, 14-19.7.2002.

Sudionici: Marinić, Ž.

Prilog:

Butković, K.; Basarić, N.; Marinić, Ž.; Šindler-Kulyk, M. Photochemical behaviour of o-stilbenyl-pyrroles and sydnone, poster

17th DUBROVNIK INTERNATIONAL COURSE & CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATHEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCE

Dubrovnik, Hrvatska, 24-29.6.2002.

Sudionici: Marinić, Ž.

Prilog:

Vikić-Topić, D.; Marinić, Ž. Deuterium Isotope Effects in ^{13}C NMR Spectra, poster

7th EUROPEAN CONGRESS OF PHARMACEUTICAL SCIENCES (EUFEPS 2002)

Štokholm, Švedska., 21-23.10.2002.

Prilog:

Jadrijević-Mladar Takač, M.; Vikić-Topić, D.; Govorčinović, T. FTIR and NMR spectroscopic structural studies of gentisamide isolated from biological material, poster

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Ad Bax, Laboratory of Chemical Physics, NIDDK, National Institutes of Health, Bethesda, MD 20892, SAD
Jadrijević-Mladar Takač, Milena, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, Hrvatska
Juranić, Nenad, Mayo Clinic, Department of Biochemistry and Molecular Biology, Analytical NMR facility, Rochester, MN, SAD
Kovaček, Damir, Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Zagreb, Hrvatska
Müller, Norbert, Institute of Chemistry, Johannes Kepler University, Linz, Austrija
Novak, Predrag, Pharmaceutical Industry PLIVA d. d., Research and Development, Zagreb, Hrvatska
Pejov, Ljupče, Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences and Mathematics, Cyril Methodius University, Skopje, Republic of Macedonia
Plavec, Janez, National Institute of Chemistry, Slovenian NMR Center, Ljubljana, Slovenija
Popović, Zorica, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zavod za opću i anorgansku kemiju, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, Hrvatska
Sklenar, Vladimir, Laboratory of Biomolecular Structure and Dynamics, Faculty of Science, Masaryk University, Brno, The Czech Republic
Uršić, Stanko, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, Hrvatska

Znanstveni skupovi u organizaciji Instituta Ruđer Bošković:

17th INTERNATIONAL COURSE AND CONFERENCE ON THE INTERFACES AMONG MATHEMATICS, CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCES (MATH/CHEM/COMP)
Inter-University Centre, Dubrovnik, Hrvatska, 24-29.6.2002.

Vikić-Topić, D., zamjenik ravnatelja

<http://knjiznica.irb.hr>

**KNJIŽNICA
LIBRARY**

Voditeljica: mr. sc. Jadranka Stojanovski

Tel. ++385 1 4560 929 e-mail: jadranka@nippur.irb.hr

Tel. ++385 1 4561 043; ++385 1 4680 086; ++385 1 4561 195

Fax ++385 1 4561 095

Djelatnici:

Vesna Borić, dipl. inž. biol., dipl. bibl., viša knjižničarka

Danijela Erman, dipl. prof. hrv. jez. i pov., diplomirana knjižničarka (od 11.4.2002., u Rovinju)

Tomislav Jakoplić, pomoćni knjižničar

Sofija Konjević, dipl. inž. agronom., dipl. bibl., diplomirana knjižničarka

Iva Melinščak Zlodi, prof. filozof. i komp. knjiž., diplomirana knjižničarka

Mirjana Mihalić, dipl. inž. šum., dipl. bibl., diplomirana knjižničarka

Ivana Pažur, prof. pov. umj. i etnol., dipl. bibl., diplomirana knjižničarka

Mario Pranjić, dipl. inž. rač., informatičar

Jadranka Stojanovski, magistrica inf. znanosti, diplomirana knjižničarka

Dunja Šafar Cvitaš, magistrica kem. znanosti, knjižničarka (od 4.4.2002.)

Vlado Šulentić, pomoćni knjižničar

Služba fotokopiranja: Dubravka Levak

Fotolaboratorij: Josip Uhl, fotograf

Program rada i rezultati:

Knjižnica je u 2002. nastavila sudjelovanje na sljedećim projektima:

Sustav znanstvenih informacija RH – tematski podsustav Prirodoslovlje (<http://prirodo.irb.hr>)

U 2002. g. Prirodoslovlje je obuhvaćalo rad 26 knjižnica iz područja prirodnih znanosti. I dalje se radilo na objedinjavanju online kataloga, koordiniranoj nabavci građe, poticanju informatizacije knjižnica, izobrazbi knjižničara i dr. Nastavljena je kvalitetna suradnja s podsustavima Biomedicina, Tehnika, Humanistika. U 2002. g. startao je i podsustav Društvenih znanosti. Projekt SZI koji je Knjižnica IRB inicirala i pokrenula 1995. sa deset knjižnica tako 2002. obuhvaća rad preko 100 znanstvenih knjižnica.

Centar za online baze podataka (<http://baze.irb.hr>)

Uspješno je nastavljen i projekt osiguravanja pristupa komercijalnim i drugim bazama podataka za znanstvenu zajednicu RH. Trenutno Centar nudi svojim korisnicima 10 baza podataka: Current Contents, Medline, INSPEC, PsycInfo, Ovid Core Biomedical Collection, Evidence Based Medicine Review, ERIC, WoS, INIS i Ei Village (Compendex). Radi se mahom o ključnim bazama podataka, posebno za područje biomedicine, fizike i tehnike. Trenutno baze podataka pretražuje oko 4200 registriranih korisnika.

Hrvatska znanstvena bibliografija CROSBIB (<http://bib.irb.hr>)

Ustanovljena kao podrška Ministarstvu znanosti i tehnologije pri prikupljanju podataka o objavljenim radovima kao dijelu rezultata rada na projektima, razvila se u sveobuhvatnu elektroničku bibliografiju čija najveća odlika je recentnost i cjelovitost podataka. Baza podataka sadrži radove od 1996 do danas, tj. preko 60000 radova. Prilikom unosa podataka o radovima znanstvenici mogu učitati cjeloviti tekst rada u digitalni arhiv.

Tko je tko u znanosti u Hrvatskoj (<http://tkojetko.irb.hr>)

Zamisao projekta je objediniti na jednom mjestu podatke o hrvatskim znanstvenicima. Bazu podataka znanstvenika moguće je pregledavati i pretraživati. Projekt ima osnovnu svrhu promocije znanstvenika u zemlji i inozemstvu, te međusobnog povezivanja znanstvenika i unaprijeđenju komunikacije. Projekt je trenutno u fazi testiranja.

EJOL Electronic Journals online Library (<http://ejol.irb.hr>)

Cilj projekta je izgradnja baze koja će preko jedinstvenog Web sučelja osigurati pristup brojnim elektroničkim znanstvenim časopisima dostupnim preko Web-a, te preprint arhivima i hrvatskom tisku. Posebna pozornost usmjerena je prema domaćim znanstvenim časopisima koji su uglavnom nepoznati međunarodnoj znanstvenoj zajednici i ne nalaze se u drugim sličnim bazama. Zamišljena je implementacija baze na razini Hrvatske u smislu uključivanja knjižnica koje će imati vlastito sučelje kao i mogućnost administriranja svoje elektroničke i tiskane pretplate. Prikupljanjem elektroničkih časopisa u bazu znanstvenici na jednom mjestu mogu pronaći i koristiti cjeloviti tekst radova velikog broja besplatno dostupnih časopisa koji su zbog raspršenosti nepoznati većem broju korisnika. EJOL će biti baza dostupna svim članovima hrvatske istraživačke i akademske zajednice kao i široj javnosti.

Tijekom protekle godine razvijali smo paralelno dva veća projekta unutar Knjižnice:

1. *SEND – Sustav elektroničke nabave dokumenata*. Kako bismo olakšali našim korisnicima nabavu tiskanih i elektroničkih dokumenata koji nisu sadržani u fondu Knjižnice, razvili smo mrežno sučelje putem kojeg autorizirani korisnici naručuju dokumente iz hrvatskih knjižnica ili iz inozemstva. SEND sučelje pušteno je u rad krajem prosinca, a reakcije korisnika su vrlo pozitivne. SEND je dostupan korisnicima na adresi <http://knjiznica.irb.hr/send>. Ujedno se Knjižnica brine da za svoje korisnike naručuje dokumente po najpovoljnijim cijenama. Zbog najpovoljnijih uvjeta za međubibliotečnu smo posudbu koristili servis TIBORDER (Universitätsbibliothek und Technische Informationsbibliothek Hannover) s kojima je suradnja započela u studenom 2001. Članke dobivamo elektroničkom poštom u digitalnom formatu uglavnom u roku od 5 dana, a mogu se posuditi i knjige.

2. *Novo sučelje za pretraživanje online kataloga Knjižnice* – koje radi znatno brže i kvalitetnije od «starog». Odnedavno je izrađena i detaljna statistika pristupa koja pokazuje da imamo prosječno oko 130 pretraživanja kataloga dnevno. Statistika je dostupna na adresi <http://prirodo.irb.hr/katalozi/stats/>.

Tijekom 2002. knjiznica IRB-a obradila je 494 knjige, od čega je kupljeno 389 naslova, 54 naslova je dar, a preko Sabre je nabavljeno 7 naslova. 44 knjige obrađene su iz Chromosove "ostavštine". Knjižnica je također organizirala akciju prikupljanja knjiga za donaciju "Za zatvorenike" u sklopu koje je prikupljeno 159 knjiga. Knjižnica trenutačno bilježi 32417 knjiga od kojih je 16000 računalno obrađeno. Nažalost, veći dio knjiga je u posudbi tako da ne možemo obaviti računalnu obradu knjižnog fonda u cjelosti.

Za 2002. godinu pretplaćeno je ukupno 383 naslova, od toga 65 naslova (i 11 elektroničkih inačica) IRB plaća vlastitim sredstvima, 57 naslova smo pretplatili potporom MZT, a za 192 naslova je MZT s izdavačima ušlo u direktnu pogodbu. Problemi s pretplatom časopisa i dalje su prisutni, jer veliki broj naslova stiže u knjižnicu sa znatnim zakašnjenjem. Ukupno je računalno obrađeno 26986 volumena časopisa.

Situaciju sa časopisima značajno su popravili elektronički časopisi (ečasopisi). Dugogodišnja nastojanja Knjižnice da korisnicima omogući korištenje elektroničkih inačica časopisa u 2002. g ostvarena su u velikoj mjeri. MZT je sklopilo trogodišnji ugovor s tri velika izdavača, Elsevier, Wiley i Springer Verlag. Ovim ugovorom omogućen je pristup svim ečasopisima koje hrvatske knjižnice pretplaćuju od spomenutih izdavača kao i mogućnost pristupa velikom broju časopisa koje same ne pretplaćuju u tiskanom obliku. Krajem godine potpisan je ugovor s Kluwer Academic Publishers.

Preko Elsevierovog servisa *ScienceDirect*, dostupno je 1208 ečasopisa, preko *SpringerLink*, dostupno 420 naslova, preko *WileyInterscience* 100 naslova. Preko Kluwera dostupno je 757 naslova časopisa. Ukupno je djelatnicima Instituta na raspolaganju 2500 pretplaćenih ečasopisa! Ovako velik broj pretplaćenih ečasopisa povremeno je bio nadopunjen i probnim pristupima što ih je za svoje korisnike osigurala Knjižnica kao što su *Blackwell Synergy* (407 naslova), *Institute of Physics Publishing Electronic Journals* (37 naslova) te mnogobrojnim časopisima koji su privremeno ili trajno besplatno dostupni na Mreži. Knjižnica je provela istraživanje korisnika o

korištenju ečasopisa koje je pokazalo da veliki broj znanstvenika želi imati pristup što većem broju naslova kao i potrebu dodatne edukacije za korištenje elektroničkih izvora znanja.

(<http://knjiznica.irb.hr/hrv/anketa/index.html>)

Djelatnici knjižnice sudjelovali su aktivno na brojnim skupovima u zemlji i inozemstvu. Također smo sudjelovali na organiziranim seminarima i radionicama.

U okviru redovitih mjesečnih Kolokvija Knjižnice IRB održano je devet predavanja s «vrućim» temama iz područja informacijskih znanosti i knjižničarstva

(<http://knjiznica.irb.hr/hrv/kolokviji.html>).

Surađivali smo intenzivno s knjižnicama u zemlji i inozemstvu. Posebno bismo istaknuli suradnju s Informacijskim centrom Američke ambasade u Zagrebu, središnjim knjižnicama podsustava SZI, Universitätsbibliothek Regensburg (zajednički projekt Elektronische Zeitschriften Datenbank), Centralnom tehniškom knjižnicom u Ljubljani, Univerzitetnom knjižnicom Maribor i Universitätsbibliothek Bochum.

Redovito smo održavali informacijski portal Knjižnice (<http://knjiznica.irb.hr>) koji trenutno ima oko 2500 mrežnih stranica. Kako je održavanje tako velikog broja statičkih stranica vrlo zahtjevno, planiramo hitnu izradu novog dinamičkog weba. Uz razvoj i održavanje mrežnih stranica Knjižnice posebno ističemo sljedeće:

- web stranice *Znanost na Internetu* nude korisnicima vrlo pregledno, prema pojedinim znanstvenim područjima kategorizirane (Fizika, Kemija, Matematika, Biologija, Medicina, Geoznanosti, Okoliš, Računala i Knjižničarstvo), relevantne informacijske izvore

(<http://znanost.irb.hr>)

- najistaknutiji hrvatski znanstvenici (<http://knjiznica.irb.hr/hrv/znanstvenici/index.html>) sa probranim mrežnim izvorima koji nude brojne biobibliografske podatke, fotografije i sl.

- Hrvatski tisak (<http://knjiznica.irb.hr/hrtisak>) s vezama na dnevne, tjedne i druge novine, npr. Vjesnik, Večernji list, Feral Tribune i dr.;

- elektronička verzija godišnjih izvještaja Instituta od 1993. godine

(<http://knjiznica.irb.hr/izvjestaj/>);

- virtualna referentna zbirka: brojni rječnici, enciklopedije i priručnici iz područja prirodnih znanosti (<http://knjiznica.irb.hr/hrv/vrz>);

- informacije o elektroničkim resursima koji su na raspolaganju korisnicima

(<http://knjiznica.irb.hr/hrv/resources.html>);

- Knjižnice u Hrvatskoj – pregled cca 140 hrvatskih knjižnica prisutnih na Mreži

(<http://knjiznica.irb.hr/hrv/crolibs.html>) zajedno s vezama na njihove online kataloge.

Knjižnicu budućnosti vidimo kao sveobuhvatan informacijski centar koji korisnicima osigurava pristup svim relevantnim izvorima informacija i kvalitetnu izobrazbu. Knjižnicu budućnosti vidimo u potpunosti svjesnu uloge i odgovornosti koju ima prema budućim naraštajima. U tom smislu zalagat ćemo se za očuvanje integriteta knjižničnih fondova. Modernizacijom segmenata knjižničkog poslovanja kao što su nabava, obrada, posudba i dr. ostvarit ćemo prostor za nove poslove kao što su učinkovito pretraživanje i diseminacija informacija, razvoj digitalne knjižnice, evaluacija mrežnih informacijskih izvora, elektroničko izdavaštvo i dr. U budućnosti svakako planiramo pojačati međunarodnu suradnju, uključivanjem u međunarodne projekte, kao i uključivanjem inozemnih stručnjaka u domaće projekte.

Programme and results:

Throughout the year 2002 the Library continued to lead and coordinate the following projects:

Croatian Science Information System – thematic subsystem Natural Science

(<http://prirodo.irb.hr>)

In 2002 the project Natural Science included 26 natural science libraries. Work was conducted on unifying the online catalogue, on co-ordinated acquisition of library material, stimulating the computerisation of libraries, educating the librarians etc. Productive cooperation with Biomedicine, Engineering and Humanities subsystems has continued. Social Sciences

subsystem was also initiated in 2002. Croatian Science Information System, which was initially launched in 1995 by RBI and ten other libraries, is today coordinating over 100 research libraries.

Online Database Centre (<http://baze.irb.hr>)

The project to provide the Croatian scientific community with access to commercial and other databases was continued successfully. At this moment the Centre offers its users ten databases: Current Contents, Medline, INSPEC, PsycInfo, Ovid Core Biomedical Collection, Evidence Based Medicine Review, ERIC, WoS, INIS and Ei Village (Compendex). Those are the most significant databases in the fields of biomedicine, physics and engineering. About 4200 registered users research them.

Croatian Scientific Bibliography CROSBIB (<http://bib.irb.hr>)

CROSBIB was initially established as a supporting tool for the Ministry of Science and Technology in gathering data about published papers, as a result of activities on various projects. It developed into a comprehensive electronic bibliography, whose major advantages are recentness and completeness of data. The database includes data from 1996 up to the present day, which add up to more than 60000 documents.

Who is Who in Croatian Science (<http://tkojetko.irb.hr>)

The objective of the project is to gather in one place data on Croatian scientists. It is possible to search and retrieve the database. The main idea is to promote Croatian scientists at home and abroad, to connect the scientists and to advance communication. At the moment the project is under testing.

EJOL Electronic Journals online Library (<http://ejol.irb.hr>)

The main goal of this project is to develop a unique Web interface that provides access to numerous scientific electronic journals, and to the preprint archives, as well as to Croatian media. Particular care has been taken of domestic scientific journals, which are mainly unknown to the international scientific community and cannot be found in other similar databases. The idea of the implementation of the base is to enable registered libraries in Croatia to access the database, by way of electronic access interface, and at the same time to enable libraries to maintain their own electronic and printed subscriptions. EJOL will be accessible to all members of Croatian scientific community, as well as to general public.

In the course of the last year we have undertaken two major parallel projects in the Library:

1. SEND – Electronic Documents Acquiring System (<http://library.irb.hr/send>). To help our customers to get printed and electronic documents not available at our Library, we have developed a web interface, which makes it possible for authorised users to loan documents from Croatian libraries or abroad. The SEND interface started at the end of December 2002 and the first reactions were very favourable.

The Library is delivering documents to library users at a favourable rate. Interlibrary cooperation with TIBORDER service (Universitätsbibliothek und Technische Informationsbibliothek Hannover) begun in 2001, because they offered most acceptable terms. Digital documents are delivered via e-mail in 5 days, or books are lent.

2. New online interface for catalogue search, which works faster and better than the "old" one. A recently conducted detailed statistics on access gave us an average result of 130 catalogue searches per day. It could be found at <http://priroda.irb.hr/katalozi/stats/>

In 2002, the Library acquired 494 books: 389 of which were purchased and 54 were donated to the Library. Seven titles were donated by the SABRE foundation. Forty-four books from Chromos collection were catalogued. The Library has participated in donating books to prisoners: it has collected 159 books.

The Library's collection amounts to 32417 volumes (16000 electronically catalogued so far) In the year 2002 the Library was subscribed to 383 scientific journals. The subscription to 65 titles (and 11 electronic versions) was covered by the Institute funds, while 249 titles were subsidized by the Ministry of Science and Technology of the Republic of Croatia. The total

number of available journal volumes is nearly 27.000. The difficulties caused by frequent delays of incoming copies of periodicals were substantially remedied by the use of electronic journals. The Library's long lasting endeavour to ensure its users access to electronic versions of the journals was in a great deal made possible by contracts between the Ministry of Science and Technology and four major publishers: Elsevier, Wiley, Springer Verlag and Kluwer Academic Publishers. This arrangement made all their e-journals to which various Croatian libraries are subscribed to available, as well as many journals, which are not subscribed to in printed form. Through *ScienceDirect* (Elsevier) 1208 journals are available, from *SpringerLink* 420, by *WileyInterscience* 100, and through Kluwer 757 titles. In total, 2500 subscribed e-publications were at the disposal to the staff of the Ruđer Bošković Institute in 2002!

Apart from such a great number of subscribed e-journals, the choice was further extended by trial access, for instance, to *BlackwellSynergy* (407 titles), *Institute Of Physics Publishing Electronic Journals* (37 titles) and by a substantial number of permanently or temporarily free journals available on the Net. A survey conducted by the Library among the readers on the usage of e-journals revealed that many researchers want access to as many titles as possible. Moreover, the survey identified a need for additional education on the use of electronic information databases (<http://knjiznica.irb.hr/eng/anketa/index.html>)

Regular monthly IRB Library Colloquia were held on "hot" issues about information sciences and librarianship. All this discussions, with their presentations, can be found at the address <http://knjiznica.irb.hr/eng/kolokviji.html>

The staff of the Library took active part in numerous meetings and conferences at home and abroad. They also attended organised seminars and workshops.

We have cooperated closely with libraries in Croatia and abroad. Cooperation with Information Center of American Embassy in Zagreb, central libraries of Croatian Science Information System, Universitätsbibliothek Regensburg (joint project ElektronischeZeitschriftenDatenbank), Central Engineering Library in Ljubljana, University Library in Maribor and Universitätsbibliothek Bochum, should be emphasized.

The regularly maintained web portal (<http://library.irb.hr>) has about 2500 pages. As the maintenance of such a great number of static pages is a very demanding task, we are planning to urgently make a new dynamic web. We would like to point out that apart from developing and maintaining the Library's web pages, we provide the following services:

- the web pages *Science on the Internet* (<http://znanost.irb.hr>) offer relevant information sources on specific scientific fields (Physics, Chemistry, Mathematics, Biology, Medicine, Earth Sciences, Environment, Computing and Librarianship)
- information about most outstanding Croatian scholars (<http://library.irb.hr/scientist/index.html>) with assorted web resources with numerous biographic and bibliographic data, photographs etc;
- Croatian press (<http://library.irb.hr/hrtis.html>) with links to daily papers, weekly journals and other publications;
- electronic versions of the Institute's annual reports, starting in the year 1993 (<http://knjiznica.irb.hr/izvjestaj/>);
- virtual reference library: numerous dictionaries, encyclopaedias and handbooks on natural sciences (<http://library.irb.hr/vrl/index.html>);
- information on electronic resources available to users (<http://library.irb.hr/resources.html>);
- Libraries in Croatia (<http://library.irb.hr/crolibs.html>) – a survey of about 140 Croatian libraries on the Web with links to their online catalogues.
- a list of CD-ROMs (<http://library.irb.hr/listacd.html>)

The library of the future we see as a comprehensive information centre where users will have access to all relevant information sources and to high quality education. The library of the future we see as fully aware of its role and responsibility towards coming generations. In this respect we will advocate the integrity of library collections. By modernisation of such segments of library

management, as acquiring, processing, lending etc, we will secure resources for new tasks, such as efficient retrieval and dissemination of information, development of digital libraries, evaluation of web information sources, electronic publishing etc. In the future we plan a stronger international co-operation, participating in international projects, as well as involving foreign experts in domestic projects.

PRILOZI

Ostali radovi u časopisima:

1. Konjević, Sofija; Pažur, Ivana. Korištenje i prihvaćanje elektroničkih časopisa: istraživanje korisnika Knjižnice Instituta "Ruđer Bošković" // Vjesnik bibliotekara Hrvatske 45 (2002), 3-4; 169-183.
2. Stojanovski, Jadranka. Što ne znamo o našim virtualnim korisnicima // Vjesnik bibliotekara Hrvatske 45 (2002), 3-4; 143 - 154.
3. Stojanovski, Jadranka; Pažur, Ivana. Hrvatske knjižnice na web-u: analiza sadržaja. // Vjesnik bibliotekara Hrvatske 45 (2002), 1-2; 83-101.

Radovi objavljeni u zbornicima skupova:

1. Stojanovski, Jadranka. Croatian Scientific Bibliography (CROSBI) - four years experience // Managing resources in a sea of change: Proceedings of the 27th Annual Conference of the International Association of Aquatic and Marine Science Libraries and Information Centres (IAMSLIC) and the 9th Conference of the European Association of Aquatic Sciences Libraries and Information Centres (EURASLIC) / Markham, James W. ; Hyett, David J. ; Duda, Andrea L. (ur.). Fort Pierce, Florida : IAMSLIC, 2002. 65-75.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

Konjević, S.; Pažur, I.: Seminar o elektroničkim časopisima (SpringerLink, ScienceDirect), 5.4.2002.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama:

Stojanovski, J. Seminar Centra za online baze podataka o korištenju baza, Ekonomski fakultet, Rijeka, 25-26.2.2002.

Stojanovski, J. Seminar Centra za online baze podataka o korištenju baza, FER, Zagreb, 8-9.4.2002.

Stojanovski, J. Seminar Centra za online baze podataka o korištenju baza, Elektrotehnički fakultet, Osijek, 6-7.5.2002.

Stojanovski, J. Seminar Centra za online baze podataka o korištenju baza, FER, Zagreb, 17-18.6.2002.

Stojanovski, J. Seminar Centra za online baze podataka o korištenju baza, Građevinski fakultet, Split, 4-5.7.2002.

Aparac-Jelušić, T.; Stojanovski, J. Kako odabrati "onaj najbolji" knjižnični softver? Gradska i sveučilišna knjižnica, Osijek, 12.11.2002.

Mihalić, M.; Konjević, S. Prezentacija mrežnih stranica knjižnice. Dan knjižnica na Interliberu, Zagreb, 15.11.2002.

Stojanovski, J.; Vrana, R. Izgradnja digitalnih zbirki. Centar za stalno stručno usavršavanje, Nacionalna i sveučilišna knjižnica, Zagreb, 18.12.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

Stojanovski, J. Posjet hrvatskih knjižničara američkim knjižnicama u okviru International Visitor Program "Library and Information Resource Management Issues", 15.-26.4.2002.

Sudjelovanja na kongresima:

4. DANI SPECIJALNOG KNJIŽNIČARSTVA "SPECIJALNE KNJIŽNICE - IZVORI KORIŠTENJA ZNANJA"

Opatija, Hrvatska, 25-26.4.2002.

Sudionice: Mihalić, M.; Pažur, I.

Prilozi:

Mihalić, M.: Virtualni korisnici Knjižnice Instituta "Ruđer Bošković", poster

Pažur, I. Digitalni izvori znanja i njihovo korištenje (na primjeru knjižnice IRB-a), predavanje

LIDA – LIBRARIES IN THE DIGITAL AGE : INTEGRATING INFORMATION SEEKING AND IR & INFORMATION SERVICES - PRACTICE AND RESEARCH

Dubrovnik, Hrvatska, 21-26.05.2002.

Sudionica: Konjević, S.

Prilog:

Konjević, S.; Pažur, Ivana: What the scientist at RBI think about electronic journals, poster

24TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON INFORMATION TECHNOLOGY INTERFACES (ITI 2002)

Cavtat, Hrvatska, 24-27.6.2002.

Sudionik: Pranjić, M.

Prilog:

Pranjić, M.; Fertalj, K.; Jukić, N.: Importance of semantics in MLS database models, predavanje

33. SKUPŠTINA HRVATSKOGA KNJIŽNIČARSKOG DRUŠTVA "UPRAVLJANJE PROMJENAMA U HRVATSKIM KNJIŽNICAMA"

Daruvarske toplice, Hrvatska, 24-27.9.2002.

Sudionica: Stojanovski, J.

Prilog:

Stojanovski, J.: Što (ne)znamo o našim virtualnim korisnicima?, predavanje

CARNET USERS CONFERENCE – CUC 2002 "SEIZE THE INTERNET : ENHANCING YOUR VIRTUAL PRESENCE"

Zagreb, Hrvatska, 25-27.9.2002.

Sudionica: Stojanovski, J.

Prilog:

Stojanovski, J.: What do we (not) know about our users?, predavanje

3. SEMINAR SUSTAVA ZNANSTVENIH INFORMACIJA "NOVE USLUGE KNJIŽNICA : ŽELITE LI SA ŠLAGOM ILI U PDF-U?"

Zagreb, Hrvatska, 8-9.11.2002.

Sudionice: Borić, V.; Erman, D.; Konjević, S.; Melinščak Zlodi, I.; Mihalić, M.; Pažur, I.;

Stojanovski, J.

Prilozi:

Mihalić, Marina; Stojanovski, J.: Jesu li kultura suradnje i zajedničke usluge za korisnike izazov i knjižničarima u Hrvatskoj?, predavanje

Konjević, S.; Pažur I.: Elektronički časopisi - promjene koje donose i kako ih korisnici prihvaćaju, predavanje

6. SEMINAR ARHIVI, KNJIŽNICE, MUZEJI "MOGUĆNOSTI SURADNJE U OKRUŽENJU
GLOBALNE INFORMACIJSKE INFRASTRUKTURE"

Rovinj, Hrvatska, 20-22.11.2002.

Sudionice: Erman, D.; Konjević, S.; Melinščak Zlodi, I.; Pažur, I.

Prilozi:

Melinščak Zlodi, I.: Elektronički arhivi znanstvenih informacija : revolucija u pristupu znanstvenim informacijama?, predavanje

Pažur, I.; Konjević, S.: EJOL- Electronic Journals Online Library, predavanje

ONLINE INFORMATION 2002

London, Velika Britanija, 3-5.12.2002.

Sudionica: Stojanovski, J.

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

Sanda Erdelez, Missouri University, Columbia, SAD, 26.6.2002.

<http://www.irb.hr/rc>

**RAČUNALNI CENTAR
COMPUTING CENTRE**

Voditelj: dr. sc. Karolj Skala

Tel. ++385 1 4571 218

fax. ++385 1 4680 114

e-mail: karolj.skala@irb.hr

Djelatnici:

Neven Kmetić, sistem inženjer, održavanje mrežnog i računalnog sustava

Domagoj Krišto, dipl. inž. računarstva, help desk, održavanje i razvoj cluster računala

Miroslav Mihaljević, dipl. inž. računarstva, help desk operator (do 1.11.2002.)

Ratko Mileta, sistem inženjer, pružanje usluge znanstvenim radnicima

Goran Radić, dipl. inž. računarstva, programska podrška (do 15.10.2002.)

Karolj Skala, doktor teh. znanosti, znanstveni savjetnik

Goran Topić, dipl. informatičar, razvoj programske podrške (od 1.12.2002.)

Vanjski suradnici:

Nikola Pavković, student, Fakultet elektrotehnike i računarstva

Anđelko Horvat, student, Fakultet elektrotehnike i računarstva

Mario Grdiša, student, Fakultet elektrotehnike i računarstva

Vilko Klein, student, Fakultet političkih znanosti

Ivan Capan, student, Fakultet elektrotehnike i računarstva (do 1.10.2003.)

Program rada i rezultati:

Unapređivanje, razvoj i održavanje, institutskih računala i računalne mreže i servisa. Radne aktivnosti uključuju server računala za informacijske servise, za numeričko računanje na klaster računala, printanje, plotanje, elektronsku poštu, web i sl., te lokalnu mrežu i mrežnu opremu na Institutu, na koju su povezana osobna računala i serveri po zavodima i laboratorijima. Održavanje mrežnih servisa, implementacija i razvoj softvera, te ostale djelatnosti vezane za unapređenje primjene računala u znanstvenom radu (razvoj e-science tehnologije). Izvedba znanstveno primijenjenih i razvojnih projekata u području suvremene mrežne tehnologije, distribuiranog računarstva, klaster računala i grid sustava. Održava znanstveno-tehničku suradnju s drugim institucijama iz znanosti i gospodarstva te s CARNet-om.

Najznačajniji rezultati Računalnog centra su: projektiranje i djelomična izvedba nove računalne mreže; razvoj novog modela hibridnog SM/MM fiber optičkog kabla; razvoj uređaja za laserski prijenos podataka kroz atmosferu, unapređenje klaster računala i CRO GRID inicijativa složenog tehnološkog projekta sa osam institucija. Uspostava međunarodne suradnje na pokretanju i izvedbi projekata.

Research programme:

Advancement, development and maintenance of the Institute's computers, computer network and services. The activities include server computers for information services, numerical computation on the computer cluster, printing, plotting, e-mail, web etc., as well as the Institute's local area network and network equipment which connects the personal and server computers on all the Institute divisions and laboratories. Maintenance of the network services, software implementation and development, and other activities related to the advancement of computer usage in scientific work (the development of e-science technology). Carrying out the scientifically applied and development projects in the field of modern network technology, distributed computing, cluster computing and GRID systems. Maintaining the scientific and technological cooperation with other scientific and business institutions, as well as CARNet.

The most important results of the Computing Centre are: design and partial implementation of the new computer network; development of a new type of hybrid SM/MM fiber-optic cables; development of laser-based transfer of data through atmosphere; enhancement of

the computer cluster, and the CRO GRID initiative of a complex technology project with eight institutions.

Initiating an international collaboration on the project initiation and execution.

IZGRADNJA LOKALNE RAČUNALNE MREŽE INSTITUTA LOCAL AREA NETWORK CONSTRUCTION IN THE INSTITUTE

Voditelj projekta: dr. sc. Karolj Skala

Tel. ++385 1 4571 218 e-mail: skala@irb.hr

Suradnici na projektu:

Karolj Skala, doktor tehničkih znanosti, znanstveni savjetnik

Tehnički suradnici:

Neven Kmetić, sistem inženjer

Vilko Klein, student, Fakultet političkih znanosti

Program rada i rezultati na projektu

U svrhu reizgradnje zastarjele lokalne računalne mreže Instituta potrebno je bilo provesti projektiranje i investicijski program. Projekt je podijeljen u tri faze: projektiranje optičkog razvoda unutar 28 objekata, projekt aktivne mrežne opreme i lokalni razvod po objektima. Projektiranje Gb Ethernet računalne mreže je ostvareno novom metodom dinamičkog projektiranja stvaranjem topološke baze podataka s grafičkim prikazom u AutoCAD-u. Kod fiber optičkih vodova se razvio novi model hibridnog (SM/MM) optičkog kabla kako bi se zadovoljila brzina prijenosa s malom latencijom kod budućih zahtjevnih mrežnih aplikacija. Topologija i aktivna oprema je konstruirana na način da se zadovolji optimizacija i rekonfigurabilnost kampus mreže. Lokalni razvod osigurava 3500 priključaka po svim objektima Instituta pomoću UTP razvoda, ukupne dužine 120 km.

Research programme and results:

For the purpose of rebuilding of the Institute's obsolete local area network, it was necessary to redesign the network architecture and to make an investment programme. The project was divided into three phases: the optic infrastructure between 28 objects, the active network equipment and the cabling within the objects. The Gb Ethernet computer network design was carried out by a new method of dynamic design using a topological database with AutoCAD-based graphic presentation. A new type of hybrid (SM/MM) optic cable was developed to increase the low-latency transfer speed for demanding network applications in the future. The topology and the active equipment were designed to optimise the network and allow for its maximum configurability. The local cabling allows for 3500 UTP connections on all of the Institute's objects, totalling 120 km in length.

SUSTAV RAČUNALNE MREŽE S LASERSKIM PRIJENOSOM PODATAKA U SLOBODNOM PROSTORU FREE SPACE LASER COMMUNICATION SYSTEM FOR DATA TRANSMISSION

Voditelj projekta: dr. sc. Karolj Skala

Tel. ++385 1 4571 218 e-mail: skala@irb.hr

Suradnici na projektu:

Darko Kolarić, doktor tehničkih znanosti, asistent

Dubravko Risović, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Dunja Soldo Roudnicky, magistrica fiz. znanosti, stručna suradnica

Karolj Skala, doktor tehničkih znanosti, znanstveni savjetnik

Hrvoje Zorc, doktor fiz. znanosti, viši znanstveni suradnik

Tehnički suradnik:

Neven Kmetić, tehničar

Program rada i rezultati na projektu:

Računalna mreža s atmosferskim laserskim prijenosom podataka koristi slobodan prostor kao medij za prijenos podataka (Free Space Optical Link). Komunikacija između usmjerenih uređaja se ostvaruje putem moduliranog laserskog snopa u IC valnom području. Posebno su pogodni za izgradnju gradskih komunikacijskih mreža, MAN (Metropolitan Area Network). Ovakova vrsta mreže predstavlja alternativu postojećim telekomunikacijskim mrežama. Prototipni uređaj omogućuje pristup korisniku unutar složene mreže (Last-hop access unit). Predviđaju se velike brzine prijenosa podataka, 10-155 Mb/s, domet u svim vremenskim uvjetima s raspoloživošću veze od 99 % vremena. Spoj na računalnu mrežu ostvarit će se putem svjetlovodnog kabela (FO) i nadzor prema standardiziranim protokolima. Dvostruki laserski predajni snop osigurat će veću pouzdanost prijenosa. Izvedba prijelnika pomoću lavinske fotodiode (APD) i namjenskog adaptivnog algoritma omogućuje veliku dinamiku prijema. Očekivani rezultat predviđa područje primjene razvoja informatičke infrastrukture koji će se moći upotrijebiti u grid sustavima.

Research programme and results:

A computer network with atmospheric laser data transmission uses free space as a medium for data transfer (Free Space Optical Link). The communication between the aligned devices is realised via modulated laser beam in IR wavelength band. It is especially useful for city-wide communication networks – MAN (Metropolitan Area Network). This type of network represents an alternative to the existing telecommunication networks. The prototype device enables the user access within a complex network (Last-hop access unit). Large transfer speeds of 10-155 Mb/s are projected, with range under all weather conditions and network availability in 99% of time. The connection to the computer network will be performed through a fiber-optic cable, and monitored according to standard protocols. Double laser transmitter will ensure greater transfer reliability. Implementation of the receiver using an avalanche photometric diode and a specialised adaptive algorithm allows for a great reception dynamics. The expected result predicts a field of application of computing infrastructure development which can be used in grid systems.

**MREŽNI NADZOR I IC UPRAVLJANJE KLASTER RAČUNALOM
NETWORK MONITORING AND MANAGEMENT OF THE CLUSTER COMPUTERS**

Voditelj projekta: dr. sc. Karolj Skala

Tel. ++385 1 4571 218 e-mail: skala@irb.hr

Suradnici na projektu:

Domagoj Krišto, diplomirani inženjer računarstva

Karolj Skala, doktor tehničkih znanosti, znanstveni savjetnik

Mario Stipčević, doktor fiz. znanosti, znanstveni suradnik

Tomislav Šmuc, doktor teh. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnik

Nikola Pavković, vanjski suradnik, Fakultet elektrotehnike i računarstva

Program rada i rezultati na projektu:

Suvremeni računalni resursi predstavljaju generičku razvojnu kategoriju društva. Računalna moć se povećava primjenom tehnologije distribuiranog računarstva. To se na najučinkovitiji način postiže razvojem i primjenom klaster računala pod Linux operacijskim sustavom. Stečena iskustva pri izgradnji i eksploataciji Institutskog klaster računala nameću drugu fazu izgradnje, u svrhu postizanja veće funkcionalnosti i pouzdanosti klaster računala.

Klasteri i farme klastera koji predstavljaju visoko učinkovite virtualne računalne obradne sustave moraju imati hardverske i programske pretpostavke za monitoring i upravljanje što podrazumijeva brzu detekciju i operacionalizaciju funkcionalnog problema. Razvoj ide u smjeru stvaranja okruženja s programskom kontrolom u svrhu doseganja visokoorganiziranog mrežno distribuiranog računarstva.

U toj težnji u sklopu ovog projektnog prijedloga se razvija: mrežno praćenje (monitoring) i upravljanje vitalnih funkcijskih veličina. To su funkcionalna stanja koje ne mogu biti obuhvaćena klaster management programom i podrška za postizanje većeg stupnja nadzora i upravljanja u funkcioniranju distribuiranog računalnog sustava.

Research programme and results:

Modern computing resources represent a generic development category of the society. The computing power increases by application of distributed computing technology. The most efficient way to do that is to develop and exploit Linux-based computer clusters. The experiences garnered by building and using the Institute's computer cluster suggest its second phase, to the purpose of increasing the functionality and reliability of the computer cluster.

Clusters and cluster farms, a highly efficient virtual computer processing systems, must have the hardware and software prerequisites for monitoring and control, which includes fast detection and solving of a problem in functionality. The development progresses in the direction of creating an environment with a programmatic control, with the purpose of achieving a highly organized, network-distributed computing.

In accordance to that, within this project proposal, network monitoring and vital functional parameter control. These are functional states that cannot be encompassed within the cluster management program, and the basis for achieving a greater level of control in distributed computing system operation.

RAZVOJ NOVE GRID TEHNOLOGIJE ZA NAPREDNE ZNANSTVENE I INŽENJERSKE PRIMJENE

DEVELOPMENT OF NEW GRID TECHNOLOGIES FOR ADVANCED SCIENTIFIC AND ENGINEERING APPLICATION

Voditelj: dr. sc. Karolj. Skala

Tel. ++385 1 4571 218, e-mail: skala@irb.hr

Suradnici na projektu:

Karolj Skala, doktor tehničkih znanosti, znanstveni savjetnik

Tomislav Šmuc, doktor teh. znanosti, znanstveni suradnik

Goran Topić, dipl. informatičar

Vanjski suradnik

Sven Lončarić, doktor rač. znanosti, redoviti profesor, Fakultet elektrotehnike i računarstva

Peter Brezany, doktor znanosti, Institute for Software Science, University of Vienna, Austrija

Program rada i rezultati na projektu:

Mnoge su aplikacije čiji zahtjevi za računalnom moći nadmašuju i sredstva najvećih računalnih središta. Za te aplikacije računalni gridovi obećavaju pristup povećanom računalnom kapacitetu kroz istovremeno i usuglašeno korištenje zemljopisno odvojenih, no umreženih velikih računala. Ovom se tehnikom «veličina» aplikacije može proširiti izvan ograda sredstava dostupnih na određenom mjestu – ili, dapače, na bilo kojem pojedinom računalnom središtu svijeta.

Naš će projekt razviti portal (tj. Interaktivno sučelje) za pristup Gridu za resurse za znanstvene i inženjerske simulacije i modeliranje. Ovaj će se zadatak usredotočiti na razvoj raznih alata i korisničkih sučelja prema znanstvenim aplikacijama i bazama podataka. Skup aplikacija pod razmatranjem uključuje biomolekularne simulacije, CAE simulacije (inženjering

uz pomoć računala), strukturalnu analizu, itd. Bit će razmotrene aplikacije sa skalarnim, vektorskim i paralelnim pristupom.

Research programme and results:

There are many applications whose computational requirements exceed the resources available at even the largest supercomputing centers. For these applications, computational grids offer the promise of access to increased computational capacity through the simultaneous and coordinated use of geographically separated large-scale computers linked by networks.

Through this technique, the "size" of an application can be extended beyond the resources available at a particular location - indeed, potentially beyond the capacity of any individual computing site anywhere.

Our project will develop a Grid access portal (interactive interface) for scientific and engineering simulation and modeling resources. This task will focus on development of various toolsets and user interfaces to scientific applications and databases. The set of applications considered includes biomolecular simulations, CAE simulations, structural analysis, etc. Scalar, vector and parallel application codes will be considered.

PRILOZI**Knjige i poglavlja u knjigama:**

1. Skala, Karolj; Zelenika, Hrvoje; Nikolić, Ivan. Retrospective of distributed media server technology // Intelligent Media Communications / Najim, Mohamed, Anorage, Michael (ur.). London : Kluwer Academic, 2002. 316-332.

Kolokviji i seminari održani u Institutu Ruđer Bošković:

Skala, K.: Reizgradnja lokalne računalne mreže Instituta, 2.2.2002.

Pavković, N.: Osnove korištenja clustera na IRB-u, 16.12.2002.

Skala, K.: Izgradnja grid aplikacije u sklopu CRO GRID projekta, 23.12.2002.

Znanstveno ili stručno usavršavanje u inozemstvu:

Skala, K., University of Southampton, Southampton and IBM, Hursley, Engleska, 15.3.-18.3. 2002

Sudjelovanja na kongresima:

CARNET USERS CONFERENCE

Zagreb, Hrvatska, 25.9.-27.9.

Sudionik: Skala, K.

Prilog:

Skala, K.: CRO GRID- Future of Grid Like Initiatives in Croatia, round table

Međunarodni ugovori i suradnja s drugim ustanovama:

Skala, K., Institute for Software Science of the University of Vienna, Austrija

Skala, K., Ugovor o dugoročnoj suradnji na području grid tehnologije, Ericsson Nikola Tesla, Zagreb

Skala, K., Sporazum o suradnji na transferu grid informatičke tehnologije, HEP, Zagreb

Skala, K., Ugovor o suradnji na izgradnji fiber optičkih mreža, ELKA, Zagreb

Skala, K., Memorandum o suradnji, SRCE, Zagreb

Posjete inozemnih stručnjaka Institutu Ruđer Bošković:

Chapman, S., IBM, Hursley, Velika Britanija, 15.6.-17.6.2002.

Galambos, G., SZTAKI, Budimpešta, Mađarska, 7.7.-14.7.2002.

FLUKTUACIJA ZAPOSLENIH U INSTITUTU

ZAPOSLENI U INSTITUTU "RUĐER BOŠKOVIĆ" NA DAN 31.12.2002. GODINE

USTROJBENE JEDINICE	VSS	VSS	VSS	VSS	VŠS	SSS	VKV	KV	NSS	UKUPNO	ZNANSTVENI NOVACI				SVEUKUPNO
	Dr. znan.	Mr. Znan.	Dipl. Inž.	Ostali							Dr.	Mr.	Dipl.	UKUPNO	
Ured ravnatelja	1					1				2					2
TF	18		2			1				21	3	2	6	11	32
EF	28	1	2		2	6		1		40		1	6	7	47
FM	17		1			2				20	1	1	3	5	25
E	9	2	1	1		1				14			1	1	15
FK	35	1	1	2		5				44	1	5	8	14	58
OKB	35	2	2	1	1	8		1	2	52	2	7	12	21	73
KM	33				1	7		2	1	44	1	2	5	8	52
MG	28	2	2			7		1	1	41	7	6	13	26	67
MM	29		1		2	15			1	48	7	6	14	27	75
ZIM	13			1	2	9	2	1	2	30	3	7	10	20	50
ZIMO	48	2	8	2	1	12		2		75	6	5	13	24	99
LAIR	1		4	1		9	1	5		21			2	2	23
UPRAVA				7	5	26	1	7	8	54					54
KNJIŽNICA				9				2	2	13					13
RAČUNALNI CENTAR				2		1				3					3
SOTU				1	1	15	7	9	32	65					65
UKUPNO:	295	10	24	27	15	125	11	31	49	587	31	42	93	166	753

FLUKTUACIJA ZAPOSLENIH U INSTITUTU "RUĐER BOŠKOVIĆ" U 2002. GODINI

a) Došli u 2002. godini

USTROJBENE JEDINICE	VSS	VSS	VSS	VSS							ZNAKSTVENI NOVACI				SVEUKUPNO
	Dr. znan.	Mr. Znan.	Inž.	Ostali	VŠS	SSS	VKV	KV	NSS	UKUPNO	Dr.	Mr.	Dipl.	UKUPNO	
TF	1									1					1
EF													1		1
FM															
E			1	1						2					2
FK			1			1				2			3	3	5
OKB	1		1			1				3		1	3	4	7
KM															
MG	1									1			1	1	2
MM				1		2				3	2	2	3	7	10
ZIM				1		1		1		3		1	2	3	6
ZIMO		2	4	1						7		2	2	4	11
LAIR						1				1			1	1	2
UPRAVA				3		2				5					5
KNJIŽNICA															
RAČUNALNI CENTAR			2							2					2
SOTU						1				1					1
UKUPNO:	3	2	9	7	0	9	0	1	0	31	2	6	16	24	55

b) Otišli u 2002. godini

USTROJBENE JEDINICE	VSS				VŠS	SSS	VKV	KV	NSS	UKUPNO	ZNANSTVENI NOVACI				SVEUKUPNO
	Dr. znan.	Mr. Znan.	Dipl. Inž.	Ostali							Dr.	Mr.	Dipl.	UKUPNO	
TF						1				1					1
EF		1								1			1	1	2
FM	2									2					2
E			1							1					1
FK											1		2	3	3
OKB			1							1	1			1	2
KM															
MG													1	1	1
MM	1	1				2				4	1		1	2	6
ZIM	1	2				1				4					4
ZIMO			1			1				2	1			1	3
LAIR						1				1					1
UPRAVA					1	1		1		3					3
KNJIŽNICA					1					1					1
RAČUNALNI CENTAR			1							1					1
SOTU						1			1	2					2
UKUPNO:	4	4	4	1	1	8	0	1	1	24	4	0	5	9	33

ABECEDNO KAZALO

ZNANSTVENICI I ISTRAŽIVAČI

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Abramić	Marija	0098055	
Ahel	Marijan	0098120	
Ambriović Ristov	Andreja	0098076	
Andraši	Anđelka	0098003	
Andreis	Mladen	0098038	
Andrić	Ivan	0098003	
Antica	Mariastefania	0098090	
Antičić	Tome	0098015	
Antol	Ivana	0098056	
Antonić	Oleg	0098082	
Antonić	Tatjana	0098060	
Babić	Ana	0098002	
Babić	Darko	0098057	
Babić-Ivančić	Vesna	0098061	
Baković	Igor	0098003	
Balog	Tihomir	0098096	
Baranović	Goran	0098057	
Bardek	Velimir	0098003	
Barešić	Jadranka	0098014	
Barić	Danijela	0098058	
Barišić	Delko	0098128	
Basrak	Zoran	0098010	
Batel	Renato	0098114	
Beč	Sonja	0098124	
Begonja Kolar	Ana	0098134	
Bertoša	Branimir	0098036	
Bihari	Nevenka	0098114	
Bilić	Nevenko	0098002	
Bilinski	Halka	0098041	
Biliškov	Nikola	0098057	
Biškup	Biserka	0098060	
Bjegović	Milica	0098103	
Blagus	Saša	0098008	
Blažina	Maria	0098111	
Blažina	Želimir	0098065	
Bogdanović-Radović	Ivančica	0098013	
Bogunović	Dijana	0098140	
Bokulić	Zvonimir	0098081	
Bonacci	Duje	0098042	
Bonifačić	Marija	0098031	
Bordukalo Nikšić	Tatjana	0098081	
Borović	Suzana	0098101	
Bosanac	Gordan	0098023	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Bosanac	Slobodan	0098042	
Bosnar	Sanja	0098060	
Bošković	Nikola		
Božić	Ljerka	0098035	
Božin	Mladen		
Brajenović	Nataša	0098031	
Brako	Radovan	0098001	
Brčić-Kostić	Krunoslav	0098070	
Brečević	Ljerka	0098061	
Breljak	Davorka	0098094	
Britvić-Budicin	Smiljana	0098135	
Bronić	Josip	0098060	
Brozović	Anamaria	0098076	
Bruvo	Branka	0098074	
Budić	Branka	0098053	
Budimir	Ivan	0098022	
Buljan	Maja	0098020	
Butković	Vjera	0098030	
Buza-Vidas	Barbara	0098094	
Car	Tihomir	0098021	
Ceci	Saša	0098009	
Ciglenečki-Jušić	Irena	0098122	
Crljen	Željko	0098001	
Cuculić	Vlado	0098121	
Cukrov	Neven	0098121	
Cvitaš	Tomislav	0098030	
Čačev	Tamara	0098108	
Čaplar	Roman	0098010	
Čaplar	Vesna	0098053	
Čičin-Šain	Lipa	0098081	
Čimbora	Tamara	0098076	
Čipak	Ana	0098101	
Čož-Rakovac	Rozelindra	0098125	
Čmugelj	Josip		
Čukman-Sardelić	Dunja	0098126	
Čulin	Jelena	0098038	
Četković	Helena	0098072	
Čosović	Božena	0098122	
Čurić	Manda	0098035	
Dadić	Ivan	0098002	
Degobbis	Danilo	0098111	
Desnica	Ida-Dunja	0098020	
Desnica	Uroš	0098020	
Despotović	Ines	0098058	
Devescovi	Massimo	0098116	
Dorešić	Miroslav		
Došlić	Nađa	0098033	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Dragčević	Đurđica	0098062	
Dragun	Zrinka	0098130	
Drašner	Antun	0098065	
Dubček	Pavo	0098020	
Dubravić	Amir	0098025	
Duplančić	Goran	0098002	
Durajlija-Žinić	Sonja	0098072	
Džidić	Senka	0098071	
Džolić	Zoran	0098053	
Đakovac	Tamara	0098111	
Đermić	Damir	0098070	
Đogić	Renata	0098121	
Ereš	Zoran	0098124	
Erk	Marijana	0098130	
Ester	Katja	0098114	
Etlinger	Božidar	0098020	
Fafanđel	Maja	0098114	
Ferenac	Marina	0098077	
Ferle-Vidović	Ana	0098076	
Filić	Vedrana	0098081	
Filipčić	Daša		
Filipović	Vlatka	0098130	
Filipović-Vinceković	Nada	0098031	
Fonjak	Mirjana	0098111	
Frančišković-Bilinski	Stanislav	0098041	
Frka	Sanja	0098122	
Frkanec	Leo	0098053	
Fuks	Dragica	0098111	
Fulgosi	Hrvoje	0098073	
Furić	Krešimir	0098022	
Gabrilovac	Jelka	0098094	
Gadanji	Gordana	0098056	
Gajović	Andreja	0098022	
Gall-Trošelj	Koraljka	0098095	
Gamberger	Dragan	0098023	
Gamulin	Vera	0098072	
Gašparović	Blaženka	0098122	
Geček	Sunčana	0098133	
Glasovac	Zoran	0098056	
Gluhak	Tea	0098111	
Gotić	Marijan	0098062	
Gracin	Davor	0098018	
Grahek	Željko	0098128	
Graovac	Ante	0098039	
Grce	Magdalena	0098104	
Grdiša	Mira	0098093	
Gržeta	Biserka	0098067	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Guberina	Branko	0098002	
Habuš	Ivan	0098080	
Hacmanjek	Mato	0098125	
Hadžija	Mirko	0098098	
Hamer	Bojan	0098114	
Hameršak	Zdenko	0098050	
Harcet	Matija	0098072	
Hećimović	Silva	0098093	
Herak Bosnar	Maja	0098092	
Herceg-Rajačić	Marija	0098036	
Horvat	Jaroslav	0098054	
Horvat	Raul	0098011	
Horvat	Štefica	0098054	
Horvath	Laszlo	0098041	
Horvatinčić	Nada	0098014	
Horvat-Radošević	Višnja	0098126	
Hojić	Amela	0098127	
Hranilović	Dubravka	0098081	
Hršak	Dubravka	0098134	
Husnjak	Koraljka	0098104	
Ilakovac-Kveder	Marina	0098037	
Ivančić	Ingrid	0098111	
Ivanda	Mile	0098022	
Ivanković	Dušica		
Ivanković	Milena	0098077	
Ivanković	Siniša	0098099	
Iveša	Liljana	0098111	
Ivezić	Tomislav	0098017	
Ivošević	Nadica	0098127	
Jakas	Andreja	0098054	
Jakopec	Sanjica	0098076	
Jakovčić	Krešimir	0098011	
Jakšić	Milko	0098013	
Jakšić	Željko	0098114	
Janeković	Ivica	0098113	
Janicki	Vesna	0098140	
Jazvinščak Jembrek	Maja	0098103	
Jerić	Ivanka	0098054	
Jernej	Branimir	0098081	
Jokić	Milan	0098053	
Jonke	Larisa	0098003	
Jozić	Dražen	0098066	
Jurin	Mislav	0098099	
Jurman	Danijel	0098003	
Kadija	Krešo	0098015	
Kapitanović	Sanja	0098108	
Katalenić	Darinka	0098053	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Katić	Maša	0098095	
Katušin-Ražem	Branka	0098063	
Kazazić	Saša	0098032	
Kazazić	Snježana	0098032	
Kekez	Dalibor	0098011	
Kezele	Nenad	0098030	
Kirin	Davor	0098028	
Klaić	Branimir	0098080	
Klaić	Lada	0098052	
Knežević	Andrea	0098004	
Knežević	Jelena	0098092	
Knežević	Željka	0098063	
Kniewald	Goran	0098132	
Kojić-Prodić	Biserka	0098036	
Kolarić	Darko	0098025	
Komar	Arijana	0098091	
Komorsky-Lovrić	Šebojka	0098123	
Kontrec	Darko	0098051	
Kontrec	Jasminka	0098061	
Körbler	Tajana	0098090	
Korolija	Milorad	0098007	
Kosanović	Cleo	0098060	
Košutić	Katica	0098128	
Kovač	Branka	0098032	
Kovačević	Borislav	0098058	
Kovačević	Goran	0098033	
Kovačević	Ivana	0098020	
Kovačević	Krešimir	0098058	
Kozar	Sonja	0098130	
Kozarac	Zlatica	0098122	
Kragol	Goran	0098052	
Krajcar	Valter	0098113	
Krajcar-Bronić	Ines	0098014	
Kralj	Damir	0098061	
Kralj	Marijeta	0098092	
Kraljević	Sandra	0098092	
Kraus	Romina	0098111	
Krča	Sanja	0098135	
Krčmar	Milica	0098011	
Krečak	Zvonko	0098011	
Kriško	Anita	0098037	
Krstulović	Jadranka	0098111	
Krznarić	Damir	0098122	
Krznarić	Ivan	0098060	
Kurtović	Božidar	0098125	
Kušić	Borka	0098090	
Kuzmić	Milivoj	0098113	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Kvastek	Krešimir	0098126	
Lakić	Biljana	0098011	
Landek	Goran	0098051	
Lazić	Predrag	0098001	
Legović	Tarzan	0098133	
Lerš	Nella	0098070	
Lesac	Andreja	0098051	
Leščić	Ivana	0098036	
Levanat	Sonja	0098091	
Lončarić	Martin	0098140	
Lovrić	Andrija-Željko	0098082	
Lovrić	Milivoj	0098123	
Lucu	Čedomil	0098116	
Lučić	Bono	0098034	
Lugomer	Stjepan	0098029	
Luić	Marija	0098036	
Lukić Bilela	Lada	0098072	
Lulić	Stipe	0098128	
Ljubešić	Nikola	0098073	
Ljubičić	Ante	0098011	
Magnus	Volker	0098080	
Majerić Elenkov	Maja	0098050	
Majerski	Kata	0098052	
Majhen	Dragomira	0098076	
Makarević	Janja	0098053	
Maksić	Mirjana	0098056	
Maksić	Zvonimir	0098058	
Maksimović	Aleksandar	0098024	
Maljković	Miroslava	0098062	
Margetić	Davor	0098056	
Marić	Ivan	0098023	
Marinić	Željko	0098080	
Marotti	Tatjana	0098096	
Martinis	Mladen	0098004	
Martin-Kleiner	Irena	0098094	
Matovina	Mihaela	0098104	
Matulić	Maja	0098077	
Medaković	Davorin	0098111	
Medunić	Zvonko	0098013	
Medved-Rogina	Branka	0098024	
Mekterović	Darko	0098007	
Melić	Blaženka	0098002	
Meljanac	Stjepan	0098003	
Merunka	Dalibor	0098038	
Mešić	Armin	0098082	
Meštrović	Nevenka	0098074	
Michieli	Ivan	0098024	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Mičić	Milena	0098114	
Mihaljević	Branka	0098063	
Mihaljević	Snježana		
Mikac	Barbara	0098111	
Mikac	Nevenka	0098132	
Mikelić	Luka		
Mikoč	Andreja	0098072	
Mikuta-Martinis	Vesna	0098004	
Miletić	Goran	0098065	
Milić	Danijela	0098111	
Milin	Matko	0098008	
Milunović	Momir	0098126	
Miljanić	Đuro	0098008	
Miljanić	Saveta	0098063	
Mirosavljević	Krunoslav	0098043	
Mlakar	Marina	0098132	
Moguš-Milanković	Andrea	0098027	
Mohaček Grošev	Vlasta	0098019	
Moslavac Forjan	Davorka	0098051	
Mravinac	Brankica	0098075	
Muck-Šeler	Dorotea	0098088	
Musani	Vesna	0098091	
Musić	Svetozar	0098062	
Mužić	Ana	0098060	
Najdek-Dragić	Mirjana	0098111	
Narančić	Sanja	0098051	
Nemet	Ina	0098054	
Nerlović	Vedrana	0098111	
Nikolić	Hrvoje	0098002	
Nikolić	Sonja	0098034	
Nižić	Bene	0098002	
Nothig-Laslo	Vesna	0098040	
Novak	Renata	0098102	
Novak Coumbassa	Nana	0098056	
Njegić	Branka	0098061	
Obelić	Bogomil	0098014	
Obhodaš	Jasmina	0098016	
Omanović	Dario	0098121	
Oreščanin	Višnja	0098128	
Orešković	Darko	0098069	
Osmak	Maja	0098076	
Ozretić	Bartolo	0098115	
Palle	Davor	0098003	
Paljević	Matija	0098065	
Passek	Kornelija	0098002	
Pastuović	Željko	0098013	
Pavelić	Jasminka	0098092	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Pavelić	Krešimir	0098093	
Pavičić	Jasenka	0098130	
Pavičić-Hamer	Dijana	0098116	
Pavlović	Mladen	0098020	
Pečar	Osvin	0098111	
Pečar-Ilić	Jadranka	0098124	
Peričić	Danka	0098103	
Perić	Berislav	0098066	
Petranović	Mirjana	0098071	
Petrović	Vlatka	0098075	
Piantanida	Ivo	0098053	
Picer	Valerije-Mladen	0098131	
Pifat-Mrzljak	Greta	0098037	
Pisk	Krunoslav	0098012	
Pivac	Branko	0098020	
Pivac	Nela	0098088	
Pivčević Novak	Branka	0098135	
Pižeta	Ivanka	0098121	
Planinić	Pavica	0098066	
Plavšić	Dejan	0098035	
Plavšić	Marta	0098122	
Plohl	Miroslav	0098075	
Pokrić	Biserka	0098097	
Poljak-Blaži	Marija	0098101	
Popović	Marijana	0098098	
Portada	Tomislav	0098053	
Prebeg	Tatjana	0098073	
Precali	Robert	0098111	
Pucić	Irina	0098064	
Rac	Mladen	0098082	
Radačić	Marko		
Radačić-Aumiler	Matea	0098093	
Radić	Nikola	0098021	
Radić	Tomislav	0098111	
Radić Stojković	Marijana	0098053	
Rajčan	Ivana	0098103	
Rakvin	Boris	0098038	
Ranogajec	Ferencne	0098063	
Ranogajec	Franjo	0098064	
Raspor	Biserka	0098130	
Raza	Zlatica	0098050	
Ražem	Dušan	0098063	
Risović	Dubravko	0098029	
Ristić	Mira	0098062	
Ristov	Strahil	0098024	
Roje	Marin	0098050	
Roščić	Maja	0098054	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Rožman	Marko	0098032	
Rožmarić Mačefat	Martina	0098128	
Rubelj	Ivica	0098077	
Ružić	Ivica	0098124	
Sabljić	Aleksandar	0098033	
Salaj-Obelić	Ivanka	0098062	
Salaj-Šmic	Erika	0098070	
Sauerborn Klobučar	Roberta	0098135	
Sekulić	Bogdan	0098124	
Semenčić	Lorena	0098115	
Sikirić	Maja	0098031	
Skala	Karolj	0098025	
Skender	Marina	0098004	
Slade	Neda	0098092	
Smital	Tvrtko	0098135	
Smodlaka	Nenad	0098111	
Smrečki	Vilko	0098059	
Sobočanec	Sandra	0098096	
Soić	Neven	0098008	
Soldo-Roudnicky	Dunja	0098140	
Sopta	Marija-Mary	0098079	
Srzić	Dunja	0098032	
Stanišić	Vitimir	0098140	
Starešinčić	Lidija	0098079	
Stipčević	Mario	0098011	
Stipčević	Tamara	0098094	
Stojković	Ranko	0098092	
Strunjak-Perović	Ivančica	0098125	
Subotić	Boris	0098060	
Sudac	Davorin	0098016	
Supek	Ivan	0098007	
Supić	Nastenjka	0098113	
Surić	Tihomir	0098012	
Svetličić	Vesna	0098127	
Šantić	Ana	0098027	
Šantić	Branko	0098045	
Šarić	Ankica	0098062	
Šestan	Marijana	0098066	
Šijaković-Vujičić	Nataša	0098053	
Šilipetar-Picer	Nevenka	0098131	
Šimaga	Šumski	0098055	
Škare	Danko	0098052	
Škrabalo	Ante	0098095	
Škrlin	Ana	0098131	
Šmit	Ivan	0098064	
Šmuc	Tomislav	0098023	
Šokčević	Damir	0098001	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Šorgić	Božica	0098065	
Špoljarić	Jasminka	0098055	
Štambuk	Nikola	0098097	
Štefančić	Hrvoje	0098002	
Štefanić	Goran	0098062	
Štefanić	Zoran	0098036	
Štefulj	Jasminka	0098081	
Štifanić	Mauro	0098114	
Štorek	Helena	0098127	
Šuman	Lidija	0098092	
Šumanovac Ramljak	Tatjana	0098052	
Šunjić	Vitomir	0098050	
Šuša	Tatjana	0098015	
Švarc	Alfred	0098009	
Šverko	Ana-Višnja	0098096	
Švob Štrac	Dubravka	0098103	
Tepić	Nataša	0098120	
Terzić	Senka	0098120	
Teskeredžić	Emin	0098125	
Teskeredžić	Zlatica	0098125	
Tisaj	Krešo	0098140	
Tkalčec	Zdenko	0098082	
Tomaš	Marin-Slobodan	0098001	
Tomašić	Vlasta	0098031	
Tomažić	Igor	0098113	
Tomec	Marija	0098125	
Tomić	Sanja	0098036	
Tonković	Maja	0098031	
Topić	Goran		
Topić-Popović	Natalija	0098125	
Trampetić	Josip	0098002	
Traven	Ana	0098079	
Travizi	Ana	0098111	
Trojko	Rudolf	0098065	
Tumir	Lidija-Marija	0098053	
Turković	Aleksandra	0098026	
Udiković	Nikolina	0098134	
Ugarković	Đurđica	0098074	
Valić	Srećko	0098038	
Valković	Vladivoj	0098016	
Vardić	Irena	0098125	
Varga-Defterdarović	Lidija	0098054	
Vdović	Neda	0098132	
Veljković	Jelena	0098052	
Vertačnik	Astrea	0098128	
Vianello	Robert	0098058	
Vikić-Topić	Dražan	0098059	

Prezime	Ime	Projekt	Stranica
Vinković	Marijana	0098051	
Vinković	Vladimir	0098051	
Višnjevac	Aleksandar	0098036	
Vlah	Ivana	0098039	
Vojnović	Božidar	0098024	
Vojvodić	Vjeročka	0098122	
Vugrek	Oliver	0098086	
Vujaklija	Dušica	0098072	
Vujasinović	Ines	0098052	
Vukelić	Bojana	0098055	
Vukoša	Elena	0098032	
Vuković	Lidija	0098076	
Vuković	Marijan	0098126	
Weber	Igor	0098073	
Wolšperger	Kristina	0098080	
Zadro	Mile	0098008	
Zahradka	Davor	0098071	
Zahradka	Ksenija	0098071	
Zekušić	Marija		
Zelić	Marina	0098123	
Zimmermann	Boris	0098057	
Zlatic	Vinko	0098004	
Zorc	Hrvoje	0098140	
Zrinski	Irena	0098056	
Žarković	Neven	0098101	
Žic	Vesna	0098121	
Žilić	Dijana	0098038	
Žinić	Biserka	0098053	
Žinić	Mladen	0098053	
Živković	Tomislav	0098043	
Žutić	Vera	0098127	

ISBN 953-6690-45-4