ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД

год. 55
бр. 4 (септембар)
YU ISSN0440-6826
UDC 54.001.93

ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД CHEMICAL REVIEW

Годиште 55 — септембар — број 4

Publisher
SERBIAN CHEMICAL SOCIETY
Belgrade/Serbia, Karnegijeva 4

DRAGICA TRIVIĆ
Deputy Editor-in-Chief
RATKO M. JANKOV
Editor-in-Chief

Volume 55
NUMBER 4
(September)

ОДГОВОРНИ И ГЛАВНИ УРЕДНИК
Ратко М. Јанков

ПОМОЋНИК ОДГОВОРНОГ И ГЛАВНОГ УРЕДНИКА
Драгица Тривић

ГЛАВНИ УРЕДНИЦИ
Иван Гутман, Снежана Зарић, Јован Јованović, Славко Кевешан, Драган Марковић, Владимир Павловић и Воин Петровић

УРЕЂИВАЧКИ ОДБОР
Владимир Вукотић, Бранко Дражић, Јелена Радосављевић

ВЕСТИ ИЗ ШКОЛЕ
Јасминка Н. КОРОЛИЈА, Јелена ЈУРЈЕВИЋ, Милена ТОШИЋ, Игор МАТИЈАШЕВИЋ и Иван ГУТМАН
ХЕМ ЗА НАСТАВУ ХЕМИЈЕ У ОСНОВНОЈ ШКОЛИ ____ 106

ВЕСТИ ИЗ СХД
ИЗВЕШТАЈ О РАДУ СА 51. САВЕТОВАЊА СРПСКОГ ХЕМИЧАРА _____ 112
ИЗВЕШТАЈ О РАДУ СА 2. КОНФЕРЕНЦИЈЕ МЛАДИХ ХЕМИЧАРА _____ 111

САДРЖАЈ

ЧЛАНЦИ

MOLECULES OF LOVE _____ 86
МОЛЕКУЛИ ЉУБАВИ
Milan Ř. NIKOLIĆ
Милан Р. НИКОЛИЋ

MOLECULAR MODELING _____ 91
МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛИРАЊЕ
Svetozar R. NIKETIĆ
Светозар Р. НИКЕТИЋ

PATHOGENESIS RELATED PROTEINS _____ 103
ПРОТЕИНИ ВЕЗАНИ У ОБОЛЕЊА ОД БИЉАКА
Milica POPOVIĆ
Милица ПОПОВИЋ

office@ratkovicdesign.net
www.ratkovicdesign.net
Слободан и Горан Ратковић, RatkovicDesign
Насловна страна и Интернет верзија часописа:

Karnegijeva 4
Београд/Србија, Карнегијева 4

Телефон 3370-467

СРПСКО ХЕМИЈСКО ДРУШТВО
Иванић Драгомирка

Штампа: РИЛ графиком инжењерства Технолошко-металуршког факултета Београд, Карнегијева 4

Претплата за штампу: Јелена и Зоран ДИМИЋ,
Светозара Марковића 2, 11000 Београд

е-mail редакције: hemipr_ed@chem.bg.ac.rs
Web site: http:\\www.shd.org.rs\hp\

Годишња и претплату можете уплатити на рачун СХД:
205-13615-63, позив на број 320.

- за чланове и институције из иностранства. ..... € 50
- претплата за школе и остале институције..... 3.500,00
- за пензионере, студенте, људе и незапослене.....800,00
- за професоре у основним и средњим школама..... 1.000,00
- за запослене..... 1.800,00
за 2014. годину износи:

Годишња чланарина, укључује часопис „Хемијски преглед“,

Радомир Саичић, Жиборад Чекић (председник).

Иван Гутман, Снежана Зарић, Јован Јованović, Славко Кевешан, Драган Марковић, Владимир Павловић, Воин Петровић

УРЕЂИВАЧКИ ОДБОР

Милица РОПОВИЋ
Милица ПОПОВИЋ

Milan Ř. NIKOLIĆ
Милан Р. НИКОЛИЋ

Svetozar R. NIKETIĆ
Светозар Р. НИКЕТИЋ

Хронік

Ювілей

Історично, усі ті патогени являли сі нагальне да сьвідомости спожеиня і комплікованих механізма обрбане.

У вишевказаної борби са патогенимі, онімі су развиле на „за разаої елементарних модела за комплексне хемијске системе“ – како се наводи у саопштењу.

* * *

Ноберову награду за хемију за 2013. годину, добили Мајкл Левит (Michael Levitt) са Медицинског факултета Универзитета у Стенфорду, и Арије Вршеп (Ариеh Warshel) са Универзитета Јужне Калифорније у Лос Анђелесу, добили Ноберову награду за хемију за 2013. годину, саопштила Краљевска академија наука и слободних уметности из Стокхолма. Ова је прва награда која се додељује за рад у области рачунарске хемије. Ради се о комплексним молекулама, који су у основи свих живих ћелија. Тако се он примјењује текстовима на неки начин специјалне. Тако се он примјењује у Батону – али конформација глисе проблематике (нпр. о Батону – али конформационе анализе, ДНК рачунарима, а најчешће о конформационој анализи) који су се појавили у претходним свескама Хемијског прегледа. Пошто године, 9. октобра 2013. године, добијено је да су Мартин Карплус (Martin Karplus), професор са америчког Харварда и Универзитета у Стразбуру (Француска), Мајкл Левит (Michael Levitt) са Медицинског факултета Универзитета у Стенфорду, и Арије Вршеп (Ариеh Warshel) са Универзитета Јужне Калифорније у Лос Анђелесу, добили Ноберову награду за хемију за 2013. годину, саопштила Краљевска академија наука и слободних уметности на посту који радимо, обмор од свакодневних активности на посту сеоу, своје ви и како врсте потребно да се посветимо мало сеоу, своје ви и на „за разаої елементарних модела за комплексне хемијске

* * *

шкоској годину!

Поред или за неки нови поретак. Добробошли у нову мисиима, планоима, идејама. То даје снагу за наставак завеј и како врсте потребно да се посветимо мало сеоу, своје обмор од свакодневних активности на посту који радимо, системе“ – како се наводи у саопштењу.

* * *

У вишевековној борби са патогенима, онике су развиле шиштво сложених и комплексних механизама одбране. Истовремено, исти ти патогени развили су начине да савла-

Уводник

до 5. до 7. јана 2014. године.

Ратко М. Јанков

У рубрици Вести из СХД нађи ћете Извештај о раду са 51. скупштине Српског хемијског друштва Ако и Извештај о раду са 2. Конференције младих хемичара које су одржане од 5. до 7. јана 2014. године.

* * *

У рубрици Хемија на/за школе у чланку "Хлеб у настави хемије.

У рубрици Хемија на/за школе у чланку "Хлеб у настави хемије у основној школи" аутори, **Јасмина Н. Коровић, Јелена Трубјелић, Милена Тошић, Итор М. Матић** (Природно-математички факултет Универзитета у Крагујевцу) написали су чланак који указује на важност улоге о хлебу у основној школи. С обзиром на то да се путем ове жвоотне намирнице могу обрађивати различити хемијско–технолошки садржаји, али и садржаји других наука, хлеб би требало да буде предмет у живору. Како се назива да настави садржаји стаје/улоге и области рада омогућа да исходи улоге буду предмет настави садржаји, методе на "наука–технологија–друштво" (НТД) приступ. Основа овог приступа настави природних наука, посебан дод називом за на теоријски и експериментално добро утемељеног незаобилазна тема у настави хемије. Циљеви ова проширена садржаји и методе у настави хемије. Тако се на примјер текстовима на неки начин специјалне. Тако се он примјењује у Батону – али конформационе анализе, ДНК рачунарима, а најчешће о конформационој анализи) који су се појавили у претходним свескама Хемијског прегледа. Пошто године, 9. октобра 2013. године, добијено је да су Мартин Карплус (Martin Karplus), професор са америчког Харварда и Универзитета у Стразбуру (Француска), Мајкл Левит (Michael Levitt) са Медицинског факултета Универзитета у Стенфорду, и Арије Вршеп (Ариеh Warshel) са Универзитета Јужне Калифорније у Лос Анђелесу, добили Ноберову награду за хемију за 2013. годину, саопштила Краљевска академија наука и слободних уметности из Стокхолма. Ова је прва награда која се додељује за рад у области рачунарске хемије. Ради се о комплексним молекулама, који су у основи свих живих ћелија

Такво мишљење је снажно утицало на Јаћеву, најбољег потпису до латинских назива ових тешких супстанци. ка (медицинк, колерк, сатванник или фијетматик) зи. Називи за типове кристера и темперамента човечје тешке темпоститу: ирне жари, жуте жари, крви и слу-су све бројсти постојбиа потребија у мешану четири текстова на тему човек. Хипократ је постулирао да нимрмаво, у старом веку нема много (медицинских) ної вереби уберіје да је човек "природа потреба". Заи "Симпозијуму", Сократ окружен тостоду на свечаје човек "врста природа", врта човеку као "дар од Бога". У два Сократова ученика. У "Федри", Сократ говори да падној филозофској традицији називамо кот Платона, послеђиле има на наше понашање.

Прве покушаје да се разуме природа човека у запотрошуму када се заједномо и када волимо, и какве то ви, до какви (био)хемијских промена долази у нашем Конкретније, није реч о природи промишљања човеја-човеку? Одређен јој се, знак је слабост а не снаге." тисни ушмавајући", и потом: "Сила човеков благи, ра-ној раздвајући, насилин покајавајући, тежеки отадајући, ви? Ној се све предреке предајући, исповести радвајући, кже: "А постоји ли вија сила и вија моштва од човесвим мернијанима и у свим културама. Јован Дијанј нисцирајући песнитима, пистима и музиравима, на чинава човде од Адама и Еве и кроз векове служи као кој осећамо према праћеру, врста човеков кој је Еros (Ἔρως), фиикка и смоционија иаклоност (фија) за братску и пријатељску човеја. Тема овог текста је Еros (Ἔρως), фиикка и смоционија иаклоност пиши. Стоје (отоуіі) се користи да опише природну човеја, најзвишенији од четири врсте човеков у Вио-(ᾧиіі) означава безусловну, све-дајући, спиритуалну језику посто је и разјашите реи за свако од них. Аіше

Сви знамо за разјашите врсте човеков: у трком страсти позатих човеку".

страсти свакако је извор "најјачих сензација, емоција и пријатија "дефинција" човеков. Човеа и човекова чена за свакот појединца. Зато и не постоји опште тих емоција и емоционалних стања, разјашнатот зна-су све постести постојбија потребија у мешану четири тешке зараде и да се буде у неној/неговој физици; интересе заеде и да се човеков "објекат човеков"; разјашање стратегије да се особа од човеја карактериште: усмерена пажња (фиксација) на су насилине емоције и осећања кое раја. Романтику интензитету емоција и осећања: што је јача човеја, то Психозом проћеку снагу човеков занеса према рији" у стомаку. Свесно, ово осећање је предрано. дисање, дезконцентрисност, клепетање колена, "лептизнати: зноје брадова, убрзано кајање срца, отежано поједини мма бедовма мозга.

Симптоми "човеков болести" су свима добро по-нетке, стихове, попуке...; друтим речима на све оно човеков "природа" и то у садржај сигнатних молекула у неравнотежа, и то у садржај сигнатних молекула у основ човеја дајашњем: романтика човеја јесте неодтако разумевање промена у тој заједници у основ потпуноново светло и на физиологији човеков. Ансложних процеса функциониса мозга, градећи фиикке, од средине XX века, омогућио разумевање снажна разној биохемије, молекуларне биологије и могла да буде предмет интензивнијег изучавања. Тек је енормност утицаја, романтика човеја (и даље) није агресија су главни покретачи човека. Због Фројдових психологији. Према Систему Фројди, либидо (секс) и дисциплину названу психијатрија, и на њенуربу човеку бољесте свет емоција предстоје на новој медицинску човеја у анатомији човека, као и нада да кре принуда-промена у понашању људи. Томе су допринела и нова разјашњавајући у разумевању физиолошких процеса и откриће у анатомији човека, као и нада да кре принуда-више кроз истраживања човеков физичких симптома и третманом физичких симптома разумевањем и третманом физичких симптома разумевањем и на новој медицинској бољесте свет емоција предстоје на новојربу човеку и на њену разјашњавајући психијатрија, и на дисциплину названу психијатрија. Према Систему Фројди, либидо (секс) и психологији. Човеја романтика човека. Због Фројдових агресија су главни покретачи човека (и даље) није енормност утицаја, романтика човеја (и даље) није могла да буде предмет интензивнијег изучавања. Тек је снажна разној биохемије, молекуларне биологије и функције, од средине XX века, омогућио разумевање промена у физиологији човеков. Ансложних процеса функциониса мозга, градећи потпуноново светло и на физиологији човеков. У основ човеја дајашњем: романтика човеја јесте неодтако разумевање промена у тој заједници у основ човеја дајашњем: романтика човеја јесте неодговорна емоција, и то у садржај сигнатних молекула у неравнотежа, и то у садржај сигнатних молекула у основ човеја кажњене емоције и осећања кое раја. Романтику интензитету емоција и осећања: што је јача човеја, то Психозом проћеку снагу човеков занеса према рији" у стомаку. Свесно, ово осећање је предрано. дисање, дезконцентрисност, клепетање колена, "лептизнати: зноје брадова, убрзано кајање срца, отежано поједини мма бедовма мозга.

Симптоми "човеков болести" су свима добро по-нетке, стихове, попуке...; друтим речима на све оно човеков "природа" и то у садржај сигнатних молекула

Поіднотставлене структурне формуле молекул лубви, яко основни и взаємосвязані, неуроформовима, а оне са системским делованем путем крвлимма, и оне са системским деловањем путем крвлимма, и оне са системским деловањем путем крвлимма, и оне са системским деловањ

ферме, које се не повезују са хемијом мрљаве. Када једнимпулсе, на пример снр, кобалте, јаторе и заљанско таном, фенилетиламином су готате и неке друте наљуди да моје знаљна колјина завршм у мозу. Устљем енамма тастоњтестнинот трактаа, спрема ("дан заљубљених") мрдм доњіаіу бомбнере од и светно. На прваник Светот Трнфуна\ Валентина колди. Једене поколаде анин да се осећамо добро, јак знат када је нађено да се у вној колјини налазе у покладу. Да ли је ово само тест мрљаве, или да својих вопених. Да ли је ово само тест мрљаве да ћете да се подвини знаіу таіну поколаде? Не мислите да ћете да се заљубите јколико уносте у отрајнзам много поколаде мозак производи више фенилетиламина, што за поношњу и ноћ.

Почетна привлачност према некој особи чини да

ФЕНИЛЕТИЛАМИН: КЛИНДОН МРЉАВИ

се ствари, ако је

Повећан ниво серотонина стимулативно делује на лекуп у регулатиној нашег пикулса славања и будности. Жмотиа: сиудно подиашу, серотонин је важан молекул (еипфиаз), која регулише пикулс светлост-тама код одраслих. У мозгу серотонин настаје у пинеалној жлезди повећа, или и емоционалних траума.

Да будете са најмилима током нихових одрастања од ког настаје серотонин у тестису, где ферментишу у ниво серотонина повећа до бр-ва. Изгледа да повећан ниво серотонина повећа кр-дотиима, где ферстаје у пробесима згрушавања кр-ајне количине серотонина могу да се нађу и у тром-повећаћем ако одбрамбена реакција отиаиама. Зна-загрођених особа, или и осећај мучнине и натон за осећај "пентрпиа у стомаку" и гуиотак апетита код метаболизма амиокиселине триптофан. Отуда и ном тракту, где регулише перистаитику, ако проиавод Највећи део серотонина настаје у тастроинтестинал-ној ћелији, у мозгу отговорном за емоције. Ваљане осећаиа гуђаве у нама. Утиаиом делује у пим-осећај загрођеност у некота или нешто, ти. за раз-ма у опасним ситуацима.

СЕРОТОНИН: МОЛЕКУЛ ГУЂАВЕ СРЕЋЕ

Серотонин је неуротрансмитер отговоран за загађен за "ворм се или ђежи" отговор нервног систе-стресне ситуације из спомашре средине: адреналин је правовремен и сврсисходан отговор отаиама на иаиина, осећај гладе. Од непоиерИвог је значаја за (и кортизола) је, прадоксално и супротно од норадре-(хормиаиија) стресса резултат деловаиа адреналина води и до зноја на руку и слешна уста. У стаиама отаиама је страс, који осиобађа адреналин, што до-не, када нас пиваде нека осода миниијаиин отговор адреналина или струјн ваши тегом. Вероваи или особом сте поаие ђже да ваи куда, то је зрог наваде претходник адреналина. Када при систему са водеиом ниа, а он сам је

Норадреналин настаје из допамина, у он је главни) заједно дегуја осећамо праву "хемију" гуђаваи.

Адреналин, допамин и норадре-стимулативни симпатички нервни систем од стране нервних енергија и одиачног расположења, захваћајући и мозгу загрођених особа повећава доживаји радо-пресјом. Висок ниво норепинефрина који наиазимо у крви и смањен садржај у мозгу се повезује са де-прес ија, ако ниа стресу, серотонин је важан мо-жиотиа: сиадно подиашу, серотонин је ћелија на-(епифиза), која реиулише циклус светлост-тама код

У мозгу серотонин настаје у пинеалној жлезди повећа, или и емоционалних траума.

Да будете са најмилима током инхових одрастања од ва. Изгледа да повећан ниво серотонина повећа кр-дотиима, где ферментишу у пробесима згрушавања кр-ајне количине серотонина могу да се нађу и у тром-повећаћем ако одбрамбена реакција отиаиама. Зна-загрођених особа, или и осећај мучнине и натон за осећај "пентрпиа у стомаку" и гуиотак апетита код метаболизма амиокиселине триптофан. Отуда и ном тракту, где регулише перистаитику, ако проиавод Највећи део серотонина настаје у гастроинтестинал-ној ћелији мозга одговорном за емоције. Ваљане осећаиа гуђаве у нама. Утиаиом делује у пим-осећај загрођеност у некота или нешто, ти. за раз-ма у опасним ситуацима.

СЕРОТОНИН: МОЛЕКУЛ ГУЂАВЕ СРЕЋЕ

Серотонин је неуротрансмитер отговоран за загађен за "ворм се или ђежи" отговор нервног систе-стресне ситуације из спомашре средине: адреналин је правовремен и сврсисходан отговор отаиама на иаиина, осећај гладе. Од непоиерИвог је значаја за (и кортизола) је, прадоксално и супротно од норадре-(хормиаиија) стресса резултат деловаиа адреналина води и до зноја на руку и сшпена уста. У стаиама отаиама је страс, који осиобађа адреналин, што до-не, када нас пиваде нека осода миниијаиин отговор адреналина или струјн ваши тегом. Вероваи или особом сте поаие ђже да ваи куда, то је зрог наваде претходник адреналина. Када при систему са водеиом ниа, а он сам је допамин) заједно делује осећамо праву "хемију" гуђаваи.

Норадреналин настаје из допамина, а он сам је допамин и норадре-стимулативни симпатички нервни систем од стране норадреналина. Пиема томе, једино када сиа три наве-ајне количине и одиачног расположења, захваћајући и мозгу загрођених особа повећава доживаји радо-пресјом. Висок ниво норепинефрина који наиазимо у крви и смањен садржај у мозгу се повезује са де-стимулативни симпатички нервни систем, или и не-

Слика 1. Структурне формуле молекула "загађеност": 1 – фенилетиламин, 2 – допамин, 3 – норадреналин, 4 – адреналин и 5 – серотонин.

ти). Мозак је током отаиама, посебно код жена, пре-изуђене и помажући мишкаиима да одрже ефек-нитимност и повезаност, повећавајући сексуалиа осиобађа мале количине серотонина у мозгу. Отстиони помаже пароиама да остаре будући осећај

2. Дуоденин нашшмак, кода је то недопређених.

На особу или само мисиимо на ну.

Сматра са да се место дешава и када ђуто тиедимо воде-до осиобађа мале количине серотонина у мозгу. ниа/ном ђукајете. Исто важи и за итру са кајним ја-кајем месцу. Довољно је да некол заиршите, или да се с

1. Иако ти је додатни, у ђиио кој е ефекс и на ђиио ниме је то "заслужио":

оиа "кајтин" статус међу молекулима ђуваи. Ево на друштвеним мрежама и ђиотоиама, отстиони до-ма задавоиог каракетра на телевизији, ако и текстовима ово пеитиде.

Посиедних година, пре свега захваћајући емисија-

ваозпесиске (тестиси) зоне, богате рецепторима за шина шкоћка код жена и обрадиие код мушкараца) и су ниитта друто до отстотинске (трудн, усне, нос и ајда доиде (таламус). Етоиене зоне на теу ловека ни-мозгу где се примају и обрађују информације путем сок садржај рецептора за отстотини нађен је у деиу пентрати ово хормона много веће у теу жена. Ви-ш ленску ексцесију отстотина, не ајде да је кон-тимности. С обзиром да естоиен хормони стимули-осећајне слудности, мрпа и стадиности, или и ни-код пратера кој су дуги ниа тодина у веом раје ионашане ловека. У основи, нихов повећан садржај пеони показују разиилите ефекте на соино-сексуално тоже уоте у отстанаку, пеитиди отстотини и вазоп-

Иако мај сиане структуре (слика 2) и фиано-

ОСОТОИИ И ВАЗОПЕСИИ: МОЛЕКУЛИ ВЕРНОСТИ

да неговог осиобађање регулише и кини пратсак.

моћан вазоконстриктор (сужава крвне судове), тако мјеиним производима, воћу и вину. Серотонин је и на и допамина: отуда, поеиеда, "ексцесно одређи-вање". И серотонина има у докоиади, ако и у мјеку и стимулативни симпатички нервни систем од стране пин енергија и одиачног расположења, захваћајући и мозгу загрођених брже опада него садржај фенилетиламин-стм". На (не)сретећу, садржај серотонина у мозгу што су такође уоиачајени симптоми "ређавање доте-способност да се усредсредимо на оно што радимо, нервни систем, изазивајући наиетост неправ, или и не-

трудно только несбыванні, нежадя и на свойі штєту. Но-на", нікако нійе було ідсно како іе могуйе да су некі поізмма, пототоры пристапмма теорійе "сєбмнот тє-ка". Поебйаеа ебмкоружмносшь. Еволуционим оно-стаиеом трикту.

6. Поебйаеа ебмкоружмносшь. Еволуционим оно-скотоиина и ребиептора за оскотоиин іе найен у диле-койе, он подобмшава ваирне: ребатаиено висок садржі-смаиуйуйи иино кортизола, као и кривн пиитсах. Та-ка кой анксозиносстн и бедпесніе. Дайе, оксотоиин на, отаваруйи могйиносст иегоиов кобмшбена као ле-кой неких жена поебзана са виским иивоом оксотоин-Остражавна показуйі да іе пост-подобрйна бедпесніа жедуйу.

5. Прибодни аиим-дедбесаиим: осолобйа од сшресс. пиа може да нас осолододи од лиаводоие и трева у анти-зададенским сводстамма, подебйан иино оксито-подебрене у ауде. Неебодатно, захаваруйи сводим осебйане одтимизма, подебаваруйи самоодуедане и зиду друштвене бадніере и стидиносст, назаваруйи Оксотоиин умнотоме одашшава да неки иудиа предва-жедуйу.

4. Смииуйе сомиійане сшрахоее, инхибмиіе и бол. миеза могу да пренесу оксотоиин сводим бедама.

(жиотокіи) удраво знаиа "иак подобрй". Майе преко подрй (као предарт Ріісіи). Ре оксотоиин на трком неча се овай хором некада и кодносш да одаша по-контрадкиіе матедиіе, што омогуйава подобрй, због бедйане иивоа оксотоиина стимуйише иактаиуйі, као и требда шедше подо за додатоиом иажком и некоиошу.

3. Поможе жеиама да буду мйіе. Знаиніе по-пиаваен оксотоиином, аиме може да се обйасни по-

Слика 2. Структурне формуле молекула "праве друваи": нонапептида (1) оксотоиина и (2) вазопресина.

Да закруаим, све іе хемійа, иак и друваі! Кадра Вам слеедйи пут будуи говоои о "неевоватоі хемійі" коіу осебйаіу према некоме, можете ми реіи да ниховое "беседиу пиовиду миниим мором друваи".

"Оксотоиин, коіи скупа са вазопресином обезебйуйе теау пеитидиот хоромона. Оваі пеитидиин хоромон оно іе знаваіним іедиинемма сумпора, посебно за прву сни-вом натрадом из хемійе за своі рад на днохемійски коиико пронедната іе моноташно. Венсан д Виио (Vincent du Vigneaud) іе натрадан 1955. године Ноебело-неких вреста мишева. Натеда да іе права друва "заши-сана у кривн оба пратнера". Сексуаина моноташніа на-не іе ретка іоіава: од око 4000 вреста сисара, света не-на у теиу поеезуйе се са моноташним поиашаием, су-да према реезултатима есперимената на мужіатима током нитмиот однеса. Стаоиаи садржі вазопресин-жена. Концентрациіа вазопресина іе на свом вихуниу одребуйе скиоиост мушкарата према одребеном тиу моиа пребмет іе несташна у струдноі іаиостн) коіи вазопресин іедан од молекула (евентуаина улога фебо-пуиснаиост и атресиано поиашане. Сматра се и да іе паживаот оиа. Мебутим, вазопресин потенцира и им-рата, помажуйи претарване "Казаиове" у бриженот и Знатно вишн нино вазопресина надан іе у тепу мушка-ра, веђ и разноіу осебйаіа ведносш воиеноі особи. песе коіи воде не само трайніем везаиаиу за партне-тодиином, дуаене вазопресина у мозу подстиае про-иедуйиаване воде путем убрета. Сиаино као и са оксо-ніх самих.

Као антидиуретички хором, вазопресин смаиуйе

рвсин.

пиа аетаеоскот пеесаиини, некада и на своіу штету. Но-

Захваалница: Захваалност дуујем Драгану Тривићу коіа іе предложила ову тему за предавање на Академс-

ше".

Захваалница: Захваалност дуујем Драгану Тривићу

ваіа истражавна повезуіу оксотоиин са осебйанем емоатніе: друди коіима іе убрзатан оксотоиин биио су много спремниіи да деле новац са другима, него они

ЛИТЕРАТУРА

1. Bartels A, Zeki S. The neural correlates of maternal and romantic love. NeuroImage. 2004; 21(3):1155-66.
2. Bartels A, Zeki S. The neural basis of romantic love. Neuroreport. 2000; 11(17):3829-34.
3. Broadfoot MV. High on Fidelity. American Scientist. 2002; 90(3):1.
4. Caldwell HK, Lee HJ, Macbeth AH, Young WS 3rd. Vasopressin: behavioral roles of an "original" neuropeptide. Prog Neurobiol. 2008; 84(1):1-24.
5. Carter CS, SW Porges. The biochemistry of love: an oxytocin hypothesis. EMBO Rep. 2013; 14(1): 12-16.
6. Cruciger MP. How little we know… or do we? The physiology of romantic love. Lecture notes: http://www.chilit.org/Papers%20by%20author/Cruciger%20-%20Romantic%20Love.htm
7. Depoung CG. The neuromodulator of exploration: A unifying theory of the role of dopamine in personality. front Hum Neurosci. 2013; 7:762.
8. Dunbar R. The Science of Love. 2012. Wiley. ISBN-13: 978-1118397657
9. Fisher H. Why We Love: The Nature and Chemistry of Romantic Love. 2004; Henry Holt. ISBN 0-8050-7796-0
10. http://io9.com/592506/10-reasons-why-oxytocin-is-the-most-amazing-molecule-in-the-world
11. Meyers S. Use of neurotransmitter precursors for treatment of depression. Altern Med Rev. 2000; 5(1):64-71.
12. Pinto MMM. Chemistry of Love and Sex. 2012; Wiley-VCH. ISBN: 978-3-90639-068-0
13. Reynaud M, Karila L, Blecha L, Benyamina A. Is love passion an addictive disorder? Am J Drug Alcohol Abuse. 2010; 36(5):261-7.
14. Zak PJ, Stanton AA, Ahmadi S. Oxytocin increases generosity in humans. PLoS One. 2007; 2(11):e1128.

Abstract

MOLECULES OF LOVE

Milan R. NIKOLIĆ, Department of Biochemistry, Faculty of Chemistry, University of Belgrade

Do molecules of love really exist? Love is a very complex set of biochemical interactions among different signalling molecules in human brain. The most significant are the following: phenylethylamine, dopamine, norepinephrine, serotonin, oxytocin and vasopressin. Simultaneous changes in their levels during the different stages of the romantic relationship between partners, not only cause well-known symptoms of love madness but also prepare the body and soul of men for the parental role. Resistance to the power of love is not a sign of the strength, but rather that of the weakness.

Светозар Р. НИКЕТИЋ, Центар за хемију (НХТМ) и Хемијски факултет Универзитета у Београду, Београд

МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛИРАЊЕ

тодину – како се навели у саопштењу – „за развој вишеразмерних модела за комплексне хемијске системе“. Детаљније образложење, за мање упућене или и за ширу јавност, под поетски надахнутим насловом „Комплиц, Мајкл Левит и Арије Вршеш су 1970-тих година поставили основе модерних [компјутерских] прорачуна који се примењују за разумевање и предвиђање хемијских процеса. Компјутерски модели који описују стварност постали су данас кључни за многа достигућа остварена у хемији.

Рад Карплуса, Левита и Вршеша је завантаран у томе што су они успели да уграде да Нутонова класична физика функционише руку-под-руку са фундаментално различитом квантном физиком. Раније су хемичари морали да се определе за једну или за другу. Предност класичне физике је у једноставности израчунавања што омогућава модеирање заиста великих молекула. А њена слабост је немогућност симулирања хемијских реакција, односно стварања и раскидања хемијских веза.

Настављајући дугогодишњу традицију Хемијског института у Београду, у оквиру ове године у чиној сарадњи са Институтом за хемију и технологију макромолекула – Новелом направио сам кратак преглед за широ читалачку публику о неким резултатима у хемији који су својим функционисањем допринели да Карплус, Левит и Вршеш добију Нобелову награду за хемију[1] и нагласили суштинску улогу рачунара у истраживањима у хемији.[2] Овај преглед је у основи сажетак осврта на Молекулско моделирање, шесто поглавље уџбеника Физичка хемија, фундаментално, и перспективно. Тако се он неговог корена, биологије, и перспективе. Такође се приказују шесстепена на неки начин гласе продолжетак (нпр. о Бадјони – оној конформационе анализе (нпр. о Бадјони – оној конформационе анализе[3] ДНК рачунарима,[4] а односно о конформационој анализи[5]) који су се појавили у претходним седамдесетим годинама. Ова ситуација у стварности постали су данас кључни за многа достигућа остварена у хемији.

УВОД

Јесенас, тачније 9. октобра 2013. године, објављено је да су Мартин Карплус, професор са америчког Харварда и Универзитета у Стразбуру (Француска), Мајкл Левит (Michael Levitt) са Медицинског факултета Универзитета у Стенфорду, и Арије Вршеш (Arieh Warshel) са Универзитета Јужне Калифорније у Лос Анђелесу, добили Нобелову награду за хемију за 2013. годину – како се навели у саопштењу – „за развој вишеразмерних модела за комплексне хемијске системе“.[6] ДНК рачунарима,[4] а односно о конформационој анализи[5]) који су се појавили у претходним седамдесетим годинама. О Бадјони – оној конформационе анализе (нпр. о Бадјони – оној конформационе анализе[3] ДНК рачунарима,[4] а односно о конформационој анализи[5]) који су се појавили у претходним седамдесетим годинама на неки начин гласе продолжетак (нпр. о Бадјони – оној конформационе анализе[3] ДНК рачунарима,[4] а односно о конформационој анализи[5]) који су се појавили у претходним седамдесетим годинама.

Настављајући дугогодишњу традицију Хемијског института у Београду, у оквиру ове године у чиној сарадњи са Институтом за хемију и технологију макромолекула – Новелом направио сам кратак преглед за широ читалачку публику о неким резултатима у хемији који су својим функционисањем допринели да Карплус, Левит и Вршеш добију Нобелову награду за хемију[1] и нагласили суштинску улогу рачунара у истраживањима у хемији.[2] Овај преглед је у основи сажетак осврта на Молекулско моделирање, шесто поглавље уџбеника Физичка хемија, фундаментално, и перспективно. Тако се он неговог корена, биологије, и перспективе. Такође се продужује шесстепена на неки начин гласе продолжетак (нпр. о Бадјони – оној конформационе анализе (нпр. о Бадјони – оној конформационе анализе[3] ДНК рачунарима,[4] а односно о конформационој анализи[5]) који су се појавили у претходним седамдесетим годинама.

[a] Сазнајте са http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/press.html (реч у уџбеничком заградама и превод: СРН).

той обдастьі, остаўшы скорбо двае дзеленні дуту і пупо-скот прогрэма профэсора Лифсона, да ён кажніе, у мс-дынатонны ідынчэна прыкупрыо помоўу комп'ютер-ва мскуства у обдастьі молекулскот модэлірываньа коорде традыцыональных ескспэрыментаў."

Послэ овот пратта, кой као да іе потежао из пера ніе постаў только реалістычне да прецвыўдіў жна ўлатка за хемчарра као и епрувета. Смуўла-ном фунжок. Данас іе комп'ютер подіедынко ва-ўпра се [комп'ютерскі] мане захтевном кўласка-с медкамментом. Остатак ведикот протенна смў-пмрнчм протенном у отрпанэму, комп'ютер изво-прнмер, у смуўлатніи сўлаўна медкамментта са кое корнсте и кўласнчу и квантну фунжку. На зеіи су оно кійоўе из оба света и развили методе Овотодышрн Нобеловн лауреатм у хемніи пре-ли остарынти само за мале молекуле.

Ствараўем окоўнокстн аўтор овот текста іе своіа пр-ва и скуства у обдастм молекулскот моделірываньа с пе-ніо фосоное идеіе и методолотіў молекулскот модели-су у ўнои мерн остарынли и знаранно ўнадведнли Ли-шелнных ўака и следенжка с разнх страна света, кой-ндрнекта нарли, и іом некоілнна мсто такоо ус-глазк сарадник профэсор Кардлус іесу, а са нмма, на Вофшеп (доктоўрат) и Леанг („пост-док"), и нетов Лифсон ніе дожмео ово прнзнаньа, али нетовн ўарли: Field],[6-12] о чему ўе ўмтн выше реки нмже). Профэсор тніе под енглескм ажонмом СЕЕ [= Consistent Force (такозваньа методе коензстентнот пола сила – позна-от центрадних правда у молекулском моделірываньу трнда, ерўдите, вазнонарь, а пре света, творда іедиот у Реховорту, вресот нарлнжка, „мајстора" за алтебру ма-ра Лифсона (Shneior Lіfson), са Вајімановот нпстнтута пом Нобеловн нарўде, истнали іедно мне – профэсо-тодинх язіва, нтервіўа и пнсанх сапштеньа пово-смсну и трећи). Наамне, сен онн су, у мноштву прн-падала два од помечта трн Нобеловда (а у язвесном ле молекулскот моделірываньа кой су неспсебно прн-од крајіа 1960-тих годна) са следенитмма іедне шко-мот пореква разовіа метода молекулскот моделірыва: него и по песпонаднмм везама (кой трајі скоро од са-знаньа за вншеделеніскм контнунрван и предан рад, такоо іе ндобр аутора овот текста резултат блнскостн не само по пробдемаднли и нстражнваркмм нитересмма, модели и многоо фединитніа. Ако бнсмо се отрванали стоіи и многоо фединитніа. Ако бнсмо се отрванали пнсано на разлнрнтнм нивомма, па самнм тнм по-случаі и с молекулскмм моделірнеем, о коме іе многоо пнсанну, іедноезначну и іедноставну фединитніў. То іе бнла посвећена іедна октобрска емнсіа у тнкнусу „Солдрнс" II проторама Радио Беотрада. Све што іе том прнлнком реено о молекулском моделірнраньу (па и нешто внше) садржано іе и у овом текстту.

ШТА ІЕ МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛІРАЊЕ?

Нма термнна у наулн за кое ніе лако дати пре-цнзну, іедноезначну и іедноставну фединитніў. То іе случаі и с молекулскмм моделірнеем, о коме іе многоо пнсано на разлнрнтнм нивомма, па самнм тнм по-стоіи и многоо фединитніа. Ако бнсмо се отрванали само на стражнварке федатностм у коіма прнмена комп'ютерскх прнступа и математнчкх метода нма самоо на стражнварке федатностм у коіма прнмена фединитніа – најсавременіи у овоі катеторіи – названи по ниховом конструктору Драј-дниту (André Dreidіng), профэсору Унивезитета у Прнхху], до сложенх нтерактнвнх комп'ютерскм тенезнсанх стереографскх модела, или холограма, или скулптура молекула лазерскм назрађенх у времту. Комп'ютерскм пронаалан у овоі фединитніи обухва-тај шнрок спектар прнступа од ад initio квантно-ме-хаককकककककक

Слика 1: Неки примери у еволуцији модела молекула воде. С лева на десно: Платонова многостранска модел воде (400 п.н.е.); Далтонова модел молекула воде (1802); геометрија равнашњег 5-центарског модела H_2O; мапа електростатског потенцијала молекула H_2O у молекулској равни са позитивним (плаво) и негативним (црвено) регионима.

два миленијума да Џон Далтон[22-24] (John Dalton) оборила војег оптужбе. Требало је да прође још више од пола века да дође до данашњег модела C_{2V} симетрије, могла је разумеју до данашњег модела С$_{2V}$ симетрије, могла је да буде дајеко више у естетском и контемплативном смислу, или наравно нешта у потпуду прпроде слика 1). Ово је ово први хемијски модел који је, међутим, на примјер, била означена као мисаоно елементарно савршено полиедарске форме, тон[21,21] је отишао још један корак даље, па је овим својства свим материјалним супстанцама. А Платта (земља, вода, ваздух и ватра), иако комбинације раја у подпјажно у исто време мало идеја о четири елемента још нису били модели. Међутим, Емпедокле[19-20] је би да им приписиш било какав облик или особине. То би могућношћу да их експериментално испитаје, молда су ова прва атомистичка спекулација а камо мистично творење, невиђрен и недоказив, тако том из Абдере.[18] За ову двојицу атома су били чисте квантних тонова зајелно са својим учеником Демокритом у предсократској време (ті. пре средње XX века) или просто да примитиво да су модели били непуствин и ваљда супстанца, и да је ту идеји усавршио током читаве недељу шестиду из које се састојин свака материја (по неколико стотина хиљада атома, и више) молекулске структуре у пиру истраживања материје, нихове улоге у високо сложеним физичким процесима. За овакво молекулско моделирање се историјски окружеником и компликоваником биолошким проблемима разоја може с разлогом тврдити од 1960-тих година 20. века. Сматра се, нарочито у круговима практичара биологије – од времена када су браћа Watson и у вољој мери при-стали и закључним средствима свих профила. Управо постали комерцијално доступни и у вољој мери при-ступачни у закључним средствима свих профила. Управо је доступност комјутера омогућила да се практично испробају све оне идеје, хипотезе и теорије, настале у првој половини XX века, које су указивале на могућност моделирања него сличан, итд. (види Слику 1). Сам поступак H-O-H (како он се данас писало), па затим да ма у молекули води (H_2O), па да се модел усавршим и 1802. године поново „откриће“ атоме, да их означи (не ситуацији) симболима кружног облика, и да поред та-ја један симболизовано кисеоник, а другу, водоник.

Чекајући се још пола века да Канниццаро[25,26] (Stanislazzo) 1860. године утврди коректан однос ато-ма у молекули води (H_2O), па да се модел усавршим и потврђује опште научне истине у науци. Ово је свакако високо ефикасно и ваљано у комплексним проблемима хемијске структуре и функције, и више) молекулске структуре у пиру истраживања материје, нихове улоге у високо сложеним физичким процесима. За овакво моделирање се историјски окружеником и компликоваником биолошким проблеми-разоја молекулског моделирања јесте оријентација атомистичке. Међутим, оно што дефинише континуитет у потврђује опште научне истине током целе своје ис-

Пример еволуције модела за молекулу H_2O само

КРАТКА ИСТОРИЈА МОЛЕКУЛСКОГ МОДЕЛИРАЊА

Земљи изузетно важног молекула.

модела овог малог или за све хемијске процесе на ваша која, између осталог, подпомоса усавршавању рада фундамента, и данас је предмет многих проучава-молекули воде, због свог значаја у молекулском моделирању воде (400 п.н.е.). или је у хемији одређивање није лишеним него сличним, итд. (види Слику 1). Сам поступак H-O-H (како он се данас писало), па затим да се модел усавршим и у молекулу воде (H_2O), па да се модел усавршим и (Stanislazzo) 1860. године утврди коректан однос атома у молекули воде (H_2O), па да се модел усавршим и потврђује опште научне истине у науци. Ово је свакако високо ефикасно и ваљано у комплексним проблемима хемијске структуре и функције, и више) молекулске структуре у пиру истраживања материје, нихове улоге у високо сложеним физичким процесима. За овакво моделирање се историјски окружеником и компликоваником биолошким проблеми-разоја молекулског моделирања јесте оријентација атомистичке. Међутим, оно што дефинише континуитет у потврђује опште научне истине током целе своје ис-

Пример еволуције модела за молекулу H_2O само

КРАТКА ИСТОРИЈА МОЛЕКУЛСКОГ МОДЕЛИРАЊА

Земљи изузетно важног молекула.

ника XX века: горе поменутог Шенера Лифсона из мог лонтрата у лабораторијама три истакнута научника молекулског моделирања, да сеควен ово делатност да пружи разлоге више у естетском и контемплативном смислу, или наравно нешта у потпуду прпроде слика 1). Ово је ово први хемијски модел који је, међутим, на примјер, била означена као мисаоно елементарно савршено полиедарске форме, тон[21,21] је отишао још један корак даље, па је овим својства свим материјалним супстанцама. А Платта (земља, вода, ваздух и ватра), иако комбинације раја у подпјажно у исто време мало идеја о четири елемента још нису били модели. Међутим, Емпедокле[19-20] је би да им приписиш било какав облик или особине. То би могућношћу да их експериментално испитаје, молда су ова прва атомистичка спекулација а камо мистично творење, невиђрен и недоказив, тако том из Абдере.[18] За ову двојицу атома су били чисте квантних тонова заједно са својим учеником Демокритом у предсократској време (ті. пре средње XX века) или просто да примитиво да су модели били непуствин и ваљда супстанца, и да је ту идеји усавршио током читаве недељу шестиду из које се састојин свака материја (по неколико стотина хиљада атома, и више) молекулске структуре у пиру истраживања материје, нихове улоге у високо сложеним физичким процесима. За овакво моделирање се историјски окружеником и компликоваником биолошким проблеми-разоја молекулског моделирања јесте оријентација атомистичке. Међутим, оно што дефинише континуитет у потврђује опште научне истине током целе своје ис-

Пример еволуције модела за молекулу H_2O само

скім програмам за гномолекулярко модэлюванне, а молекулы СНАЯММ су постаўлены ўе ўисто рефеpентны комп'ютерпадтрымкі знаўнных нстражнвага. АМВЕЯ и подібнако знаўнных нстражнвага. АМВЕЯ и проблеме у медыцынскоі хемыі, кяо и іош неколько спустрат и протеин-лигаНд нтеракцыі, и на друге трамом АМВЕЯ[39] и прмеменом на модэлюванне ензимме, Петера Колмана (Peter Kollman) за прогскі дынамікс, Пітера Колмана (Peter Kollman) за прогскі дынамікс, Пітера Колмана (Peter Kollman) и на Дженнифер Ван (Jennifer Wang) с кясныіе Унверзитета Цорпіе (Атенс, Цорпіра), коіи су, незавнсно іедан од другог, гдео-тих тодина, заугоеци контнунвана и опсежна нстражнвана молекулскот моделирана на принципиме кояи се данас етмкетраіу назанов „молекулска механика“, и оформили своіе школе из коіих су дрвежно нидпректно пронстекли многи следбеники. Подстакнуто мпресивним развоіем компіутерских технологіі, математичких метода , кяо и теоретіске хемиіе, молекулско моделиране се до данас развило до недрмо је разне варіанте методе поенате под аркоимном QM/MM (где прва два слова стоіе за квантну, а друга два за класичну механику).

Но домен примене молекулскот моделирана није, нарано, остао у истим окврима кяо у почетном периоду. Од моделирана индивидуалних молекула без разматрана нихових окружена (тзв. моделирана „у вакууму“) прелазило се на укрупнане медіума на разним нивоима сложеност (од хомогене подрединица средине, до експлицитног моделирана молекулма растварача), чиме се повећало не само обіо истражива да коіе је требало укрупнити у модел, него іе и сам молекул постаіао сложеніі због нових типова међумолекулских интеракціі коіе је требало узети у обзир. Разуме се да је стално померање граница у погледу ефикасности компіутерских алгоритета и перформанси омогућавало проширавање све већих молекулских система, односно временских све дужих молекулске динамике путања – трајекторіі.

Велики квантитаван скок у молекулском моделирану треба очекивати, чини нам се, у развоіу таскозваних вишеразмерних (енгл. „multiscale“) метода[42] коіе треба да обухвате неуопходно већи опсег како на временскоі, тако и на просторноі скали, у односу на оні коіи іе дефинисан у свим познатим посу стоіећим методама моделирана. Овај правац развоа отворене могућности, између осталог за проширавање утицаіа система на іедном ступну временске или просторне скале, на неговоа поштане на неком другом (пре свега, суседном) ступну исте скале. За већину питана у оноі области данас іош увек нема поуздане или исказане одговора.

ПРЕТПОСТАВКЕ ЗА НАСТАНАК И РАЗВОЈ МОЛЕКУЛСКОГ МОДЕЛИРАЊА

Готово да нема истражнвана у хемиіи коіе није базирано на свим претходним сазнањима у области квантне механике. То су, на првом месту, експерименталниа коіоі припада. То су и разлоги (правилност, генералиазоваана и свеобухватни карактер) коіи се из них изводе. Иако за поонре молекулскот моделирана, у односу на ранијеі модели, принципи, теоріе) коіи се из них изводе. Иако за поонре молекулскот моделирана, у односу на претходне моделе, није било тривијално да трансфераіу енергіе, водећи

цеолит окиф – после чега је овај новац потпао на усмрз–26 година формулисао нен лоткик доследан и на Ервина Шредингера[53] (Erwin Schrödinger), који је да) морало је да сагреа на разној квантне механике – Објашњене за примјеру кожезје (ван дер Валсових ске силе кесанје назове ван дер Валсовим именом. Болцману[52] (Ludwig Boltzmann) да ове међумолекулидер Waals) квантитативно описао и дао могућност текству), да би та ван дер Валс[51] (Johannes Diderik van де Лапласе; кога ђемо поново срести доцније у овом Нутн[49] (Isaac Newton), или Лаплас[50] (Pierre-Simon пред себе на столу? Знаној разумевања овог феномена користи Н^{2}О остаје заједно у чаши воде који имамо исмеђу истопних молекула: зашто, на примјер, молекондензационе силе, је кожезје – примјетна сила них проузрокава. Типична примјер, који потиче из савномени који су и у прошлости били предмет дуготрајтоа је помогло да се у новом светлу сагледају многи електрични, механички и термички основне материје. То је ствар до тада недовољно разумљиво оптичке, ветрава разне до Вол), и друге открили да квантизација енергије рас- ма XX века су Макс Планк[45] (Max Planck), а убрзо по- спе него Аинштајн[46] (Albert Einstein), Бор[47] (Niels Бор), и друге открили да квантизација енергије рас- ставе за идеалне гасове, PV=RT), су запажајуће слика- ни данашњим изразима за Ленард-Јонсов[54] (John Edward Lennard-Jones) или тзв. „6-12“ потенцијал: $E(r) = -A/r^{6}+B/r^{12}$, који представља једну од основних функција у савременом молекулском моделирању (Слика 2).

Поред поменутих достигућа у потрагу теоријског разумевања феномена везаних за молекуле, нарочито важну улогу о структури из анализе скода новом опажању". Две друге методе су у том погледу биле у „невидљивим молекулима, недоступним директно посматрању. Ове се базирају на проучавању последица интеракције материје (молекула) са електромагнетним зрачењем или са спољашњим електростатским пољем, и на индуктивним ефектима електрона у атомима и молекулима. Ова метода се у основи заснива на чињеници да се Шредингерова једначина ($H\Psi=E\Psi$) „реши“, што значи – практично добијамо у облику таласних функција електрона у атому или молекулу, што се може се јављају између атома или молекула, што је имала највећи утицај на разумевање природе спектралних линија (испрано!) представе као резултат истовременог деловања две врсте сила: привлачних и одбојних, при чему је изгледало да су и једне и друге обухваћене потпуно новом природу било је да се међумолекулске интеракције могу описати у приближној теорији кванту механичке основу молекулских модела, при чему се јављају између атома или молекула, што је имала највећи утицај на разумевање природе спектра (Слика 2).

Молекулска квантна механика. У правом тренутку се јављају на самом почетку XX века, нпр.: $E(r) = -A/r_{m}+B/r_{m}$ (где је први члан с десне стране означавао привлачну, а други одбојну интеракцију, а оба се поклапају као ван дер Валсове кореније у једначини $E(r) = -A/r^{6}+B/r^{12}$, који представља једну од основних Едвард Ленард-Јонс) или тзв. „6-12“ потенцијал: ни данашњим изразима за Ленард-Јонсов[54] (John Edward Lennard-Jones), у другим отворили да квантизација енергије расте за идеалне гасове, PV=RT), су запажајуће слика- ма XX века су Макс Планк[45] (Max Planck), а убрзо по- номени који су и у прошлости били предмет дуготрајних проучавања. Типичан примјер, који потиче из кванте механике, механички и термички основне материје. То је помогло да се у новом светлу сагледају многи електрични, механички и термички основне материје. Ова ствар до тада недовољно разумљиво оптичке, ветрава разне до тада недовољно разумљиво оптичке, Бор), и друге открили да квантизација енергије рас- те него Аинштајн[46] (Albert Einstein), Бор[47] (Niels ни на науке, као што су били Рубер Бошковић,[48] Исак одавно су уочили и нашле се позадини извјесни умо- пред себе на столу? Знаној разумевања овог феномена или Н^{2}О остаје заједно у чаши воде који имамо исмеђу истопних молекула: зашто, на примјер, молекондензационе силе, је кожезје – примјетна сила них проучавања. Типичан примјер, који потиче из кванте механике, механички и термички основне материје. То је помогло да се у новом светлу сагледају многи електрични, механички и термички основне материје. Ова ствар до тада недовољно разумљиво оптичке, ветрава разне до тада недовољно разумљиво оптичке, Бор), и друге открили да квантизација енергије рас- те него Аинштајн[46] (Albert Einstein), Бор[47] (Niels ни на науке, као што су били Рубер Бошковић,[48] Исак одавно су уочили и нашле се позадини извјесни умо- пред себе на столу? Знаној разумевања овог феномена или Н^{2}О остаје заједно у чаши воде који имамо исмеђу истопних молекула: зашто, на примјер, молекондензационе силе, је кожезје – примјетна сила них проучавања. Типичан примјер, који потиче из кванте механике, механички и термички основне материје. То је помогло да се у новом светлу сагледају многи електрични, механички и термички основне материје. Ова ствар до тада недовољно разумљиво оптичке, ветрава разне до тада недовољно разумљиво оптичке, Бор), и друге открили да квантизација енергије рас- те него Аинштајн[46] (Albert Einstein), Бор[47] (Niels ни на науке, као што су били Рубер Бошковић,[48] Исак одавно су уочили и нашле се позадини извјесни умо- пред себе на столу? Знаној разумевања овог феномена или Н^{2}О остаје заједно у чаши воде који имамо исмеђу истопних молекула: зашто, на примјер, молекондензационе силе, је кожезје – примјетна сила них проучавања. Типичан примјер, који потиче из кванте механике, механички и термички основне материје. То је помогло да се у новом светлу сагледају многи електрични, механички и термички основне материје. Ова ствар до тада недовољно разумљиво оптичке, ветрава разне до тада недовољно разумљиво оптичке, Бор), и друге открили да квантизација енергије рас- те него Аинштајн[46] (Albert Einstein), Бор[47] (Niels ни на науке, као што су били Рубер Бошковић,[48] Исак одавно су уочили и нашле се позадини извјесни умо- пред себе на столу? Знаној разумевања овог феномена

потежно растојање, **R** – параметар јаме.

Слика 2: Разној потенцијалних функција за проучавање међуатомских (или међу-молекулских) интеракција. С лева на десно: Модел тврдих сфера; Модел правоугаоне јаме; Садерлендов[55] (Sutherland) модел; Ленард-Јонсов[54] модел. Означено: **σ** – контактно растојање, **ε** – енергија привлачења, **r***– равнотежно растојање, **R** – параметар јаме.

мічскої мнерэнія фізскіпмічных мэлекулаў, кажа я а ба-
Мэтода дзіе такоўе я прецянне подзатке а стерэохе-
тнія масы атома я нахоўных растоўяна аа ооае ротацыі.
сустэтуцыя атома, пошто іе можнат мнеприіе функ-
ізіеэнзяанных рэзультата ўесто ее корнстя нзотопскя
мпеаіяном сцуаіі, мецуатомскя растоўяна. Зя доўнаіне
е прецянэно нэрацуанатн можнат мнеприіе, а ня нета, у
тніе мэлекулаў. Nз поэпожаія спектраціных лнніяі можа
Hz) на ўзорку у таснон стану, дзе ее ветстрэіў рота-
мнкроталаснаа спектроскопіяа[62] (обоаст 10^{10}–10^{12}
скнх мэтода зя мэлекулско модеіпрнане іе наіўажнніяі
цеперпментанін скіоп іе компнковаў, што прнлнано
на мяле мэлекуле тако ксцаірнаих сустатнцн, а екс-
ліне (кяо „ў ваккуму“), проверя я оптнмзатніяі моде-
ла су вро поўздане. Мецутнм, мэтода іе отраннчена
ўсрецбнеоет скуа стрэктура я то іош без утнціяа око-
електронске дпфракціе даіў сцку конформацноно
ліе модеі доўр нлн не. С обзнрон на то да рэзультата
ўеёнем с експерпментанінм рэзультатом показаіе да
може се смуліпрэт дпфракцнон профнл коіп по-
сцптонтом смнсл: из пнорачна стрэктуре мэлекуда
прнмену у мэлекулском модеіпрнанў, доўше у
електроноа на ўзорку у таснон стану,[61] коіа іе нашта
дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
ліцатніяі рэзультата мэлекулско модеіпрнана.

У дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
зетно прдатоенн за прамэтрэзатніяі, нэроўнене, и ва-
РДВ[60] за леде протенне, пре чему су тн подрнн нзу-
за обтанска и коорднпацнона іедпнмена, нлн даа
пеопоіяі у отпоравраіўе бянке података: даа CSD[59]
орбеўяі крнстане структуре мэлекуда и рэзультата
да, помоўу наіўанет мнкроскопа. Данас се рутнскн
трнане обіекта, некоўнко хнрада пуа ваёет од мэлеку-
ўадпан од, ретнмо, онна коіе даіе прнектно посма-
дпфракціе Х-зрака нксу нншта мане прецнанн и по-
атома око сеоіх равнотежних поэпожаія, рэзультата
просеане вреднстн у однносу на тепмане вопрацціе
нпанн доўнеіна мецуатомска растоўяна прецстаўраіў
у фнзнцн свнх времена! Ўзнмаіўнн у обзнр да на оваі
да іе дпфракціяа Х-зрака іедно од раісіаінніх открнўа
ра. Тако іе по прен пут постаіо мотуће да се „ваде“ и
о прнстопном распоредў атома у крнстанноі структу-
нна фнотрафніяа може реконструкстат нпформацніяа
іа13. тодне,[58] коіп су показаіи да се из дпфракцно-
сина Брет (William Lawrence и William Henry Bragg) из
промптна експерпментаіна потврда од стране она и
ліе анено Луе (Max von Laue) 1912. тодне,[57] и нена
дпфракціе Х-зрака на крнстанним матеріаіима коіе
метода претходно іе Рентеново (Wilhelm Röntgen) от-
крће Х-зрака на, 1895. тодне,[56] затим предвиђане
ідеіноананих рэзультата ўесто се кодрнстн нзотопска
мецаіном сцуаіу, мецуатомска растоўяна. За доўнаіне
се прецнано нзраунатн моженат нмеприіе, а из нета, у
ніе мэлекуда. Nз поэпожаія спектраціних лнніяі можа
Hz) на ўзорку у таснон стану, дзе ее ветстрэіў рота-
мнкроталасна спектроскопіяа[62] (обоаст 10^{10}–10^{12}
скнх мэтода зя мэлекулско модеіпрнане іе наіўажнніяі
ўеёнем с експерпментанінм рэзультатом показаіе да
може се смуліпрэт дпфракціе коіп по-
сцптонтом смнсл: из пнорачна стрэктуре мэлекуда
прнмену у мэлекулском модеіпрнанў, доўше у
електроноа на ўзорку у таснон стану,[61] коіа іе нашта
дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
ліцатніяі рэзультата мэлекулско модеіпрнана.

У дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
зетно прдатоенн за прамэтрэзатніяі, нэроўнене, и ва-
РДВ[60] за леде протенне, пре чему су тн подрнн нзу-
за обтанска и коорднпацнона іедпнмена, нлн даа
пеопоіяі у обторавраіўе бянке података: даа CSD[59]
орбеўяі крнстане структуре мэлекуда и рэзультата
да, помоўу наіўанет мнкроскопа. Данас се рутнскн
трнане обіекта, некоўнко хнрада пуа ваёет од мэлеку-
ўадпан од, ретнмо, онна коіе даіе прнектно посма-
дпфракціе Х-зрака нксу нншта мане прецнанн и по-
атома око сеоіх равнотежних поэпожаія, рэзультата
просеане вреднстн у однносу на тепмане вопрацціе
нпанн доўнеіна мецуатомска растоўяна прецстаўраіў
у фнзнцн свнх времена! Ўзнмаіўнн у обзнр да на оваі
да іе дпфракціяа Х-зрака іедно од раісіаінніх открнўа
ра. Тако іе по прен пут постаіо мотуће да се „ваде“ и
о прнстопном распоредў атома у крнстанноі структу-
нна фнотрафніяа може реконструкстат нпформацніяа
іа13. тодне,[58] коіп су показаіи да се из дпфракціяа
сина Брет (William Lawrence и William Henry Bragg) из
промптна експерпментаіна потврда од стране она и
ліе анено Луе (Max von Laue) 1912. тодне,[57] и нена
дпфракціе Х-зрака на крнстанним матеріаіима коіе
метода претходно іе Рентеново (Wilhelm Röntgen) от-
крће Х-зрака на, 1895. тодне,[56] затим предвиђане
ідеіноананих рэзультата ўесто се кодрнстн нзотопска
мецаіном сцуаіу, мецуатомска растоўяна. За доўнаіне
се прецнано нзраунатн моженат нмеприіе, а из нета, у
ніе мэлекуда. Nз поэпожаія спектраціних лнніяі можа
Hz) на ўзорку у таснон стану, дзе ее ветстрэіў рота-
мнкроталасна спектроскопіяа[62] (обоаст 10^{10}–10^{12}
скнх мэтода зя мэлекулско модеіпрнане іе наіўажнніяі
ўеёнем с експерпментанінм рэзультатом показаіе да
може се смуліпрэт дпфракціе коіп по-
сцптонтом смнсл: из пнорачна стрэктуре мэлекуда
прнмену у мэлекулском модеіпрнанў, доўше у
електроноа на ўзорку у таснон стану,[61] коіа іе нашта
дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
ліцатніяі рэзультата мэлекулско модеіпрнана.

У дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
зетно прдатоенн за прамэтрэзатніяі, нэроўнене, и ва-
РДВ[60] за леде протенне, пре чему су тн подрнн нзу-
за обтанска и коорднпацнона іедпнмена, нлн даа
пеопоіяі у обторавраіўе бянке података: даа CSD[59]
орбеўяі крнстане структуре мэлекуда и рэзультата
да, помоўу наіўанет мнкроскопа. Данас се рутнскн
трнане обіекта, некоўнко хнрада пуа ваёет од мэлеку-
ўадпан од, ретнмо, онна коіе даіе прнектно посма-
дпфракціе Х-зрака нксу нншта мане прецнанн и по-
атома око сеоіх равнотежних поэпожаія, рэзультата
просеане вреднстн у однносу на тепмане вопрацціе
нпанн доўнеіна мецуатомска растоўяна прецстаўраіў
у фнзнцн свнх времена! Ўзнмаіўнн у обзнр да на оваі
да іе дпфракціяа Х-зрака іедно од раісіаінніх открнўа
ра. Тако іе по прен пут постаіо мотуће да се „ваде“ и
о прнстопном распоредў атома у крнстанноі структу-
нна фнотрафніяа може реконструкстат нпформацніяа
іа13. тодне,[58] коіп су показаіи да се из дпфракціяа
сина Брет (William Lawrence и William Henry Bragg) из
промптна експерпментаіна потврда од стране она и
ліе анено Луе (Max von Laue) 1912. тодне,[57] и нена
дпфракціе Х-зрака на крнстанним матеріаіима коіе
метода претходно іе Рентеново (Wilhelm Röntgen) от-
крће Х-зрака на, 1895. тодне,[56] затим предвиђане

Дифракционе методе. Ако не рачунамо Фраун-
хоферово (Joseph von Fraunhofer) откриће дифрак-
ције видљиве светлости, 1820. тодине, применом ових
метода претходило је Рентеново (Wilhelm Röntgen) от-
крће Х-зрака на кристалним материјалима које
је наено Лауе (Max von Laue) 1912. тодине,[57] и нена
дифракције Х-зрака на кристалним материјалима које
се применио назрачатн моженат нмеприіе, а из нета, у
ніе мэлекуда. Nз поэпожаія спектраціних лнніяі можа
Hz) на ўзорку у таснон стану, дзе ее ветстрэіў рота-
мнкроталасна спектроскопіяа[62] (обоаст 10^{10}–10^{12}
скнх мэтода зя мэлекулско модеіпрнане іе наіўажнніяі
ўеёнем с експерпментанінм рэзультатом показаіе да
може се смуліпрэт дпфракціе коіп по-
сцптонтом смнсл: из пнорачна стрэктуре мэлекуда
прнмену у мэлекулском модеіпрнанў, доўше у
електроноа на ўзорку у таснон стану,[61] коіа іе нашта
дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
ліцатніяі рэзультата мэлекулско модеіпрнана.

У дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
зетно прдатоенн за прамэтрэзатніяі, нэроўнене, и ва-
РДВ[60] за леде протенне, пре чему су тн подрнн нзу-
за обтанска и коорднпацнона іедпнмена, нлн даа
пеопоіяі у обторавраіўе бянке података: даа CSD[59]
орбеўяі крнстане структуре мэлекуда и рэзультата
да, помоўу наіўанет мнкроскопа. Данас се рутнскн
трнане обіекта, некоўнко хнрада пуа ваёет од мэлеку-
ўадпан од, ретнмо, онна коіе даіе прнектно посма-
дпфракціе Х-зрака нксу нншта мане прецнанн и по-
атома око сеоіх равнотежних поэпожаія, рэзультата
просеане вреднстн у однносу на тепмане вопрацціе
нпанн доўнеіна мецуатомска растоўяна прецстаўраіў
у фнзнцн свнх времена! Ўзнмаіўнн у обзнр да на оваі
да іе дпфракціяа Х-зрака іедно од раісіаінніх открнўа
ра. Тако іе по прен пут постаіо мотуће да се „ваде“ и
о прнстопном распоредў атома у крнстанноі структу-
нна фнотрафніяа може реконструкстат нпформацніяа
іа13. тодне,[58] коіп су показаіи да се из дпфракціяа
сина Брет (William Lawrence и William Henry Bragg) из
промптна експерпментаіна потврда од стране она и
ліе анено Луе (Max von Laue) 1912. тодне,[57] и нена
дпфракціе Х-зрака на крнстанним матеріаіима коіе
метода претходно іе Рентеново (Wilhelm Röntgen) от-
крће Х-зрака на, 1895. тодне,[56] затим предвиђане

сужава ненр распространеност.

Мэлекулска спектроскопіяа. Од спектроскоп-
скнх метода за мэлекулско модеіпрнане іе наіўажнніяі
пеприменатнин скіоп іе комплнковаў, што прнлнано
на мале мэлекуле тако ксцаірнаих сустатнцн, а екс-
ліне (кяо „ў ваккуму“), проверя я оптнмзатніяі моде-
ла су вро поўздане. Мецутнм, метода іе отраннчена
ўсрецбнеоет скуа стрэктура и то іош без утнціяа око-
електронске дпфракціе даіў сцку конформацноно
ліе модеі доўр нлн не. С обзнром на то да рэзультата
ўеёнем с експерпментанінм рэзультатом показаіе да
може се смуліпрэт дпфракціе коіп по-
сцптонтом смнсл: из пнорачна стрэктуре мэлекуда
прнмену у мэлекулском модеіпрнанў, доўше у
електроноа на ўзорку у таснон стану,[61] коіа іе нашта
дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
ліцатніяі рэзультата мэлекулско модеіпрнана.

У дпфракцнопе мэтоде ўбраіа се и дпфракціяа
зетно прдатоенн за прамэтрэзатніяі, нэроўнене, и ва-
РДВ[60] за леде протенне, пре чему су тн подрнн нзу-
за обтанска и коорднпацнона іедпнмена, нлн даа
пеопоіяі у обторавраіўе бянке података: даа CSD[59]
орбеўяі крнстане структуре мэлекуда и рэзультата
да, помоўу наіўанет мнкроскопа. Данас се рутнскн
трнане обіекта, некоўнко хнрада пуа ваёет од мэлеку-
ўадпан од, ретнмо, онна коіе даіе прнектно посма-
дпфракціе Х-зрака нксу нншта мане прецнанн и по-
атома око сеоіх равнотежних поэпожаія, рэзультата
просеане вреднстн у однносу на тепмане вопрацціе
нпанн доўнеіна мецуатомска растоўяна прецстаўраіў
у фнзнцн свнх времена! Ўзнмаіўнн у обзнр да на оваі
да іе дпфракціяа Х-зрака іедно од раісіаінніх открнўа
ра. Тако іе по прен пут постаіо мотуће да се „ваде“ и
о прнстопном распоредў атома у крнстанноі структу-
нна фнотрафніяа може реконструкстат нпформацніяа
іа13. тодне,[58] коіп су показаіи да се из дпфракціяа
сина Брет (William Lawrence и William Henry Bragg) из
промптна експерпментаіна потврда од стране она и
ліе анено Луе (Max von Laue) 1912. тодне,[57] и нена
дпфракціе Х-зрака на крнстанним матеріаіима коіе
метода претходно іе Рентеново (Wilhelm Röntgen) от-
крће Х-зрака на, 1895. тодне,[56] затим предвиђане

воста до потпуне компјементарности. Поіам мэлеку-
за коіе ставоа нстражнаа нду од потпуне нскрўан-
торе пнтрнаном обрэазіожену Новеіоаоі комнтета)
сцпотне шкоіе у пруўраваў мэлекуда (помеутте и у
постаіан с обзнром на поетоіане дае пніяаметрэдино
рамо нетоў сцштнуў. Оваі задатак нніе нн мадо іед-
и даіе анне нетоў основу), поекшаіемо да реамм-
пдетходнда настанку мэлекулско модеіпрнана (а коіа
ріске пнннпие и експерпментаіна саанана коіа су
ріске бефннннніе, нсторіаіта, и осерта на тео-
Послеі бефннннніе, нсторіаіта, и осерта на тео-

ПРИНЦИП МОЛЕКУЛСКОГ МОДЕЛИРАЊА

ніутерских модеда мэлекуда.

Ако се ставе у однос ранији и ануарбене ком-
формаціяа од значаіа за проверу и ануарбене ком-
ларе могао да предстаўраіа назаованн новн назоо нн-
прадну остаарена могућности за мантуаціяаніі нндн-
них новах) техника атомске микроскопіе креће се у
веома нанк на онакве какве су их хемнарн замнш-
ніеіе сеелтике увеоно у постоіане мэлекуда коіп су
традў за фнзику за 1986. тодну, требаіо бн да іе и
тота што іе своім творнмма STM доно Новеіоаоі на-
ніеіе да се дпректно виде мэлекуда, чак и атомн! Пореа
та (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
ў веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.
ту (STM)[65] помоўу коіет іе по прен пут постаіо мо-
скеннраіўн микроскоп на принципу тунелског ефек-
у веан треба помеутн да су Бннт (Gerd Binnig) и Ро-
рер (Heinrich Rohrer) из IBM-ових истраживачких ла-
боратоніа у Цнрнху конструисаіи, 1981. тодне, тав.

модели дора сила.

Ако се сетим за Кулоновата потенциална енергија на двете честички, то ова е и е-ден пример на „конформациона промена“ (или „равнотежна“). Ова е ситуација во која се „ставаат“ (или „равнотежа“).

Математичкиот модел **(4)**, кој е стекнат во ниска по-ниска температура, е сличен на Ајнштајновиот модел на цврсти тела. Навистина потенцијална енергија[6] (аналогна ПЕС, ја) е ист. Ајнштајн претпоставил дека е ист. Ајнштајн претпоставил дека е ист. Ајнштајн претпоставил дека

якога се мена потенцијална енергија при промени друга? ...), а за индуктиван пустој отпор је **Како?** (нпр. између два С атома у молекулу заснивајући утврђивање пустоје **Зашто?** (нпр. зашто настаје хемијска веза ствари. Основно питање које квантетворне бројчане мерене. Метода која се бројчано у методи, која се бројчано у молекулској моделирању за решавање проблема. Ако се оно користи (у теоретској моделирању) настави експериментални податак но, већ да се оно користи (у теоретској моделирању) се сматра квантно-механичке методе питања праву)[68] сврха квантно-механичке методе ватно поступцима Аристотел да у својој логици (Аналитички аналитички). Ако се оно користи (у теоретској моделирању) се сматра квантно-механичке методе. Ово је основно питање које се на том начину управљају физичким методама, или кретањем и обрадјују све основне молекуле, или хемијских система лоше. Важно полазиште би европској физици. Ово је основно питање које се на том начину управљају физичким методама, или кретањем и обрадјују све основне молекуле, и у својој логици (Аналитички). Ако се оно користи (у теоретској моделирању) се сматра квантно-механичке методе.

Квантно-механички приступ, по дефиницији, полазе од супатомских честица (електрона и атомских језгра) и сврха које на том начину управљају физичким методама, или квантно-механичке методе.

Основно је, према томе, да постоји известан везе између квантно-механичке методе и молекулској моделирању. Ако се молекулска структура у оквирима растојања електронско-протонског система (или хемијског система) сматра се могућност да модел повећава величина истраживања молекула (или хемијски систем) упућује на суштинску подлогу. Ако се молекулска структура у оквирима растојања електронско-протонског система (или хемијски систем) сматра се могућност да модел повећава величина истраживања молекула (или хемијски систем) и да се из него квантно-механичко моделирање једина добија. Ако се из него квантно-механичко моделирање добија у свим случајевима када се ситуација у свим случајевима да буде примењена, као на пример, код малих физичких молекула (инвентарисање молекула) и да се из него квантно-механичко моделирање добија у свим случајевима када се ситуација у свим случајевима да се молекула (или хемијски систем) сматра се могућност да модел повећава величина истраживања молекула (или хемијски систем

позадяве ксплтнавнем могўнпостм прмнеме Бутнове „комп'ўтерскм снжно подржане“ нстржмвае да се (кр'м маханем крмга незаема пўнамм на друтом крај' бмло замшмрено, друтмм решмма, да ефекат лептра немогўнпост прервўвана будўнпостм на нанм како је равдеца ненмемвна сложеност смга Природе, па тако и одређена садашнмм станем и смлама квантнфкм'е тмм, да пробе јом много времена да ќе се у лупој мрн овај потпеј како детермннстмкм. Требало је, међ' ја ситуациј пропе будўнпост. Управо та идеја да је будўнпост да познавање смга Природе даје могўнпост да се предс'ка снжан подстрек развој науке па је, на пример, у фмзоофс'ставнм Јанлас – размшљўм, наравно, у фмзоофс'ка окрнпмма – схватмо,[20] јом радмко пре него што се и могло помислити на мнкаку практнчку провер', развоју комп'ўтерских пострмка за генерсане свекетм (посебно)прмзвољних бројева.

Примена Монте Карло методе састојм се у генерн'сану прмзвољних конфигурацм'а сложеног хемм'ског система (и до некомко стотнна хиљада конфигурацм'а, ако да пео бескрајно великм тај. конфигурацм'ске статистмке пнннцмпа кој'м омогућавај'штовање статистмких нумеричких метода за решавање ефикасних нумеричких метода за решавање проблема (трајектор'е) система у времен'ском интервалу од некомко десетнна или стотнна секундн ($1\ \text{ps} = 10^{-12}$ s) до некомко стотнна наносекундн ($1\ \text{ns} = 10^{-9}$ s). што је с једне стране усмерено отрнмрањем пербрмвамсама дванашњих комп'ўтера, а с друге, великом система (бројем честица), а у ствари не само статмке и дннамнке особине (но)хемм'ских система, него и конформацмоне фм'кстрацм'е молекула, нетрадкцм'е с окружењем, стварање и растварање водоникних веза, протеин-лиганд или ензим-супстрат интеракцм'е, и друге врсте биохемм'ских знакења сложених система састојм се у извођењу високо сложених система састојм се у извођењу (но)хемм'ских важних закрурака из резултата генерн'сане на основу или потпуно произвољних бројева. Методу су описали, примениили у физици, и дали јој назив (по ве скоро или потпуно произвољних бројева. Методу заснива на способност комп'ўтера да генерише низ тмкм модел (од грч. στόχος = циљ), кој'м се тема. За разлику од детермнннстмкол, ово је стохастмка. Ако се на низ сваким даном све убрзанје прибљижава на кој'м нанм корелисаних) конфигурацм'а датог система отворнот броја произвољних (ті. случајних и нн (но)хемм'ски важних закрурака из резултата генерн'сане високо сложених система састојм се у извођењу

Monte Карло методе. Друге примене симулацм'а при чему симулацм'а увијена протеина остаје као при'м ја ниних структурних кретања молекула, супстрат интеракцм'е, и друге врсте биохемм'ских знакења водоникних веза, протеин-лиганд или ензим-молекула, интеракцм'е с окружењем, стварање и растварање не само статмке и дннамнке особине (но)хемм'ских система, него и конформацмоне фм'кстрацм'е у времен'ском динамном успешно проблему).

Данас се молекулском динамком успешно проблем комп'ўтера, а с друге, великом система (бројем честица) отворнмени перформансама данашњих носекундн ($1\ \text{ps} = 10^{-9}$ s). што је с једне стране усмерено ка ниској потрошњи енергије и високој брзини извршавања. На овај начин долазе се, на пример, до средње вредности енергије кој'м отговара систему у ствари фм'кстрацм'е. Ако се из обезбеђене континуалне Маркоњева процес[26]), и из обезбеђене током времена вредности по анализи (друтмм решмма, да се остварн узрокавање било кој'е тражене великане из средње штовање статистмких принципа кој'м омогућавај'радијонн простор буде равномерно испражњен), из по-кол система (и до некомко стотнна хиљада конфигурацм'а произвољних конфигурацм'а сложеног хемм'ске системе на основу добро познатих принципа статистмке механике, као и исто тако добро детерминисане функсенних нумеричких метода за решавање система диференцм'алних једначина – на чему се овај поступак заснива у комп'ўтерској реализацм'и. Пребављање будўнпостм се, у овом случај', своди на комп'ўтера, а с друге, великом система (бројем честица).

Данас се молекулском динамком успешно проблем не само статмке и дннамнке особине (но)хемм'ских система, него и конформацмоне фм'кстрацм'е и растварање водоникних веза, протеин-лиганд или ензим-молекула, интеракцм'е с окружењем, стварање и растварање водоникних веза, протеин-лиганд или ензим-молекула, интеракцм'е с окружењем, стварање и растварање

[a] „Оно што познајемо није бог-зна-шта; оно што заиста јесте отромно.“ (превод: СРН).

лишких димензија, што представља уско грло свакомашинској технологији чврсте материје у хемијском систему великих димензија да друге врхунске перформансе у производњи технологија полресорбер комплетера Анђон су двајица-стварања протеина у биохемијском производњи. Спектрофотометрија материјала и мембранских нутриционистичких стручњака. Поред тога, због својих једноставне примјенљивости у биохемијским поступцима, нашле су примену у спектрофотометрија, као и у спектрофотометрија (или спектрофотометрија) за одређивање концентрације супстанци у хемији и сродним дисциплинама, али је знатно је доминантна у биохемијским поступцима. Поред тога, због својих једноставне примјенљивости и високе прецизности, у последње вријеме се све чешће примјењује у биохемијским поступцима. Моје Кадо методе се као такве, или највише и до других карактеристика система.

Вршио је хемијски проблем подстакли хаотичне промене, што представља уско грло свакомашинској технологији. Анђон је користио да у производњи у хемијском систему великих димензија, или у производњи протеина у биохемијским поступцима. Спектрофотометрија материјала и мембранских нутриционистичких стручњака. Поред тога, због својих једноставне примјенљивости и високе прецизности, у последње вријеме се све чешће примјењује у биохемијским поступцима. Моје Кадо методе се као такве, или највише и до других карактеристика система.

КОМПЈУТЕРСКЕ ТЕХНОЛОГИЈЕ И МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛИРАЊЕ

Сасвим је разумљиво да је доступност рачунара високих перформанси и нехемијски стварно усавршавање подстакло и даље стварно унапређивало развој и примјену молекулског моделирања помоћу компјутера. Захваљујући за рачунарским ресурсима били су увек на располагању и могућности, а за хемичаре се знатно (или чак и) могућности, компјутерске технологије и (био)хемијских система, састављање нетржишних молекулских моделирање у хемијској методи, молекулско моделирање у свим, развојој компјутерских технологија, као и развојој математичких метода, експериментални напредним у (био)хемијских система. Данас се утисак као да се не смањује. Напротив, стиче се утисак да се технологија као високо развијени приказан стварних комбинација хемијских и биохемијских система. Овај је у технологија или су се и модели, или су увек основа данашњег.

Модели су одувек били присутни у хемији. С разлогом су се и модели, или су се у хемији, у последњем само оно што би могло бити подршка или подршка.

Не треба посебно наглашавати да из помињућа но за симулатиј Јанјина протеина), итд.

Сисану пробиту торзионих углова (што је интересантно или са функцијама кој се омогућавају контролирати, или са функцијама кој се не могу дифференцирати функцијама кој се не могу дифференцирати са одређене геометријске вредности функције), са групама електронегативности и електронских супституенти у (био)молекулском моделирању. Поред тога, због својих једноставне примјенљивости и високе прецизности, примјенљиви за проучавање истих, тоје помоћне, примјенљиви за проучавање истих, тоје помоћне с претходно поменутим методама молекулске анализе и до других карактеристика система.

Моје Кадо методе се као такве, или највише

---

[a] „Оно што познајемо није бог-зна-шта; оно што заиста јесте отромно.“ (превод: СРН).

кој и нису то биле". ibid. 53 (2012) 3–9; Коларски, Д.; вић, Н. "Новелова натрада за хемију 2011 – кристали ма – Новелова натрада за хемију 2012". Хемијски прегледа 53 (2012) 142–147; Тодоровић, Т., Филипповић, М.Б. "Регенератори спектрити са Г протеинима Спасић, М.Б. "Новелова натрада за хемију 2012". Хемијски

1. У последњих 5 година, то су, нпр.: Мишковић, А.;

ЛИТЕРАТУРА:

основни задатак науке.

ветљавању мене комплексност – што је, уосталом, и циљ моделирања очекује да нам помоћи у расветљавању мене комплексност – што је, уосталом, и основни задатак науке.

ПО(Р)УКА

Лео ова текст резултат је покушаја да се укратко резимира једна актуелна и важна област истраживања у хемији и сродним дисциплинама, али је знатно је доминантна у биохемијским поступцима. Моје Кадо методе се као такве, или највише и до других карактеристика система.

Моје Кадо методе се као такве, или највише

стојећи супер-комплитер.

тој у потребу с оном коју постижу најбржи поброј на брзина сумирања за некоји ред величине лекулске динамике, па је на тај начин остварена укупна на брзина сумирања за некоји ред величине лекулске динамике, па је на тај начин остварена укупна

1. Минин, Л., Селаковић, Ж. "Нобелова награда за хемију 2010". ibid. 52 (2011) 3–11; Пороковић, В., Томић, Г. "Нобелова награда за хемију 2009 – Структура и функција рибозома". ibid. 51 (2010) 61–71.
2. Поповић, Д.М. "Из сајбер простора – Нобелова награда за хемију 2013". ibid. 52 (2013) 142–147.
3. Јанков, Р.М. "Дерек Бартон – човек који је задужио свет и Србију". ibid. 50 (2009) 2
4. Мекдоналд, Д., Стефановић, Д., Стојановић, М.Н. "Игре за ДНК рачунаре". ibid. 50 (2009) 3–11.
5. Дошен-Мићовић, Љ. "Поједини конформационе анализе – и шта је после њих". ibid. 50 (2009) 123–127.
6. Lifson, S. "Intramolecular energy functions for conformational and vibrational analysis". J. Chim. Phys. Physicochim. Biol. 65 (1968): 40–43.
7. Lifson, S. "Intermolecular forces and protein structure". In Problèmes physiques dans les systèmes biologiques, edited by C. M. DeWitt. London: Gordon and Breach, 1970.
8. Lifson, S. "Molecular Forces". In Protein–protein interactions, edited by R. Jaenicke and E. Helmreich, 3–16. Heidelberg: Springer, 1972.
9. Lifson, S. "Recent Developments in the Force Field Calculations". In Dynamic Aspects of Conformational Changes in Biological Macromolecules, edited by C. Sadron, 421–429. Dordrecht: Reidel, 1973.
10. Hagler, A. T., Lifson, S. In "The Proteins", edited by H. Neurath. New York: Academic Press, 1977.
11. Lifson, S. "Potential Energy Functions for Structural Molecular Biology". In Structural Molecular Biology, NATO Advanced Study Institutes Series, Vol. 45, edited by D. B. Davies, W. Saenger, S. S. Danyluk, 359–385. New York: Springer, 1982.
12. Lifson, S. "Potential Energy Functions for Structural Molecular Biology". In Supramolecular Structure and Function, edited by G. Pifat and J. N. Herak, 1–44. New York: Springer, 1983.
13. Niketić, S. R., Rasmussen, K. "The Consistent Force Field: A Documentation". Heidelberg: Springer, 1977.
14. Никетић, С. Р. "Конзистентно поље сила (CFF): Принципи и могућности". Гласн. хем. друштва Београда 43 (1978): 741–760.
15. Никетић, С. Р. "Хемија и рачунари: Спојена између промисли и будућности", Предавање у оквиру манифестације Лабораторија електронике: наслеђе српске хемије, Галерија науке и технике САНУ, Београд, 28. новембар, 2013.
16. Никетић, С. Р. "Хемија и рачунари: Молекулско моделирање", Предавање из циклуса "Хемија и рачунари" у Музеју науке и технике, Београд, 9. децембар, 2013.
17. Dreiding, A. S. "Einfache Molekularmodelle". Helv. Chim. Acta, 42 (1959): 1339–1344.
18. Taylor, C. C. W. The Atomists: Leucippus and Democritus. Fragments, A Text and Translation with Commentary. Toronto: University of Toronto Press, 1999.
19. Diels, H., Kranz, W. Die Fragmente der Vorsokratiker. Berlin: Weidmann, 1951.
20. Trépanier, S. "Empedocles on the ultimate symmetry of the world". Oxford Studies in Ancient Philosophy 24 (2003): 1–57.
21. Platon, Timaeus (Тимеј, на српском: Тимај), Поглавље о четири елемента, 55d–57d, око 360. п.н.е.
22. Dalton, J. A New System of Chemical Philosophy. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1808.
23. Roscoe, H. E., Harden, A. A New View of the Origin of Dalton's Atomic Theory. London: Macmillan, 1896.
24. Rocke, A. J. "The Quaker Rustic as Natural Philosopher: John Dalton and His Social Context". In Characters in Chemistry: A Celebration of the Humanity of Chemistry, ACS Symposium Series 1136, edited by G. D. Patterson, S. C. Rasmussen, 49–59. Washington, DC: American Chemical Society, 2013.
25. Visinak, J. "Political and Science Revolutionary: Stanislao Cannizzaro". Educación Química 16 (2005): 456–468.
26. Di Meo, A. "Il positivismo in Italia: Stanislao Cannizzaro, scienziato e filosofo". Giornale di filosofia, ISSN 1827-5834, Ottobre 2007, http://www.filosofitaliana.it/
27. Leach, S. J., Nemethy, G., Scheraga, H. A. "Computation of the sterically allowed conformations of peptides". Biopolymers 4 (1966): 369–407.
28. Scheraga, H. A. "Calculations of conformations of polypeptides". Adv. Phys. Org. Chem. 6 (1968): 103–184.
29. Allinger N. L. Molecular Structure: Understanding Steric and Electronic Effects from Molecular Mechanics. Hoboken, NJ: Wiley, 2010.
30. Le Bel, J.A. "Sur les relations qui existent entre les formules atomiques des corps organiques et le pouvoir rotatoire de leurs dissolutions". Bull. Soc. Chim. France, 22 (1874): 337–347.
31. van 't Hoff, J. H. "Voorstel tot uitbreiding der structuur formules in de ruimte". Arch. néerl. sci. exactes et nat. 9 (1874): 445–454.
32. van 't Hoff, J. H. La Chimie dans L'Espace. Rotterdam: Bazendijk, 1875.
33. Hendrickson, J. B. "Molecular geometry, I: Machine computation of the common rings". J. Amer. Chem. Soc. 83 (1961): 4537–4547; et seq.
34. Wiberg, K. B. "A Scheme for Strain Energy Minimization. Application to the Cycloalkanes". J. Amer. Chem. Soc. 87 (1965): 1070–1078.
35. Boyd, R. "Method for Calculation of the Conformation of Minimum Potential-Energy and Thermodynamic Functions of Molecules from Empirical Valence-Force Potentials: Application to the Cyclohanes". J. Chem. Phys. 49 (1968): 2574–2583.
36. Rahman, A., Stillinger F.H. "Molecular dynamics study of liquid water". J. Chem. Phys. 55 (1971): 3336–3359.
37. Kitaigorodsky, A. I. Molecular Crystals and Molecules. New York: Academic Press, 1973.
38. Brooks, B. R., Bruccoleri, R. E., Olafson, B. D., States, D. J., Swaminathan, S., Karplus, M. "CHARMM: A program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations". J. Comput. Chem. 4 (1983): 187–217.
39. Wang, J., Wolf R. M., Caldwell, J.W., Kollman, P. A., Case, D. A. "Development and testing of a general AMBER force field". J. Comput. Chem. 25 (2004): 1157–1174.
40. Warshel, A. "The consistent force field and its quantum mechanical extension". In Modern Theoretical Chemistry, Volume 7, edited by G. A. Segal. New York: Plenum Press, 1977.
41. Warshel, A. Computer Modeling of Chemical Reactions in Enzymes and Solutions. New York: John Wiley & Sons, 1991.
42. Brandt, A., Bernholc, J., Binder, K. (editors) Multiscale Computational Methods in Chemistry and Physics, NATO Science Series III, Volume 177: Computer and Systems Sciences. Amsterdam: IOS Press, 2001.
43. Pasteur, L. "Mémoire sur la relation qui peut exister entre la forme cristalline et la composition chimique, et sur la cause de la polarisation rotatoire". C. R. Séances Acad. Sci. 26 (1848): 535–538;
44. Pasteur, L. "Recherches sur les relations qui peuvent exister entre la forme crystalline, la composition chimique et le sens de la polarisation rotatoire". Ann. Chim. Phys. 24 (1848): 442–459.

45. Planck, M. "Über das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum". Ann. Phys. 4 (1901): 553–563; "Über die Elementarquanta der Materie und der Electricität". Ann. Phys. 4 (1901): 564–566.

46. Einstein, A. "Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt". Ann. Phys. 17 (1905): 132–148.

47. Bohr, N. "On the Constitution of Atoms and Molecules". Phil. Mag. [6] 26 (1913): 1–25.

48. Boscovich [Bošković], R. J. Theoria philosophiae naturalis. Venetiis: Typographia Remondiniana, 1763; Енглеска превод: J. M. Child. A theory of natural philosophy, Cambridge, MA: MIT Press, 1966.

49. Newton, I. Philosophiae Naturalis Principia Mathematica. Londini: Pepys, 1687. Најновије издање: New York: Snowball Publishing, 2010.

50. de Laplace P. S. Oeuvres Complètes de Laplace. Théorie Analytique des Probabilités, volume VII. Paris: Gauthier-Villars, 1820.

51. van der Waals, J. D. Over de continuiteit van den gas- en vloeistoftoestand, Дисертација. Leiden, 1873. Доступна у преводу на енглески језик под насловом: On the continuity of the gas and liquid states, edited by J. S. Rowlinson, North-Holland: Amsterdam, 1988.

52. Boltzmann, L. Vorlesungen über Gasthеorie. J. A. Barth: Leipzig, 1896.

53. Schrödinger E. "Quantisierung als Eigenwertproblem". Ann. Phys. 79 (1926): 361; et seq.

54. Lennard-Jones, J. E. "Cohesion". Proc. Phys. Soc. 43 (1931): 461–482.

55. Sutherland, W. "The viscosity of gases and molecular force". Phil. Mag. 36 (1893): 507-531.

56. Authier, A. Early Days of X-ray Crystallography. Oxford: Oxford University Press, 2013.

57. Friedrich, W., Knipping, P., Laue, M. "Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen". Sitzungsber. Math. Phys. Kl. K. Bayer. Akad. Wiss. Munchen (1912): 303–322.

58. Williams, S. F. "Celebrating 100 years of X-ray crystallography". Acta Cryst. A 69 (2013): 1–4.

59. Allen, F. H. "The Cambridge Structural Database: a quarter of a million crystal structures and rising". Acta Cryst. B 58 (2002): 380-388.

60. Bernstein, F. C., Koetzle, T. F., Williams, G. J., Meyer Jr., E. E., Brice, M. D., Rodgers, J. R., Kennard, O., Shimanouchi, T., Tasumi, M. "The protein Data Bank: A Computer-based Archival File For Macromolecular Structures". J. Mol. Biol. 112 (1977): 535–542.

61. Hargittai, I., Hargittai, M. (editors) Stereochemical applications of Gas-Phase-Electron Diffraction". New York: VCH, 1988.

62. Burshtein, A. I., Temkin, S. I. Spectroscopy of Molecular Rotation in Gases and Liquids. Cambridge: Cambridge University Press, 1994.

63. Herzberg, G. Molecular Spectra and Molecular Structure: Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules. New York: Van Nostrand, 1945.

64. van Brakel, J. Philosophy of Chemistry – Between the Manifest and the Scientific Image, Leuven: Leuven University Press, 2000.

65. Binning, G., Rohrer, H. "Scanning Tunelling Microscopy". Surf. Sci. 126 (1983): 236–244.

66. Avogadro, A. "Essai d'une manière de determiner les masses relatives des molecules elementaires des corps, et les proportions selon lesquelles elles entrent dans ces combinaisons". J. Phys. 73 (1810): 58–76.

67. Sutcliffe, B. T. "The idea of a potential energy surface". J. Molec. Struct. (Theochem) 341 (1995): 217–235.

68. Aristotle [Аристотел] "Analytica priora (Аналитички трактери)", Књига II, Глава 23, око 360. п.н.е. Преводи на енглески језик: Prior Analytics. transl. A. J. Jenkinson, University of Adelaide, Australia, 2014.

69. Hempel, C. G. Aspects of Scientific Explanation and other Essays in the Philosophy of Science. New York: Free Press, 1965.

70. Born, M., Oppenheimer, J. R. "Zur Quantentheorie der Molekeln". Ann. Phys. (Leipzig) 84 (1927): 457–484.

71. Born, M., Huang, K. Dynamical Theory of Crystal Lattices. New York: Oxford University Press, 1954.

72. Goldstein, H. Classical Mechanics. Reading, MA: Addison-Wesley, 1980.

73. Rapaport, D. C. The Art of Molecular Dynamic Simulation. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.

74. Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., Teller, E. "Equation of state calculations by fast computing machines". J. Chem. Phys. 21 (1953): 1087–1092.

75. Landau, D. P., Binder, K. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.

76. Vallеau, J. P., Whittington, S. G. "A guide to Monte Carlo for statistical mechanics. I. Highways". In Statistical Mechanics A. Modern Theoretical Chemistry, Volume 5, edited by B. J. Berne, 137–68. New York: Plenum Press, 1977.

77. Metropolis, N. "The Beginning of the Monte Carlo Method". Los Alamos Sci., Special Issue (1987): 125–130.

78. Eckhardt, R. "Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo Method". Los Alamos Sci., Special Issue (1987): 131–143.

79. Larson, R. H., Salmon, J. K., Dror, R. O., Demerоff, M. M., Young, C., Grossman, J. P., Shan, Y., Klepeis, J. L., Shaw, D. E. "High-Throughput Pairwise Point Interactions in Anton, a Specialized Machine for Molecular Dynamics Simulation". The 14th International Symposium on High-Performance Computer Architecture, Salt Lake City, UT, (2008): 331–342.

80. Shaw, D. E. et al. "Anton, a Special-Purpose Machine for Molecular Dynamics Simulation". Commun. ACM 51 (2008): 91–97.

Abstract

This contribution reviews the motive (2013 Nobel prizes for chemistry), definition of molecular modeling, its roots and short history, former scientific achievements on which it is based, areas of application (single molecules, condensed phase, cellular biomolecules, multiscale systems), methods (deductive and inductive, stochastic and deterministic), as well as experimental (diffraction, molecular spectroscopy) and theoretical (quantum mechanics, theories of intermolecular forces) antecedences of molecular modeling.

Милица ПОПОВИЋ, Катедра за биохемију, Хемијски факултет Универзитета у Београду; Студентски трг 12-16; 11000 Београд, Србија

ПРОТЕИНИ БИЉКА У ОДБРАНИ ОД ПАТОГЕНА

Сажетак: У условима стреса биљке укључују ве-лики број одбрамбених стратегија међу којима се на-глашавају врлинами молекули који имају улогу заштитну улогу. Један биљних протеина или екстра-целуларни протеини са улогом биотичког стреса назива-се групама протеина са малотежном или ПР-протеини на је протеини повезани са патогенезом (енг. Pathogenesis related proteins). ПР-протеини су подељени у 17 фамилија, ПР-1 до 17 по редоследу от-кривања. Велика количина експерименталних пода-така везаних за ПР протеине се налазила у посебним базама података, што је коришћено при изградњи ове обухвати ПР протеине у 17 фамилија, ПР-1 до 17 по редоследу от-кривања. Експресија гена протеина у биљкама се мењала у зависности од врсте патогена, врсте и фазе развоја биљке, као и у зависности од начина ин-фекције. Ова студија је показала да се ПР протеини у биљкама могу сврстати у 17 фамилија, а експресија ПР-протеина у биљкама се мењала у зависности од врсте патогена, врсте и фазе развоја биљке, као и у зависности од начина ин-фекције [3].

Слика 1. Одбрамбени одговор биљке на напад патогена, рањавање, фитохормоне, хемикалије и стрес. ХР- "хипер-осетљиви" одговор, САР- системска стечена резистенција, ПР- протеини повезани са патогенезом, ПЗ- јенгијски зид, В-вакуола, НУ-једро.

Од протеина се могу посматрати као отворени рат у ко-ме су протеини главно оружје које користе обе стране [2]. Поједини протеини су дефинисани као протеини повезани са патогенезом (ПР протеини енг. Pathogenesis related proteins). ПР протеини су у односу на патогене биљке снабдевају у групу протеина повезаних са патогенезом (ПР протеини енг. Pathogenesis related proteins). ПР протеини су дефинисани као протеини који се могу посматрати као отворени рат у ко-ме су протеини главно оружје које користе обе стране [2] Поједини протеини су у односу на патогене биљке снабдевају у групу протеина повезаних са патогенезом (ПР протеини енг. Pathogenesis related proteins). ПР протеини су дефинисани као протеини који се могу посматрати као отворени рат у ко-ме су протеини главно оружје које користе обе стране [3].

УВОД

У вишевековној борби са патогенима, биљке су развиле многобројне и компликованих механизама одбране. Истовремено, исти су патогени раз-вили су начине да савладају одбрамбене механизме биљака [1]. Током времена, коеволуирана борба из-међу потенцијалних патогена и инокових потенцијал-ног домаћина довела је појаве комплексних интерак-ција са патогенезом (ПР протеини енг. Pathogenesis related proteins). ПР протеини су дефинисани као про-теини који се налазе у ћелији у одговору на патогене биљке, тако и за саму биљку.

У односима домаћин-патоген који су некомпати-билни (не долази до значајне инфекције биљке ткива патогеном), штета коју патоген наноси биљном ткиву је отпорнија услед присуства одбрамбеног од-говора биљке. Најјача ефикасност показана је код "хипер-осетљивог" одговора чија одлика је брза не-кроза ткива око места инфекције. Овакав одговор по-следица је координисаног и брзог метаболичког одго-вора на улазак патогена [4]. Измењен функционалитет ћелијске мембране, генерисање реактивних кисеоникних врста, промена нивоа фосфорилатних супстрата [4]. Продукција ПР протеина није само по-следица [4]. Продукција ПР протеина у одговору на патогене биљке снижава интензитет у фотосинтези, трансмембранске ћелијске сигнале, повећане ексцитабилности ћелијске мембране, промене у експресији гена [5]. По-фотосинтеза као и повећана пропустљивост ћелијског зида услед натомилавања лигнина и целулозе [5]. Ве-лики број протеина који се налазе у ћелији у одговору на патогене биљке снижава интензитет у фотосинтези, промене у експресији гена [5]. По-фотосинтеза као и повећана пропустљивост ћелијског зида услед натомилавања лигнина и целулозе [5]. Ве-лики број протеина који се налазе у ћелији у одговору на патогене биљке снижава интензитет у фотосинтези, промене у експресији гена [5]. Поред ових ћелијске смрти, поједине ензимске активације ћелијске регулаторних протеина и активација трансмем-бранских канала у плазма мембрани ћелије, генерисање реактивних кисеоникних врста, промена нивоа фосфорилатних супстрата [4]. Измењен функционалитет ћелијске мембране

Таблеа 1. Класификација ПП протеина

Фамилија	Представник	Својства
PR-1	PR-1a из дувана	Непозната
PR-2	PR-2 из дувана	β-1,3-глуканаза
PR-3	P,Q из дувана	Хитиназе типа I,II,IV,VII
PR-4	‘P’ из дувана	Хитин везујући протеини
PR-5	S из дувана	Тауматину слични
PR-6	Инхибитор I из парадајза	Инхибитори протеаза
PR-7	P_{69} из парадајза	Ендопротеиназе
PR-8	Хитиназа из краставца	Хитиназе типа III
PR-9	Литин синтетишућа пероксидаза из дувана	Пероксидазе
PR-10	”PR1”из першуна	Рибонуклеазе слична
PR-11	Хитиназа класе V из дувана	Хитиназе типа V
PR-12	Rs-AFR3 из поткве	Дефензин
PR-13	THI2.1 из Арабидопсиса	Тионин
PR-14	LTP4 из јечма	Липидни трансфер протеин
PR-15	OxO (germin) из јечма	Оксалат оксидаза
PR-16	OxOaLP из јечма	Оксалатни оксидаз слични
PR-17	PRp27 из дувана	Непозната

на на протеолизу, нису pH вредности и да су локализи-
протеини, нису молекулске масе, да су веома отпор-
ни. Пробојно се сматрало да су ПП протеини кисели
је хиперосетрно реагово на вирус мозаика дувана
[12].

Инфекција вируса дувана (Nicotiana tabacum) који
се ПП протеинима. Ова дефиниција базирана је на екс-
периментима који су седамдесетих година пошли
дужим боравком током патогенских услова не сматрају
мали или детектабилним количинама, а до није ни-
ним који се конституално експримирају у ткивима у
током инфекције [4]. Према овој дефиницији, проте-
ини ПП протеине је да се експримира да ново
Главни критеријум по коме се неки протеини може ра-
злити не-патогенним/корисним тиквама и бактерија-
ма може да инструише синтезу ПП протеина [9; 10; 11].
Сматра се да адекватан стрес и поремећај не инструи-
сају ПП протеина, иако су добијени ненинфектив-
ни услови (нпр. токсичним материјама неког врста
хлороза) често окидач за производњу добијених ПП
протеина [8]. У последње време показано је да колони-
зације не-патогеним/корисним тиквама и бактерија-
ма у ткиву ПП протеина. Ова група материјала
Van Loon) је уво термин материјалним обрадамбен
протеини [13]. Овај термин подразумева протеине
који се у ардавом ткиву најчешће не могу детектовати
и који је материјала на протеинском нивоу показана
неки инфекције патогеном. Овај термин укључује ка-
ко познате ПП протеине тако и оне који су до сада не-
ки инфекције патогеном. Овај термин укључује ка-
ардавим ткиву, а који се експресија материјала изазвана
ријум или не укључује протеине који су присутни у
изазнаковани и који задовољавају задате критери-
ме су ПП протеини тако и оне који су до сада не-
ким инфекције патогеном. Ова дефиниција у тиквама у
кроне инфекције.

Материјала експресије неких протеина током ми-
кроне инфекције стереше инхибиторе улогу у обрбани
биљке, или је не доказује [14]. Ова протеини се наје-
чешће посматрају као обрбамбени протеини који уло-
та је у спречавању патогена или отрицавању ши-
рења инвазије. Инхибиција функција на материјалним
зовани у екстрацелуларном и интрацелуларном прос-
тору листова. Иако инфекције акумулирају се у
листу и другим органима и могу да чине до 10 % укуп-
них солубилних протеина.

Термин ПП-слични протеини коришћен се да би се
описали ПП-хомологи протеини који су присутни у
здравом биљном ткиву, који се експримирају ткивно-
специфично током развоја. Ови протеини, који се не
синтетишу као одговор на присуство патогена су до-
минантно базни и лоцирани унутар ћелије или у вакуо-
ли [4]. Међутим, како су се открили нови протеини
постајало је све теже успоставити јасну границу из-
међу ПП и ПП-сличних протеина. Пример овога су
базна хитиназа и глуканаза из зеленог лишћа дувана
које могу да се експримирају конституисано током раз-
вија или као одговор на инфекције [6]. Материјал из-
међу ПП протеина и ПП-сличних протеина додатно је
замагљена откривањима специфичних ПП протеина у
здравим биљним ткивима, као и откићем да се синтеза
ПП-сличних протеина индукује у условима инфек-
ције. Супротно почетним дефиницијама, многи ауто-
ри су под ПП протеинима подразумевали оне који
синтезу је индукована биотичким стресом. Van Loon
(Van Loon) је уво термин индуцибилним обрадамбен
протеини [13]. Овај термин подразумева протеине
који се у ардавом ткиву најчешће не могу детектовати
и који је материјала на протеинском нивоу показана
неки инфекције патогеном. Овај термин укључује ка-
ко познате ПП протеине тако и оне који су до сада не-
ким инфекције патогеном. Ова дефиниција задаје кри-
теријум или не укључује протеине који су присутни у
здравим ткиву, а који се експресија индукује иако ми-
кроне инфекције.

Индукција експресије неких протеина током ми-
кроне инфекције стереше инхибиторе улогу у обрбани
биљке, или је не доказује [14]. Ова протеини се наје-
чешће посматрају као обрбамбени протеини који уло-
та је у спречавању патогена или отрицавању ши-
рења инвазије. Инхибиција функција на материјалним

Таблиця 2. ПП протеїнів коїн су ідентифікованих кло алергенів

Фамилія	Основа	Назвор	Ниме алергена
PR-2	β-1,3-Глукаваза	Hevea Brasiliensis латекс, банана	Hev b 2
PR-3	Хитиназа I класе	Авокадо, H. Brasiliensis латекс, кестен, банана	Pers a 1, Hev b 11, Cas a 5
PR-4	Хитиназа	H.Brasiliensis латекс, лала	Hev b 6
PR-5	ТЛП	Трешня, ябука, киви,паприка	Pru av 2, Mal d 2,Act d 2, Cap a 1
PR-8	Хитиназа III класе	H.Brasiliensis латекс	Hevamine
PR-10	Непозната, Bet v 1 хомологен	Бреза, лешник, кестен, ябука трешнва, бресква, першун	Bet v 1, Cor a 1, Cas s 1, Mal d 1, Pru p 1, PcPR-1
PR-14	ЛТП	Бресква, ябука, трешня, H. Brasiliensis латекс, кестен, амброзија, пелин, грожђе, маслине	Pru p 3, Mal d 3, Gly m 1, Pru av 3, Art v 3, Amb a 6, Par j 1,2, Cas s 8, Cor a 8, Vit v 1, Hev b 12, Ole e 7

у спомињаној околини. Хипербосетљивост се јавља као до хипербосетљивост на антитене нормално присутне у месту инфекције обично није знаија или ако су већ присутни у ткиву или је нихова синтеза индукована у околном ткиву које није инфицирано могу да пруже високо ниво заштите [15].

Вишке синтетишу ПП протеине и током нормалног развоја или и као део обраде од ранних патогена. За велику групу ПП протеина показано је да се јако брзо синтетишу локално, на месту инфекције или и системски [16]. ПП протеини се такође индукују у одговору на разлиците факторе из околине као што су суша, температура, ултраљубичасто зрачење, тешки метали и регулаторе растења [17; 18; 19].

Кратеријум за укрштање неког протеина међу ПП протеине су следећи: (и) протеин мора да буде нападан патогеном у ткиву које та не експримира у довољним количинама, мора се показати да до индукционе условима, мора се показати да се индукционе експресије у ткиву које та не експримира у патогене у ткиву које је нападнуто [20].

КЛАСИФИКАЦИЈА ПП ПРОТЕИНА

Највероватнији протеинске компоненте су дефинисане у врвану, који је хиперосетљиво реаговао на патогене, и назване су I, II, III, IV и V на основу електрофоретске покретљивости [12]. Наиђено, ово представља покретљивост у пет група ПП-1 до ПП-5. Сваки од ових класификованих у пет група ПП-1 до ПП-5. Сваки од ових класификованих у пет група ПП-1 до ПП-5, обично у експонирана у вакуоли и на ниској индукцији утицај етилен или јасмонска киселина [21; 22; 23; 24; 25] .

ПП протеини су подељени у 17 фамилија [26] (Таблеа 2.) од ПП-1 до ПП 17 по редоследу откривања. Поред у фамилије назвијене је на основу сличности у секвенци, секвенцама и мукоолошких реакција и енбеда 1.) од ПП-1 до ПП 17 по редоследу откривања. Поред ових ПП протеина су у ствари ПП-2, 3, 4, 5, 8, 10 и 14 фамилије протеина (Таблеа 2.). Ово су углавном мали протеини (молекуске масе 5-70 kДа), стабилни су на ниским pH и отпорни на протеолизу.

ЛИТЕРАТУРА

1. N.T. Keen, Nat Biotechnol 17 (1999) 958-959.
2. J. Jayraj, Anand, A. and Muthukrishnan, S, Pathogenesis-related proteins and their roles in resistance to fungal pathogens. In: Fungal Diseases Resistance in Plants. Biochemistry, Molecular Biology, and Genetic Engineering, Haworth Press, New York, 2004.
3. R.B. Ferreira, S. Monteiro, R. Freitas, C.N. Santos, Z. Chen, L.M. Batista, J. Duarte, A. Borges, A.R. Teixeira, Critical Reviews in Plant Sciences 25 (2006) 505-524.
4. L. van Loon, W. Pierpoint, T. Boller, V. Conejero, Plant Molecular Biology Reporter 12 (1994) 245-264.
5. Y. Yang, J. Shah, D.F. Klessig, Genes Dev 11 (1997) 1621-1639.
6. L. van Loon, Occurrence and properties of plant pathogenesis-related protein in Datta SK, Muthukrishnan S, eds. Pathogenesis-related Proteins in Plants CRC Press, Boca Raton,FL, 1999.
7. J.F. Antoniw, A.M. Dunkley, R.F. White, J. Wood, Biochem Soc Trans 8 (1980) 70-71.
8. J. Jayraj, Anand, A. and Muthukrishnan, S, Pathogenesis-related proteins and their roles in resistance to fungal pathogens. In: Fungal Diseases Resistance in Plants. Biochemistry, Molecular Biology, and Genetic Engineering, Haworth Press, New York, (2004).
9. I. Bliloo, J.A. Ocampo, J.M. Garcia-Garrido, J Exp Bot 51 (2000) 1969-1977.
10. Y. Desaki, A. Miya, B. Venkatesh, S. Tsuyumu, H. Yamane, H. Kaku, E. Minami, N. Shibuya, Plant and Cell Physiology 47 (2006) 1530-1540.
11. G.W. Zehnder, J.F. Murphy, E.J. Sikora, J.W. Kloepper, European Journal of Plant Pathology 107 (2001) 39-50.
12. L.C. van Loon, Virology 67 (1975) 566-575.

13. L.C. van Loon, M. Rep, C.M.J. Pieterse, Annual Review of Phytopathology 44 (2006) 135-162.
14. L.C. van Loon, Physiological and Molecular Plant Pathology 37 (1990) 229-230.
15. R.B. Ferreira, S. Monteiro, R. Freitas, C.N. Santos, Z. Chen, L.M. Batista, J. Duarte, A. Borges, A.R. Teixeira, Molecular Plant Pathology 8 (2007) 677-700.
16. E. Kombrink, I.E. Somssich, Pathogenesis-related proteins and plant defense. In: The Mycota (Plant Relationships) Springer-Verlag, Berlin, 1997.
17. J.-P. Dercel, L. Legendre, J.-C. Audran, B. Haye, B. Lambert, Plant Science 119 (1996) 31-37.
18. Z.-P. Xie, C. Staehelin, A. Wiemken, W.J. Broughton, J. Müller, T. Boller, Journal of Experimental Botany 50 (1999) 327-333.
19. X.-M. Yu, M. Griffith, S.B. Wiseman, Plant Physiology 126 (2001) 1232-1240.
20. L.C. Van Loon, E.A. Van Strien, Physiological and Molecular Plant Pathology 55 (1999) 85-97.
21. T. Boller, A. Gehri, F. Mauch, U. Vögeli, Planta 157 (1983) 22-31.
22. F. Hamel, G. Bellemare, Biochim Biophys Acta 1263 (1995) 212-220.
23. D.A. Samac, C.M. Hironaka, P.E. Yallaly, D.M. Shah, Plant Physiology 93 (1990) 907-914.
24. C.P. Selitrennikoff, Applied and Environmental Microbiology 67 (2001) 2883-2894.
25. B. Thomma, B. Cammue, K. Thevissen, Planta 216 (2002) 193-202.

Abstract

PATHOGENESIS RELATED PROTEINS 1

Milica POPOVIĆ, Department of Biochemistry, Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16; 11000 Belgrade; Serbia

In conditions of stress, plant engage a large number of defense strategies. These strategies include different types of proteins that have a defensive role. A group of plant proteins induced in conditions of biotic stress is named pathogenesis related proteins or PR proteins. PR proteins are divided into 17 families, PR-1 to 17 in order in which they were discovered. A large body of experimental data has emerged in the last 15 years and altered considerably our understanding of this topic. The aim of this paper is short overview of nomenclature, classification, induction, the prevalence, function and role of PR proteins.

ВЕСТИ из ШКОЛЕ
ВЕСТИ за ШКОЛЕ

ХЛЕБ У НАСТАВИ ХЕМИЈЕ У ОСНОВНОЈ ШКОЛИ

Јасмина Н. КОРОЛИЈА[1], Јелена БУРБЕВИЋ[2], Милена ТОШИЋ[1], Игор МАТИЈАШЕВИЋ[1] и Иван ГУТМАН[2]

[1]Хемијски факултет Универзитета у Београду и [2]Природно-математички факултет Универзитета у Крагујевцу, korolija@chem.bg.ac.rs

овим чланком желимо да допринесемо већој заступљености предмета који се боље образовањем и васпитањем, у низу области са односе на настајање планове и прорраме за сео да буду реализовани налази у свим законским актима сада о томе да настајани садржаји за ученике пред исходи учена буду примењени у животу. Како се жаји, методе настајае/учења и области рада омогући да ел оеоа присуствује јесте да се нађем настајених садр- "наука–технологија–друштво" (НТД) присуству. Осно- на настајем природних наука, поједиоі под називом јајски и експериментално добро умежереног присту- у настајем хемије. Између свега прокламисаи из мето- тих наука, хлеб би требало да буде незаобилазна тема хемијско–технолошких садржаја, или и садржаји дру- ове животне намирнице могу обрађивати различитим хлебу у основној школи. С обзиром на то да се нађем

Сврха чланка јесте да укаже на важност учења о исхрани помоћу присуства у основношкској настај- ем хемије.

ХЛЕБ - НАСТАВНИ АСПЕКТИ

На основу нашег рада у школској пракси, неђемо потврдити ако кажемо да се о хлебу (слика 1) не зна у настави хемије. Разлоза такво стања јесу рад настав- ника и наставни планови и програми хемије. Први на- ведени разлог неђемо разматрати у овом чланку, док ђемо се осврнути на наставне планове и програме кој за наставнике обезбеђују документа.

Слика 1. Хлеб - основна животна намирница у нашој земљи.

це полупедитда и протеина, и да настаяване ове везе знаі настаяване педитдне везе, кво функционалне трај-ної индустрија. У Египет стоја да имаат треба да машетско индустрија, шамка и педитоне и текстил-хрвмбеної индустрија, скрода и пехрвмбеної и фар-хоа пшмена и свакодневном жиот: сахарозе и пре-рок застапреност атрених хидрата и пиродор и ри-них користина и користи. Важно је да се јакже на шин-пија користина и на знаваі незастрених мас-мата и Ајра и живи фајмма и рихових знаваі за іедначена и рихових смешт, на енергетеско ајоин на познавану својства фолошки важних остаских тиіа настојане тиме и кроме стоја да треба инстистрати и пторам садржи и јајајтемо за реализа-протеина и живи фајмма.

Ајоин морај аносити хранов; зна о знаваі и ајоин јине ајоин аносити хранов; зна о знаваі и ајоин мској структури; зна да се есенцијине аминокисе-ајое последица разлика и рихової разлинатої хе-лината својства и фолошка функција скрода и пеј-жи, по хемијском саставу, пеј(ајоза); разуме да са раз-(на пример, да се хранај прави од пеј(ајоза; да је па-фајмма; зна о практичној примени атрених хидрата хидрати и зна о рихових знаваі и ајоин и живи ајоин мастин и Ајра и живи фајмма; зна шта са атрен атренин хидратима и протеинима; зна о знаваі и наводи жиотне нашиние готате мастима и Ајрима, између остајог стоја да фи Аленик треба да зна да настаја тему, ајдрајтемим ајдрајтима за ову настаја тему.

У обрајтемим ајдрајтима није било сајтитских про-новили сво да и обајастин која се однося на фолошки и основној шкоји за педнод од 1923–2010. године аста-ше, предлеком настаја прогрма за предмет хемија доказивање скрода и денатурација протеина. Штаван-творјивостин мастин и Ајра и атрених хидрата и водн, насјов Мастим и Ајра предвиђено је да се користај рас-фикција мастин, ті водивање сајина. За вежбу или је за демонстрационе опет предвиђена је сапони-

- Витамини
- Протеини
- Аминокиселине
- полисахариди (скроб и пеј(ајоза)
- Атрени хидрати и предлед: моносахариди (глукоза и фруктоза), дисахариди (сахароза),
- Масти и Ајра

Садржај ове настаје теме је следећи:

фолошки снидром [2].

забрињавајуће повећан број младих који имају мета-здравље млади, пототово и тренутку када је код нас и висилно одвајање јер се неосредно однося на Ајра хране и исхране. Такав приступ има и образовно начинилиа, она се правестено мора разматрати из ошошки важна обтаска јединена састојци жиотних ваће и један час за вежбе) [1]. С обзиром на то да су ди-ва (седам часова за образду трајева, четири за утврђи-јанска јединена, за који је укупно предвиђено 12 часо-разреду и океиру настаје теме Биолошки важна ор-ни шкоји, најпикладнији је да се о хледу или о осном-

Према садашњим прогрмима из хемије за основ-

Слика 2. Производња хлеба у древном Египту.

разној вештине правлена хлеба, од просејаног пше-ја у Египту, већ око 2500. година пре новe ере, поред 2) да

Постоје доказа (трагови у гробницама, слика 2) да

трајштвених наука, или и из или умешности (схема 1).

да се сазнајемо из или разлинатих природних и

Хлеб и неговаа производња и настава хемије може

ОД ПШЕНИЦЕ ДО ВЕЖНЕ ХЛЕБА

а тиме ни хлеб, нису довољно заступљене.

разној, према нашем мишљењу, жиотне наминиле, било Министарство просвете, науке и технолошког развој и Србије финансирала за осми разред [3–7], које је одо-лост, у Србији на основу ових разлика и технолошког наминиија, треба да има истакнуто место. Нажа-лиси део нашег становништва и најважнија жиотна храна је основа, а за ве-ја он садржавао примере конкретних жиотних на-од великог помоћи при обради ове наставне теме користе „жиотне наминиле“ и „правилна исхрана“, сматрамо да би наставнима требали ово дајемо помоћу „жиотне наминиле“ и „правилна обраду наставне теме Биолошки важна објашњ-ја-ње и Ајра и Ајра, витамини, минерали и вода), о важности ном Аносн шест главних врста супстанци неопходних океиру ове теме Аленини треба да науче да се исхра-исхрану обради кроз самостајне радове Аленика. У атрених хидрата, протеина, витамина) за правилну биолошки важних остаских јединена (масти и Ајра, тиреку функ(ија) и остаиних. Пределожа је да се знаваі биолошки знаваі протеина, нихову традицију и катали-ција са наставом биологије, Аленитима јакже на био-ногиа. Од највеће важности је, да се у кореја-лиина, протеинска аминокиселина и есенцијалне ами-ти на значене појмова: аминокиселина, α-аминокисе-биокиселине трупе друте аминокиселине. Важно је ајзаз-између амино трупе једне аминокиселине и кар-треба објаснити кво реакцију која формално настаје

Таблєла 1. Хємічєскі састав зрна жита (%), обрабатаного на бєзводну пшєницу

Вєстa жита	Пратєіны	Скроб	Цєлулоза	Лєпіды	Мінєральнєástатнє
Хєрда	10,8–13,1	67,0–71,0	12,5–13,1	1,5–1,6	2,6–2,9
Пєрлєнка	7,2–7,6	72,0–75,0	10,0–11,8	1,6–2,2	5,4–5,9
Овас	9,6–12,6	56,0–68,5	10,0–11,5	5,0–6,0	3,0–3,4
Рж	10,5–13,1	76,9–81,2	2,0–2,2	1,8–2,0	1,9–2,4
Jєчмєн	9,6–12,2	69,3–77,2	4,2–5,2	2,3–2,5	2,4–3,1
Кукурузa	8,8–14,8	62,2–83,0	2,0–3,0	3,3–6,9	1,0–2,0
Тєрдa пшєнєцa	16,0–25,2	60,0–77,4	2,0–3,0	1,6–1,9	1,7–1,8
Мєкa пшєнєцa	9,6–16,0	63,8–79,9	1,9–3,0	1,5–1,9	1,7–1,8

жєлтaрнцa, a то сл: пшєнєцa, рaж, jєчмєн, кукурузa, овaс, жєлтaрнцa мoжє прєрєрєзaтєи oд рaзлєчнєх вєстa

Хлєб сє мoжє прєрєрєзaтєи oд рaзлєчнєх вєстa

ЖЄЛТАРНЦЄ ЗА ПРОИЗВОДЊУ ХЛЄБА

хемије хлєбa.

У дaльєм тєкстy прєкaзaни сy нєкє бєлєшєнє прєс прaвljєнa хлєбa [8, 9].

Сaмoєнник jєднoм прєкaзyje, нa кojєм фaзa пoкaзyje прoшишє jє oкo 30. тoднє прє нoвє єрє пoдєшєнyт вєлєшєнє кo сy пєкaзн бнли пoштoвaни y Рнмy, свєдoчи и тo нa прє нoвє єрє) y Рнмy постојало 329 пєкaрa [8]. Кoлнкo вндн сє пo тoмє штo jє зa врємє цaрa Aвгyстa (30. тoднє. тих вєстa хлєбa бнли пoзнaвaни вишє oд сєдaмдєсєт рaзлнчнє нoвє єрє Трнн jaкн пoрoдицa (мєђy нимa Пaлaчнитє дa сy сє трнн фнлoзoфи (мєђy нимa Пaлaтoн) дaвaли тaлєнтнмa пєкaрa те дa сy oкo 300. тoднє ндрaвaнли умєтнoст; тaкoв схвaтaнy нду y пoмoл и вoдни хлєбa. Смaтрa сє дa сy Трнн oд прaвljєнa хлєбa тyдa oнo шєст нyтa вєљи y oднoсy нa прoтєнє. Пoрєд прaтa oкo шєст нyтa вєљи y oднoсy нa прoтєнє. Пoрєд хлєбa и Рнмрaнин, бнли сy вєoмa вєшти y прoизвoдњи хлєбa. Смaтрa сє дa сy Трнн oд прaвljєнa хлєбa тyдa oнo шєст нyтa вєљи y oднoсy нa прoтєнє. Пoрєд прєдвaљaнa“ [8, стр. 223]. Трнн, a касније пoд нaхoвнм нaчaнoт брaшнa, aнjн сy рєзyлтaти бнли „крєaтнвни и прaвljєнa хлєбa. На прнмєр, зaстyпљєнoст скрoбa oд пoсно прoтєнa oд врстє дo врстє житa мєнa сє зa пo тaв и квaлитєт. На прнмєр, зaстyпљєнoст скрoбa oд прaвljєнa хлєбa, прєвєктнo yлaгє и на нєтoв хемијски сaстaв. Рaзлнкa y хемијском сaстaвy зрнa житa oд кojих сє прaвљєнх састојака (тaбєлa 1) зрнo житa сaдржи нa вoдaв

та пропонували да он мча и найвели масени удео у масени удео мча утрени хидрат скроб (табела 1), из ве-

Из саставе зрна жита вани се да у њему найвећи

оје.

ОЊе ранје о тесту за хлеб и о самом хлебу бе-

зевањаса кои штите хлеб од бољи. У давањем тесту

предвата и прехрамбених адитива, на пример кон-

поли мастн, шећера, мleка, различитих еналмских

них, често се у хлеб мора наглати и друти састојци

ка и хлеб кои не садржи кухињску со. Поред основ-

Међутим, познато је да се прави и бескисени хлеб

вилник, такође доводјава и додатак адитива.

тих средстава за ферментацију и кухињске соли". При-

друте доводјене тајности, нежарског квасца или дру-

сирања, и то: брашна од жита, пшенице, воде или

одликовањем и испечем теста умешеног од основних

хлеб: „производ добијен мешањем, ферментацијом,

састојка. На пример, у правилнику [12] каже се да је

говорити искључно нису присутна сва четири наведена

хиљска со, те зато ма мишљења да се о хлебу не може

ових основних састојака ту су најчешће и квасац и ку-

Главни састојци хлеба су брашно и вода. Поред

Слика 3. Главни возећа молекула глукозе у полимер-

ним молекулама амилозе (горе) и амилопектина (доле).

пустења (слика 4) [18]. На тај начин правио се проте-

латалта глутенина, а кое потиче од амиокиселине

доводи до стварања дисулфидних веза (-S-S-) између

У току друге мешања теста при прављењу хлеба

тен.

протеина из брашна је нехова способност да када се

помешају са водом формирају лепљиву, високоелас-

тичну, растегљиву масу протеина кои се назива глу-

шенични представник проламина је глијадин, а пред-

олазећим растворима киселина (глутенини) [17]. У

ном раствору етанола (проламини) и растворе у раз-

ним растворима соли (глобулини), растворе у води-

растворе у води (албумини), растворе у разблаже-

пред свои растворљивост могу класификовати на

ра) и хемоа згатајна шенице. Протеини брашна се

шпоком оксет и заваси од сорте (генетских факто-

Садржај протеина у шеничном брашну варира у

пријатан мирис [16].

ја) у хлеб дају кори хлеба. Термичком раз-

тварањем утрених хидрата настаје фурфурал кои (са

лина и редукујућих група из утрених хидрата,

стаје обојени производи у реакцији амиокисе-

варана доје коре хлеба. Током печења хлеба на-

Важна улога утрених хидрата је и у процесу ст-

ни они су одговорни и за слатког укус хлеба.

са сировина у поретној фази ферментације.

Користи утрених хидрата слатког укуса (моно-

сахарида и дисахарида) има у доводној количи-

ности. Приликом мешања теста утрени хидрати

чина скробних зрнаца и степен нихове оштеће-

скроба у брашну на својства теста утиче и вели-

прављену хлеба, пореди пропентност садржаја

хидрата (осим скроба) износи од 1 % до 2 %. При

У шеничном брашну кулиа садржај утрених

сахароза, малтоза, друти малтозни и целулоза.

У шеничном брашну јесу: глукоза, фруктоза,

тосахариди, кои се називају декстрини.

Утрени хидрати кои се осим скроба налазе

амилозе и амилопектина, при чему настају оли-

гелимилне растварање молекула (хидролизе)

ност зрна. Тек у присуству ензима (амилазе) долазе до

лак), јер под дејством воде долази до бубрења скроб-

воде, док у врућој води дође губитак смесу (скробни ле-

део скробног зрнца. Скроб је нерастворан у хладној

лоза (25 %) док амилопектин (75 %) чини сопствени

У шеничном скробу унутрашњи део чини ами-

лопектин има разграну структуру.

но повезани α-1,6-гликозидним везама због чега ами-

гликозидним везама, а та линеарни ланци су међусоб-

У којима су остали молекула глукозе повезани α-1,4-

лопектин је полисахарид кои садржи линеарне ланце

полисахарида, амилозе и амилопектина, кои се међу-

собно разликују по начину настајања полисахаридног

ланца (слика 3). Амилоза је нерастварати полисахарид

у коме су остали моносахаридних јединица (α-Д-глу-

копиранозе) повезани α-1,4-гликозидном везом. Ами-

лопектин је полисахарид кои садржи линеарне ланце

шенични представник проламина је глијадин, а пред-

ставник глутенина је глутенин. Заједничко својство

олажених растворима киселина (глутенини) [17]. У

ном растору етанола (проламини) и растворе у раз-

ним растворима соли (глобулини), растворе у воде-

растворе у води (албумини), растворе у разблаже-

пред свои растворљивост могу класификовати на

ра) и хемоа згатајна шенице. Протеини брашна се

шпоком оксет и заваси од сорте (генетских факто-

Садржај протеина у шеничном брашну варира у

пријатан мирис [16].

ја) у хлеб дају кори хлеба. Термичком раз-

тварањем утрених хидрата настаје фурфурал кои (са

лина и редукујућих група из утрених хидрата,

стаје обојени производи у реакцији амиокисе-

варана доје коре хлеба. Током печења хлеба на-

Важна улога утрених хидрата је и у процесу ст-

ни они су одговорни и за слатког укус хлеба.

са сировина у поретној фази ферментације.

Користи утрених хидрата слатког укуса (моно-

сахарида и дисахарида) има у доводној количи-

ности. Приликом мешања теста утрени хидрати

чина скробних зрнаца и степен нихове оштеће-

скроба у брашну на својства теста утиче и вели-

прављену хлеба, пореди пропентност садржаја

хидрата (осим скроба) износи од 1 % до 2 %. При

У шеничном брашну кулиа садржај утрених

сахароза, малтоза, друти малтозни и целулоза.

У шеничном брашну јесу: глукоза, фруктоза,

тосахариди, кои се називају декстрини.

Утрени хидрати кои се осим скроба налазе

амилозе и амилопектина, при чему настају оли-

гелимилне растварање молекула (хидролизе)

ност зрна. Тек у присуству ензима (амилазе) долазе до

лак), јер под дејством воде долази до бубрења скроб-

воде, док у врућој води дају течу смесу (скробни ле-

део скробног зрнца. Скроб је нерастворан у хладној

лоза (25 %) док амилопектин (75 %) чини сопствени

У шеничном скробу унутрашњи део чини ами-

лопектин има разграну структуру.

но повезани α-1,6-гликозидним везама због чега ами-

гликозидним везама, а та линеарни ланци су међусоб-

У којима су остали молекула глукозе повезани α-1,4-

лопектин је полисахарид кои садржи линеарне ланце

шенични представник проламина је глијадин, а пред-

ставник глутенина је глутенин. Заједничко својство

олажених растворима киселина (глутенини) [17]. У

ном растору етанола (проламини) и растворе у раз-

ним растворима соли (глобулини), растворе у воде-

растворе у води (албумини), растворе у разблаже-

пред свои растворљивост могу класификовати на

ра) и хемоа згатајна шенице. Протеини брашна се

шпоком оксет и заваси од сорте (генетских факто-

Садржај протеина у шеничном брашну варира у

пријатан мирис [16].

ја) у хлеб дају кори хлеба. Термичком раз-

тварањем утрених хидрата настаје фурфурал кои (са

лина и редукујућих група из утрених хидрата,

стаје обојени производи у реакцији амиокисе-

варана доје коре хлеба. Током печења хлеба на-

Важна улога утрених хидрата је и у процесу ст-

ни они су одговорни и за слатког укус хлеба.

са сировина у поретној фази ферментације.

Користи утрених хидрата слатког укуса (моно-

сахарида и дисахарида) има у доводној количи-

ности. Приликом мешања теста утрени хидрати

чина скробних зрнаца и степен нихове оштеће-

скроба у брашну на својства теста утиче и вели-

прављену хлеба, пореди пропентност садржаја

хидрата (осим скроба) износи од 1 % до 2 %. При

У шеничном брашну кулиа садржај утрених

сахароза, малтоза, друти малтозни и целулоза.

У шеничном брашну јесу: глукоза, фруктоза,

тосахариди, кои се називају декстрини.

Утрени хидрати кои се осим скроба налазе

амилозе и амилопектина, при чему настају оли-

гелимилне растварање молекула (хидролизе)

ност зрна. Тек у присуству ензима (амилазе) долазе до

лак), јер под дејством воде долази до бубрења скроб-

воде, док у врућој води дају течу смесу (скробни ле-

део скробног зрнца. Скроб је нерастворан у хладној

лоза (25 %) док амилопектин (75 %) чини сопствени

У шеничном скробу унутрашњи део чини ами-

лопектин има разграну структуру.

но повезани α-1,6-гликозидним везама због чега ами-

гликозидним везама, а та линеарни ланци су међусоб-

У којима су остали молекула глукозе повезани α-1,4-

лопектин је полисахарид кои садржи линеарне ланце

шенични представник проламина је глијадин, а пред-

ставник глутенина је глутенин. Заједничко својство

олажених растворима киселина (глутенини) [17]. У

ном растору етанола (проламини) и растворе у раз-

ним растворима соли (глобулини), растворе у воде-

растворе у води (албумини), растворе у разблаже-

пред свои растворљивост могу класификовати на

ра) и хемоа згатајна шенице. Протеини брашна се

шпоком оксет и заваси од сорте (генетских факто-

Садржај протеина у шеничном брашну варира у

пријатан мирис [16].

ја) у хлеб дају кори хлеба. Термичком раз-

тварањем утрених хидрата настаје фурфурал кои (са

лина и редукујућих група из утрених хидрата,

стаје обојени производи у реакцији амиокисе-

варана доје коре хлеба. Током печења хлеба на-

Важна улога утрених хидрата је и у процесу ст-

ни они су одговорни и за слатког укус хлеба.

са сировина у поретној фази ферментације.

Користи утрених хидрата слатког укуса (моно-

сахарида и дисахарида) има у доводној количи-

ности. Приликом мешања теста утрени хидрати

чина скробних зрнаца и степен нихове оштеће-

скроба у брашну на својства теста утиче и вели-

прављену хлеба, пореди пропентност садржаја

хидрата (осим скроба) износи од 1 % до 2 %. При

У шеничном брашну кулиа садржај утрених

сахароза, малтоза, друти малтозни и целулоза.

У шеничном брашну јесу: глукоза, фруктоза,

тосахариди, кои се називају декстрини.

Утрени хидрати кои се осим скроба налазе

амилозе и амилопектина, при чему настају оли-

гелимилне растварање молекула (хидролизе)

ने ने ने

света кромпир, кукуц и пшерка. Значајан извор витамина Д, због тога, поред хлеба у исхрани морају бити заступљене и друге, витамином Д богате, намирнице. Од намирница да које се конзумирају у великим количинама то су пре оброка.

Важно је знати да хлеб не садржи витамин Д, због тога да буде саставни део три главна дневна главна разлитих биолошки важних једињења и да он представља основног хемијског састава јасно је да је хлеб извор витамина. Међутим, хлеб као намирница је здрав и да би та у исхрани требало користити у што мањим количинама. Поштује разне забуде да хлеб није здрав и које су човеку потребне за нормално функционисање поред тога хлеб садржи много хранљивих супстанци или се ово количине током обраде могу смањити. Међутим знатне количине вољне хранљивих супстанци, ограничене од којих се прави хлебно брашно обезвода [10]. Дрвта елементи су заступљени у трагови ма.

Квантите од којих се прави хлебно брашно обезвода [10]. Дрвта елементи су заступљени у трагови, калијум, калцијума, магнезијума, силицијума и фосфорних минерални састојци чине једињења фосфо- ^{0} заступљене су углавном у омотачу плода. Најзаступљенији минерални састојци у комадима су у трагови у односу на 1,7 % до 2,0 % току прерада хлеба.

Минерални супстанце у количини од 1,7 % до 2,0 % у брашну су присутни следећи елементи: пероксидазе, протеазе, β-амилаза. Активност ензима заједнице у брашнини и ензими такође су заступљени у брашну а знатан део поткоре и из квасца. У пшеничном брашну видимо има витамина Б-групе, мање токоферола α (форма витамина Е), док је садржај остатних витамина занемарљив.

У брашну су присутни следећи ензими: пероксидазе, протеазе, β-амилаза. Активност ензима заједнице тесто они имају улогу у повећању броја ваздуху када се брашно помеша са водом и приликом мешења ^{0} заступљене су углавном у омотачу плода. Најзастопљенији минерални састојци у количини од 1,7 % до 2,0 % току прерада хлеба.

Минерални супстанце у количини од 1,7 % до 2,0 % у трагови, калијум, калцијума, магнезијума, силицијума и фосфорних минерални састојци чине једињења фосфо- ^{0} заступљене су углавном у омотачу плода. Најзаступљенији минерални састојци у количини од 1,7 % до 2,0 % току прерада хлеба.

Слика 4. Структурне формуле L-триозина (лево) и L-цистеина (десно)

Витамини и ензими такође су заступљени у брашну а знатан део поткоре и из квасца. У пшеничном брашну видимо има витамина Б-групе, мање токоферола (форма витамина Е), док је садржај остатних витамина занемарљив.

У брашну су присутни следећи ензими: пероксидазе, протеазе, β-амилаза. Активност ензима заједнице у тесто они имају улогу у повећању броја ваздуху када се брашно помеша са водом и приликом мешења поштапетнихianaда, а активност им се завршава у хлебу.

Минерални супстанце у количини од 1,7 % до 2,0 % току прерада хлеба.

Слика 4. Структурне формуле L-триозина (лево) и L-цистеина (десно)

Витамини и ензими такође су заступљени у брашну а знатан део поткоре и из квасца. У пшеничном брашну видимо има витамина Б-групе, мање токоферола (форма витамина Е), док је садржај остатних витамина занемарљив.

У брашну су присутни следећи ензими: пероксидазе, протеазе, β-амилаза. Активност ензима заједнице у тесто они имају улогу у повећању броја ваздуху када се брашно помеша са водом и приликом мешења поштапетнихianaда, а активност им се завршава у хлебу.

Минерални супстанце у количини од 1,7 % до 2,0 % току прерада хлеба.

ЗАХВАЛНИЦА

Чланак је резултат рада на пројекту Технологија и процес нових у функцији: функционалности, обрада зоне и међуфазне електрохемијске перформансе (172048) и пројекту Технологија брашна и математичко моделирање рада са примесама у хемији и радиофармацеутској (172033) које финансира Министарство просвете, науке и технолошког развоја. Захваљујемо се проф. др Зорану Бојићићу, Марку С. Тодоровићу и Зорани Бојићевић Бојићићу, Марку С. Тодоровићу и Зорани Бојићевић кој су нам помогли при изради овог рада.

ЛИТЕРАТУРА

1. Службени гласник РС–Просветни гласник, 58 (2), 76–83, 2010.
2. V. Dimitrijević Stefković, E. Čolak, P. Vorgačić, D.Gostiljac, B.Stefković, S. Popović, E. Čanović, M. Milić, R. Obrenović, V. Vukćević, D. Nikolić, T. Nišić, G. Milić, G. Rejić, Clin. Chem. Lab. Med. 45 (9) (2007) 1140-1144.
3. Љ. Манојлић, Ј. Коровић, Д. Дванојевић, Хемија 8. - за 8. разред основне школе, Завод за уџбенике, Београд, 2010-2011.
4. Т. Недељковић, Д. Анђелковић, Хемија 8 - Уџбеник хемије за осми разред основне школе, Логос, Београд, 2010.
5. Ј. Адамов, Р. Трубјевић, С. Кладжковић, Хемија - за 8. разред основне школе, ТЕРУНДИЈУМ, 2012.
6. Д. Раденковић, М. Раденковић, Хемија - Уџбеник за 8. разред основне школе, Клетт, Београд, 2013М.
7. М. Рајићановић, М. Марковић, Хемија - уџбеник за осми разред основне школе, BIGZ, Београд, 2013.
8. M. Toussaint–Samat, A history of food, Blackwell, Oxford, 1996. (Преводи книге: М. Toussaint–Samat, Histoire matérielle et morale de la nourriture BORDAS, Paris, 1987. Преводи поменуте книге доступни је у Библиотеци Одељења за историју Филозофског факултета у Београду.)
9. http:\\www.livius.org/ro-rz/rome/rome_tomb_eurysaces.html (проверено 16. јула 2014)
10. С. Л. Јевтић, Посебно рашчарство, Наука, Београд, 1992.
11. Закон о безбедности хране, Службени гласник РС, бр. 41/2009, (доступно на http:\\www.paragraf.rs/propisi/zakon_o_bezbednosti_hrane.html, проверено 11. јула 2014.)
12. Правилник о квалитету жита, млинских и пекарских производа, тестенина и брзо смрзнутих теста (доступно на http:\\www.tehnologijahrane.com/

12. Правилник о декларисању, означавању и рекламирању храну хране, Службени гласник РС, бр. 85/2013, стр. 34-43. Pravilnik (доступно на http://www.tehnologijahrane.com/pravilnik/pravilnik-o-deklarisanju-oznacavanju-i-reklamiranju-hrane, проверено 11. јула 2014.)
14. Друга аутора,潮ообуреерни лекциои, ПП Филип Вишњић, Београд, 2004.
15. М. Марковић, http://www.tehnologijahrane.com/tehnologija-mlinarstva-i-mlinarstva/proizvodnja-pseniczog-brasna (проверено 11. јула. 2014).
16. J. A. Johnson, L. Rooney, A Salem, Chemistry of bread flavor, у књизи: P. E. Gould (Ed.), Flavor Chemistry, Am. Chem. Soc., Washington, 1966, pp. 153-173.
17. З. Вујић, Експериментална биохемија - практикум, Радник, Београд 2002.
18. H. This, Casseroles épiroutettes, Belin, Paris, 2002
19. K. Dewettinck, F. Van Bockstaele , B. Kühne, D. Van de Walle, T.M. Courtens, X. Gellynck, J. Cereal Sci. 48 (2008) 243.

ВЕСТИ ИЗ СХД

ИЗВЕШТАЈ О РАДУ СА 51. САВЕТОВАЊА СРПСКОГ ХЕМИЈСКОГ ДРУШТВА

У периоду од 05 – 07. јула 2014. године одржано је у Нишу 51. Саветовање Српског хемијског друштва, а 2. Конференција младих хемичара. Обе манифестације су одржане у Ректорату Универзитета у Нишу. По доброј старој традицији на скупу су изложени оригинални научни радови из практично свих области хемије, хемијске технологије и металургије. На саветовању је изложено 114 радова сарадника кроз одговарајуће секције и то: 3 пленарна предавања, 3 предавања по позиву, 15 усмених саопштења и 93 постера.

Пленарни предавачи

1. Professor Matthias D'hooghe, SynBioC Research Group, Department of Sustainable Organic Chemistry and Technology, Faculty of Bioscience Engineering, Ghent University, Belgija

„Application of small-ring azaheterocyclic building blocks for the construction of biologically relevant nitrogen compounds"

2. Professor Ljudmil Antonov, Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia 1113, Bułgarska

„Tautomerism of azo dyes and Schiff bases: history, investigations and applications"

3. Professor George Horvai, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics, Szent Gellert ter 4., Budapest, Mađarska

„Structure and composition of soft interfaces"

Предавачи по позиву

1. Тодорка С. Стојановић, Департман за хемију, Природно-математички факултет, Ниш

„Analysis of secondary metabolites of lichens-unexpected expertises"

Истичемо да молекуларну генетику и генетичко инжењерство и настава хемије.

Радови као и постерска сопштења публикована су на комплакт диску који чини саставни део материјала са 51. Саветовања Српскохемијског друштва.

2. Конференција младих хемичара укључила је 2 **пленарна предавања**: Јасмина Николиновић-Рунић, Институт за молекуларну генетику и генетичко инжењерство и настава хемије, хемија жиготне средине, наука о материјалима, хемијско инжењерство и технолошка хемија, биотехнологија, хемија и технологија хране, хемија и технологија макромолекула (5 радова и 38 постера), органска хемија и биохемија (5 радова и 37 постера), неорганска хемија, физичка хемија, електрохемија, теоријска хемија, хемија жиготне средине, наука о материјалима, хемијско инжењерство и технолошка инжењерство и наставе хемије.

Радови са конференција су приказани у форми рада на четири странице. Такви радови се вредновали могућност и примјенили своје резултате за будуће истраживања у области органске синтезе. Такође радови су са одговарајућим упутствима неки аутори су исказали у оквиру одговарајућих секција. У складу са ентузијазмом. Од 114 саопштених радова 15 је изабрано у секцији. Завидним јесик конференције био је допринели успешном раду кроз предавања или постерске секције. Завидним јесик конференције био је допринели успешном раду кроз предавања или постера из инострантва и предавања по позиву и сам су баве истраживањима у хемији, као и пленарни предавачи сих наших универзитета, института и центара који се

На 51. Саветовању били су заступљени учесници

„Synthesis and characterization of the novel Pt(II) complexes with pyrazole derivatives"

1. Татјана Трпић-Петровић, Лабораторија за физику, Институт за нуклеарне науке „Винча", универзитет у Београду

„Applications of membrane extraction in analytical, environmental and radiochemistry. Results and perspective"

3. Биљана Петровић, Природноматематички факултет, Крагујевац

„Synthesis and characterization of the novel Pt(II) complexes with pyrazole derivatives"

Предавање по позиву:

- Др Александар Декански, научни саветник, Институт за хемију, технологију и металургију

Предавање по позиву:

- Др Милан Вранеш, доцент, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, биохемијски факултет.
- Др Јасмина Николић-Рунић, виши научни сарадник, Институт за молекуларну генетику и генетичко инжењерство, Универзитет у Београду, Биохемијска гнезда – дијагностички метод будућности.

Предавања по позиву:

- Др Александар Декански, научни саветник, Институт за хемију, технологију и металургију

Другa конференција младих хемичара Србије се одржала је 07. јуна 2014. године у Ректорату Универзитета у Нишу у организацији Српског хемијског друштва и Института за физичку хемију Српске академије наука и уметности.

Посебан допринос организацији конференције дали су чланови Секције за електрохемију, Секције за биоорганску хемију, Секције за хемију и заштиту животне средине; Универзитет у Новом Саду; Технолошки факултет, Универзитет у Београду, "Електростатички и топлотни дезинтегратор као предтретман интензивне активности хетерогених катализатора", "Индекси тежине и дискриминантност пробојних јачина и декларативних задатака у основношколској настави хемије".

Игор Опсеница

- Центар за електрохемију, Како презентовати и публиковати резултате научног истраживања.

Научни обзор Конференције је после резервисане подцентих радова одабрао три рада која обухватају тематске области Земља и Биотехнологија које су представили млади хемичари и Нишу у организацији Српског друштва и Института за физичку хемију Српске академије наука и уметности.

Предавање по позиву:

- Др Александар Декански, научни саветник, Институт за хемију, технологију и металургију

Предавање по позиву:

- Др Милан Вранеш, Природно-математички факултет, Нови Сад, Ionic Liquids – green solvents for biocatalyst", Милан Вранеш, Природноматематички факултет, Нови Сад, Ionic Liquids – green solvents for the future", **предавање по позиву**: Александар Декански, НХТМ – Центар за електрохемију, Београд, „How to present and publish results of scientific research", З уснена наградна и 25 постера.

Сматрамо да је 51. Саветовање Српског хемијског друштва организовано на високом нивоу захваљујући све великом ангажовању колега хемичара младих конференција.

Софија Соиа

ИЗВЕШТАЈ О РАДУ СА 2. КОНФЕРЕНЦИЈЕ МЛАДИХ ХЕМИЧАРА

Друга конференција младих хемичара Србије одржана је 07. јуна 2014. године у Ректорату Универзитета у Нишу у организацији Српског хемијског друштва и Института за физичку хемију Српске академије наука и уметности. Посебан допринос организацији конференције дали су чланови Секције за биоорганску хемију, Секције за хемију и заштиту животне средине; Универзитет у Новом Саду, "Електростатички и топлотни дезинтегратор као предтретман интензивне активности хетерогених катализатора", "Индекси тежине и дискриминантност пробојних јачина и декларативних задатака у основношколској настави хемије".

Игор Опсеница

- Центар за електрохемију, Како презентовати и публиковати резултате научног истраживања.

Научни обзор Конференције је после реферисане подцентих радова одабрао три рада која обухватају тематске области Земља и Биотехнологија и Нишу у организацији Српског друштва и Института за физичку хемију Српске академије наука и уметности.

Предавање по позиву:

- Др Милан Вранеш, доцент, Природно-математички факултет, Нови Сад, Ionic Liquids – green solvents for biocatalyst", Милан Вранеш, Природноматематички факултет, Нови Сад, Ionic Liquids – green solvents for the future", **предавање по позиву**: Александар Декански, НХТМ – Центар за електрохемију, Београд, „How to present and publish results of scientific research", З уснена наградна и 25 постера.

Сматрамо да је 51. Саветовање Српског хемијског друштва организовано на високом нивоу захваљујући све великом ангажовању колега хемичара младих конференција.

Софија Соиа