

ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД

год. 50

бр. 5 (ноембар)

YU ISSN04406826

UDC 54.001.93

ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД CHEMICAL REVIEW



Годиште 50

број 5
новембар

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

Volume 50
NUMBER 5
(November)

Publisher
SERBIAN CHEMICAL SOCIETY
Belgrade/Serbia, Karnegijeva 4

Издаје
СРПСКО ХЕМИЈСКО ДРУШТВО

Телефон 3370-467

Карнегијева 4

излази двомесечно

ОДГОВОРНИ И ГЛАВНИ УРЕДНИК
Ратко М. Јанков

ПОМОЋНИК ОДГОВОРНОГ И ГЛАВНОГ
УРЕДНИКА
Драгица Тривић

ЧЛАНОВИ РЕДАКЦИЈЕ
Владимир Вукотић, Бранко Дракулић, Јелена Радосављевић
и Воин Петровић

Издавање часописа „ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД“ помажу:
Технолошко-металуршки факултет, Хемијски факултет и
Факултет за физичку хемију у Београду.

УРЕЂИВАЧКИ ОДБОР

Иван Гутман, Снежана Зарић, Јован Јовановић, Славко
Кеврешан, Драган Марковић, Радо Марковић, Владимир
Павловић, Радомир Саичић, Живорад Чековић (пред-
седник).

Годишња чланарина, укључује часопис „Хемијски преглед“,
за 2009. годину износи:
- за запослене..... 1.400,00
- за пензионере, студенте, ђаке и незапослене.....600,00
- претплата за школе и остале институције..... 3.000,00
- за чланове из иностранства..... € 40,-
- претплата за институције из иностранства € 50,-

Чланарину и претплату можете уплатити на рачун СХД:
205-13815-62, позив на број 320.

Web site: <http://www.shd.org.yu/hp/>
e-mail редакције: hempred@chem.bg.ac.rs

Припрема за штампу: Јелена и Зоран Димић, Светозара
Марковића 2, 11000 Београд

Штампа: Завод за графичку технику Технолошко-
металуршког факултета Београд, Карнегијева 4

Насловна страна и Интернет верзија часописа:
Слободан и Горан Ратковић, [RatkovicDesign](http://RatkovicDesign.com)
www.ratkovicdesign.net
office@ratkovicdesign.net

САДРЖАЈ

ЧЛАНЦИ

Бранимир ЈОВАНЧИЋЕВИЋ
Branimir JOVANČIĆEVIĆ

ОД ФОТОСИНТЕЗЕ ДО БЕНЗИНСКЕ ПУМПЕ
FROM PHOTOSYNTHESIS TO PETROL STATION114

Иван ГУТМАН, Горица ЂЕЛИЋ, Аца МАРКОВИЋ, Јелена
ЂУРЂЕВИЋ
Ivan GUTMAN, Gorica ĐELIĆ, Aca MARKOVIĆ and Jelena
ĐURĐEVIĆ

ХЕМИЈА ПАПРИКЕ
CHEMISTRY OF PAPRIKA 120

Љиљана ДОШЕН-МИЋОВИЋ
Ljiljana DOŠEN-MIĆOVIĆ

ПОЧЕЦИ КОНФОРМАЦИОНЕ АНАЛИЗЕ
– И ШТА ЈЕ ПОСЛЕ БИЛО
*THE BEGINNINGS OF CONFORMATIONAL ANALYSIS AND
SUBSEQUENT RESULTS*123

Радисав ГОЛУБОВИЋ, Нина ЈЕВТИЋ и Љубица ПЕРИЋ
Radisav GOLUBOVIĆ, Nina JEVTIĆ, Ljubica PERIĆ

ХЕМИЈА У ПЕТНИЦИ – ДВАДЕСЕТПЕТ ГОДИНА ИСКУСТВА
CHEMICAL EDUCATION IN PETNICA SCIENCE CENTER ___127

Мелиха ЗЕЈНИЛАГИЋ-ХАЈРИЋ, Инес ВИДОВИЋ
Melihā ZEJNILAGIĆ-HAJRIĆ, Ines VIDOVIĆ

ИСТОРИЈСКИ РАЗВОЈ СПОЗНАЈЕ О АТОМУ
*HISTORICAL DEVELOPMENT OF KNOWLEDGE
ABOUT THE ATOM*132

ВЕСТИ из СХД

НОВО РУКОВОДСТВО СХД-ХЕМИЈСКОГ ДРУШТВА
ВОЈВОДИНЕ137

РЕАКТИВИРАН ЈЕ РАД ПОДРУЖНИЦЕ СХД У ЧАЧКУ ___137

112 ГОДИНА СРПСКОГ ХЕМИЈСКОГ ДРУШТВА
– СВЕЧАНА СКУПШТИНА137

СЕМИНАР „ЕНЕРГИЈА И ЖИВОТНА СРЕДИНА ДАНАС“ _138

2011. ГОДИНА – МЕЂУНАРОДНА ГОДИНА ХЕМИЈЕ ____138

СЕМИНАР ЗА НАСТАВНИКЕ ШКОЛА ОДРЖИВОГ
РАЗВОЈА139

ОВОГОДИШЊИ РАД ФОНДА НЕНАДА М. КОСТИЋА ЗА
ХЕМИЈСКЕ НАУКЕ139



УВОДНИК

Поштовани читаоци Хемијског прегледа, примиче се крај ове календарске године, а самим тим и годишњица Српског хемијског друштва. Као што знате, СХД на годишњицу свог оснивања организује Свечану скупштину Друштва. Тим поводом Председништво Српског хемијског друштва вас позива да **08. децембра 2009.** године присуствујете Свечаној скупштини Друштва којом ћемо обележити 112 година постојања Друштва. Традиција је да се на тој седници члановима СХД обраде прошлогодишњи добитници награда СХД са пригодним предавањем. Ове године ће предавања одржати Вукадин Леовац, добитник Медаље за трајан и изванредан допринос науци за 2008. годину и Горан Калуђеровић, добитник Медаље за прегалаштво и успех у науци за 2008. годину.

Свечана скупштина ће, дакле, бити одржана 08. децембра 2009. године у Свечаној сали Српске академије наука и уметности у Београду, Кнез Михајлова 35, са почетком у 11.00 часова. Позивницу са дневним редом овог скупа наћи ћете у рубрици *Вести из СХД*. Лепо би било да се скупимо, видимо и тиме, додатно, подржавамо виталност нашег друштва.

У рубрици *Вести из СХД* наћи ћете и многе друге информације из живота и тренутних дешавања у СХД и око њега.

* * *

На осталим страницама овог броја *XII* који је пред вама наћи ћете, као и обично, веома интересантне чланке. Први од њих је чланак "Од фотосинтезе до бензинске пумпе", аутора **Бранислава Јованчићевића**, у коме је успешно успостављена веза између две наизглед неспојиве ствари: бензина и фотосинтезе. Ова веза је, уствари, врло природна, и у овом тексту учињен је покушај да се она детаљно објасни. Имајући у виду да је бензин производ прераде нафте, задатак се своди на тражење везе између нафте и фотосинтезе. Вредност овог чланка утолико је већа што је овај чланак настао као дорада предавања истог аутора које је одржано у оквиру "*Априлских дана просветних радника Србије*", који су одржани на Хемијском факултету 21. IV 2009. године. Посебно се захваљујемо аутору због уложеног труда да ово занимљиво предавање преточи у текст трајно доступан нашим колегама.

* * *

На одржаним *Априлским данима* једно од предавања било је о Истраживачкој станици Петница (ИСП), која је основана 1982. године на иницијативу групе младих истраживача, наставника и студената незадовољних постојећом праксом у образовању и формирању научних кадрова.

Станица је смештена у селу Петница, око 7 км источно од Ваљева и око 100 километара југозападно од Београда. Место је изабрано због изузетног споја природних и културних особености које омогућавају извођење разноврсних облика и садржаја практичне наставе и истраживачког рада.

Истраживачка станица Петница је независна, самостална и непрофитна организација. Основни циљ ИСП Петница је подршка школама у унапређивању квалитета, садржаја и метода научног образовања и додатне наставе и, нарочито, непосредног образовања младих који показују склоности и способности за бављење научним и истраживачким радом. У чланку "Хемија у Петници – двадесетпет година искуства", који су писали стручни радници ИСП, и

то: **Радисав Голубовић**, **Нина Јевтић** и **Љубица Перић** приказани су бројни резултати и велико и квалитетно искуство које су прикупиле наше колеге - сарадници ИСП Петница. Пошто кроз Петницу и програме хемије сваке године прође велики број ученика, биће вам сигурно занимљиво како изгледа тај вид хемијског образовања и његов однос са школском хемијом.

* * *

Паприка је свима позната биљка, а њен плод игра значајну улогу у нашој исхрани. У овом чланку аутори су изложили хемијске детаље који су у вези са две упадљиве и веома варијабилне особине паприке: њеном љутином и њеном бојом. Љутина паприке потиче од групе једињења званих капсаицини, који су амиди неке органске киселине и ванилинамина. Пре сазревања паприка има зелену боју која потиче од хлорофила. У паприкама чија боја приликом сазревања постаје жута, наранџаста и/или црвена, стварају се многобројна обојена једињења из групе каротеноида. О свему овоме, на леп и занимљив начин, пишу у свом чланку аутори: **Иван Гутман**, **Горица Ђелић**, **Аца Марковић**, и **Јелена Ђурђевић**.

* * *

Термин "конформација" означава сваки од безброј тренутних положаја атома неког молекула у простору. Међутим, термин се обично користи за неке од тренутних распореда атома који настају као последица ротације око простих веза у молекулу. Најчешће се узимају у обзир само оне конформације које одговарају минимуму потенцијалне енергије тј. које су најстабилније. Конформациона анализа је анализа физичких и хемијских особина једињења преко анализе њихових конформација у основном, прелазном или ексцитованом стању. Данас је тешко замислити органску хемију без познавања конформационе анализе и без интерпретација које она омогућава. Много више о свему томе можете наћи у чланку "Почеци конформационе анализе – и шта је после било" аутора **Љилане Дошен-Мићовић**.

* * *

Природа и структура свега што нас окружује увек је била предмет интересовања како филозофа тако и научника. Прва филозофска размишљања на ову тему датирају још од VI века п.н.е., из хинду филозофије у Индији, затим грчког атомизма и Асхарите филозофске школе у исламским земљама. Тадашњи филозофи су на различите начине представљали свет који их окружује; размишљања су се разликовала од једне до друге филозофске школе и подручја где су деловали. Заједничко свима њима било је да су они своје теорије темељили искључиво на теоретским концептима, јер тада их још увек није било могуће експериментално доказати, што је данас предуслов свега у модерној науци. Због тога није изненађујуће да су многе од тих теорија биле заборављене. Тек у XIX веку неки од ових концепата поново добијају смисао захваљујући истраживањима која су имала првенствено подлогу у експерименталним доказима. У свом чланку "Историјски развој спознаје о атому" аутори **Мелиха Зејнилагић-Хајрић** и **Инес Видовић** из Сарајева дају преглед развоја тих мисли од самих почетака цивилизације.

Када погледате понуду овог броја XII, несумњиво ћете наћи нешто „за своју душу“, а можда и праксу којом се бавите.

Ратко М. Јанков



ЧЛАНЦИ



Бранимир ЈОВАНЧИЋЕВИЋ, Хемијски факултет, Универзитет у Београду
(е-пошта: bjovanci@chem.bg.ac.yu)

ОД ФОТОСИНТЕЗЕ ДО БЕНЗИНСКЕ ПУМПЕ

(Предавање - "Априлски дани просветник радника Србије", Хемијски факултет, 21. април 2009.)

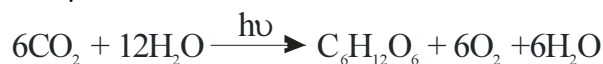
Бензин је најважнији производ прераде нафте у рафинерији. У процесу ректификације из једне врло сложене смеше угљоводоника (фракционом десублијацијом, ректификацијом), изолује се фракција која десублиује у опсегу од 50 до 200 °С. Принос фракције повећава се процесом каталитичког краковања, а квалитет бензина се побољшава каталитичким реформовањем.

Оваква историја почела су да се развијају од половине деветнаестог века. Од тада до данашњих дана достигао су врло висок технолошки ниво. Међутим, истовремено нафта као сировина за добивање бензина од петролеума, сложених лиганда, лигана, угљених хидрата, и других диолимерних сложених једињења изумрлих живих организима враћа нас многу више у прошлост. Враћа нас у геолошку прошлост која се мери милионима година. Сматра се да је шаложене органске супстанце биосфере у седиментне геосфере почело у шоку Камбријума, најстарије епохе Палеозоика, пре око 600 милиона година. Такође, имајући у виду да је нафта само један од облика органске супстанце геосфере, а да целокупна органска супстанца води порекло из биосфере, праве прекурсоре бензина, односно нафте наћи ћемо у још дубљој прошлости, у оним временима када се развијала планета Земља и када су на њој еволуирали аутотрофни организми. Другим, речима праве корене налазимо у временима од пре око две милијарде година када је почео да се развија процес фотосинтезе, једини процес у природи којим се од неорганских једињења стварају органска.

УВОД

Бензин је угљоводонична смеша која се добија ректификацијом нафте као фракција у опсегу 50-200 °С. Служи као гориво за моторе са унутрашњим сагоревањем. Сматра се једним од најважнијих производа данашњице. Фотосинтеза је основни процес који доприноси масовној производњи органске супстанце на Земљи. У историји Земље појава овог

процеса се сматра једним од најважнијих догађаја. У овом процесу енергија сунчеве светлости се претвара у хемијску енергију, при чему водоник из воде са угљен-диоксидом из атмосфере гради органску супстанцу (глюкозу), уз ослобађање кисеоника, као споредног производа. Ослобођени кисеоник потиче из молекула воде:



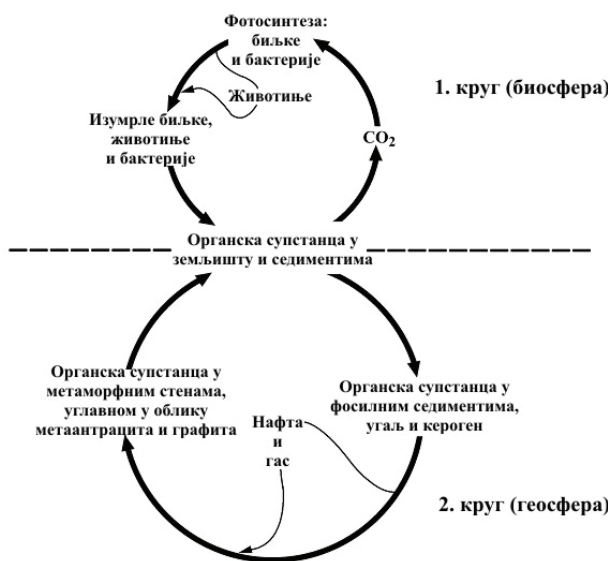
Аутотрофни организми, као што су зелене биљке, из глюкозе синтетизују полисахариде, целулозу и скроб, а и све друге за себе потребне састојке.

На изглед бензин и фотосинтеза су производ и процес између којих је тешко успоставити везу. Међутим, она је врло природна, и у овом тексту учиниће се покушај да се детаљно објасни. Имајући у виду да је бензин производ прераде нафте, задатак се своди на тражење везе између нафте и фотосинтезе.

Нафта представља само један од облика органске супстанце у геосфери. Може се рећи да су знања о пореклу, количини и облицима органске супстанце геосфере добрим делом резултат тражења одговора на једно од најстаријих питања органске геохемије, питање о пореклу нафте. Трудећи се да што боље дефинишу порекло и начин постанка нафте, органски геохемијари су доказали да су органске супстанце земљине коре врло разноврсне по саставу, начину постанка и старости и да представљају део органског материјала биосфере који се уградио у седименте, а затим се и даље физичким, биохемијским и хемијским процесима мењао. Другим речима, доказано је да целокупна органска супстанца геосфере потиче од органске супстанце из биосфере, и да заједно припадају циклусу угљеника у природи (Слика 1).

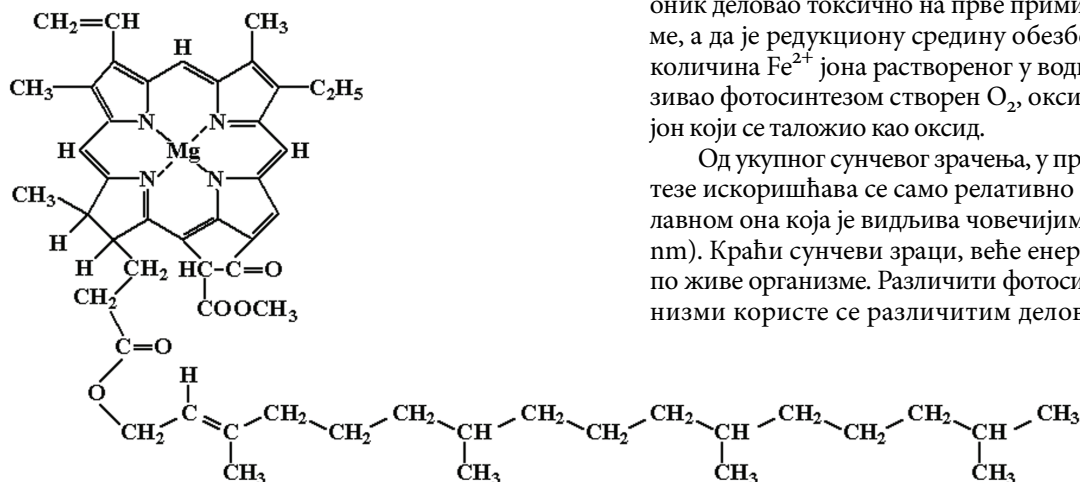
Кружење угљеника у природи се може представити помоћу два кружна тока. У првом, мањем кругу (1), који се односи на биосферу, учествује око 2,7-3,0·10¹⁵ kg угљеника, са полувременом кружења које се мери понекад данима, али некад и деценијама, што зависи од животног века биопопулација. Други, већи круг (2), који се односи на геосферу, обухвата количину од око

6,4·10¹⁸ kg угљеника са полувременом кружења од неколико милиона година. Ова два круга спојена су танком везом од око 0,01 – 0,1 % органског угљеника из биосфере који се трајно уграђује у седimente и улази у гециклус. Са становишта органске геохемије, а нарочито геохемије нафте, други циклус је од веће важности. Када органска супстанца доспе у седимент, на њену даљу судбину утичу брзина седиментовања и различити тектонски поремећаји. Наиме, слегање и спуштање седимента на веће дубине, или издизање и ерозија, одредиће да ли ће органска супстанца да остане очувана, или ће да буде оксидована. Органска супстанца која у оквиру гециклуса непрекидним повећањем дебљине наслага доспе на веће дубине бива изложена дијагенези, катагенези, метагенези и коначно метаморфизму.



Слика 1. Кружење угљеника у природи.

Имајући у виду везу по пореклу између органске супстанце геосфере и органске супстанце биосфере, долази се до закључка да је основни процес за продукцију органске супстанце у биосфери, заправо и основни процес за органску супстанцу геосфере.



Слика 2. Молекул хлорофила.

ФОТОСИНТЕЗА

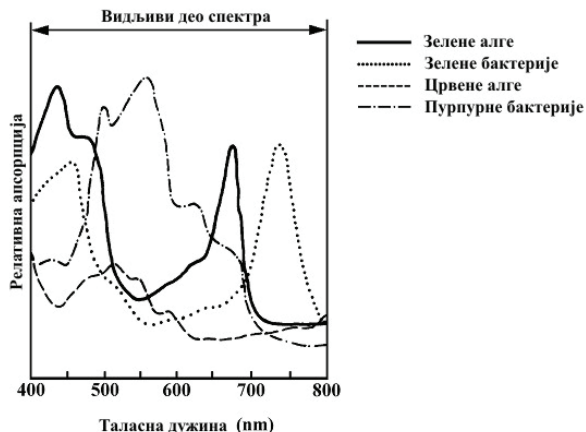
Први примитивни организми који су допринели масовној производњи органске супстанце били су аутоτροφне, фотосинтетичке бактерије и модрозелене алге, које у својим ћелијама садрже релативно слободан, зелени пигмент хлорофил (Слика 2), способан да апсорбује сунчеву енергију. У биљкама на вишем еволуционом ступњу хлорофил је сконцентрисан у хлоропластима зеленог лишћа. Хлоропласти су нека врста фотосинтетичких "фабрика".

Иако су најстарији фосили бактерија и алги нађени у јужноафричким стенама старим око 3,2 милијарде година, сматра се да је тек пре око 2 милијарде година дошло до знатније производње фотосинтетичке органске супстанце широм Земље. До тада су се примитивни фотосинтетички организми јављали само местимично. Од тог периода почиње абиогена или хемијска еволуција, уз синтезу органских молекула. Први примитивни организми су се као извором енергије за одржавање свог метаболизма вероватно користили абиогеним путем синтетизованим органским молекулима. То су, дакле, били хетеротрофни организми, јер су за своју "исхрану" употребљавали органску супстанцу створену абиогеним путем. Са порастом популације хетеротрофних организама смањивала се количина органске супстанце синтетизоване абиогеним путем, па је фотосинтеза постепено постала нови извор енергије. Другим речима, хетеротрофни организми постају способни да се користе енергијом сунчевих зрака као допунским извором енергије. Овакве особине међу првима су показале неке пурпурне бактерије које и данас постоје. Најстарије фотосинтетичке бактерије биле су анаеробне. То значи да у току првих фаза развоја фотосинтезе споредни производ није био кисеоник. Анаеробне бактерије употребљавале су водоник-сулфид као извор водоника, па се као споредни производ ослобађао сумпор.

Захваљујући фотосинтези, односно фотосинтетичким организмима чије су популације почеле нагло да запоседају водене средине планете, постепено је расла и количина кисеоника у земљиној атмосфери, која се до тог периода махом састојала од водоника, метана, амонијака, азота и воде. Сматра се да је кисеоник деловао токсично на прве примитивне организме, а да је редукциону средину обезбеђивала знатна количина Fe²⁺ јона раствореног у води. Fe²⁺ јон је везивао фотосинтезом створен O₂, оксидујући се у Fe³⁺ јон који се таложио као оксид.

Од укупног сунчевог зрачења, у процесу фотосинтезе искоришћава се само релативно уска област, углавном она која је видљива човечијим оком (400-800 nm). Краћи сунчеви зраци, веће енергије, штетни су по живе организме. Различити фотосинтетички организми користе се различитим деловима видљивог

спектра, што омогућава да у воденом стубу на различитим дубинама живе различити организми. Слика 3 показује којим деловима видљивог спектра се у процесу фотосинтезе користе, на пример, зелене алге, зелене бактерије, црвене алге и пурпурне бактерије.



Слика 3. Делови сунчевог спектра којима се користе поједине фотосинтетичке алге и бактерије.

Неке модрозелене алге, постале еволуцијом из фотосинтетичких бактерија, сматрају се првим организмима који су производили кисеоник као споредни производ фотосинтезе. Мада је познат већи број фотосинтетичких пигмената, ниједан није имао значај као хлорофил. Пошто су аутотрофни, фотосинтетички организми, супериорнији од хетеротрофних организама, они су убрзо постали доминантни у биолошком свету, а када је, као што је речено, пре око 2 милијарде година, фотосинтеза широм Земље постала распрострањена, створили су се услови и за еволуцију у више облике живота. Количина слободног кисеоника у земљиној атмосфери бивала је све већа.

НАГОМИЛАВАЊЕ ОРГАНСКОГ УГЉЕНИКА У ГЕОСФЕРИ

Да би се проценила укупна количина угљеника која је учествовала у фотосинтези у току земљине историје, потребно је сабрати сву количину органског угљеника на Земљи, у океанској води и у седиментима. Још је 1970. године процењено да је укупна количина органског угљеника и графита (који потиче од органског угљеника из седимената) око $6,4 \cdot 10^{18}$ kg. По једној другој процени, из 1972. године, количина органског угљеника је скоро два пута већа. Међутим, она обухвата и "органски" угљеник из базалта и других вулканских стена, као и из гранита и свих метаморфних стена, чије је биолошко порекло неизвесно.

Скоро целокупна количина органског угљеника на Земљи сконцентрисана је у седиментним стенама. Она чини знатно мањи део од укупне количине угљеника, само око 18 %. Знатно већи део (око 82 %) неоргански је, карбонатни угљеник. Између органског и карбонатног угљеника свакако да постоји веза: угљендиоксид из атмосфере је у равнотежи са угљендиоксидом хидросфере. Из водене средине карбонати се

могу сталожити хемијским путем или у облику неких водених организама са карбонатним скелетом (љуштуре шкољки и др.), градећи карбонатне седimente. С друге стране, карбонатне стене се растварају у води, захваљујући равнотежним реакцијама између CO_3^{2-} , HCO_3^- и CO_2 . Примарна органска супстанца постаје фотосинтезом, било директно од атмосферског CO_2 , у сувоземним биљкама, или од CO_2 хидросфере, у воденим биљкама. Сувоземна и маринска органска супстанца, с друге стране, у великој мери се оксидују, па се CO_2 враћа у атмосферу. Само занемарљиво мали део органског угљеника земљине коре, укључујући хидросферу, налази се у живим организмима и у раствореном облику. Највећи део органског угљеника (око $5,0 \cdot 10^{18}$ kg) налази се у седиментима у везаном облику. Знатан, али ипак мањи део (око $1,4 \cdot 10^{18}$ kg) налази се у метаморфним стенама у облику материјала сличног графиту или метаантрациту (Табела 1).

Табела 1. Органски угљеник земљине коре

Порекло	Количина у 10^{18} kg
Организми и растворан органски угљеник	0,003
Седименти	5,0
Метаморфне стене седиментног порекла (60 % од свих метаморфних стена)	1,4
Укупни органски угљеник	6,4

На основу податка о укупној количини органског угљеника у периоду од када је фотосинтеза узела маха, може се доћи и до процене о брзини акумулације органског угљеника у седиментима на годишњем нивоу. Процењено је да је просечна годишња акумулација органског угљеника у геосфери од постанка живота на Земљи до данас била $3,2 \cdot 10^8$ kg, што у односу на просечну годишњу производњу органског угљеника представља свега око 0,01 %. Сматра се да би максимална количина органске супстанце која се уграђивала у седименте могла да буде и до 0,1 %. Највећи део се враћао, деградовао се биохемијским или физичко-хемијским процесима, и тако рециркулисао, одлазећи углавном у горње слојеве воде океана.

ФОРМИРАЊЕ СЕДИМЕНАТА БОГАТИХ ОРГАНСКОМ СУПСТАНЦОМ

Као што је већ речено, врло мали део органске супстанце биосфере (0,01-0,1 %) успева да се "задржи", односно да се "очува" у седиментним стенама геосфере. Као резултат интензивног оксидационог разлагања изумрле органске супстанце, потпомогнутог дејством микроорганизама, далеко највећи део враћа се у биолошки циклус. Међутим, и поред тога, мали део који је избегао биолошки циклус у току врло дугог геолошког времена, нагомилао се у виду огромне количине органског материјала, највећим делом диспергованог у ситнозрним седиментним стенама. Три су главна фактора који утичу на количину органске супстанце која се уграђује у седиментне стене. То су биопродукција, очување и "разблаживање".

Неки од фактора који утичу на биопродуктивност јесу: исхрана, јачина светлости, топлота, количина

карбоната и вода. Сваки од ових фактора може се даље ращчланити. На пример, исхрана зависи од циркулације воде, стварања стена и њихове ерозије, вулканске активности, палеоклиме и рецикловања производа органског распадања.

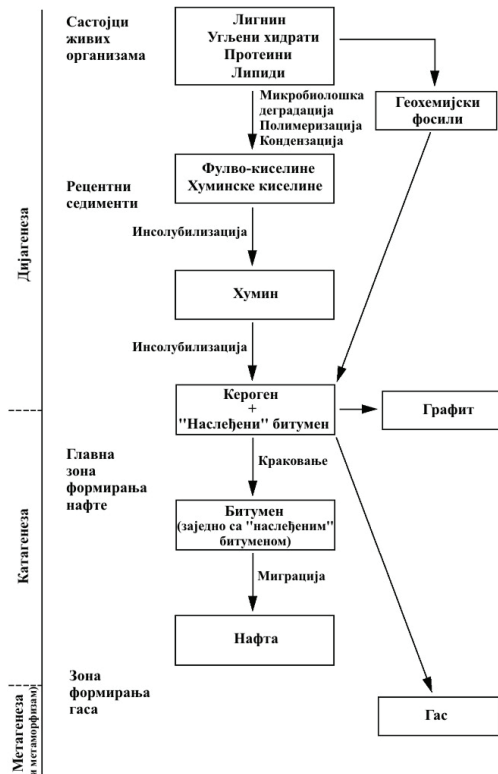
Да би се формирале стене богате у органској супстанци, мора да се сталожи знатна количина органског материјала, а затим да она избегне процесе који га враћају у биосферу. Фактори који утичу на очување органске супстанце су: концентрација и природа оксидационих агенаса, тип седиментне органске супстанце и брзина акумулације седимента. Од ова три фактора највећи значај имају концентрација и природа оксидационих агенаса. Неколико примера средина повољних за очување органске супстанце у седиментима дати су на слици 4.

Мада велика брзина нагомилавања и седиментовања доприноси очувању органског материјала, при врло великим брзинама акумулације "разблаживање" седимента минералним материјалом може бити значајније. Разблаживањем се не смањује укупна количина органског материјала, али се смањује њена концентрација у седименту. Крајњи исход је мања вредност укупног органског угљеника у седименту.

ТРАНСФОРМАЦИЈА ОРГАНСКЕ СУПСТАНЦЕ У СЕДИМЕНТНИМ СТЕНАМА

Трансформација органске супстанце геосфере одиграва се у фазама које се називају дијагенеза, катагенеза, метагенеза и метаморфизам. На самом почетку дијагенеза обухвата промене највећег дела органске супстанце, оног који се враћа у биосферу, а тек касније преостали знатно мањи део који се очуван задржава у

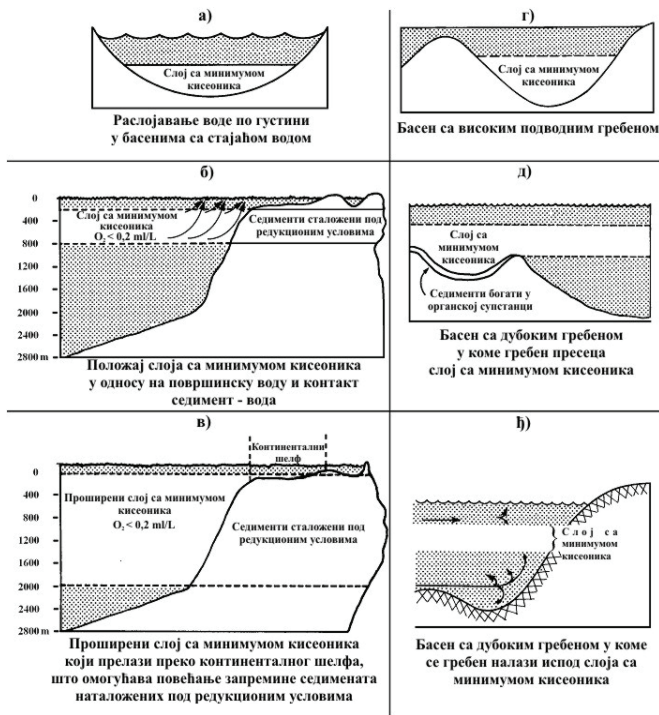
седиментним стенама. Због тога се неки аутори користе појмовима "рана" и "касна" дијагенеза. Катагенеза и метагенеза су фазе које се односе само на органску супстанцу седиментних стена. Упрошћена шема поменутих трансформација приказана је на слици 5.



Слика 5. Упрошћена шема трансформација органске супстанце у земљиној кори.

У првој фази, раној дијагенези, промене органске супстанце се дешавају у благим условима за које нису карактеристичне повишене температуре и притисци, а најинтензивнија је микробиолошка активност. Основне компоненте изумрлих организама, угљени хидрати, протеини, липиди и лигнин, по таложењу, на малим дубинама, разлажу се углавном дејством микроорганизама. Степен разлагања зависи од средине у којој се седимент таложи, нарочито од њених редокс-особина, али зависи и од токсичности средине, као и брзине хемијских трансформација (нпр. поликондензације) и заштитног дејства минерала.

Највећи део производа разлагања, олиго- и моносахариде, аминокиселине и липиде, микроорганизми искоришћавају као своју храну. На тај начин се угљеник, односно CO_2 као производ метаболичких процеса, враћа у биолошки циклус. Поред CO_2 производи метаболичких процеса су и H_2O , CH_4 , NH_3 , N_2 и H_2S . Један део производа разлагања органске супстанце даљом оксидацијом или неким другим хемијским процесом такође се претвара у горе наведене деградационе производе. Знатно мањи део избегава биолошко рецикловање или хемијске промене, не разлаже се већ се уграђује у седименте. Овај део представља основни извор седиментне органске



Слика 4. Примери средина са аноксичним условима.

супстанце. Његова трансформација у геосфери започиње од нивоа створених геомономера.

У даљој, касној дијагенези, геомономери се полимеризују или поликондензују у производе типа фулво- и хуминских киселина, а затим и хумина све веће молекулске масе. Даљом инсолубилизацијом, ослобађањем угљен-диоксида, воде, амонијака и метана, из интермедијарних геополимера постаје кероген. Његов настанак означава крај дијагенезе.

Крајњи и главни производ дијагенетских промена, кероген, нерастворни је део органске супстанце седиментних стена. Поред њега, у количински знатно мање заступљеном, растворном делу (Слика 5), могу се наћи слободни угљоводоници и нека друга липидна једињења, као и супстанце које потичу од пигмената (изопреноиди, порфирини) или других метаболита (стероиди, терпеноиди), који су "избегли" полимеризационе процесе. У току таложења и дијагенезе ова једињења у великој мери задржавају хемијску структуру једињења из живог света, носећи на тај начин највише "генетских информација" о прекурсорском органском материјалу. Због тога се она називају молекулским фосилима или биомаркерима. Растворни део органске супстанце седиментних стена назива се "наслеђеним" битуменом.

Слегањем првобитно наталожених слојева и њиховим даљим спуштањем и прекривањем новим седиментима, органска супстанца доспева на веће дубине, где бива изложена вишим притисцима и температурама, а и дејству минералних катализатора. Даље промене, обично на дубинама већим од хиљаду метара, на температурама 50-150 °C и притисцима 300-1700 бара, карактеришу другу фазу еволуције органске супстанце седиментних стена која се назива катагенезом. Под наведеним условима долази до деградације макромолекулског керогена у производе који се састоје од мањих молекула, растворних у органским растварачима, и назива општим именом битумен. Тако створени битумен меша се са наслеђеним битуменом. При деградацији керогена постаје и знатна количина гаса. Молекули мање молекулске масе производ су разлагања C-C веза, као и кондензационих и дефункционализационих реакција.

Нагомилавањем битумена у седиментним стенама стварају се услови за његово покретање - миграцију. Под повољним условима битумен напушта матични седимент и мигрира до резервоарских стена где се акумулира. Битумен акумулиран у овим стенама је нафта.

Седиментне стене у којима се ствара, у којима би могла да се створи, или у којима се некад створила за миграцију довољна количина битумена називају се изворним стенама за нафту. Стене у којима се битумен акумулира, као што је речено, јесу резервоарске стене за нафту.

У завршној фази трансформације органске супстанце литосфере, метагенези и метаморфизму, на дубинама и до десет хиљада метара, и у условима врло високих температура и притисака, долази до завршне

деградације керогена и ослобађања гаса, претежно метана. Остатак керогена се претвара у графит, што представља и крај последње фазе трансформације органске супстанце геосфере.

САСТАВ НАФТЕ

Нафта је сложена смеша различитих органских једињења. Највећим делом су то угљоводоници, тако да нафту у просеку чине и до 95% угљеник и водоник. У преосталих 5% могу се наћи сви елементи периодног система. Међутим, међу њима доминирају азот, сумпор и кисеоник. На хиљаде, па и на десетине хиљада једињења може се идентификовати у овом облику органске супстанце геосфере. Међу истраживачима, органским геохемичарима, идентификација неког новог једињења и данас представља велики истраживачки изазов. Она захтева примену најсавременијих инструменталних метода органске анализе. Најважније међу њима су гасна хроматографија (GC) и систем гасне хроматографије и масене спектрометрије (GC-MS). Постоји мишљење по коме интензивни развој инструменталних метода у органској хемији уопште највише дугује нафтним компанијама, јер су оне биле те које су највише новца улагале у развој, са циљем да се што боље дефинише састав нафте, али и других облика органске супстанце геосфере.

Овог пута немогуће је детаљније говорити о једињењима која се у нафти налазе. Због тога су у табели 2 дате само најважније фракције и њихови најважнији састојци.

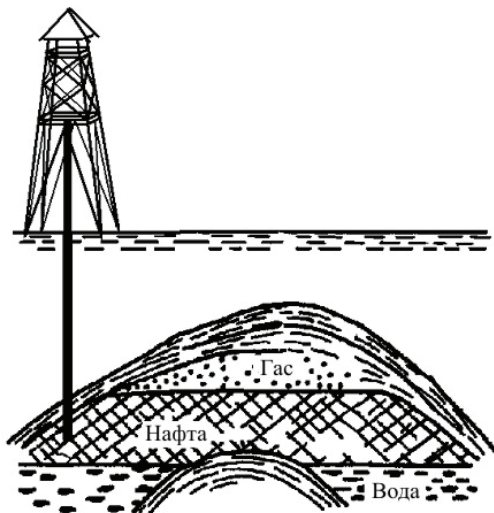
Табела 2. Фракције нафте и њихови најважнији састојци

Фракција	Састојци
Засићени угљоводоници	<i>n</i> -Алкани; Изопреноидни алкани и угљоводоници са рачвастим низом; Алициклични алкани, укључујући стеране, дитерпане и тритерпане
Ароматични угљоводоници	Ароматични угљоводоници; Нафтенароматични угљоводоници; Мањи молекули са сумпором
Смоле (НСО-поларна фракција)	Порфирини; Више масне киселине и алкохоли; Алифатични и циклични кетони; Сумпорна алифатична и ароматична једињења
Асфалтени	Кондензована ароматична једињења са великим бројем хетероатома

ОД РЕЗЕРВОАРСКЕ СТЕНЕ ДО РАФИНЕРИЈЕ

У резервоарској стени за нафту најчешће се налази слој воде који је специфично најтежи, затим слој нафте која је нешто лакша, и коначно најлакши гас (Слика 6). Редовни пратилац је и суспендовани чврсти материјал. Проналажење лежишта нафте и гаса резултат је, пре свега, геолошких, геофизичких и геохемијских истраживања. Пошто се резервоарска стена дефинише и пошто се до ње допре системом цеви (нафтна бушотина), сирова нафта на првршину може

да доспе без додатног дејстава (еруптивне бушотине) или пак помоћу притиска. Више нафтних бушотина чине једно нафтно поље. У оквиру нафтног поља постоји најчешће „сабирна станица“ са резервоарима у којима се исталожи специфично тежа вода и суспендовани чврсти материјал. Сирова нафта ослобођена од ових материјала транспортује се до фабрика за прераду нафте које се називају рафинерије. Начини транспорт могу бити различити. Најчешће се употребљавају нафтоводи и бродови-танкери, а ређе ауто и возне цистерне.



Слика 6. Упростићен приказ резервоарске стене за нафту.

ПРЕРАДА НАФТЕ У РАФИНЕРИЈИ

Као што је већ речено, нафта представља сложenu угљоводоничну смешу, тако да се њена прерада своди на атмосферску фракционu дестилацију (ректификацију). На тај начин изолују се поједине фракције, при чему свака од њих представља одређени производ. Главни производи прераде нафте у рафинерији могу се класификовати у неколико група. То су: течна горива, затим мазива, битумен (асфалтни остатак), гасови, чврсти производи и петрохемијски производи (Табела 3).

Сам процес ректификације изводи се тако што се нафта пошто прође кроз систем измењивача топлоте загреје у цевној пећи на температуру од око 400 °С. Температура саме пећи је знатно виша и износи чак 1300 °С. Нафта кроз такву цевну пећ пролази под притиском од 7-8 атмосфера. Загрејана одлази у ректификациноу колону која представља високи цилиндар подељен на већи број „подова“, ситастих решетке које пропуштају пару, а задржавају течност до нивоа одводних сливника који враћају течност на нижи под. Пара и течност имају супротне токове што омогућава размену топлоте (рефлуковање). Сваки под има температуру која одговара тачки кључања течности која се на њему налази. Један део паре приспеле на под се хлади, ослобађа топлоту и кондензује се; ослобођена топлота се преноси на течност и омогућава да из ње

испаре лакше фракције и оду навише. Значи, пара се идући ка врху колоне стално обогаћује лакше испарљивим састојцима, а течност, идући ка дну колоне се обогаћује теже испарљивим састојцима.

Табела 3. Најважнији производи прераде нафте у рафинерији.

Течна горива	Мазива	Битумен	Гасови	Чврсти остатак	Петрохемијски производи
Бензин, 50-200 °С, гориво за моторе са унутрашњим сагоревањем	Уља и масти за подмазивање, > 350 °С		Пратећи гас (C ₁ -C ₄)	Петрол-кокс	Ацетилен
Петролеум, 200-280 °С, гориво за млазне моторе	Мазут, за ложење		Крекинг гасови	Чађ	Олефини C ₂ -C ₄
Гасно уље (уље за ложење), 280-350 °С, гориво за дизел моторе			Реформинг гасови	Парафин	Ароматични угљоводоници

Пара која напушта колону представља најлакшу фракцију. Она се ван колоне хлади. Део кондензата се враћа у горњи део колоне као рефлукс. Течне фракције на појединим деловима колоне имају различити сложен састав, па се додатно фракционишу у мање сложене фракције у помоћним колонама које се популарно називају „стрипери“.

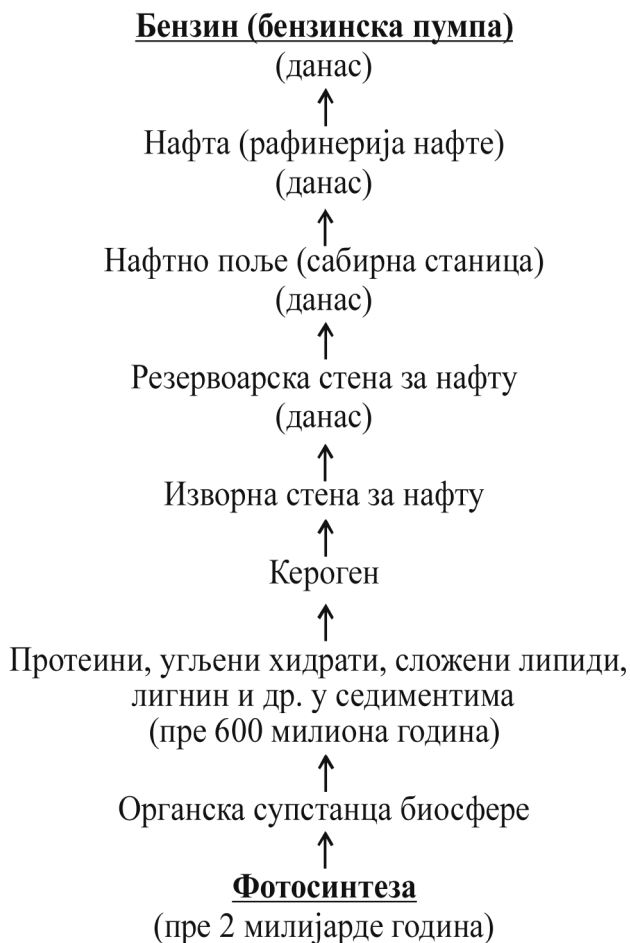
У рафинеријама је могућно добити различите производе. Могућно је конструисати рафинерије на такав начин да се фаворизује добивање одређеног производа. Најчешће је то бензин. Он се сматра најважнијим рафинеријским производом, и због тога се перманентно улажу напори да се повећа принос бензинске фракције, и да се побољша њен квалитет. За повећање приноса примењују се процеси краковања, а за побољшање квалитета, процеси реформовања.

У новије време краковање се изводи искључиво у присуству одређеног катализатора (на пример Cr₂O₃ + Al₂O₃, зеолити, молибден силикати, флуорна једињења). Овим процесом изводи се разлагање једињења велике молекулске масе на производе ниже молекулске масе. Могућне пратеће реакције су циклизација, ароматизација, дехидрогенизација, изомеризација, полимеризација. Процес се најчешће изводи на 400-500 °С, и при притиску од једне атмосфере. Може се изводити и у присуству водоника. Такав процес назива се хидрокраковање.

Реформовање је врста благог термичко-каталитичког краковања при коме се сировина не распада већ се само мења структура састојака. Овим процесом се повећава количина ароматичних, рачвастих и олефинских угљоводоника, јер долази до циклизације и изомеризације. Изводи се на 450-550 °С, на притиску 15-50 атмосфера и у присуству платине као катализатора. Може се изводити и у присуству водоника. Такав процес назива се хидрореформовање.

На овај начин завршава се дуг пут органске супстанце од њеног формирања процесом фотосинтезе

до добивања бензина прерадом нафте у рафинерији (Слика 7).



Слика 7. Пут органске супстанце од фотосинтезе до бензинске пумпе.

Abstract

FROM PHOTOSYNTHESIS TO PETROL STATION

Branimir JOVANČIĆEVIĆ, Faculty of Chemistry, University of Belgrade

A search for the origin of oil is one of the oldest tasks of organic geochemistry. In their efforts to assess the origin and formation of oil, organic geochemists have revealed the extreme heterogeneity of sedimentary organic matter, with regard to its composition, genesis, as well as maturity, at the same time corroborating the assumption that it originated from biological material, altered by physical, biochemical and chemical transformation processes in the crust of the Earth.

In this paper organic matter transformation from photosynthesis to oil production and gasoline, the main product in oil refinery, is explained.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. M. Hunt, *Petroleum Geochemistry and Geology*, W.H. Freeman and Company, San Francisco, 1979
2. D. Waples, *Organic Geochemistry For Exploration Geologists*, International Human Resources Development Corporation, Boston, 1982
3. B.P. Tissot and D.H. Welte, *Petroleum Formation and Occurrence, A New Approach to Oil and Gas Exploration*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1978; Second Revised and Enlarged Edition, 1984
4. A. Hollerbach, *Grundlagen der organischen Geochemie*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1985
5. R.P. Philp, *Fossil Fuel Biomarkers. Applications and Spectra*, Elsevier, Amsterdam, 1985
6. D.W. Waples, *Geochemistry in Petroleum Exploration*, D. Reidel Publishing Company, 1985
7. K.E. Peters, C.C. Walters and J.M. Moldowan, *The Biomarker Guide. Biomarkers and Isotopes in the Environment and Human History*, Cambridge University Press, Cambridge, 2005



Иван ГУТМАН, Горица ЂЕЛИЋ, Аца МАРКОВИЋ, Јелена ЂУРЂЕВИЋ

Природно-математички факултет Крагујевац (е-пошта: gutman@kg.ac.rs)

ХЕМИЈА ПАПРИКЕ

О ПАПРИЦИ

Биолози паприку називају *Capsicum annuum L.*, и убрајају је у породицу *Solanaceae*. У исту породицу спадају још и кромпир, парадајз, дуван и буника. Паприка је пореклом из Јужне Америке, а у нашим крајевима појавила се релативно недавно. (У јужне делове Србије донели су је Турци, у северне Мађари.) Српски назив “паприка” води порекло од грчког “пепери” и латинског “пипер”, које означавају бибер. Стари назив за паприку био је “пиперка”.

Паприка је свима позната биљка, а њен плод има значајну улогу у нашој исхрани. У овом чланку излажемо хемијске дејства који су у вези са две ујадљиве и веома варијабилне особине паприке: њеном љушчином и њеном бојом. Љуштина паприке постоји од групе једињења званих кайсаицини, који су амиди неке органске киселине и ванилинамина. Пре сазревања паприка има зелену боју која постоји од хлорофила. У паприкама чија боја приликом сазревања постоје жути, наранџаста и/или црвена, сиварају се мнобројна обојена једињења из групе каротиноида.

У крајевима са умереном климом (дакле и код нас) паприка је једногодишња зељаста биљка. У тропским и суптропским областима она је вишегодишња биљка. Плод паприке је бобица зелене, жуте или упадљиво црвене боје.

Због великог значаја у исхрани, селекцијом су добивене многобројне сорте паприке, чији плодови се разликују по облику, боји, љутини, итд. О томе овде нећемо говорити, а заинтересовани читаоци нека оду на неку од наших пијаца и нека погледају.



Слика 1. Домаће љуте паприке.



Слика 2. Овако се још и данас суши паприка у селима на северу Бачке.

Највећи љубитељи паприке су, изгледа, народи који живе на Индијском потконтиненту. Према подацима из 2003. године,¹ Индија, Пакистан и Бангладеш производе 1,250,000 тона паприке годишње, следи Кина са 400,000 тона, и Мексико са 300,000 тона.

У наставку овог чланка говорићемо само о љутини и боји паприке. Зато на овом месту помињемо да паприка има велику прехранбену вредност, а нарочито је богата витамином Ц.

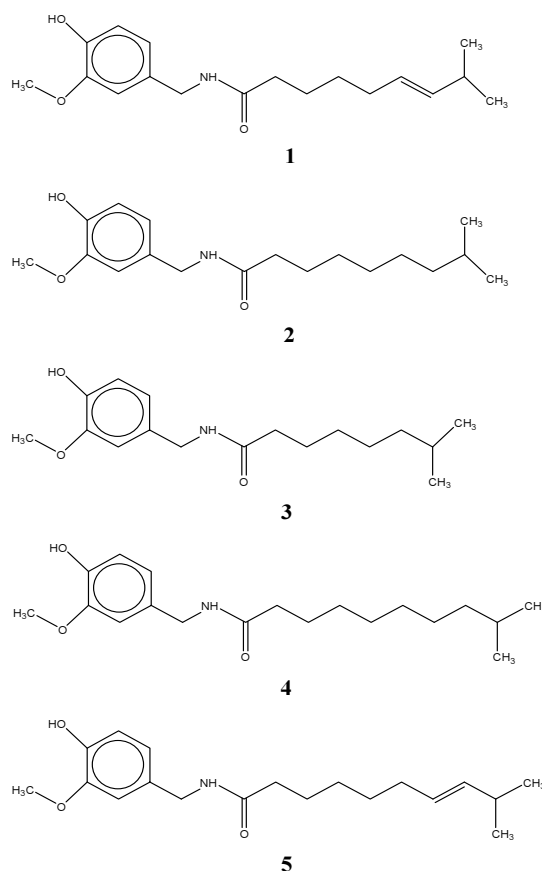
Витамин Ц је откривен током 1931. године, тако што су га у врло малим количинама изоловали из надбубрежне жлезде. Мађарски биохемичар Алберт Сент-Ђерђи (Albert Szent-Györgyi) открио је 1932. го-

дине да се велике количине тог витамина налазе у паприци, и тиме омогућио да се са овим витамином могу изводити потребни биохемијски и медицински експерименти. Сент-Ђерђи је добитник Нобелове награде за физиологију и медицину за 1937. годину.

ЉУТИНА ПАПРИКЕ

Љутина паприке потиче од једне групе једињења која имају врло сличну хемијску структуру,^{1,2} в. слику 3. Најважнији међу њима је капсаицин (једињење 1 на слици 3). На њега отпада око 70% љутине паприке. Следи дихидрокапсаицин (2) са око 20% и у још мањим количинама једињења 3, 4 и 5. Сва ова једињења су амиди неке органске киселине са дугачким угљеничним ланцем, на чијем крају је изопропил група. Амин који улази у састав свих капсаицина је такозвани ванилинамин.

Сви капсаицини изазивају, отприлике, једнако јак осећај љутине. Биолози сматрају да капсаицини за паприку имају заштитну улогу, односно спречавају неке животиње да их једу. Међутим, садржај капсаицина у разним сортама паприке изузетно много варира. Постоје сорте које су „слатке” – у којима уопште нема капсаицина, а постоје и неке веома „љуте” сорте.



Слика 3. Хемијска једињења која паприци дају љутину: капсаицин (1), дихидрокапсаицин (2), нордихидрокапсаицин (3), хомокапсаицин (4), хомокапсаицин (5).

Љутина паприке мери се на један интересантан начин. Методу је 1912. године измислио амерички нау-

чник Вилбур Сквилл (Wilbur Scoville) и по њему се за љутину користе такозване Сквиллове јединице.

Поступак је следећи. Самлевена паприка или екстракт паприке меша се са заслађеном водом и екипа дегустатора одређује разблажење код којег се љутина више не може осетити. Екипа дегустатора се састоји од пет чланова (који своју одлуку доносе већином гласова).

На пример, ако је за нестанак љутине, екстракт паприке потребно разблажити зашећереном водом 100,000 пута, онда се каже да љутина паприка има 100,000 Сквиллових јединица.

Јасно је да је мерење љутине на овај начин веома непрецизно и субјективно. Оно се, ипак, користи и у данашње време, мада првенствено у комерцијалне одн. трговачке сврхе. (За научне потребе данас се одређује количина капсаицина, што се може учинити применом гасне хроматографије.)

Следи једно велико разочарање за љубитеље љutih паприка:

По љутини, наше паприке спадају у најслађе. Наше љуте фефероне (разне врсте) имају од 500 до 2500 Сквиллових јединица, што је незнатно у односу на

- црвену Амазонску паприку са 80,000
- Тајландску паприку са 50,000-100,000
- љуту паприку са Јамајке са 100,000-200,000
- хабанеро паприку са 100,000-350,000

Сквиллових јединица. Чисти капсаицин би имао 16,000,000 Сквиллових јединица.

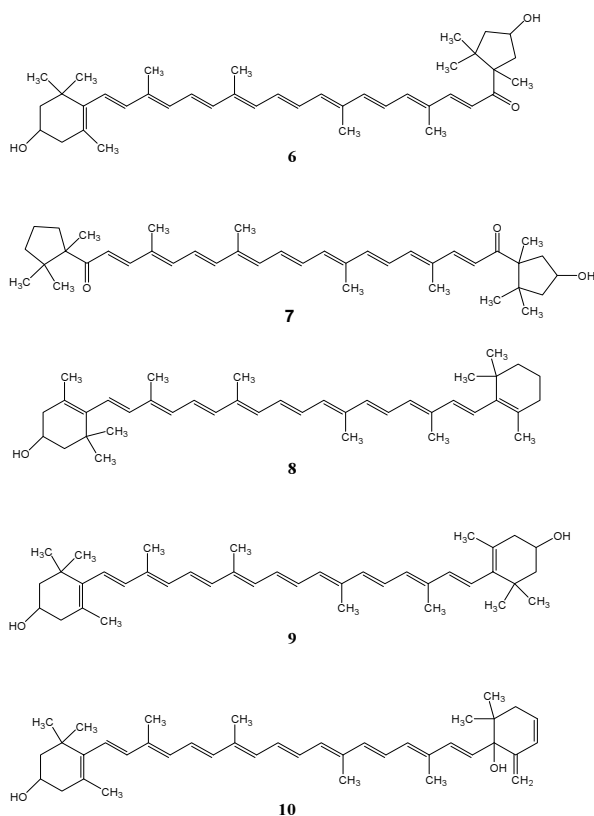
Сматра се да је најљућа данас позната паприка сорта Нага Џолокиа из Индије. За њу се тврди да има 850,000 Сквиллових јединица, а неки сматрају да их има преко милион.

БОЈА ПАПРИКЕ

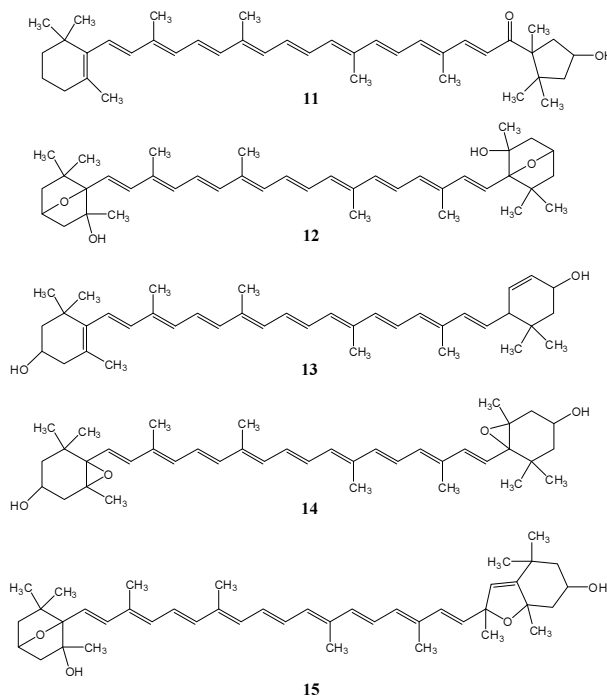
Пре сазревања плод паприке има зелену боју, која потиче од хлорофила. Зрењем се боја плода мења, што у највећој мери зависи од сорте. Неке сорте остају зелене, неке пожуте, неке поцрвене. За производњу млевене паприке користе се искључиво сорте које су тамно црвене боје, види слике 1 и 2.

Боја паприке (са изузетком зелене) потиче од једне компликоване смеше каротеноида.³ Хемијске формуле неких представника ових једињења приказана су на сликама 4 и 5.

Да се подсетимо: Каротеноиди су интензивно обојена, у мастима растворљива, органска једињења, састојци готово свих биљака и неких животња. Њихови молекули садрже ланац од 18 угљеникових атома, са 9 конјугованих двоструких угљеник-угљеник веза. На том ланцу налазе се четири метил групе у карактеристичним (увек истим) положајима. На оба краја угљеничног ланца налазе се цикличне бочне групе, које одређују о ком конкретно каротеноиду се ради. Најпознатији представници каротеноида су алфа- и бета-каротен, од којих потиче наранџаста боја шаргарепе; ова једињења су веома распрострањена и у другим биљкама, међу којима је и паприка. Из бета-каротена у нашем организму настаје витамин А.



Слика 4. Неки од тридесетак каротеноида који паприци дају жуту, наранџасту и црвену боју: капсантин (6), капсорубин (7), криптоксантин (8), зеаксантин (9), нигроксантин (10). Њихова количина у плоду зависи од сорте, а мења се током процеса сазревања.³



Слика 5. Наставак примера са слике 4: крипто-капсин (11), цикловиолаксантин (12), лутеин (13), виолаксантин (14), кукурбитахром (15).

Већина каротеноида у паприци садржи кисеоник. Поред хидроксилисаних група (које постоје у многим каротеноидима), каротеноиди паприке садрже неке нетипичне хемијске детаље: кето-групе (на пример, **6**, **7**, **11**), епокси-групе (на пример, **14**) и кисеоничне мостове (на пример, **12**, **15**).

У паприци је нађено преко 30 каротеноида.³ Њихова количина се током зрења јако мења, што се јасно примећује на боји плода. Најважнијим каротеноидом паприке сматра се капсантин (**6**). Он чини око 60% свих каротеноида зреле паприке. Црвена боја паприке потиче првенствено од од капсантина (**6**) и капсорубина (**7**), а наранџасто-жута од бета-каротена и виолаксантина (**14**). Капсантин (**6**), капсорубин (**7**) и криптокапсин (**11**) су каротеноиди које налазимо искључиво у паприци.

Abstract

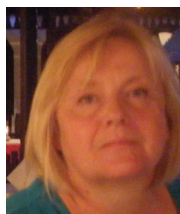
CHEMISTRY OF PAPRIKA

Ivan GUTMAN, Gorica DELIĆ, Aca MARKOVIĆ and Jelena ĐURĐEVIĆ, Faculty of Science Kragujevac

Some basic facts on paprika (*Capiscum annum L.*) are outlined, with emphasis on the chemical nature of the substances responsible for its pungency and color.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. J. Zachariah, P. Gobinath, *Paprika and Chill*, in: V. A. Parthasarathy, B. Chempakam, T. J. Zachariah (Eds.), *Chemistry of Spices*, CAB International, Cambridge, 2008, pp. 260-286.
2. R. Q. Thompson, *Flavour Fragr. J.* 22 (2007) 243.
3. J. Deli, P. Molnár, Z. Matus, G. Tóth, *J. Agric. Food. Chem.* 41 (2001) 1517.



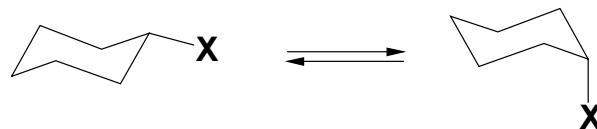
Љиљана ДОШЕН-МИТРОВИЋ, Хемијски факултет, Универзитет у Београду
(е-пошта: lmicovic@chem.bg.ac.rs)

ПОЧЕЦИ КОНФОРМАЦИОНЕ АНАЛИЗЕ – И ШТА ЈЕ ПОСЛЕ БИЛО

Термин „конформација“ означава сваки од безброј тренутних положаја атома неког молекула у простору. Међутим термин се обично користи за неке од тренутних распореда атома који настају као последица ротације око простих веза у молекулу. Најчешће се узимају у обзир само оне конформације које одговарају минимуму потенцијалне енергије тј. које су најстабилније. Конформациона анализа је анализа физичких и хемијских особина једињења преко анализе њихових конформација у основном, прелазном или ексцитованом стању¹. Данас је тешко замислити органску хемију без познавања конформационе анализе и без интерпретација које она омогућава. Делови физичке хемије, који се баве молекулском структуром и физичким особинама молекула такође се тешко могу замислити без коришћења концепта конформационе анализе, као што и сваки покушај да се потпуно разуме начин деловања биомолекула захтева познавање њихових главних конформација.

Године 1885 Бајер (Bayer) је формуласао теорију напона² за циклична једињења. Према тој теорији угљенични скелет цикличних једињења је правилни планарни многоугао, а напон таквог прстена је једнак једној половини разлике између унутрашњег угла и угла везе тетраедарског угљеника од $109^{\circ} 28'$. Према овој теорији напон код циклоалкана опада, од циклопропана ка већим прстеновима, досеже минимум код циклопентана, а затим поново расте са повећањем прстена. Експерименталне вредности топлота сагоревања,

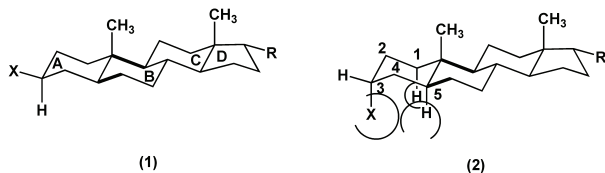
одређене касније,³ показале су да је теорија напона нетачна за прстенове веће од петочланог. Године 1890. Сач (Sachse) је предложио⁴ да шесточлани прстен постоји у набраној, непланарној, форми тако да су сви углови у прстену тетраедарски ($109^{\circ} 28'$). Он је такође закључио да постоје два облика циклохексановог прстена: флексибилни и крути (облик столице), и да постоје два облика моносупституисаног циклохексана (сада их знамо као екваторијални и аксијални облик) који прелазе један у други преко инверзије столице (Слика 1):



Слика 1. Облици моносупституисаног циклохексана.

Међутим Сач је сматрао да до инверзије столице долази само при загревању. Непознавање релативне енергије конформација даље је замагљивало слику тако да Сач-ова теорија није привукла пажњу све до 1918. године, када је Мор (Mohr) сугерисао⁵ да се две конформације столице измењују великом брзином, ротацијом око веза у прстену, тако да се екваторијални и аксијални облици моносупституисаних циклохексана не могу изоловати. До потврде постојања столицасте конформације циклохексана дошла је касније путем ренгенске анализе,⁶ Раманових спектра⁷ и електронске дифрак-

ције.⁸ Међутим прави почетак конформационе анализе везује се за радове Д.Х. Бартона (D.H. Barton),⁹ који је први истакао вишеструки значај разлике између екваторијалних и аксијалних супституената. Он је предвидео¹⁰ да ће 3β -супституисани (екваторијални), *trans*A/B стероида (1), Слика 2, бити стабилнији од 3α -супституисаног (аксијалног) једињења (2) јер има нижу енергију тј. мање одбојних интеракција са другим атомима или групама у молекулу (мање стерних сметњи), што је потврђено експерименталним мерењима.



Слика 2. Два изомера стероидног молекула

Ово даље омогућава да се предвиди који ће се изомер (α или β) добити у термодинамички контролисаним реакцијама (оним у којима се добија стабилнији производ), а такође и да се боље разуме механизам реакција у којима постоје стерне сметње. На пример у реакцији алкалне хидролизе естера ($X = -COOR$), Слика 2, где ће у прелазном стању за 3α -изомер бити још више стерних сметњи него у основном стању, може се предвидети да ће се 3β -изомер хидролизовати знатно брже, јер ће имати прелазно стање ниже енергије. Бартонове идеје су одмах прихваћене и допринеле су брзом развоју многих области хемије нарочито области природних производа и механизма органских реакција. Од тог времена постало је јасно да је тродимензионалност молекула основа за разумевање њихове структуре, стабилности и реактивности.

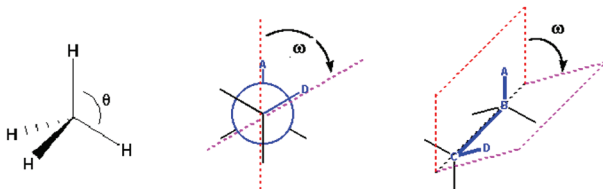
Међутим, како се то често дешава у науци, развој једне области подстиче развој неке друге. Тако је од самог почетка конформациона анализа била повезана са облашћу хемије коју данас знамо као молекулско моделовање (или као рачунарска хемија, те две области се у великој мери преклапају). Још 1946. и 1947. године, без помоћи компјутера, који у то време нису били у употреби, урађена су прва израчунавања¹¹ енергије стерних интеракција и њиховог утицаја на реактивност молекула. Праћена је реакција рацемизације супституисаних бифенила, тј. промена енергије при ротацији око везе између два прстена код бифенила. Међутим тек током педесетих година овог века, са наглим развојем примене компјутера, долази до пораста интересовања за рачунске методе у хемији. Детељан преглед историје развоја рачунских метода важних за молекулско моделовање може се наћи на интернету.¹²

Године 1961. Хендриксон (Hendrickson) је формулисао¹³ једначину за рачунање енергије молекула, E :

$$E = E_{\theta} + E_t + E_R - E_A$$

где је: $E_{\theta} = K_{\theta} \sum (\theta_i - \theta_{i0})^2$ енергија деформације углова веза, $E_t = K_t \sum (1 + \cos 3\omega)$ је торзиона енергија,

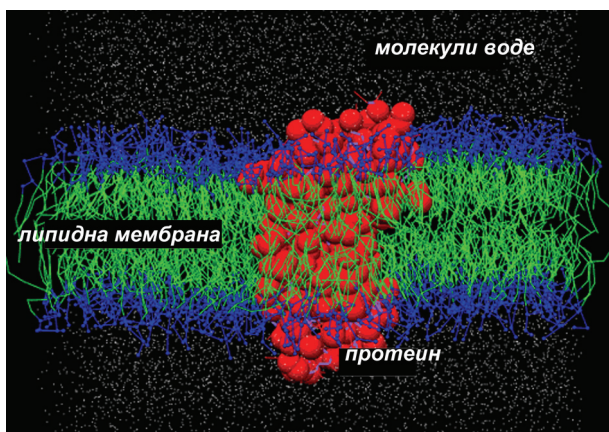
Слика 3, E_R и E_A су одбојна и привлачна компонента невезивних (стерних) интеракција, која је, у сличном облику, и данас у употреби у **молекулско-механичкој (ММ)** или **емпиријској рачунској методи**. Једначине



Слика 3. θ (угао везе) је угао између веза које имају заједнички атом; ω (торзиони угао) је угао између суседних веза.

које су горе приказане и њихови параметри заједно представљају такозвано поље сила па се ова метода назива и **методом поља сила**. Хендриксон је такође био први који је користио рачунар за ове прорачуне. Током шездесетих година прошлог века рачунске методе привлаче све више пажње, а почетком седамдесетих у радовима Варшела¹⁴ (Warshel) и Алинџера¹⁵ (Allinger) описана су прва општа поља сила за угљоводонике чиме је почела широка примена молекулско-механичких израчунавања. Временом је молекулско-механичка метода проширена на једињења са различитим функционалним групама и користити се за оптимизацију молекулске структуре као и за израчунавања молекулских величина као што су топлота настајања, (стерни) напон, конформациона енергија, вибрациони спектри, параметри кристалне речетке. У неким хемијским реакцијама када је позната структура прелазног стања, односно блиског му реакционог интермеђијера, може се такође израчунати енергија активације и релативна брзина реакције. Данас се молекулско-механичка метода, у комбинацији са **Monte Carlo (MC)** методом и методом **молекулске динамике (MD)**, користи за израчунавања на великим молекулима и молекулским системима као што је на пример оптимизација структуре протеинског рецептора у фрагменту ћелијске мембране, Слика 4. Ограничење методе су параметри који се користе у једначинама јер они треба да су предходно одређени за сваки тип атома који се налази у молекулу. Квалитет резултат молекулско-механичке методе зависи од квалитета ових параметара.

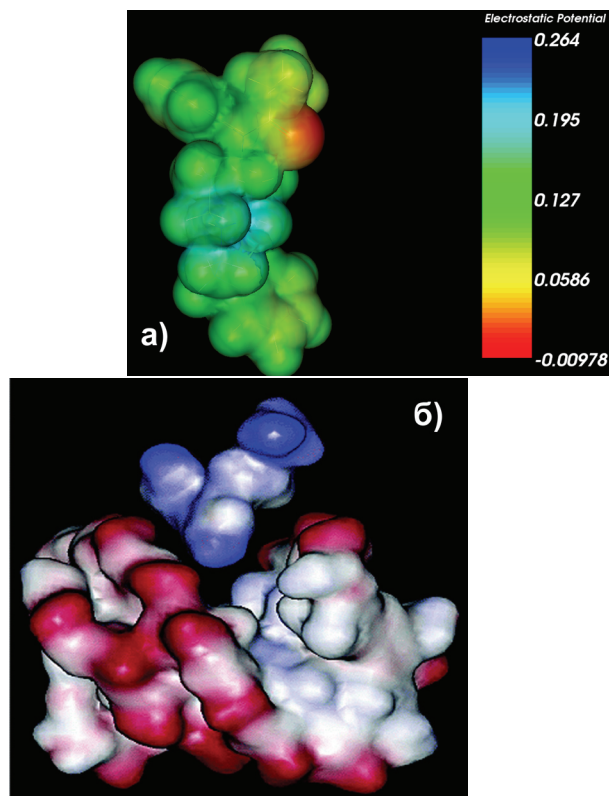
Monte Carlo метода и метода молекулске динамике развијале су се од педесетих година прошлог века упоредо са молекулско-механичком методом и преузете су из физике. У хемијским израчунавањима служе за дефинисање различитих стања система, на пример различитих конформација једног молекула, а у циљу дефинисања узорка нискоенергетских структура тога молекула које заједно описују стварно стање и понашање тог молекула. Такође се користе за испитивање динамике молекула и молекулских система и за израчунавање средњих вредности термодинамичких величина молекула које се могу директно поредити са експерименталним вредностима.



Слика 4. Оптимизовани протеински рецептор у фрагменту липидне мембране.

Молекулско-механичка метода, међутим, не третира електроне експлицитно него су њихови ефекти укључени у емпиријске параметре. То знатно поједностављује и повећава брзину израчунавања па тако омогућава израчунавања на великим молекулима и молекулским системима, али особине које директно зависе од расподеле електрона у молекулима, не могу бити израчунате. За њихово израчунавање користе се **семи-емпиријске** и ***ab initio* квантно-хемијске** методе. Ове рачунске методе се користе у хемији од двадесетих година прошлог века^{16,17} и данас су стандардне методе молекулског моделовања. Поред оптимизације молекулске структуре (изналажења конформације са минимум потенцијалне енергије), термодинамичких функција и вибрационих спектра ове методе се користе, више него молекулско-механичке, за израчунавање активационих енергија тј. за праћење кинетике хемијских реакција, мада то ни са овим методама није лако. Ове методе се првенствено користе за израчунавање енергије и коефицијената молекулских орбитала и даље за рачунање атомска наелектрисања, електростатичких потенцијала молекула и неких параметара као што су NMR спектари. Молекулски електростатички потенцијал (МЕР) се затим може представити на молекулској површини¹⁸, Слика 5, чиме се добија истовремени увид у облик и расподелу електронске густине у молекулу, а тиме и увид у начин на који ће молекул учествовати у интеракцији са другим молекулима. То је на пример важно у реакцијама између протеина и малих молекула (лиганда) где се може пратити да ли су лиганд и протеински рецептор комплементарни по свом облику и расподели наелектрисања, што онда обећава повољну интеракцију и грађење стабилног комплекса. Ово је битан податак за фармацеутску индустрију, између осталих, јер су многи лекови (нековалентно) везују за протеине или друге биомолекуле.

Ab initio квантно-хемијска метода је најосвеобухватнија и најезактнија од рачунских метода молекулског моделовања. Међутим, са данашњим компјутерима, њихова примена је ограничена на молекуле и молекулске системе од највише 50-100 атома. Семи-емпиријске квантно-хемијске методе могу да се користе на

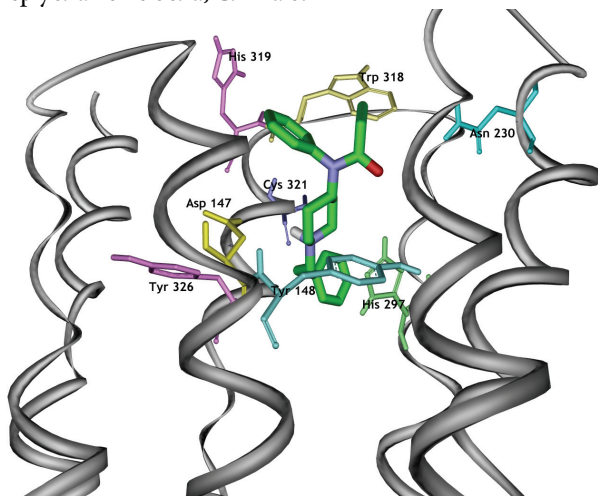


Слика 5. а. МЕР молекула фентанила пројектован на *van der Waals*-ову површину. б. МЕР молекула неомицина у интеракција са рецептором, триплексом ДНК.

већим системима, али као и молекулско-механичка метода, зависе од емпиријских параметара.

Развој описаних рачунских метода, као и кристалографско одређивање структуре великих биомолекула: протеина и нуклеинских киселина подстакло је, од 1982. године када је публикован први алгоритам¹⁹ (касније уграђен у програм DOCK), развој рачунских метода за молекулско моделовање молекулских комплекса. **Метода уклапања (docking)** постала је нарочито популарна у протеинској хемији где се користи за изучавање комплекса протеина са другим протеинима, нуклеинским киселинама или са малим молекулима какви су често молекули лекова. Метода се састоји у низу покушаја да се флексибилни лиганд уклопи у структуру рецептора, на разним положајима у рецептору и у различитим оријентацијама, тако да се оствари најнижа енергија рецептор-лиганд интеракције, а то значи и најстабилнији комплекс. Од ове се методе очекује да да одговоре о структури комплекса тј. о везивној конформацији рецептора и лиганда, о стабилности комплекса израженој преко енергије везивања, која се израчунава молекулско-механички или квантно-хемијски, и о мутацијама протеинског рецептора које би могле довести до стабилнијег комплекса. Када су у питању мали молекули (лиганди) метода уклапања може да помогне у синтези ових молекула тако што сугерише које делове молекула треба модификовати како би се појачале интеракције са функционалним групама

рацептора, формирао стабилнији комплекс, и тиме евентуално појачао повољан биолошки ефекат, на пример ублажење бола, Слика 6.



Слика 6. Молекул фентанила (аналгетик) у протеинском рецептору

Упоредо са већ описаним рачунским методама развијале су се и друге²⁰, као што је хеометријска метода **QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship)** или квантитативни однос структура-активност). Иако, за разлику од предходних метода, не ради директно са тродимензионалном геометријом молекула, ова је метода знатно допринела разумевању утицаја структуре молекула на њихове биолошки важне особине као што су токсичност, карциногеност и мутагеност, и уопште је, заједно са другим рачунским методама, допринела развоју медицинске хемије. Основа једначина QSAR методе²¹ повезује биолошку активност (Φ) и неке параметре молекулске структуре (x):

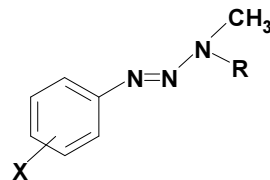
$$\Phi = f(x)$$

Метода користи вишеструку регресиону анализу (MLR), делимични метод најмањих квадрата (PLS), неуронске мреже (**neural networks**) итд. као математичке методе (f) да повеже активност, обично изражену преко концентрације или преко величина везаних за дозу лека (ED_{50} , IC_{50}), или пак преко констане везивања односно инхибиције, са хемијским и физичким особинама једињења (x). Параметри (x) су бројни и могу се поделити на: електронске (одражавају индуктивне и резонанционе ефекте различитих супституената у молекулу); хидрофобле (најчешће се користи $\log P$ где је P партициони коефицијент у систему n -октанол/вода); стерне, који описују облик молекула и величину (на пример моларна рефрактивност, MR , која поред величине молекула описује и његову поларизабилност). У употреби су и бројни други параметри и њихове комбинације. Типична QSAR једначина има следећи облик:

$$\log \Phi = a_0 + a_1 x_1^{n_1} + \dots + a_r x_r^{n_r} + \dots + a_n x_n^{n_n}$$

Где експонент може бити 1 или 2 (линеарна или квадратна зависност од датог параметра x). Коефици-

јенти a_n се рачунају регресионом анализом и проверавају статистичком анализом да би се добила финална једначина која добро описује специфичну активност молекула и њену варијацију са променом параметара. Тако се за следећа једињења²²:



(где су X и R супституенти који се мењају, $R = CH_3$, n -бутил, t -бутил, алил; $X = 3$ - и 4 - $CONH_2$, 4 - и $3,5$ - CN , 4 - SO_2NH_2 , 3 - $NHCONH_2$, 4 - $COCH_3$, 4 - $NHCOCH_3$, 4 - CF_3 , 3 - и 4 - CH_3 , 4 - Cl , 4 - C_6H_5) антитуморна активност може описати следећом једначином:

$$\log\left(\frac{1}{C}\right) = 0.10 \pi - 0.042 \pi^2 - 0.31\sigma - 0.18MR + 0.39E_{SR} + \text{const.}$$

А њихова мутагеност следећом једначином:

$$\log\left(\frac{1}{C}\right) = 1.09 \pi - 1.63\sigma + \text{const.}$$

где је C концентрација, σ је електронски параметар, π је липофилни параметар супституента, слично ономе што $\log P$ (горе поменуто) описује за цео молекул, MR је моларна рефрактивност, E_{SR} је стерни фактор R групе. Из ових једначина је очигледно да електронски ефекти супституента више утичу на мутагеност него антитуморну активност, што значи да ће група X са позитивним индуктивним ефектом ($\sigma > 0$) знатно смањити мутагеност, а врло мало антитуморну активност једињења.

Још свакако треба поменути развој компјутерске графике²³ која од седамдесетих година прошлог века прати и подстиче развој рачунских метода молекулског моделовања и интегрални је део савремених компјутерских програма за молекулско моделовање. Увођење графичке комуникације у програме за молекулско моделовање приближила је рачунске методе истраживачима из других области хемије. Такође је знатно побољшала начин представљања и интерпретације резултата израчунавања. Данас постоји велики број компјутерских програма који се користе у оквиру молекулског моделовања. Овде су наведени само неки од њих (неки су бесплатни, а неки су комерцијални): MM3(4), или DUPLEX (специјализован за полинуклеотиде) за молекулско-механичка израчунавања, MORAC за семиемпиријска израчунавања, GAMESS и Gaussian за квантно-хемијска израчунавања, MMC, NAMD за MonteCarlo и молекулску динамику (AMMP, MacroModel и ТИНКЕР су програмски пакети за MM, MC и/или MD израчунавања), AutoDock за молекулско уклапање, GRID за процену повољних интеракција између рецептора и молекула и QSAR израчунавања. Постоје такође програмски пакети, обично комерцијални, који обједињују више различитих програма и моћну компјутерску графику. Такав је на пример **Discovery Studio** од **Accelrys-a**.

УМЕСТО ЗАКЉУЧКА

Од својих почетака, везаних за конформациону анализу, рачунске методе молекуларног моделовања или рачунарска хемије (две области које се у великој мери преклапају) доживеле су вртоглав развој и данас представљају једну важну област хемије која задира у све друге хемијске дисциплине. Са брзим развојем компјутерске технологије за очекивати је да ће се ова област и даље убрзано развијати, од садашњих израчунавања на молекулима и једноставним реакцијама и интеракцијама са њиховом најближим окружењем, до симулација сложених хемијских процеса у различитим срединама, на молекуларном нивоу.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. L. Eliel, N. L. Allinger, S. J. Angyal, G. A. Morrison, „Conformational Analysis“, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1966.
2. A. Baeyer, *Ber.*, **18**, 2269 (1885).
3. S. Kaarsemaker, J. Coops, *Rec. Trav. Chim.*, **71**, 261 (1952).
4. H. Sachse, *Ber.*, **23**, 13 (1890).
5. E. Mohr, *J. Prakt. Chem.*, (2) **98**, 315 (1918).
6. R. G. Dickinson, C. Bilicke, *J. Am. Chem. Soc.*, **50**, 764 (1928).
7. K. W. F. Kohlrausch, A. W. Reitz, W. Stockmair, *Z. Physik. Chem.*, **B32**, 299 (1936).
8. O. Hassel, *Tidsskr. Kjemi Bergvesen Met.*, **3**, 32 (1943).
9. D. H. Barton, *Experientia*, **6**, 316 (1950).
10. D. H. Barton, *Nobel Lecture*, December 11, 1969.
11. I. Dostrovsky, E. D. Hughes, C. K. Ingold, *J. Chem. Soc.*, 173 (1946); F. H. Westheimer, J. E. Mayer, *J. Chem. Phys.*, **14**, 733 (1946); F. H. Westheimer, *J. Chem. Phys.*, **15**, 252 (1947).
12. <http://www.netsci.org/Science/Compchem/feature17c.html>
13. J. B. Hendrickson, *J. Am. Chem. Soc.*, **83**, 4537 (1961).
14. A. Warshel, S. Lifson, *J. Chem. Phys.*, **53**, 582 (1970).
15. N. L. Allinger, M. T. Tribble, M. A. Miller, D. H. Wertz, *J. Am. Chem. Soc.*, **93**, 1637 (1971).
16. E. Schrodinger, *Ann. Phys.*, **79**, 361 (1926).
17. J. A. Pople, D. P. Santry, G. A. Segal, *J. Chem. Phys.*, **43**, S129 (1965).
18. M. L. Connolly, *Science*, **221**, 709 (1983).
19. I. D. Kuntz, J. M. Blaney, S. J. Oatley, R. Lantridge, T. E. Ferrin, *J. Mol. Biol.*, **161**, 269 (1982).
20. C. Hansch, T. Fujita, *J. Am. Chem. Soc.*, **86**, 1616 (1964).
21. R. Benigni, Ed., „Quantitative structure-activity relationship (QSAR), Models of Mutagens and Carcinogens“, CRC Press, 2003.
22. B. H. Venger, C. Hansch, G. J. Hatheway, Y. U. Amrein, *J. Med. Chem.*, **22**, 473 (1979).
23. R. Langridge, *Fed. Proc. Fed. Am. Soc. Exp. Biol.*, **33**, 2332 (1974).

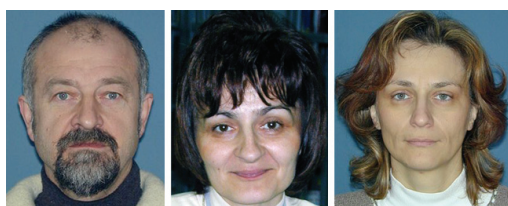
Abstract

THE BEGINNINGS OF CONFORMATIONAL ANALYSIS AND SUBSEQUENT RESULTS

Ljiljana DOŠEN-MIĆOVIĆ, Faculty of Chemistry, Belgrade

Molecular modeling is one of many new tools that contribute to chemical research. Software for molecular modeling has become an indispensable part of the modern laboratory, where it provides new information about molecules, as well as an inexpensive forum for the testing of new ideas.

This text provides an overview of the development of major molecular modeling methods beginning with methods of conformational analysis.



Радисав ГОЛУБОВИЋ, Нина ЈЕВТИЋ и Љубица ПЕРИЋ,
Истраживачка станица Петница, Ваљево
(golub@petnica.rs, nina@petnica.rs, buba@petnica.rs)

ХЕМИЈА У ПЕТНИЦИ – ДВАДЕСЕТПЕТ ГОДИНА ИСКУСТВА

Истраживачка станица Петница (ИСП) основана је 1982. године на иницијативу групе младих истраживача, наставника и студената незадовољних постојећом праксом у образовању и формирању научних кадрова.

Станица је смештена у селу Петница, око 7 км источно од Ваљева и око 100 километара југозападно од Београда. Место је изабрано због изузетног споја природних и културних особености које омогућавају извођење разноврсних облика и садржаја практичне наставе и истраживачког рада (Слика 1).

Истраживачка станица Петница је независна, самостална и непрофитна организација. Основни циљ ИС Петница је подршка школама у унапређивању квалитета, садржаја и метода научног образовања и додатне наставе и, нарочито, непосредно образовање младих који показују склоности и способности за бављење научним и истраживачким радом.

Станица организује програме додатне наставе за ученике основних и средњих школа у различитим научним областима (15 области):

- Хемија, Хемија вода, Молекуларна биомедицина, Биологија и Геологија,



Слика 1. Истраживачка станица Петница

- Математика, Физика, Електроника, Астрономија и Рачунарство,
- Археологија, Историја, Лингвистика, Психологија и Етнологија.

Програми су семинарског карактера и намењени су ученицима који су веома заинтересовани за науку и поседују квалитетно предзнање и склоност за самостални рад.

Циљ семинара ИС Петница је подстицање самосталног рада и осавремењивање знања ученика елементима трагачког и истраживачког, као и њихово увођење у основне методе научног рада. Да би се ученици боље оспособили и лакше реализовали самосталне пројекте организују се четири типа програма:

Зимски семинари (7 дана у периоду фебруар - март)

Полазници стичу теоретска знања из различитих области хемије: аналитичка, неорганска, органска, биохемија, физичка хемија. Упознају се са коришћењем стручне литературе (Слика 2).

Пролећни семинари (4 дана; април - мај)

Полазници се упознају са методологијом истраживања у хемији, планирањем експеримента (Слика 3), обрадом резултата, коришћењем стручне литературе и сл..

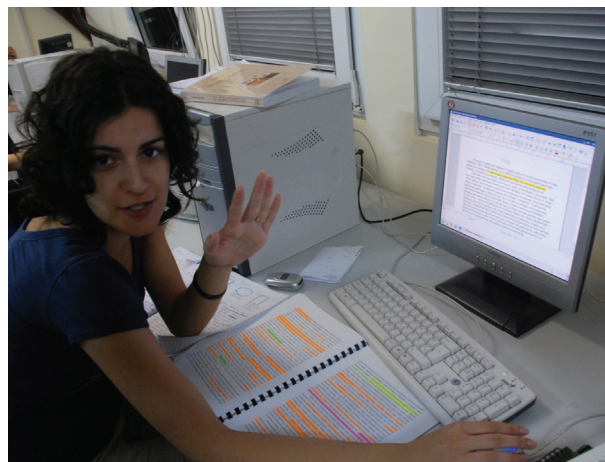
Летњи семинари (10 до 15 дана; јун - август)

Циљ ових семинара је да полазници савладају методологију истраживања кроз самостални рад на конкретним проблемима (огледи, експерименти, теренска истраживања). За ученике који су I и II разред средњих школа организују се вежбовни семинари, а полазници кроз припремљен сет експерименталних вежби овладавају основним техникама рада у лабораторији. Полазници III и IV разреда самостално реализују своје пројекте и пишу извештаје (Слике 4 - 6).

Јесењи семинари (4 - 5 дана; октобар - новембар)

Семинари су теоријски, а теме атрактивне, занимљиве и постављају се узимајући у обзир заинтересованост и жеље већине полазника петничких летњих семинара. Током ових семинара истраживачки рад-

ви се дорађују и припремају за конференцију полазника ИСП "Корак у науку" и штампу у Петничким свескама (Слике 7 - 9).



Слика 9

Циљ истраживачких активности ученика није да остваре неки одређени научни резултат, већ да овладају коректном методологијом истраживачког рада од замисли и формулације пројекта, преко његове припреме и реализације, па до формулације и представљања резултата. Они прво уче да претражују литературу да јасно и прецизно одреде проблем који их интересује. Затим уче методологију истраживања тј. да проблеме испитују преко низа експеримената чији ће им резултати пружити одговоре на јасно постављена питања. Потом полазници уче да добијене резултате обраде на одговарајући начин, уче да пишу извештаје и да резултате својих истраживања саопштавају јасно и прецизно (Слика 10).

ИС Петница такође повремено организује и теренске кампове у трајању од 4 - 10 дана, најчешће у областима где је важно упознати рад на терену (геологија, биологија, археологија) или бити лоциран на местима где су услови за одређене облике рада бољи (астрономија). Такође је уобичајена пракса да се ученицима који показују високо знање и одличне резултате у раду омогући учешће на научним камповима и сличним програмима које организују друге организације, најчешће у иностранству.

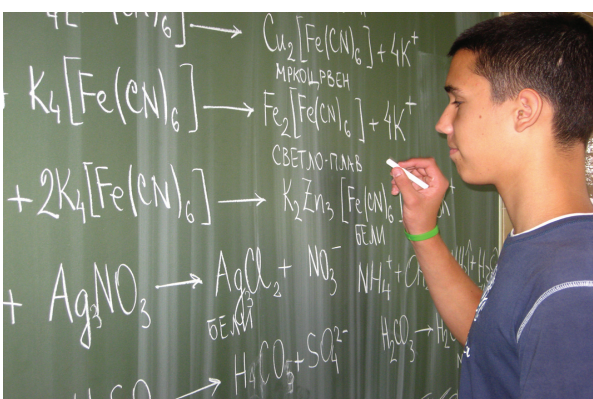
У припреми и непосредној реализацији програма активно учествује велики број искусних научних радника са факултета и из научних института укључујући и еминентне стручњаке из иностранства. Предавачи, асистенти и сарадници Станице стручњаци су различитог профила и искуства. Неке од ових семинара одликује ангажовање врхунских научника и универзитетских наставника, док на другим учествују млади стручњаци који се бирају и припремају из редова студената или младих научних радника. Значајан део активности на програмима се поверава бившим полазницима Петнице - млађим сарадницима (студенти сарадници) који су се доказали као успешни и талентовани студенти и будући професионални научни радници.



Слика 2



Слика 6



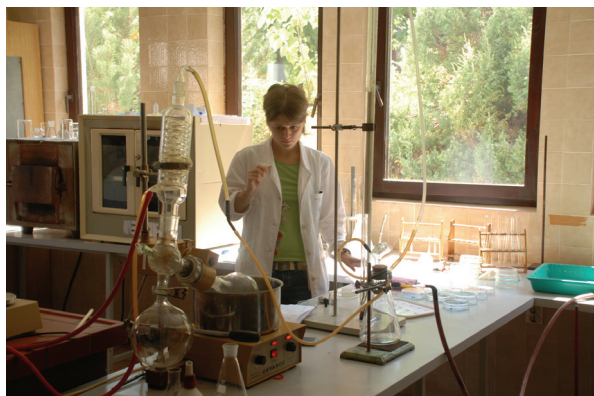
Слика 3



Слика 4



Слика 7



Слика 5



Слика 8

Садржаји семинара и других програма Станице нису усклађени са школским градивом, иако се за неке научне области води рачуна о предзнању и разреду које кандидат похађа.

Пријављивање за учешће на годишњем циклусу образовних програма за средњошколце ИСП врши се слањем попуњеног формулара и пратеће документације (аутобиографија, есеј на задату тему, препорука предметних наставника, мишљење школског психолога) према упутствима на пријавном формулару. Пријаву може послати школа или сам ученик. Пријавни формулар школе добијају током октобра месеца, а може се наћи и на Web-сајту ИСП www.petnica.rs. Рок за приспеће пријава је крај новембра. Број учесника на семинарима је ограничен, па пристигле пријаве подлежу селекцији. Селекција је сложена процедура у којој учествује неколико десетина сарадника и струч-

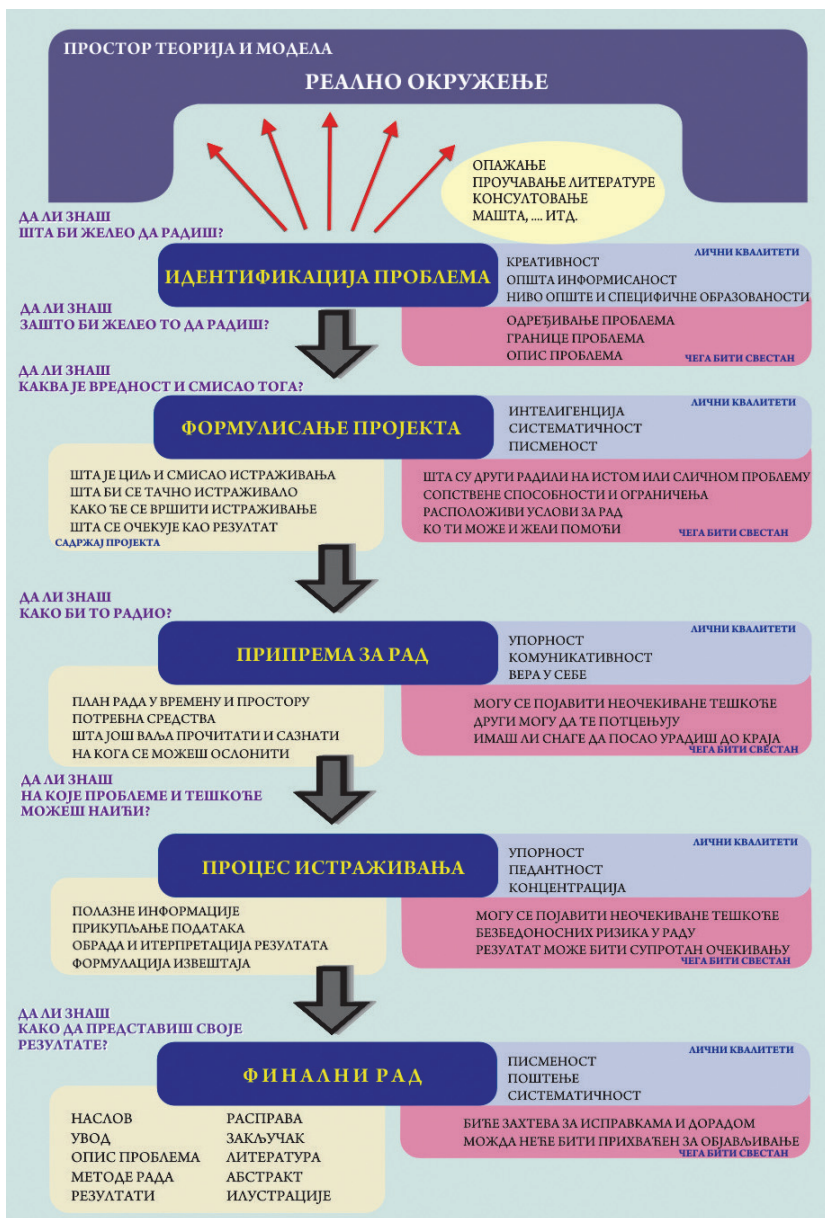
них радника ИС Петница. Сваку пријаву независно прегледа и по прецизним критеријумима оцењује неколико (најмање три) чланова селекционе комисије. Коначна ранг листа кандидата се формира уз помоћ рачунара и јавна је, тако да су приватне интервенције практично немогуће. Након прегледа пристиглих пријава и избора кандидата, изабрани ученици ће добити позиве за зимске семинаре који су први у годишњем циклусу семинара.

За протеклих 25 година реализовано је 246 семинара хемије за 4956 учесника тј. 2180 полазника (већина полазника долази више пута на семинаре). На програму хемије полазници су реализовали више од 400 радова, а неке од тема су и:

- **Оксидација хидрохинона калијум-хлоратом као нова кинетичка метода за одређивање микроколичина ванадијума** (Милош Пешић, ученик 2. разреда Хемијско-прехранбене и грађевинске школе "23. мај" у Панчеву и Марко Дракуловић, ученик 2. разреда Гимназије у Врњачкој Бањи)

У овом раду испитана је могућност примене ванадијумом катализоване оксидације хидрохинона калијум-хлоратом, као нове кинетичке методе за квантитативно одређивање микроколичина ванадијума. Резултати су показали да се на овај начин ванадијум може квантитативно одредити са релативном грешком од 2 - 15%. Испитивање утицаја почетних концентрација хидрохинона и калијум-хлората на брзину стварања семихинона (производа оксидације хидрохинона), тј. на брзину реакције, пружио је детаљнији увид у механизам целог процеса. Такође је испитан и компетитивни утицај других јона (гвожђе, хром, кобалт, церијум, сребро, жива, манган и бакар) на реакциони систем. Утврђено је да се ванадијум на овај начин не може квантитативно одредити у присуству јона гвожђа, које или катализује процес оксидације хидрохинона, или онемогућава спектрофотометријско одређивање ванадијума услед стварања мрко-обојеног колоидног гвожђе(III)-хидроксида. Одређивање ванадијума такође није могуће у присуству сребро(I)-јона, јер настали бели талог сребро(I)-сулфата онемогућава неопходна спектрофотометријска мерења. Остали испитивани јони немају утицај на процес оксидације (односно не ути-

цају процес оксидације)



Слика 10

чу на брзину реакције), па се у њиховом присуству ванадијум може квантификовати овом методом.

- Утицај ултразвука на електрохемијско издвајање водоника на различитим електродама (Александра Думић, ученица 3. разреда Средње школе у Крупњу и Милош Баљозовић, ученик 2. разреда Гимназије у Лесковцу)

У овом раду испитиван је утицај ултразвука на електрохемијско издвајање водоника из хлоридно киселих раствора на следећим материјалима: Al, Pt, Fe, Cu, W и графиту. Концентрације хлороводоничне киселине су биле 0,001; 0,005 и 0,01 molL⁻¹. Снимљене су I – E криве за све коришћене електродне материјале и наведене концентрације киселине у тихим условима, као и при дејству ултразвука. Резултати су показали да ултразвук има вишеструко дејство на електродне процесе, који зависе од услова у систему. Примећене су и анализирани појаве померања скока криве зависности густине струје од наднапона, појава карактеристичног платоа на I – E кривама и повећање струје електролизе на неким електродама, као и померање равнотежног потенцијала радне електроде у односу на исте у тихим условима. Ове појаве су још увек недовољно истражене и дају могућност за даља испитивања.

- Испитивање утицаја гвозденог ексера на промену хемијског састава јабуке (Филип Петронијевић, ученик 3. разреда Гимназије у Чачку)

Испитивано је дејство гвозденог ексера на промену садржаја органских и неорганичких материја у плоду домаће јабуке. Идеја аутора била је да размотри основаност једног народног рецепта за лечење анемије, према којем оболели користе у исхрани јабуке у којима је извесно време стајао гвоздени ексер. У експерименту је у плодове јабуке, у трајању од једног до шест дана, постављан гвоздени ексер и испитиване су промене хемијског састава плода у зависности од дужине времена излагања. Основни закључак експеримента је да евидентно долази до повећања количине гвожђа у пулпи јабуке са временом њене изложености гвоздеком ексеру.

- Квалитет воде реке Градац (Јелена Милосављевић, ученица 3. разреда Гимназије у Младеновцу и Даша Спасојевић, ученица 3. разреда VIII београдске гимназије)

У овом истраживању испитане су хидрохемијске особине реке Градац како би се утврдио њен квалитет у летњем периоду, под јачим утицајем антропогеног фактора. Истраживање је рађено у периоду јун – август и обухватило је три узорковања (јун, јул и август). Узорци су узети са 34 тачке дуж тока реке (Градачка врела (3), 11 извора дуж тока и 20 тачака равномерно распоређених дуж тока). Применом основних метода хидролошких и хидрохемијских истраживања утврђено је да вода горњег тока припада другој, а доњег тока реке трећој класи, због повишене концентрације нитрита и амонијум јона. Амонијум јон је посебно био повишен у августу, услед смањене количине падавина, при већој посећености реке.

- Утицај индустријских отпадних вода на квалитет воде горњег тока реке Колубаре (Нада Сантрач, ученица 3. разреда IV београдске гимназије и Иван Даскијевић, ученик 3. разреда Гимназије "Никола Тесла" у Апатину)

Због великог броја загађивача дуж горњег тока реке Колубаре (индустрија коже, млин, пивара, пијаци, рибарница, лабораторија, дрвна индустрија, градска канализациона мрежа), у периоду од 28. об. до 11. 07. 2004. године изведено је истраживање са циљем утврђивања утицаја отпадних индустријских вода на квалитет воде горњег тока реке Колубаре. Коришћене су основне методе хидролошких и хидрохемијских истраживања, а малом хемијском анализом одређене су вредности калцијума, магнезијума, хлорида, карбоната и бикарбоната, затим индикатора загађености: сулфата, фосфата, амонијума, нитрита и нитрата, а обухваћени су и показатељи органског садржаја: растворени кисеоник, хемијска потрошња кисеоника (из KMnO₄) и биолошка потрошња кисеоника (БПК). На основу добијених резултата може се рећи да вода реке Колубаре и њених притока припада IV класи односно да је њен квалитет знатно опао јер је вода, на основу прошлогодишњих истраживања Хидрометеоролошког завода РС, до сада била II/III и III класе. На пад квалитета воде утицали су изливи који немају адекватне системе за пречишћавање отпадне воде пре њеног пуштања у реку Колубару, као и велики број депонија које прате ток реке. Наиме, они повећавају концентрације NH₄⁺ јона у води који се, због присуства великог броја органских материја, оксидују до NO₃⁻ јона. Иако је разблажење воде велико због великог протицаја реке, повишене концентрације NO₃⁻ јона се не могу занемарити јер се константно обнављају. Да би се дефинисала већ постојећа, као и потенцијална загађења, потребан је даљи мониторинг квалитета воде реке Колубаре. Уколико би се сагледали целокупни хидроеколошки проблеми, могле би се предузети адекватне мере заштите како би се вода исплативије експлоатисала.

- Квалитет воде Палићког језера (Ивана Симић, ученица 4. разреда Гимназије "Светозар Марковић" у Суботици)

Услед дугогодишњег испуштања отпадних вода суботичких индустрија у Палић, језеру је пре тридесет година почело да прети изумирање. 1974. године извршена је санација, којом је постигнуто значајно побољшање квалитета воде, и активиран је механичко-биолошки пречистач у којем се врши обрада отпадних индустријских вода пре њиховог испуштања у језеро. У лабораторији код пречистача четири пута годишње се обавља испитивање хемијског састава језерске воде. Овогодишње истраживање обухватило је поређење резултата хемијских анализа Палића из 1982, 1992. и 2002. године. Циљ истраживања било је праћење промене квалитета воде језера током последњих двадесет година. Резултати испитивања показали су да се у назначеном периоду тип воде језера није променио у односу на 1975. годину, тако да она и данас припада типу хидрокарбонатно-натријумских вода. Међутим, иако

током година долази до постепеног смањивања минерализације, квалитет воде се непрекидно погоршава услед константног пада садржаја раствореног кисеоника, јер он доводи до изумирања живог света у језеру. У том смислу, ефекти санације, која је омогућила "оздрављење" језера као екосистема, практично су већ изгубљени.

Пажљивим и непрестаним подизањем квалитета програма, широком сарадњом са домаћим и међународним партнерима, Истраживачка станица Петница далеко је превазишла локалне и националне границе и постала препознатљива свима који озбиљно размишљају о развоју науке и научног образовања.

Велики број младих људи који данас представљају окосницу српске, а и светске науке су управо петнички полазници и ево шта двоје од њих данас кажу:

"Оно што сам нашао у Петници променило је мој живот. Нестандардан начин рада и живота у Станици, који не може да разуме нико ко није провео цео дан на предавањима и у лабораторији радећи на свом истраживачком задатку а затим пробдео ноћ и дочекао излазак Сунца на језеру, са пријатељима са различитих семинара, са различитим интересовањима, али са истом животном енергијом; развија у младим људима љубав према бављењу науком, али на такав начин да се бављење науком претвара у искрену радост."

др Владимир Петровић, МИТ, Бостон

"Значај Петнице за науку је лако мјерити ако се погледа где су и шта раде бивши полазници. Петница је била и остала једно мјесто које је давало људима наду да ствари могу опет доћи на нормалу и да има смисла бавити се конструктивним стварима. Значај

за моју професију, а и других људи, мјерила бих тим колико смо још сви везани за Петницу. Лично не бих била експериментални физичар и радила то што радим да није било петничких семинара и мојих првих практичних искустава у лабораторији. Сем искуства, Петница ми је дала самопоуздање да се бавим и областима које нијесу у мојој уској струци."

др Лидија Шекарић, IBM,
T.J. Watson Research Center, Њујорк

Abstract

CHEMICAL EDUCATION IN PETNICA SCIENCE CENTER

Radisav GOLUBOVIĆ, Nina JEVTIĆ, Ljubica PERIĆ,
Petnica Science Center, Valjevo, Serbia

The Petnica Science Center (PSC) is a unique educational NGO in Serbia founded to help and support young people who demonstrate an interest in the sciences that goes beyond regular school curricula. Most of the activities are designed for secondary-school students (ages 14-20), but there also is a variety of programs for elementary school students, college undergraduates, graduate students, and school teachers. PSC has gained recognition for its innovative methods in science education, as well as for significant advances in identifying and educating gifted children and students.

With no marks, no rigid discipline, with no regional or national limits for students, open to supporting students' research projects, with a young staff and a thousand enthusiastic scientists and teachers from academia, Petnica Science Center is not only the heart of Serbian alternative education, but is one of the top popular happy places for young people.

In this text some aspects of chemical education in Chemistry and Hydrogeology department of PSC were reviewed. The total of 400 student projects were realized in Chemistry department of PSC during 1990 – 2008.



Мелиха ЗЕЈНИЛАГИЋ-ХАЈРИЋ, Инес ВИДОВИЋ, Природно-математички факултет, Сарајево, Босна и Херцеговина
(е-пошта: mzejnilagic@pmf.unsa.ba и ividovic@pmf.unsa.ba)

ИСТОРИЈСКИ РАЗВОЈ СПОЗНАЈЕ О АТОМУ

Природа и структура свега што нас окружује увијек је била предмет интересовања, како филозофа тако и научника. Прва филозофска размишљања датирају још од VI стољећа п.н.е., из хинду филозофије у Индији, затим грчког атомизма, и Асхарите филозофске школе у исламским земљама. Тадашњи филозофи су на различите начине представљали свијет који их окружује; размишљања су се разликовала од једне до друге филозофске школе и подручја гдје су они дјеловали. Заједничко свима њима било је да су они своје теорије темељили искључиво на теоретским концептима, јер тада још увијек њихове теорије није било могуће експериментално доказати, што је данас предумет свега у модерној науци. Због тога није изне-

нађујуће да су многе од тих теорија биле заборављене. Тек у XIX стољећу неки од ових концепата добивају смисао, захваљујући истраживањима која су имала првенствено подлогу у експерименталним доказима.

УВОД

У хемији и физици атомска теорија је теорија о природи материје, која каже да је материја састављена од дискретних јединица које се зову атоми. Некада је владало мишљење да се материја не може дијелити на било коју мању количину.

Коријени атомске теорије сежу далеко у прошлост - још у филозофске концепте, а у XIX стољећу ова теорија доживљава широко прихватање, зах-

ваљујући открићима која данас представљају три темељна закона материје, и који су експериментално утврђени. Хемичари ове ере су вјеровали да су темељне јединице елемената такођер темељне јединице природе, и назвали су их атомима (ријеч долази из грчког језика, од ријечи атомос, што значи недељив).

Ипак, на почетку XX стољећа, различитим експериментима са електромагнетизмом и радиоактивношћу, утврђено је да је атом, који је сматран недељивим, заправо конгломерат различитих субатомских честица (од којих су главне електрони, протони и неутрони). Те честице могу постојати и саме, неовисно од атома, али у екстремним увјетима врло високих температура и тлака који постоје на неутронским звијездама.

ФИЛОЗОФСКИ АТОМИЗАМ

То је концепт по којем је материја састављена од дискретних јединица које се не могу подијелити на мање дијелове. Он је важио стотинама година, али је то био искључиво филозофски појам атома до којег се дошло филозофским размишљањем, а не експериментом. Природа атома у филозофији је значајно варијала тијekom времена и у различитим филозофским школама, и често је имала духовне елементе. Ипак, темељну идеју о атому прихватили су знанственици стотинама година послје, јер је могла објаснити нова открића на подручју хемије. Трагови атомистичке теорије могу се наћи у античкој Грчкој и Индији.

ИНДИЈА

Најраније познате теорије о атому развијене су у старој Индији у VI стољећу пре Христа, а развио их је Хинду филозоф Канада. У Хинду филозофији, Нуауа и Vaisheshika филозофске школе развиле су теорије о томе како се атоми комбинују у сложеније објекте (прво у паровима, затим по три), али они су вјеровали да се ове интеракције догађају искључиво захваљујући Божјој вољи (хиндуистичког бога Ишваре) и да су атоми сами по себи неактивни, без властитих физикалних карактеристика. За разлику од ових вјеровања, друга, Јаину филозофија, је повезала понашање материје са природом самих атома. Сваки атом, према Јаину филозофији, има специфичан окус, мирис, боју, и двије врсте додира. Атом може постојати у два стања, фином (суптилном), а када је у њему, може стати у бесконачно мали простор, те грубом, када је огроман и заузима велики простор. Иако су атоми грађени од исте твари, могу се спајати, овисно од њихових унутарњих карактеристика и тада настаје један од могућих шест агрегата који одговарају грчком концепту елемената; ти агрегати су земља, вода, сјена, осјетилна твар, карма, и тзв. "неприкладна" твар.

ГРЧКА

Грчки атомизам датира до 440. године пре Христа, што је наведено у књизи *De Rerum Natura* (О природи ствари) коју је написао Римљанин Лукреције

(Lucretius), 50. године пре Христа. У књизи се могу наћи и идеје које су изнијели Леукип (Leucippus, 500-440 пр. Кр.) и његов ученик Демокрит (Democritus, 470-380), да су атоми најмањи дијелови материје, који су недељиви.

Демокрит је развио концепт атома да би помирио двије супротстављене филозофске школе. На једној страни био је Хераклит, који је вјеровао да је у природи свега што постоји – промјена, док је на другој страни био Парменид, који је вјеровао да је свака промјена заправо илузија.

Парменид је негирао постојање празног простора; самим тим, није вјеровао нити у постојање кретања нити промјене, јер није било празног простора у којем се та промјена или кретање могло одвијати. Из истог разлога је сматрао да је твар недељива, јер није било простора у којем би се дијељење могло одвијати. Демокрит је прихватио неке његове поставке, вјеровао је да се свемир састоји од недељивих честица које се крећу у простору. Оне, ипак, нису подложне промјени и недељиве су, али њихов се распоред у простору константно мијења.

Према Демокриту сви атоми су састављени од истог материјала, али су могли имати неограничен број облика и величина. Тако је Демокрит њиховим различитим распоредом у простору објашњавао постојање различитих твари и објеката у свемиру.

Без емпиријског доказа, постојање атома је било лако занијекати – тако је један од противника ове теорије био и сам Аристотел, који се успротивио теорији о постојању атома 330. године пре Христа. Аристотелови списи су сачувани на арапском језику у муслиманском свијету, да би их касније на латински превели св. Тома Аквински и алхемичар Роџер Бејкон у XIII стољећу. Касније је Црква уздизала Аристотелове написе скоро до нивоа Светог писма, повезујући атомизам са неком врстом јереси.

Иако су и индијски и грчки концепт били утемељени искључиво на филозофији, модерна је знаност задржала име атом, који је надјенуо Демокрит. Данас, у хемији и физици атомом се сматра најмања честица која има карактеристике хемијског елемента.

ИСЛАМСКЕ ЗЕМЉЕ

Тијekom XI стољећа, које се назива још и исламско златно доба, исламски филозофи-атомисти су развили атомске теорије које су представљале синтезу грчког и индијског атомизма. Уз претпоставке индијских и грчких филозофа, нове исламске идеје су укључивале и претпоставку да постоји могућност постојања честице мање од атома. У овим радовима истицала се Асхарите филозофска школа, најпознатија по радовима филозофа Ал Газалија (Al-Ghazali, 1058 – 1111). Исламски филозофи су такођер сматрали да се ствари не догађају због природних физикалних узрока, него су резултат Божије воље, без чијег се утјецаја ниста не може догодити. Према њима, природа у потпуности овиси о Божјој вољи.

МОДЕРНА АТОМСКА ТЕОРИЈА

Рађање

Крајем XVIII и почетком XIX стољећа хемичари су се нашли пред низом загонетки – у то вријеме доби вени су многи експериментални подаци, који се нису могли објаснити постојећим теоријама. У низу покушаја да објасни те загонетке, међу којима је био и касније дефинирани закон о очувању масе, који гласи да укупна маса у хемијској реакцији остаје константна, а формулирао га је Антоан Лавоазје (Antoine L. Lavoisier, 1743-1794), Џон Далтон (John Dalton, 1766-1844) је развио атомску теорију у којој је изнио претпоставку да се сваки хемијски елемент састоји од атома уникатног типа, да су они незамјењиви и непромјењиви и да се могу комбинирати да би притом настајале сложеније структуре (хемијски спојеви). Загонетка је такође била и закон сталних масених односа, који је доказао француски хемичар Жозеф Луи Пруст (Joseph Louis Proust, 1754-1825) године 1799., те закон умножених тежинских односа, који је проишао из Далтоновог рада.

Закон о одржању масе, који је формулирао Лавоазје, Далтону је сугерирао да је материја неуништива.

Прустов закон говори о томе да у једном хемијском споју, добивеном било природним било вјештачким путем, масе његових саставних дијелова или конституената ће бити увијек у истим односима, независно од количине и извора оригиналне твари. Пруст је споменути закон доказао синтетизиравши бакарни карбонат различитим методама нашавши да се у свим случајевима састојци комбинирају у истим односима у којима се налази и када се природни бакарни карбонат растави на саставне дијелове.

Далтонов закон умножених масених односа: ако два елемента чине међусобно више од једног споја, тада ће однос маса другог елемента који се комбинира са фиксном масом првог елемента, бити однос малих цијелих бројева.

Године 1803. Далтон је објавио први попис релативних атомских маса за многе твари (тек је пет година касније објавио како је дошао до тих података). Далтон је процијенио атомске тежине елемената према њиховим масеним односима у којима ступају у реакције, при томе узимајући водик као референтну јединицу. Ипак, Далтон није узео у обзир да неки елементи егзистирају у молекулама – нпр. чисти кисик егзистира као молекула O_2 , те је такођер погрешно вјеровао да најједноставнији спој било која два елемента чини по један атом од сваког елемента (тако је вјеровао да је вода HO а не H_2O). Ове чињенице, уз грубост његових мјерних инструмената, резултирале су тиме да његова табела има многих грешака, али је ипак у повијести развоја теорије о атому и саме класификације елемената оставила значајан траг.

Недостатак Далтонове теорије је исправио 1811. године Амедео Авогадро (Amedeo Avogadro, 1776-1856). Он је претпоставио да једнаки волумени било која два глина, на једнакој температури и тлаку,

садрже исти број молекула (односно, маса честица глина не утјече на његов волумен). Авогадро је на тај начин открио двоатомску природу многих плиндова, проучавајући волумене у којима они реагирају. Тако је био у могућности да понуди точније процјене атомске масе кисика и многих других елемената, и јасно је успоставио разлику између атома и молекула. Ипак су хемичари Авогадрову хипотезу из 1811. усвојили тек пола века касније.

Ошкриће субатомских честица

Сматрано је да су атоми најмањи могући дио материје све до 1897. године када је Џ. Џ. Томсон (J.J. Thomson, 1856-1940) својим радом на катодним зракама открио електрон. Он је закључио да су ове зраке састављене од негативно набијених честица које је он назвао корпускулама (други знанственици су то име промијенили у име „електрон“)

Томсон је вјеровао да корпускуле израђају из атома од којих је сачињена сама електрода. Тако је он закључио да су атоми дјељиви, а да су те корпускуле саставни дијелови атома.

Да би објаснио свеукупни неутрални набој атома, претпоставио је да су корпускуле распоређене у једноликом мору позитивног набоја; ово је био тзв. модел „јагоде у пудингу“.

Како је пронађено да су атоми заправо дјељиви, физичари су касније осмислили термин „елементарне честице“ како би описали недјељиве честице.

Ошкриће нуклеуса

Дванаест година касније, Томсонов ученик Ернест Радефорд (Ernest Rutherford, 1871-1949) је потиснуо његов модел атома, захваљујући свом чувеном експерименту са златном фолијом. Он је открио да је велики дио масе, као и позитивног набоја атома, концентрирано у веома малом дијелу његовог волумена. Радефорд је исправно претпоставио да је тај мали дио волумена смјештен заправо у средишту атома.

У експерименту са златном фолијом Гајгер (H. Geiger) и Марсден (E. Marsden) Радефордове колеге, пропуштали су алфа честице кроз танки лист злата, које су након проласка ударале у флуоресцентни екран који је окруживао лист. Алфа честица се састоји од два протона и два неутрона са укупним набојем +2 (језгро атома He). Због веома мале масе електрона и неконцентриране дистрибуције позитивног набоја у Томсоновом моделу, експериментатори су очекивали да алфа честице или прођу кроз листић без значајног отклањања, или да се апсорбирају. Међутим, мали дио алфа честица је био значајно отклоњен.

Ово је навело Радефорда да предложи планетарни модел атома у којем се точкasti електрони гibaју по орбитама око масивног, компактног нуклеуса (атомског језгра), као што се планети гibaју око Сунца. У јавност је са овим открићем изашао 1911. године.

Радефордов модел тада није ништа говорио о структури електронског облака, иако је споменут

атомски модел Хантаро Нагаоке (Hantaro Nagaoka), у којем су електрони организирани у један или више прстенова (ово је био једини ранији атомски модел који је Радефорд споменуо у свом раду 1911. године).

Такођер, у овом раду, Радефорд је сугерирао да је средишњи позитивни набој атома вјеројатно пропорционалан његовој атомској маси, и то у јединицама масе атома водика. Радефорд тада није покушао створити изравну везу средишњег набоја са атомским бројем.

Радефордов модел је ускоро потиснут Боровим моделом атома. Тако је Нилс Бор (Niels Bohr, 1885-1962) употребио ране резултате квантне механике да би описао понашање електрона у орбити, ограничивши га на одређене кружне планарне орбите (орбите у једној равни).

У Боровом моделу, касније проширеним радом Мозлија (H. Moseley), средишњи набој је изравно повезан са атомским бројем (што је, наравно, мјесто атома у периодном саставу елемената). Како је Боров модел представљао побољшање Радефордовога модела, неки извори комбинују ова два модела, означавајући их као Радефорд-Боров модел. Ипак, требало би споменути, да теорија о атому чији је набој језгре једнак његовом атомском броју, представља, осим наведених знанственика, и рад многих мање познатих људи.

Радефордов модел је био важан из тог разлога што је у бити први предложио концепт нуклеуса, иако та ријеч није била употребљена у извјештају из 1911. године. Оно што Радефорд примјећује као вјеројатан узрок његових резултата, јест концентrirани средишњи набој у атому. Након Радефордовога модела и његове потврде у Мозлијевим експериментима, и теоретског описа у Боровом моделу атома, наука о атому се подијелила у два одвојена поља: нуклеарну физику, која проучава атомску језгру (нуклеус) и атомску физику која проучава структуру електроноског облака.

Унаточ својој неточности, Радефордов модел атома је привукао пажњу јавности, док точнији Боров модел није, те се и даље често користи као симбол за атомску енергију. На примјер, Радефордов модел атома се налази на застави Међународне Агенције за атомску енергију (International Atomic Energy Agency), на географским картама се употребљава за ознаку нуклеарних инсталација.

Дојринос Радефорд-овој модела модерној знаности

Након открића атома, знанственици су схватили да атом није најмања честица, него да је састављен од много мањих субатомских честица. Каснији радови су се базирали на истраживању тачне атомске структуре, а експерименти су водили преко Радефордовога експеримента са златном фолијом. Будући да је нађено да су електрони још мањи, могло би се рећи да се атом састоји од празног простора.

Касније, знанственици су открили очекивани број електрона (исти као атомски број) у атому, уз по-

моћ Рентгенских или X зрака. Када X зрака прође кроз атом, један њезин дио се распрши, док остатак пролази кроз атом. Она губи на интензитету због расипања електрона, те се, мјерећи смањивање интензитета X зрака, могао процијенити број електрона у атому.

Откриће изотопа

Фредерик Соди (1877-1956) је 1913. године открио да се појављује више елемената на једном мјесту у Периодном саставу елемената. Термин "изотоп" је надјенула Маргарет Тод (Margaret Todd) као прикладно име за ове елементе. Развој масеног спектрометра је омогућио прецизно мјерење стварних атомских маса. Објашњење ових различитих атомских изотопа чекало је на откриће неутрона, неутралних честица са масом сличном као и протон, а открио их је 1932. год. Џејмс Чедвик (James Chadwick) (1891-1974). Изотопи су дефинирани као елементи истог броја протона, али различитог броја неутрона унутар језгре.

Откриће честица у језгри

Радефорд је 1918. године закључио да се позитивни набој било којег атома може поистовјетити са цјелобројним умношком водикових језгара. Ова чињеница, заједно са оном да је водик најлакши познати елемент и да је атомска маса сваког елемента угрубо еквивалентна са цјелобројним умношком водикове атомске масе, навела га је да закључи да су водикове језгре јединице, и да је саставни дио свих атомских језгара протон.

Даље Радефордово истраживање показало је да је маса језгре већине атома већа од масе протона које та језгра посједује; он је претпоставио да овај вишак масе представљају дотада непознате неутралне честице.

Џејмс Чедвик (James Chadwick) је 1932. године изложио различите елементе "тајанственој" берлијевој радијацији, и мјерењем енергија избачених набијених честица закључио да је радијација уствари састављена од електрички неутралних честица, које имају масу сличну протону. За своје откриће неутрона, Чедвик је 1935. године добио Нобелову награду.

Планетарни модел атома имао је мане. Прво, према класичном електромагнетизму, убрзани електрични набој емитира електромагнетне валове, и електрон који се гiba по орбитама око нуклеуса би стално губио енергију и спирално падао према нуклеусу, и сударио би се с њим у маленом дјелићу секунде. Други феномен, који овај модел није објаснио, је зашто побуђени атоми емитирају само свјетлост одређеног дискретног дијела спектра.

Боров модел атома

Квантна теорија је унијела револуцију у физику почетком XX стољећа, кад су Макс Планк (Max Planck, 1864-1941) и Алберт Ајнштајн (Albert Einstein, 1879-1955) постулирали да се свјетлосна енергија емитира или апсорбира у дискретним количинама названим

кванти. Нилс Бор је 1913. године уградио ову идеју у тзв. Боров модел атома, по којем се електрони могу гибати око нуклеуса по одређеним кружним путањама, а њихове удаљености од нуклеуса су пропорционалне њиховим енергијама. По овом моделу, електрони не могу спирално пасти у нуклеус јер не могу изгубити енергију на континуиран начин; умјесто тога, они могу једино правити скокове између фиксно одређених енергетских разина. Када се ово догоди, свјетлост се емитује или апсорбира у фреквенцији која је пропорционална енергетској промјени (одатле долази апсорпција и емисија у дискретном дијелу спектра).

Боров модел атома је могао само предвидјети спектралне линије атома водика; није их могао предвидјети за мултиелектронске атоме. Како се спектрографска технологија побољшавала, откривене су додатне спектралне линије у атому водика, које Bohr-ов модел није могао објаснити.

А. Сомерфилд (A. Sommerfeld) је 1916. године претпоставио да се електрони у Боровом моделу атома, осим по кружним, могу кретати и по елиптичним путањама. Тиме је покушао објаснити додатне емисијске линије, али ово је начинило модел много сложенијим, а још увијек није могао објаснити сложеније атоме.

Луј де Брољи (Louis de Broglie) је 1924. године претпоставио да све честице које се гibaју – особито се ово односило на субатомске честице као што је електрон – имају један вид валног гibaња.

Ервин Шредингер (Erwin Schrodinger) је истраживао може ли се електрон у атому боље објаснити као вал него као честица. Шредингерова једначина, објављена 1926. год., описује електрон као валну функцију, а не као тачкасту честицу, и елегантно је предвидио многе спектралне појаве које Боров модел није могао.

Иако је овај концепт био математички погоднији, било га је тешко предочити, па се суочио са супротстављањем. Један од његових критичара, Макс Борн, претпоставио је да Шредингерова вална функција не описује електрон, него сва његова могућа стања, те да се тако може употребити да би се израчунала вјеројатност налажења електрона на било којој датој локацији око нуклеуса.

Како вална функција укључује истовремено и вријеме и мјесто (локацију електрона), немогуће је симултано добити прецизне вриједности за обје величине; ова чињеница је постала позната као принцип неодређености.

Ово је обезвриједило Боров модел атома и његове уредне, јасно дефиниране кружне путање. Модерни модел атома описује позицију електрона у атому вјеројатношћу да се он ту налази. Електрон се може наћи у било којој удаљености од нуклеуса, али овисно о његовој енергетској разини, има тенденцију чешћег појављивања у одређеним регијама око нуклеуса, него у другим; ово подручје је данас познато под називом атомска орбитала.

ЗАКЉУЧАК

Проматрајући наведене чињенице, може се закључити да данашња модерна атомска теорија има коријене још прије више од 2500 година. Прве претпоставке су биле искључиво филозофске, но оне се ипак могу сматрати претечама данашње атомске теорије. Било је потребно више стотина година да се старе претпоставке индијских и античких грчких филозофа опет узму у разматрање и искористе као објашњење тада невјеројатних експерименталних резултата. Увијек је постојао и постојао ће отпор традиције и устаљених мишљења према новим идејама, које корјенито мијењају сва дотадашња увјерења – но да тога нема, можда данас не бисмо толико цијенили ова достигнућа. Ова теорија и закони који произилазе из ње, и који је доказују, су донесени на темељу искључиво експерименталних података, и једино као такви могу имати значајно мјесто у модерној знаности.

Многи научници су дуги низ година проучавали експериментално добивене податке, и на основу њих настојали да објасне шта је то атом. Многе теорије су постављене како би то протумачиле, али нису издржале даље експерименталне провјере. Након дуго-трајних истраживања дошло се до данашњих спознаја о атому.

Данас се атом дефинира као најмања честица неког елемента која има своје карактеристичне особине. Састоји се од језгра (нуклеуса), у којем је сконцентриран највећи дио масе атома, а чине га протони и неутрони. Протони су позитивно набијене честице, док су неутрони честице без набоја, и доприносе једино маси атома, те је језгро у цјелини позитивно набијено. Електрони круже око језгра, и то су негативно набијене честице – сваком протону у језгру одговара електрон у омотачу, па је атом у цјелини неутралан.

Abstract

HISTORICAL DEVELOPMENT OF KNOWLEDGE ABOUT THE ATOM

Meliha ZEJNILAGIĆ-HAJRIĆ, Ines VIDOVIĆ, Faculty of Science, Zmaja od Bosne 33-35, 71000 Sarajevo, Bosnia and Herzegovina

The nature and structure of all that surrounds us has always been an item of interest, of both philosophers and scientists. The first philosophical thoughts are dating back to VI century BC, in the Hindu philosophy in India, then the Greek atomism, and Asharite philosophical school in Islamic world. Philosophers of that period were representing the world that surrounded them in different ways, and those thinking differed from one to the other philosophical school and areas where they worked. Common for all of them was a fact that they based their theories solely on theoretical concepts. None of these theories have been proven experimentally, which is a precondition of all in a modern science. Therefore, it is not surprising that many of these theories were forgotten. But, in the XIX century some of these concepts gain meaning, thanks to researches primarily based on the experimental evidence.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. I. Ponomarev, *The Quantum Dice*, CRC Press, Danvers, 1993
2. M. Gangopadhyaya, *Indian Atomism: History and Sources*, K.P. Bagchi, Calcutta, 1980
3. D. Teresi, *Lost Discoveries: The Ancient Roots of Modern Science-from the Babylonians to the Maya*, Simon & Schuster Inc., 2003, p. 213
4. R. Siegfried, *From Elements to Atoms: A History of Chemical Composition*, Diane Publishing Co, Darby, 2002
5. A.L. Lavoisier, *Elements of Chemistry*, Dover Publications, 1984
6. C. A. Wurtz, *The Atomic Theory*. D. Appleton and Co., New York, 1881
7. J. Dalton, *A New System of Chemical Philosophy*, Part 1. S. Russel, London&Manchester, 1808
8. W. Demtröder, *Atoms, Molecules and Photons: An Introduction to Atomic-Molecular- and Quantum Physics*, 1st Edition, Springer Inc., 2002
9. G. Woan, *The Cambridge Handbook of Physics*, Cambridge University Press, 2000
10. J. I. Pfeffer, *Modern Physics: An Introductory Text*, Imperial College Press, 2000
11. J. Dong, *Diameter of an Atom - The Physics Factbook*, 1998
12. S. Chandra, *Comprehensive Inorganic Chemistry*, New Age Publishers, 1993
13. K. S. Krane, *Introductory Nuclear Physics*, 1987
14. М. Јанковић, *Хисторија хемије = Повијест хемије*, Универзитетска књига, Сарајево, 1999.



ВЕСТИ ИЗ СХД

НОВО РУКОВОДСТВО СХД-ХЕМИЈСКОГ ДРУШТВА ВОЈВОДИНЕ

На скупштини Српског хемијског друштва-Хемијског друштва Војводине која је одржана 28.05.2009. године на Технолошком факултету у Новом Саду извршен је избор новог председника, потпредседника, чланова Извршног одбора, чланова Председништва, чланова Надзорног одбора и чланова комисије за награде и одликовања и Комисије за међународну сарадњу. За новог

председника ХДВ је изабран Горан Бошковић, редовни професор Технолошког факултета у Новом Саду. За потпредседнике СХД-ХДВ су изабрани: Биљана Абрамовић, ПМФ, Драгослав Стоиљковић, ТФ и Вранић Иван, а за секретаре Данијела Шојић, ПМФ, и Сања Ратковић, ТФ.

Рада Баошић

РЕАКТИВИРАН ЈЕ РАД ПОДРУЖНИЦЕ СХД У ЧАЧКУ

Делегација СХД коју су чинили Љуба Мандић, члан председништва, Јасминка Королија и Рада Баошић, секретар Друштва, је посетила Чачак на позив и у организацији професора хемије Зорана Срећковића, председника наставног актива. Делегацију је дочекао и начелник школске управе Чачак. Рад подружнице је последњих година утихнуо, али захваљујући ангажовању Зорана Срећковића једино је наставна секција успешно радила. Скуп је одржан у Регионалном центру за професионални

развој запослених у образовању. После уводне речи секретара СХД одржана су два предавања: Ј.Королија "Намирнице на часу хемије" и Љ.Мандић "Метаболизам, контрола и регулација". Након тога је одржана основачка Скупштина ове подружнице којој је присуствовало око 30 чланова, на којој је за председника подружнице једногласно изабран Зоран Срећковић, а за секретара Драшко Симоновић.

Рада Баошић



112 ГОДИНА СРПСКОГ ХЕМИЈСКОГ ДРУШТВА СВЕЧАНА СКУПШТИНА

Председништво Српског хемијског друштва има задовољство да Вас позове да присуствујете Свечаној скупштини која се одржава поводом дана оснивања Друштва - 15.новембар 1897. године по старом календару.

ПРОГРАМ

- Порука Председништва Друштва
- Вукадин Леовац, добитник Медаље за трајан и изванредан допринос науци за 2008. годину: "Синтеза и структуре комплекса метала са из-

тиосемикарбазидима и изотиосемикарбазони ма. Метал-индуковане реакције”

- Уручивање годишњих награда и признања Друштва
- Горан Калуђеровић, добитник Медаље за прегалаштво и успех у науци за 2008. годину: ”Развој антитуморских комплекса платине и других метала”

- Из историје Друштва

Свечана скупштина одржаће се у уторак, 8. децембра 2009. године у Свечаној сали Српске академије наука и уметности у Београду, Кнез Михаилова 35, са почетком у 11.00 часова.

Позивамо Вас и на коктел у Клубу Академије (по завршетку Свечане скупштине).

СЕМИНАР „ЕНЕРГИЈА И ЖИВОТНА СРЕДИНА ДАНАС“

Семинар „Енергија и животна средина данас“ у организацији Српског хемијског друштва под покровитељством Министарства за науку и технолошки развој Србије одржан је 19. јуна 2009. године у просторијама Технолошко-металуршког факултета у Београду. Скупу је присуствовало преко 65 слушалаца који су дошли да чују и учествују у дискусијама 11 предавача из земље и иностранства који су излагали на ову тему. Скуп је отворен поздравом Председнице Српског хемијског друштва Проф Иванке Поповић и Државног секретара Министарства рударства и енергетике Проф Николе Рајаковића, а започет гостујућим предавањима представника Америчког хемијског друштва, са којим је Српско хемијско друштво у протеклом периоду отпочело чвршћу сарадњу. Одржана су следећа предавања:

- Проф Јурген Х. Екснер, “Развијање глобалне етике животне средине“.
- Проф Марк А. Нани, “Депоније: од отпада до ресурса”.
- Проф Дионисиос Д. Дионисиу, “Нанотехнологије пријатељске према животној средини за третман воде загађене цијанобактеријама: примена, реакциони интермедијери, токсиколошке студије.”
- Проф Томислав Павловић, “Савремена достигнућа у области соларне енергетике.”
- Др Драгана Ђорђевић, “Емисија честица у атмосфери као последица добијања енергије из фосилних горива.”

- Мр Бојан Ковачић, “Енергетска ефикасност и обновљиви извори енергије у функцији одрживог развоја државе.”
- Проф Ратко Кадовић, “Потенцијали шума у функцији заштите животне средине и обновљиве енергије.”
- Проф Александар Поповић, “Загађење животне средине у околини србијанских термоелектрана - резултати добијени испитивањима на Хемијском факултету Универзитета у Београду.”
- Др Бојан Радак, “Нуклеарна енергија - кандидат за спас климе.”
- Мр Драгољуб Дабић, “Квалитет ваздуха и возни парк у граду Панчеву.”
- Др Мила Пуцар, “Примена енергетске ефикасности и обновљивих извора енергије у циљу заштите животне средине.”
- Проф Драган Веселиновић, “Основни узроци загађења животне средине.”

С обзиром да је енергија, њена производња и потрошња у људској цивилизацији данас изворни узрок практично свих загађења и угрожавања животне средине од стране човека, закључно са изазивањем климатских промена, ово је био значајан допринос у којем је Српско хемијско друштво својим колегама из струке, али и осталим сродним и заинтересованим стручњацима, приближило овај проблем и допринело стварању слике о путевима његовог решавања.

Бојан Радак

2011. ГОДИНА – МЕЂУНАРОДНА ГОДИНА ХЕМИЈЕ

Крајем децембра 2008. године, Генерална скупштина Уједињених нација усвојила је Резолуцију којом се 2011. година проглашава Међународном годином хемије. Резолуцију су заједнички припремили IUPAC и UNESCO, а формални предлагач је била Етиопија у којој је седиште Федерације афричких хемијских друштава. Ова одлука уклапа се и даје додатни значај ранијој одлуци УН којом је период од 2005-2014. године проглашен Декадом образовања за одрживи развој.

“Међународна година хемије даће глобални импулс развоју хемијске науке која представља основ на

шег живота и наше будућности. Надамо се да ћемо повећати прихватање и разумевање хемије у широј јавности, повећати интересовање младих људи за науку и генерисати ентузијазам за креативну будућност хемије,” изјавио је председник IUPAC-а Јун-Ил Јин, професор Универзитета у Сеулу.

Између осталог, Резолуција истиче:

- да хемијска наука даје изванредан допринос економском напретку човечанства; да хемијска индустрија и све остале индустријске гране које производе лекове, горива, метале и слично, зависе од хемије;

- да хемија игра кључну улогу у решавању многих проблема и изазова савременог света, чиме помаже да се остваре циљеви Миленијума; разумевање хемије је нарочито битно за изазове као што су медицина и јавно здравље, глобалне промене климе, обезбеђивање одрживих извора чисте воде, хране и енергије, одржавање чисте животне средине за добробит свих људи;
- да је неопходан континуални развој ове науке и да је потребно привући одличне студенте, да је важно је да се јавност упозна са бројним доприносима хемије у решавању основних човекових потреба, у смањивању сиромаштва, у

очувању добробити наше планете и побољшању квалитета живота на њој;

- да ће Међународна година хемије представљати фокалну тачку за активности хемијских друштава, образовних институција и невладиних организација, као и да ће катализирати међународну сарадњу.

Године 2011. обележиће се и два значајна јубилеја: 100-годишњица од доделе Нобелове награде Марији Склодовски-Кири за откриће радијума и полонијума, и 100-годишњица од оснивања у Паризу Међународне асоцијације хемијских друштава, из које је 1919. године израстао IUPAC.

Теодор Аст

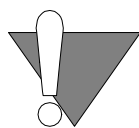
СЕМИНАР ЗА НАСТАВНИКЕ ШКОЛА ОДРЖИВОГ РАЗВОЈА

Након неколико успешно реализованих семинара за ученике основних школа на тему заштите животне средине, Српско хемијско друштво у сарадњи са Технолошко-металуршким факултетом у Београду организује семинар за наставнике *Школа одрживог развоја*. Семинар је акредитован од стране Завода за унапређивање образовања и васпитања као обавезан и може се наћи у Каталогу програма стручног усавршавања запослених у образовању за школску 2009./2010. годину под редним бројем 211. Циљна група су сви наставници основних и средњих школа, као и професори разредне наставе који желе да прошире своја знања у области заштите животне средине и превенције загађења и тим знањем побољшају квалитет наставе.

Теме које обухвата дводневна радионица су животна средина и одрживи развој, ваздух, вода и

земљиште (загађење и последице загађења, мере превенције), алтернативни извори енергије и енергетска ефикасност у школи и код куће, управљање отпадом и рециклажа. Поред предавања професора Технолошко-металуршког факултета и координатора програма планиране су и вежбе, интерактивне и креативне активности које ће наставници касније моћи да примене и у свакодневној настави. Посебан акценат ће бити стављен на имплементацију ових тема у наставни програм и корелацију одрживог развоја са осталим школским предметима. У зависности од интересовања наставника, семинари ће се одржавати и регионално уз помоћ подружница Српског хемијског друштва.

Бојана Вукадиновић



ОВОГОДИШЊИ РАД ФОНДА НЕНАДА М. КОСТИЋА ЗА ХЕМИЈСКЕ НАУКЕ

Фонд Ненада М. Костића за хемијске науке основан је 2001. године са задатком да, према својим средствима, подстиче и помаже хемијско школовање и истраживање у Србији. Фонд ради кроз свој Управни одбор, чији садашњи чланови су угледни универзитетски професори: др Милош И. Ђуран са Природно-математичког факултета у Крагујевцу, председник, др Душан М. Сладић са Хемијског факултета у Београду, др Миљенко Н. Перић, дописни члан САНУ, са Факултета за физичку хемију у Београду, као и др Љиљана С. Јовановић и др Неда Мимица-Дукић са Природно-математичког факултета у Новом Саду. Бивши чланови, професори др Мирослав В. Врвић са Хемијског факул-

тета у Београду и др Милорад Г. Јеремић са Факултета за физичку хемију у Београду, добровољно су иступили из Управног одбора после вишегодишњег предавног и успешног рада. Од самог почетка, Фонд ради двојачко: преко јавног конкурса награђује најбоље дипломце и похваљује менторе њихових дипломских радова, а по сопственом избору награђује појединце и установе који се истичу у просветном и научном раду. У договору са Управним одбором, крајње одлуке доноси власник и председник фонда, др Ненад М. Костић, професор на Тексас А&М универзитету у САД и члан ван радног састава САНУ.

Почев од 2002. године, сваког маја месеца, фонд одржава наградне свечаности на универзитетима широм Србије. Осма годишња свечаност одржана је на Факултету за физичку хемију у Београду 19. маја 2009. године. На тој свечаности две хемичарке добиле су дипломе, савремене уџбенике и награде од по 33.000 динара. То су Сања Ј. Клер са Природно-математичког факултета у Новом Саду, за дипломски рад „Волтаметријско испитивање имидаклоприда на електродама од угљеничне пасте“ и Јована В. Матић са Хемијског факултета у Београду, за дипломски рад „Оптимизација услова изоловања и испитивање ИгЕ везујућег потенцијала киселих и базних хитиназа за дијагности-

фиковање алергије на банану (*Musa acuminata*)“ . Дипломке су одржале занимљива кратка предавања о својим истраживањима. Њихови ментори, професори др Ференц Гал из Новог Сада и др Марија Гавровић-Јанкуловић из Београда, добили су дипломе и савремене уџбенике. Професор др Живорад Чековић, редовни члан САНУ, са Хемијског факултета из Београда, награђен је за доприносе развоју хемијске науке и просвете. На крају свечаности факултет домаћин и председник фонда приредили су пријем у част награђених и похваљених.

Ево одломака из говора др Ненада М. Костића на свечаности.

Сви ми се држимо стипендија Фонда и примењујемо строга мерила. Трудимо се да радимо објективно, да не одлучујемо “ни по даду ни по стичењима” већ по заслугама појединца и установа. Ми отворено дискутујемо међу собом, али коначне одлуке су моје. Ако у раду Фонда има пројеката, за њих није одговоран Управни одбор; одговоран сам ја. Слободно ми се обраћајте. Ја никоме нећу замерити на примерцима и предлозима.

Овогодишњи конкурс донео нам је два преседана истих врста. Обе награђене дипломе потичу из универзитетских лабораторија из којих су потекли и преходни добитници награда. Очигледно, на новосадском ПМФ-у делује одлична лабораторија за електроаналитичку хемију, а на београдском Хемијском факултету делује одлична лабораторија за имунохемију. Те истраживачке групе привлаче најбоље студенте, и сами студенти привлаче једни друге. Унутар тих лабораторија колеге сарађују. Усвих појединца усвех је целој тими.

Награђени дипломски радови показују колико су хемијске дисциплине повезане и узајамно зависне. Колеџница Клер помиње имунохемијске и хроматографске методе. Колеџница Матић помиње разне хроматографије и користити имунохемијске методе. Заиста, добре научне студије су ипак без одзира на њихову класификацију по транса хемије.

То исто важи и за добре научнике. У социологији науке постоји Лојкин закон, степен функција која квантифицира познато правило да мала мањина на учника производи велику већину научних радова. Квалитет се зишњава при врху, најбољи се држе најбољих. Безимени мудрац из народа не зна социологију ни математичку, али је искуством дошао до сличне закључка: с ким си – такав си.

Награђивање људи по исправним мерилима ствара елиту заслужних. Награђивање по погрешним мерилима ствара елиту повлашћених. Школство, постојећу научно школство, треба да предначи у поштом оцењивању и одбиру најбољих. Одбир по заслугама је строга, али мора бити хуман. Стирочни и добронамерни људи различито оцењују ња и реше. Зато ниједи суд не треба да буде једини и коначан. Свако заслужује нову прилику, следећу шансу. Ко омане или про-

пусти једном имаће прилику поново, и ипак више пута, како у школовању ипак и у животи. Сваки низ прилика ипак се завршава одбором најбољих. У добром друштву, када се човеку ујаси једна прилика, указаће му се друга, на некој другој страни.

Установе које деле новац и друга средства за истраживање треба да се руководе квалитетом погодног елабората и способностима научника и тимова који их подносе. Уравниловка је штетна, разумна утакмица је корисна, али то не значи да је жестока утакмица још кориснија. Људи нису анђели; у великом искушењу показују своје слабости. Било би добро да у Србији постоје паралелни извори средстава за научни рад. Распарчавањем једне исте блајне умножавају се административни трошкови, храни се незаситна бирократија, и на крају научници су губитници. Пожељно је да те установе финансирања буду независне једна од других чак и ако се у крајњој линији све оне најајају из државног буџета.

Одлично научно истраживање је тежак и неизвесан посао јер се природа отворено истраживачу. И најбољи научник је ограничен способностима. Те две врсте такмичења, са зајоним природом и са несавршеним собом, здраве су и корисне утакмице. Утакмица са другим научницима често поправља али понекад квари учинак истраживања. У мојој домовини, Америци, ирецењује се користити од утакмице у иривреди, школству, ња и у науци. У мојој отаџбини, Србији, нема довољно ни плодне утакмице ни плодне сарадње. Срећом, имамо одличне узорне у хемичарима које данас награђујемо. Они добро пролазе у здравим утакмицама о којима говорим зато што умеју да сарађују и воде млађе сараднике.

Награде и похвале које Фонд данас уручује мале су према заслугама ово петоро људи. Млади фонд не може уклонити иреке које они срећу у своме раду, али може подстићи њихову вољу да савладају те иреке.

У име Костић фонда за хемијске науке позивам све вас, и друге који нису могли да нам се данас придруже, на породжетијак рада у идућој години. Колико год средства буду дозвољавала, Фонд ће остати ваш саговорник, сарадник, и савезник.

Председник и управни одбор фондације