

**Srpsko hemijsko društvo**  
**Serbian Chemical Society**



**53. SAVETOVANJE**  
**SRPSKOG HEMIJSKOG**  
**DRUŠTVA**

**PROGRAM**  
**i**  
**KRATKI IZVODI RADOVA**

**53<sup>nd</sup> Meeting of  
the Serbian Chemical Society**

**Program  
&  
Book of Abstracts**

**Prirodno-matematički fakultet, Kragujevac 10. i 11. jun 2016.**  
**Faculty of Science, Kragujevac, Serbia, June 10 and 11, 2016**

CIP - Каталогizacija u publikaciji  
Narodna biblioteka Srbije, Beograd

54(048)  
577.1(048)  
66(048)  
66.017/.018(048)  
502/504(048)

СРПСКО хемијско друштво. Саветовање (53 ; 2016 ; Крагујевац)

Program i kratki izvodi radova = Program & Book of Abstracts / 53. savetovanje Srpskog hemijskog društva, Kragujevac, 10. i 11. jun 2016. = 53rd Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia, June 10 and 11, 2016 ; [organizator] Srpsko hemijsko društvo = [organizer] Serbian Chemical Society ; [urednici, editors Miloš Đuran, Aleksandar Dekanski]. - Beograd : Srpsko hemijsko društvo = Serbian Chemical Society, 2016 (Beograd : Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva TMF). - XI, 127 str. ; 25 cm

Uparedo srp. tekst i engl. prevod. - Tekst ćir. i lat. - Tiraž 150. - Registar.

ISBN 978-86-7132-056-6

a) Хемија - Апстракти b) Биохемија - Апстракти c) Технологија - Апстракти d) Наука о материјалима - Апстракти e) Животна средина - Апстракти

COBISS.SR-ID 223816204

**53. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA, PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET, KRAGUJEVAC, 10. i 11. JUN 2016.**

### **PROGRAM I KRATKI IZVODI RADOVA**

*53<sup>RD</sup> MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY, FACULTY OF SCIENCE, KRAGUJEVAC, SERBIA, JUNE 10 AND 11, 2016*

### **PROGRAM AND BOOK OF ABSTRACTS**

*Izdaje / Published by*

**Srpsko hemijsko društvo / Serbian Chemical Society**

*Karnegijeva 4/III, 11000 Beograd, Srbija*

*tel./fax: +381 11 3370 467; www.shd.org.rs, E-mail: Office@shd.org.rs*

*Za izdavača / For Publisher*

**Živoslav TEŠIĆ, predsednik Društva**

*Urednici / Editors*

**Miloš ĐURAN**

**Aleksandar DEKANSKI**

*Dizajn korica, slog i kompjuterska obrada teksta*

*Cover Design, Page Making and Computer Layout*

**Aleksandar DEKANSKI**

*Tiraž / Circulation*

**150 primeraka / 150 Copy Printing**

**ISBN 978-86-7132-061-0**

*Štampa / Printing*

**Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva, Tehnološko-metalurški fakultet,**

**Karnegijeva 4, Beograd, Srbija**

Naučni Odbor  
Scientific Committee

Miloš ĐURAN, *predsednik*

Živoslav TEŠIĆ

Vladislava JOVANOVIĆ

Živadin BUGARČIĆ

Ivan GUTMAN

Zorica KNEŽEVIĆ-JUGOVIĆ

Dragana MILIĆ

Slavica RAŽIĆ

Menka PETKOVSKA

Velimir POPSAVIN

Danijela ŠOJIĆ

Igor OPSENICA

Zorka STANIĆ

Bojan RADAČ

Maja RADETIĆ

Niko RADULOVIĆ

Dragica TRIVIĆ

Tanja ĆIRKOVIĆ VELIČKOVIĆ

Maja GRUDEN-PAVLOVIĆ

Ivana HOLCLAJTNER-ANTUNOVIĆ

Jasna ĐONLAGIĆ

Slobodan MILONJIĆ



Organizacioni Odbor

Organising Committee

Srećko TRIFUNOVIĆ, *predsednik*

Snežana RAJKOVIĆ

Aleksandar DEKANSKI

Marija ŽIVKOVIĆ

Biljana GLIŠIĆ

Emina MRKALIĆ

Marina ĆENDIĆ

Marija JEREMIĆ

Maja ĐUKIĆ

Danijela STOJKOVIĆ

Nada SAVIĆ

Svetovanje su podržali / *Supported by*



Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja  
Republike Srbije

*Ministry of Education, Science and Technological Development  
of Republic of Serbia*

**SUPERLAB®**  
Your Lab - Our Passion

*Ova knjiga sadrži kratke izvode  
tri plenarna predavanja (PP),  
tri predavanja po pozivu (PPP) i  
111 saopštenja prihvaćenih  
za prezentovanje na Savetovanju,  
od čega 4 sekcijaska (S) predavanja,  
24 usmena (O) i 83 posterska (P) saopštenja.*

*Zbornik radova (radovi obima od najmanje četiri stranice)  
publikovan je na kompakt disku (CD),  
kao sastavni deo materijala Savetovanja.  
Radovi koji su publikovani na disku  
u ovoj knjizi su označeni simbolom*



*na desnoj strani iznad naslova rada.*

*This book contains short abstracts of  
3 Plenary Lectures (PP),  
3 Invited Lectures (PPP),  
111 contributions accepted  
for the presentation at the Meeting,  
of which 4 sectional (S) lectures,  
24 oral (O) and 83 poster (P) presentations*

*The Proceedings of the papers (consisting of four pages)  
are published on compact-disk (CD),  
as an integral part of the Meeting material.  
The papers published on the CD are designed in this book by*



*symbol on the right side above the paper title.*

## SADRŽAJ / CONTENTS

PROGRAM	vii
KRATKI IZVODI	1
ABSTRACTS	1
Plenarna predavanja / Plenary Lectures	3
Predavanja po pozivu / Invited Lectures	7
Saopštenja / Contributions	11
Analitička hemija / Analytical Chemistry	11
Fizička hemija / Physical Chemistry	30
Elektrohemija / Electrochemistry	35
Hemijsko inženjerstvo / Chemical Engineering	40
Nauka o materijalima / Material Science	48
Neorganska hemija / Inorganic Chemistry	50
Hemija životne sredine / Environmental Chemistry	60
Teorijska hemija / Theoretical Chemistry	66
Biohemija / Biochemistry	67
Hemija i tehnologija hrane / Chemistry and Technology of Food	77
Hemija i tehnologija makromolekula Chemistry and Technology of Macromolecules	86
Organska hemija / Organic Chemistry	93
Author Index	122



# PROGRAM

**Petak, 10. jun 2016. / Friday, June 10, 2016**

**08.30 – 12.30 Registracija – Hol u prizemlju glavne zgrade**  
Registration – Lobby on the ground floor

**Velika sala u prizemlju / Great hall on the ground floor**

**09.00– 09.30 Postavljanje postera / Poster Mounting (Sesija 1 / Session 1)**

**Velika sala na prvom spratu / Great hall on the first floor**

**09.30 – 09.45 Svečano otvaranje / Opening Ceremony**

**Plenarna predavanja / Plenary Lectures**

**Predsedavajuća / Chairperson: Ivan Gutman**

**09.45 – 10.30 Tanja Parac-Vogt, KU Leuven, Department of Chemistry, Leuven, Belgium**

**PP 1 Poliokosmetalati kao veštački enzimi / Polyxometalates as artificial enzyme**

**10.30 – 11.15 Marcel Swart, Institut de Química Computacional i Catalàlisi (IQCC),**

**PP 2 Univ. Girona, Spain**

**Spinning around in transition-metal chemistry**

**Hol na prvom spratu / Lobby of the first floor**

**11.15 – 11.45 Koktel / Cocktail**

**Velika sala na prvom spratu / Great hall on the first floor**

**Predavanja po pozivu / Invited Lectures**

**Predsedavajući / Chairperson: Velimir Popsavin**

**11.45 – 12.10 Ivana Drvenica, Olgica Nedić\*, Aleksandar Dekanski\*\***

**PPP 1 Inovacioni centar TMF, \*INEP, \*\*IHTM - CEH, Univerzitet u Beogradu, Srbija**

**\*Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, CEH, Univerzitet u Beogradu, Srbija**

**Proces recenziranja radova u časopisima iz hemije i srodnih oblasti koji se izdaju u Srbij**

**Peer-review process in journals dealing with chemistry and related subjects published in Serbia**

**Velika sala u prizemlju / Great hall on the ground floor**

**12.15 – 13.30 Posterska sesija 1 / Poster Session 1**  
**(OH P1 – OH P22; NH P01 – NH P04; EH P01 – EH P04;**  
**HŽS P01 – HŽS P05; HTM P01 – HTM P06)**

**13.30 – 14.30 Ручак / Lunch**

**Uklanjanje postera / Poster Dismounting (Sesija 1 / Session 1)**

**Sale Instituta za hemiju, prvi sprat / Halls of the Department of Chemistry, first floor**

**Sala A / Hall A**

**Sekcijsko predavanje / Keynote Lecture**

**Predsedavajući / Chairperson: Maja Gruden-Pavlović**

**14.30 – 14.50 Snežana Rajković, PMF, Univerzitet u Kragujevcu, Srbija**

**NH S Dinuklearni platina(II) kompleksi kao katalitički reagensi za selektivnu hidrolizu peptida**

**Dinuclear platinum(II) complexes as catalytic reagents for the selective hydrolysis of peptides**

**Usmena izlaganja / Oral presentations**

- 14.50 – 15.05** **Snežana M. Jovanović, Biljana V. Petrović, Živadin D. Bugarčić**  
**NH O1** **Sinteza i karakterizacija novih bimetalnskih kompleksa platine(II) i paladijuma(II) i ispitivanje njihovih interakcija sa važnim biomolekulima**  
Synthesis and characterisation of the new bimetallic complexes of platinum(II) and palladium(II) and study of their interactions with important biomolecules
- 15.05 – 15.20** **Jovana V. Bogojeski, Milan M. Milutinović, Olivera R. Klisurić, Sofi K.C.**  
**NH O2** **Elmroth, Živadin D. Bugarčić**  
**Sinteza i struktura Rh(III) kompleksa sa pincer-tipom liganda; Interakcije sa biomolekulima**  
Synthesis and structures of pincer-type rhodium(III) complex; Interactions with biomolecules
- 15.20 – 15.35** **Milan M. Milutinović, Ana Rilak, Ioannis Bratsos, Olivera R. Klisurić,**  
**NH O3** **Živadin D. Bugarčić**  
**Novi 4'-(4-hlorofenil)-2,2':6',2''-terpiridin rutenijum(II) kompleksi: Sinteza, karakterizacija i interakcije sa biomolekulima**  
New 4'-(4-chlorophenyl)-2,2':6',2''-terpyridine ruthenium(II) complexes: Synthesis, characterization and interaction with biomolecules
- 15.35 – 15.50** **Nada D. Savić, Beata Warżajtis, Biljana Đ. Glišić, Marija Antić,**  
**NH O4** **Slavko Radenković, Urszula Rychlewska, Miloš I. Djuran**  
**Sinteza i karakterizacija kompleksa zlata(III) sa tricikličnim aromatičnim jedinjenjima koja sadrže azot**  
Synthesis and characterization of gold(III) complexes with tricyclic aromatic nitrogen-containing heterocycles
- 15.50 – 16.05** **Maja D. Nešić, Jelena Žakula, Lela Korićanac, Iva Vukićević, Boris Rajčić,**  
**NH O5** **Marijana Petković**  
**Sistem za fotoaktivnu terapiju kancera na bazi nanočestica TiO<sub>2</sub> i kompleksa rutenijuma**  
Sistem za fotoaktivnu terapiju kancera na bazi nanočestica TiO<sub>2</sub> i kompleksa rutenijuma
- 16.05 – 16.20** **Marko G. Pavlović, Vanessa Prevot, Elodie Bourgeat-Lami, Istvan Szilagyi**  
**NM O1** **Uticao adsorpcije polimera na koloidnu stabilnost Dvostrukih Slojevitih Hidroksida**  
Tunning colloidal stability of Layered Double Hydroxides by polymer adsorption
- Sala B / Hall B**  
**Sekcijsko predavanje / Keynote Lecture**  
**Predsedavajući / Chairperson: Igor Opsenica**
- 13.30 – 14.30** **Mario Zlatović, Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija**  
**OH S** **Potruga za mehanizmom dejstva inhibitora botulinum neurotoksina ili Kako pokvariti molekulska mašinu**  
In a search of a mechanism of action of botulinum neurotoxin inhibitors or How to sabotage the molecular machine
- Usmena izlaganja / Oral presentations**
- 14.50 – 15.05** **Violeta R. Marković, Katarina Jakovljević, Milan D. Joksović, Ivana Matić**  
**OH O1** **Sinteza i biološko ispitivanje novih triazolnskih Mannich-ovih baza**  
Synthesis and biological screening of novel triazole Mannich bases
- 15.05 – 15.20** **Ivana Kovačević, Mirjana Popsavin, Jovana Francuz, Goran Benedeković,**  
**OH O2** **Vesna Kojić, Gordana Bogdanović, Milka Jadranin, Velimir Popsavin**  
**Sinteza i antitumorska aktivnost defenilovanih analoga goniofufurona**  
Synthesis and antitumour activity of dephenylated goniofufurone analogues



- 15.20 – 15.35 **Jovana Jovanović, Danijela Ilić-Komatina, Ivan Damljanović,**  
OH O3 **Rastko D. Vukićević**  
**Sinteza 6-acil-5-feniltetrahidropirazolo[1,2-a]pirazol-1(5H)-ona**  
Synthesis of 6-acyl-5-phenyltetrahydropyrazolo[1,2-a]pyrazol-1(5H)-ones
- 15.35 – 15.50 **Života Selaković, Sandra B. Šegan, Rekha G. Panchal, Bogdan A. Šolaja**  
OH O4 **Nova farmakofora aktivna na Ebola virus**  
A novel anti-Ebola pharmacophore
- 15.50 – 16.05 **Milica Videnović, Tatjana Srdić-Rajić, Igor Opsenica, Siniša Radulović,**  
OH O5 **Bogdan Šolaja**  
**Ispitivanje antiproliferativne aktivnosti novih derivata benzotiazolamina**  
**prema MCF-7 ćelijskoj liniji humanog kancera dojke**  
Investigation of antiproliferative activity of new benzothiazolamine derivatives  
against MCF-7 human breast cancer cell line
- 16.05 – 16.20 **Slavko Radenković, Marija Antić, Nada D. Savić, Biljana Đ. Glišić,**  
TH O1 **Miloš I. Djuran**  
**Priroda Au-N veze i aromatičnost N-heterocikličnih liganada**  
**koordinovanih za zlato(III) jon**  
The nature of Au-N bond and aromaticity of N-heterocycles coordinated to  
Au(III) ion
- 15.45-16.30 **IZLET / EXCURSION**  
**Polazak autobusa sa parkinga ispred glavnog ulaza Prirodno-**  
**matematičkog fakulteta (ulica Radoja Domanovića 12)**  
Bus departure from the parking lot in front of the main entrance of Faculty of  
Science (Radoja Domanovića street, 12)
- 20.00 **Večera u tradicionalnom šumadijskom restoranu ORANICA (Šumarice)**  
Dinner in the traditional Šumadia restaurant ORANICA

## **Subota, 11. jun 2016. / Saturday, June 11, 2016**

- 08.30 – 12.30 **Registracija – Hol u prizemlju glavne zgrade**  
Registration – Lobby on the ground floor

### **Velika sala u prizemlju / Great hall on the ground floor**

- 09.00– 09.30 **Postavljanje postera / Poster Mounting (Sesija 2 / Session 2)**

### **Velika sala na prvom spratu / Great hall on the first floor**

- Plenarno predavanje / Plenary Lecture**  
**Predsedavajuća / Chairperson: Živadin Bugarčić**
- 09.30 – 10.15 **Iztok Turel, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana,**  
PP 3 **Slovenia**  
**Interactions of metal ions with old drugs**
- Predavanja po pozivu / Invited Lectures**
- 10.15 – 10.45 **Jakob Kljun, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana,**  
PPP 2 **Slovenia**  
 **$\beta$ -Diketonate scaffolds in medicinal chemistry:**  
**The case of organoruthenium anticancer compound**

### **Hol na prvom spratu / Lobby of the first floor**

- 10.45 – 11.15 **Koktel / Cocktail**

**Velika sala na prvom spratu / Great hall on the first floor****Predavanja po pozivu / Invited Lectures****Predsedavajući / Chairperson: Mirjana Popsavin****11.15 – 11.45** **Janoš Čanadi**, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Srbija**PPP 3** **Sinteza sulfonskih C-glikozida kao potencijalnih inhibitora glikozil transferaza**

Synthesis of C-glycoside sulfones as potential glycosyltransferase inhibitors

**Sale Instituta za hemiju, prvi sprat / Halls of the Department of Chemistry, first floor****Sala A / Hall A****Sekcijsko predavanje / Keynote Lecture****Predsedavajući / Chairperson: Slavica Ražić****12.00 – 12.00** **Zsanett Dorkó**,\*\*\* **Miloš P. Pešić**,\*\*\* **Anett Szokolczai**,\***AH S** **Miljana D. Todorov**\*\*\*, **Tatjana Ž. Verbić**\*\*\*, **George Horvai**\*\*\*,

\*Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics, Budapest, Hungary; \*\*MTA-BME Research Group of Technical Analytical Chemistry, Budapest, Hungary; \*\*\* Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Serbia

**Molekulski obeleženi polimeri**

Molecularly imprinted polymers

**Usmena izlaganja / Oral presentations****12.20 – 12.35** **Marko Z. Krstić**, **Svetlana R. Ibrić**, **Slavica S. Ražić****AH O1** **Karakterizacija čvrstih samo-mikroemulgujućih sistema sa****karbamazepinom izrađenim sa poroznim adsorbenima**

Characterization of solid self-microemulsifying drug delivery systems of carbamazepine with porous adsorbents

**12.35 – 12.50** **Iva A. Popović**, **Maja Nešić**, **Zoran Šaponjić**, **Marijana Petković****AH O2** **Kvalitativno i kvantitativno poređenje masenih spektara vitamina E i A****dobijenih MALDI, SALDI i LDI TOF MS tehnikama**

Quantitative and qualitative comparison of mass spectra of vitamin E and A acquired with MALDI, SALDI and LDI TOF MS techniques

**12.50 – 13.05** **Miloš P. Pešić**, **Vesna S. Živanović**, **Elisabet Fuguet**, **Clara Ràfols**,**AH O3** **Ilija N. Cvijetić**, **Alex Avdeef**, **Tatjana Ž. Verbić****Terfenadine solubility – MS studies of pH dependent aggregation**

Rastvorljivost terfenadina – MS proučavanje pH zavisne agregacije

**13.05 – 13.20** **Maja M. Sremački**, **Jovana Lj. Simić**, **Jelena R. Radonić**, **Maja M. Turk****HŽS O1** **Sekulić**, **Mirjana B. Vojinović**, **Miloradov****Otpadna voda mesne industrije – skrining analiza**

Meat processing industry wastewater – screening analysis

**13.20 – 13.35** **Aleksandra M. Dramićanin**, **Filip Lj. Andrić**, **Nebojša M. Momirović**,**HTH O1** **Sandra B. Šegan**, **Dušanka M. Milojković-Opsenica****Šćerni profil kore i jezgra krompira kao indikator botaničkog porekla i sistema gajenja**

Sugar composition of potato peel and core as an indicator of its botanical origin and system of agriculture

**13.35 – 13.50** **J. Lović**, **N. Prlainović**, **D. Mijin**, **S. Stevanović**, **B. Andjelković**, **S. Petrović**,**EH O1** **M. Avramov Ivić****Detekcija glukoze korišćenjem glukozo okidaza-glutaraldehyd-cistein modifikovane elektrode od zlata primenom ciklične voltametrije**

Glucose sensing using glucose oxidase-glutaraldehyde-cysteine modified gold electrode using cycling voltammetry

**Sala B / Hall B****Sekcijsko predavanje /** Keynote Lecture**Predsedavajući /** Chairperson: **Tanja Ćirković Veličković**

13.30 – 14.30 **Danijela Apostolović**, Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija  
 BH S **Razotkrivanje alergena Proteomikom: struktura, funkcija i epitopi**

Revealing the allergens by Proteomics: structure, function and epitopes

**Usmena izlaganja /** Oral presentations

12.20 – 12.35 **Jelena Aćimović, Ana Penezić, Ivan Pavićević, Vesna Jovanović,**

BH O1 **Marija Takić, Tamara Uzelac, Ljuba Mandić****Vezivanje slobodnih masnih kiselina i bakar(II)-jona za HSA dovodi do promena u karbonilaciji i reaktivnosti Cys34 tiolne grupe sa metilglioksalom**

Binding of FAs and Cu(II)-ions to HSA changes its carbonylation pattern and Cys34 thiol group reactivity with methylglyoxal

12.35 – 12.50 **Suzana S. Jovanović-Šanta, Dimitar S. Jakimov, Vesna V. Kojić,**

BH O2 **Lidija D. Aleksić, Evgenija A. Đurendić, Jovana J. Ajduković****Efekat odabranih 17-supstituisanih androstanskih derivata na ćelije kancera**

The effect of selected 17-substituted androstane derivatives on cancer cells

12.50 – 13.05 **Katarina T. Smiljanić, Danijela Lj. Apostolović, Marija B. Peruško, Sara V.**

BH O3 **Trifunović, Luka D. Mihajlović, Lidija Burazer, Tanja D. Ćirković Veličković****Sub-polenske čestice kao potencijalno najopasniji alergenski nosioci u poređenju proteoma različitih polenskih frakcija ambrozije (*Ambrosia artemisiifolia* L.)**Proteomic comparison reveals sub-pollen particles as potentially the most dangerous allergenic carriers among different pollen fractions of short ragweed (*Ambrosia artemisiifolia* L.)

13.05 – 13.20 **Milan P. Mladenović, Rino Ragno**

BH O4 **Racionalni dizajn novih inhibitora MAO B kao terapeutika u lečenju****Parkinsonove bolesti baziran na 3-D QSAR studijama**

The 3-D QSAR studies based rational design of novel MAO B inhibitors as therapeutics in Parkinson's disease treatment

13.20 – 13.35 **Simeon Minić, Dragana Stanić-Vučinić, Maja Krstić, Jelena Mihailović,**

BH O5 **Milan Nikolić, Tanja Ćirković Veličković****Određivanje strukture hromopeptida dobijenih pepsinskom digestijom C-fikocijanina iz mikroalge *Spirulina platensis***Determination of chromopeptides structure obtained by pepsin digestion of C-phycoyanin from microalga *Spirulina platensis*

13.35 – 13.50 **Marijana M. Ponjavić, Marija S. Nikolić, Jasmina Nikodinović-Runić,**

HTM O1 **Sanja Jeremić, Sanja Stevanović, Jasna Đonlagić****Poređenje hidrolitičke, enzimske i degradacije u kompostu PCL/PEO diblok kopolimera**

Comparative analysis of hydrolytic, enzymatic and degradation in compost of PCL/PEO diblock copolymers

14.00 – 15.30 **Ručak /** Lunch

**Velika sala u prizemlju /** Great hall on the ground floor

15.30 – 16.45 **Posterska sesija 2 /** Poster Session 2

(AH P01 – AH P15; BH P01 – BH P04; FH P01 – FH P05; HTH P01 – HTH P08; HI P01 – HI P08; NM P01)

16.45 – 17.00 **Uklanjanje postera /** Poster Dismounting

**Velika sala na prvom spratu /** Great hall on the first floor

17.30 **Dodela IUPAC poster nagrada i zatvaranje Savetovanja**

IUPAC poster prize award and Closing Ceremony

## **Hemometrijska analiza parametara lipofilnosti novosintetisanih spirohidantoina koji su određeni primenom RP-TLC sa protičnim rastvaračima**

Jadranka A. Tot, Kristina A. Tot, Tatjana Lj. Đaković Sekulić, Anita M. Lazić\*,  
Gordana S. Uščumlić\*

*Departman za hemiju, biohemiju i zaštitu životne sredine, Prirodno-matematički fakultet,  
Univerzitet u Novom Sadu, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad*

*\*Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd*

Predmet ovog rada je ispitivanje lipofilnosti novosintetisanih derivata cikloalkilspiro-5-hidantoina. Parametri lipofilnosti ( $R_M^0$ ) za ispitivana jedinjenja dobijeni su primenom reversno fazne hromatografije na tankom sloju C-18 modifikovanog slikagela. Kao pokretne faze korišćene su dvokomponentne smeše vode i protičnih organskih rastvarača (metanola, etanola, *n*-propanola, *i*-propanola i *t*-butanola). Linearna zavisnost između  $R_M$  vrednosti i zapreminskog udela organskog modifikatora u pokretnoj fazi,  $\varphi$ , omogućava izračunavanje  $R_M^0$  ispitivanih jedinjenja. Uticaj supstituenata, kao modifikatora pokretne faze na  $R_M^0$  vrednosti procenjen je primenom hemometrijskih metoda, hijerarhijske kalster analize (HCA) i analize glavnih komponenata (PCA). Ove metode omogućavaju grupisanje ispitivanih derivata spirohidantoina, kao i primenjenih pokretnih faza prema njihovoj polarnosti.

## **Chemometric analysis of lipophilicity parameters of newly synthesized spirohydantoin derivatives determined by RP-TLC and protic solvents**

Jadranka A. Tot, Kristina A. Tot, Tatjana Lj. Đaković Sekulić, Anita Lazić\*,  
Gordana Uščumlić\*

*Department of Chemistry, Biochemistry and Environmental Protection, Faculty of Sciences,  
University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad*

*\*Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade*

The subjects of this paper are newly synthesized derivatives of cycloalkylspiro-5-hydantoins and the analysis of their lipophilicity. The parameters of lipophilicity ( $R_M^0$ ) were determined by reverse phase thin layer chromatography on C-18 modified silica gel. Mobile phases were two-component mixtures of water and protic organic solvents (i.e. methanol, ethanol, *n*-propanol, *i*-propanol and *t*-butanol). Linear relationship between  $R_M$  values and volume fraction of organic solvent,  $\varphi$ , allows calculation of  $R_M^0$  for investigated compounds. The effect of the substituents in the molecule as well as mobile phase modifier on  $R_M^0$  value was assessed using chemometric methods, hierarchical cluster analysis (HCA) and principal component analysis (PCA). This allows clustering of spiro hydantoin derivatives as well as applied mobile phases according to their polarity.