

Srpsko hemijsko društvo
Serbian Chemical Society



**53. SAVETOVANJE
SRPSKOG HEMIJSKOG
DRUŠTVA**

**PROGRAM
i
KRATKI IZVODI RADOVA**

**53nd 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 - Каталогизacija у публикацији
Народна библиотека Србије, Београд

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 cir. 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

53RD 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	31
Elektrohemija / Electrochemistry	36
Hemijsko inženjerstvo / Chemical Engineering	41
Nauka o materijalima / Material Science	49
Neorganska hemija / Inorganic Chemistry	51
Hemija životne sredine / Environmental Chemistry	61
Teorijska hemija / Theoretical Chemistry	67
Biohemija / Biochemistry	68
Hemija i tehnologija hrane / Chemistry and Technology of Food	78
Hemija i tehnologija makromolekula Chemistry and Technology of Macromolecules	87
Organska hemija / Organic Chemistry	94
Author Index	123

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* Adria Romero-Rivera**, Kallol Ray***, Aidan McDonald******

PP 2 *Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Barcelona, Spain

****Inst. Química Computacional i Catàlisi, Dept. Química, Univ. Girona, Spain**

*****Dept. Chemistry, Humboldt-Universität zu Berlin, Germany**

******School of Chemistry, Trinity College Dublin, Ireland**

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 Srbiji / 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 peptide / 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 01 **Sinteza i karakterizacija novih bimetalnih 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. Elmroth, Živadin D. Bugarčić**
NH 02 **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, Živadin D. Bugarčić**
NH 03 **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, Slavko Radenković, Urszula Rychlewska, Miloš I. Djuran**
NH 04 **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, Milutin Stepić, Iva Popović, Boris Rajčić, Marijana Petković**
NH 05 **Sistem za fotoaktivnu terapiju kancera na bazi nanočestica TiO₂ i kompleksa rutenijuma**
Sistem za fotoaktivnu terapiju kancera na bazi nanočestica TiO₂ i kompleksa rutenijuma
- 16.05 – 16.20 **Marko G. Pavlović, Vanessa Prevot, Elodie Bourgeat-Lami, Istvan Szilagyi**
NM 01 **Uticaj adsorpcije polimera na koloidnu stabilnost Dvostrukih Slojevitih Hidroksida**
Tuning colloidal stability of Layered Double Hydroxides by polymer adsorption
- Sala B / Hall B**
Sekcijsko predavanje / Keynote Lecture
Predsedavajući / Chairperson: Igor Opsenica
- 14.30 – 14.50 **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 01 **Sinteza i biološko ispitivanje novih triazolnih Mannich-ovih baza**
Synthesis and biological screening of novel triazole Mannich bases
- 15.05 – 15.20 **Ivana Kovačević, Mirjana Popsavin, Jovana Francuz, Goran Benedeković, Vesna Kojić, Gordana Bogdanović, Milka Jadranin, Velimir Popsavin**
OH 02 **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 03 **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 04 **Nova farmakofora aktivna na Ebola virus**
A novel anti-Ebola pharmacophore
- 15.50 – 16.05 **Milica Videnović, Tatjana Srđić-Rajić, Igor Opsenica, Siniša Radulović,**
OH 05 **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 01 **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: Živadín 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, Izток Turel**
PPP 2 **Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Slovenia**
 β -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, Jacquelyn Gervay-Hague***
Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Srbija
*Department of Chemistry, University of California, Davis, USA
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 – 12.20 **Zsannett 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 01 **Karakterizacija čvrstih samo-mikroemulgujućih sistema sa karbamazepinom izrađenim sa poroznim adsorbenisima**
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 02 **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 03 **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 01 **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 01 **Sandra B. Šegan, Dušanka M. Milojković-Opsenica**
Šećerni 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 01 **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**

- 12.00 – 12.20 **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-phycocyanin 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, enzimске 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

FH P03

Dizajn-eksperiment matematička metoda primenjena u MALDI-TOF-MS analizi

Tijana M. Rakić–Kostić, Jovana V. Bogojeski,* Iva A. Popović, Maja D. Nešić,
Boris M. Rajčić, Marija R. Nišavić, Marijana Ž. Petković, Suzana R. Veličković
*Univerzitet u Beogradu, Institut za nuklearne nauke Vinča,
Laboratorija za fizičku hemiju, Beograd, Srbija*

**Univerzitet u Kragujevcu, Prirodno-matematički fakultet, Hemijski institut, Kragujevac, Srbija*

U ovom radu, matematička metoda Dizajn eksperimenta (eng. Design of Experiment, DoE) korišćena je za optimizaciju instrumentalnih parametara masenog spektrometra sa laserskom desorpcijom i jonizacijom pomoću „matriksa“ i sa analizatorom na bazi vremena preleta (MALDI TOF MS), a za analizu metalnih kompleksa. Ulazni parametri DoE metodologije bili su intenzitet lasera, napon na „gridu“ i broj impulsa lasera, dok su kao izlazni parametri od interesa bili odnos signal/šum i rezolucija. Različite vrednosti ulaznih parametara (njihovi nivoi) definisane su na osnovu dobijenih preliminarnih eksperimenata. Nakon utvrđivanja ulaznih i izlaznih parametara DoE eksperiment je izveden primenom Box-Behnken-ove metode. Teorijski predviđene vrednosti za dobijanje kvalitetnog masenog spektra metalnog kompleksa (snaga lasera-1220 W, napon „grida“-79 V i broj impulsa lasera-360) su eksperimentalno potvrđeni.

Zahvalnica Ministarstvo prosvete i nauke i tehnološkog razvoja podržalo je ova istraživanja u Projektima 172052 i 172011.

Design of Experiments mathematical methodology applied in MALDI-TOF-MS analysis

Tijana Rakić–Kostić, Jovana Bogojeski,* Iva A. Popović, Maja D. Nešić, Boris M. Rajčić,
Marija Nišavić, Marijana Ž. Petković, Suzana R. Veličković
*Department of Physical Chemistry, Vinča Institute of Nuclear Sciences,
University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

** Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of Kragujevac,
Kragujevac, Serbia*

In this work Design of Experiment mathematical methodology (DoE) was used for optimization the instrumental parameters of matrix-assisted laser desorption/ionization (MALDI) time-of-flight (TOF) mass spectrometer (MS) for the analysis of metal complex. The input factors in DoE methodology were laser intensity, grid voltage and number of laser shots, while the output response of interest were signal-to-noise ratio and resolution. The different values of input factors (their level) are defined according to the results obtained in preliminary experiments. After the identification of input factors and responses of interest the DoE experimental plan is created using Box-Behnken methode. Theoretically predicted values for obtaining high-quality mass spectra of metal complex (laser power – 1220 W, grid voltage – 79 V and number of laser shots – 360) are experimentally confirmed.

Acknowledgements The Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia for supporting these investigations in Project 172052 and 172011.