

# **ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД**

год. 49

бр. 5 (ноембар)

YU ISSN04406826

UDC 54.001.93

# ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД CHEMICAL REVIEW



Годиште 49

број 5  
новембар

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

Volume 49  
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 и Јелена Радосављевић

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

УРЕЂИВАЧКИ ОДБОР

Никола Благојевић, Иван Гутман, Снежана Зарић, Јован  
Јовановић, Славко Кеврешан, Драган Марковић, Радо  
Марковић, Владимир Павловић, Слободан Рибникар,  
Радомир Саичић, Живорад Чековић (председник).

Годишња чланарина, укључује часопис „Хемијски преглед“,  
за 2008. годину износи:

- за запослене..... 1.200,00  
- за пензионере, студенте, ђаке и незапослене..... 500,00  
- претплата за школе и остале институције..... 2.500,00  
- 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.yu](mailto:hempred@chem.bg.ac.yu)

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  
[www.ratkovicdesign.net](http://www.ratkovicdesign.net)  
[office@ratkovicdesign.net](mailto:office@ratkovicdesign.net)

## САДРЖАЈ

### ЧЛАНЦИ

Тамара ТОДОРОВИЋ  
*Tamara TODOROVIĆ*  
О ПАКОВАЊУ У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА *CRYSTAL  
PACKING* ..... 102

Иван ГУТМАН, Душица СИМИЈОНОВИЋ, Зорица  
ПЕТРОВИЋ, Јована КРМАР  
*Ivan GUTMAN, Dušica SIMIJONOVIĆ, Zorica PETROVIĆ and  
Jovana KRMAR*  
МИРИС РУЖЕ  
*THE FRAGRANCE OF ROSE* ..... 107

Милош К. МИЛЧИЋ, Снежана Д. ЗАРИЋ  
*Miloš K. MILČIĆ and Snežana D. ZARIĆ*  
„ТИПОВИ“ АРОМАТИЧНОСТИ  
*“TYPES” OF AROMATICITY* ..... 110

### ВЕСТИ ИЗ ШКОЛЕ, ВЕСТИ ЗА ШКОЛЕ

Вера МУЖДЕКА  
*Vera MUŽDEKA*  
СЦЕНАРИО ЗА ЧАС: ЗАКОН СТАЛНИХ МАСЕНИХ ОДНОСА  
*TEACHING THEME: LAW OF CONSTANT COMPOSITION* ..... 116  
ПРОПОЗИЦИЈЕ ЗА ТАКМИЧЕЊЕ ИЗ ХЕМИЈЕ УЧЕНИКА  
ОСНОВНИХ ШКОЛА ЗА ШКОЛСКУ 2008/09. ГОДИНУ \_\_\_\_ 117  
ШКОЛСКЕ УПРАВЕ СА ОКРУЗИМА ..... 119

### ХЕМИЈА НА ИНТЕРНЕТУ

Александар ДЕКАНСКИ, Владимир ПАНИЋ, Драгана  
ДЕКАНСКИ  
*Преишраживање лијераиуре X* ..... 120

### ВЕСТИ ИЗ СХД

„КРЕАТИВНО УЧЕЊЕ ХЕМИЈЕ“  
ЛЕТЊА ШКОЛА ХЕМИЈЕ НА ТАРИ ..... 122  
НИЈЕ ОТПАД СВАКА АМБАЛАЖА, НАУЧИ ШТА ЈЕ  
РЕЦИКЛАЖА! ..... 122  
ПРВО ТАКМИЧЕЊЕ ЗА ТРОФЕЈ СРЕБРНИ ЕРЛЕНМАЈЕР \_ 124  
111 година СРПСКОГ ХЕМИЈСКОГ ДРУШТВА  
СВЕЧАНА СКУПШТИНА ..... 124



## УВОДНИК

Примичемо се крају 2008. године, а тиме и дану кад Српско хемијско друштво обележава 111 година свог постојања и рада. Већ је традиција да Друштво крајем новембра или почетком децембра организује Свечану скупштину поводом дана свог оснивања - 15. новембра 1897. године (по старом календару!).

**Свечана скупштина** ће се одржати у среду, **10. децембра 2008.** године у **Свечаној сали Српске академије наука и уметности** у Београду, Кнез Михаилова 35, са почетком у **11 часова**. Поред поруке Председништва Друштва присутни чланови и гости на скупштини имаће прилику да чују и предавања добитника прошлогодишњих медаља: **Бранислава Николића**, добитника Медаље за трајан и изванредан допринос науци и **Мелине Калагасидис Крушић**, добитнице Медаље за прегалаштво и успех у науци. Све ће се завршити интересантним прилозима из историје нашег Друштва. Као и током низа претходних година, на овој свечаности биће уручене награде и признања најбољим дипломираним студентима хемије и хемијске технологије из целе Србије и заслужним члановима Друштва.

Добродошли сте на Свечану скупштину. У овом броју *XII* у рубрици Вести из СХД (124 страна) налази се комплетан програм овог догађаја. Надамо се да ћете и ви својим присуством увеличати овај лепо професионални скуп и да ћете уживати у њему.

\*\*\*

У оквиру Априлских дана професора хемије 2001. године на Трибини која је била организована донета је одлука да се у сваком септембарском броју *Хемијској прејледа* објаве пропозиције за такмичења ученика основних и средњих школа из хемије које организује СХД. Од тада се сваке године објављује и листа освојених места у основним и у средњим школама за сваку школску управу у Србији.

У претходном броју (бр. 4) донели смо пречишћени текст пропозиција за такмичење ученика средњих школа из Хемије. У овом броју доносимо пропозиције за такмичење основаца. Оне су морале да буду промене зато што је промењен систем административног регионалног организовања школа, тј. обрачуна расположивих места за сваки појединачни регион.

У рубрици *Вести из/за школе* сем нових пропозиција наћи ћете и листу округа (са припадајућим школским управама) који ће убудуће представљати основ за одређивање броја одобрених места за поједине категорије такмичара.

\*\*\*

Скрећемо вам пажњу на три интересантна чланка у овом броју *XII*. Из свакодневног искуства је познато да се материја може наћи у различитим агрегатним стањима. Такође се зна да се материја састоји од атома, јона и молекула, те да макроскопске особине било ког објекта зависе

од величине, облика и енергије ових микроскопских конституената. О паковању честица у кристалне структуре и пуно других лепих ствари може се прочитати у првом чланку у овом *XII*, аутора Тамаре Тодоровић.

Да је ружа цвет изузетне лепоте и изузетно пријатног мириса не треба нико да вам прича. Не зову је без разлога „краљицом цвећа“. А да ли знате да мирис руже потиче од компликоване смеше хемијских једињења, при чему разне сорте ружа свој мирис дугују различитом саставу смеше или чак различитим хемикалијама. У овом броју Хемиског прегледа аутори Иван Гутман, Душица Симијонових, Зорица Петровић и Јована Крмар упознају све радознале читаоце са основним хемијским подацима о мирису руже.

У прошлом броју *Хемијској прејледа* публикован је први рад о ароматичности. Аутори Милош Милчић и Снежана Зарић су у том тексту објаснили да је још од Мајеровог (Meuer) открића тиофена, који је веома сличан бензену по физичким и хемијским особинама, постало јасно да је појам ароматичности много шири од хемије бензена и његових једињења. Данас постоји много „типова“ ароматичности, а самом појму ароматичности су додати разни префикси (анти-, нон-, хомо-, псеудо-, квази-, супер-, итд.). Сви ови типови ароматичности указују на то да се концепт ароматичности састоји од многобројних структурних, хемијских и физичких манифестација, тј. да је ароматичност један мултидимензиони феномен. Тему о ароматичности настављамо и у овом броју *XII* представљањем неких од најраспрострањенијих типова ароматичности.

Мислимо да је добро када се у *XII* појављује више радова на одређену тему (у истом броју, или из броја у броју, као што је сада случај) јер се тако освежава и дозиђује грађевина знања коју о датом феномену имамо. Уколико имате и ви неки прилог на ову или на неку од тема које се појављују у овом броју *XII* (властито текст или преузет), пошаљите нам га, да правимо „гроздове“ текстова који, с једне стране, комплетирају знања о одређеном феномену, а са друге, представљају додатни материјал који се на различите начине може користити у настави и ваннаставним активностима на свим нивоима, од основне школе до факултета.

\*\*\*

Рецепата за квалитетан живот по властитој мери има много. Оно око чега се сви слажу јесте да живот чине мале ствари и да би требало да себи што чешће приуштимо уживање у малим, финим стварима. Још трају лепо, прилично топли јесењи дани, па уграбите прилику и овај *XII* читајте опуштени на неком пријатном сунчаном месту. Скупљајте енергију и идеје и, пре свега, уживајте и у сунцу и у часопису.

Р. М. Јанков



## ЧЛАНЦИ

Тамара ТОДОРОВИЋ, Хемијски факултет, Београд, tamarat@chem.bg.ac.yu

### О ПАКОВАЊУ У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА

Из свакодневног искуства је познато да се материја може наћи у различитим агрегатним стањима. Такође се зна да се материја састоји од атома, јона и молекула, те да макроскопске особине било ког објекта зависе од величине, облика и енергије ових микроскопских конституената.

Један mol гасовите супстанце на собној температури заузима око  $24 \text{ dm}^3$ , док запремина исте количине супстанце у течном или чврстом агрегатном стању износи од неколико десетина до неколико стотина  $\text{cm}^3$ . Следи да се честице супстанци у чврстом и течном агрегатном стању налазе на много мањим растојањима него што је то случај у гасовитом агрегатном стању. Како су честице течних и чврстих тела релативно густо паковане у простору, могућност сабијања кондензованих супстанци на још мању запремину је врло мала услед одбојних сила које долазе до изражаја на малим међучестичним растојањима (Слика 1).

Гас ће врло брзо дифундовати из отворене боце, док чврста супстанца обично може бити изложена ваздуху (уколико не ступа у хемијску реакцију са компонентама ваздуха) без приметне промене величине и облика (мада има изузетака попут нафталена, камфора, јода итд., који сублимују<sup>1</sup>). Поред одбијања на кратким растојањима, честице чврстих тела нерадо напуштају своје суседе, што значи да између честица постоји привлачење које их држи на окупу. Температура има далеко већи утицај на поменуто него притисак: течности углавном кључају већ при умереном загревању, али се чак и стене топе и испаравају у вулканским гротлима.

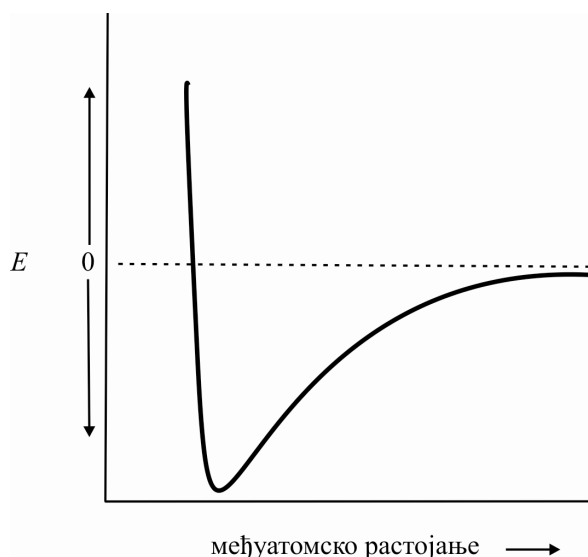
Расуђивањем, заснованим на једноставним доказима, могу се извући следећи закључци: при хлађењу или при повећању притиска честице ће се међусобно приближавати и формирати течности или чврста тела, при чему су међучестична растојања истог реда величина као димензије самих честица; уколико се честице присиле да дођу у ближи контакт јавља се снажно одбијање. При загревању или смањењу спољашњег притиска дешава се супротно.

Док би лаик вероватно задовољио своју радозналост већ након ових уводних редова, неко ко жели да сазна више мора поставити најмање следећа два питања:

1) Каква је природа и величина сила које држе честице на окупу?

2) Какво је геометријско уређење честица које се налазе у блиском контакту?

Ограничавајући се на кристална чврста тела, управо ова питања дефинишу област изучавања паковања у кристалним структурама, стога што силе паковања и симетрија кристала одређују хемијске и физичке особине кристалних материјала.



Слика 1. Промена енергије ( $E$ ) као последица довођења два атома на блиско растојање

#### СВЕ ЈЕ ПОЧЕЛО ОД ПАХУЉИЦЕ

Немачки научник Јоханес Кеплер (Johannes Kepler) је 1611. године објавио рад под називом „Новогодишњи дар - шестоугаоне снежне пахуљице” као поклон свом дугогодишњем пријатељу и патрону барону Џону Вакеру од Вакенфелса (John Wackher von Wackhenfels). У овом раду Кеплер је успео да објасни зашто све пахуљице имају јединствену шестоугаону (хексагоналну) структуру. Свака снежна пахуљица настаје из „језгра” хексагоналне симетрије које се увећава пролазећи кроз атмосферу. Стална промена атмосферских услова доприноси да свака снежна пахуљица има другачији облик. Језгро је толико мало да су услови који одређују шему раста сваке пахуљице идентични са

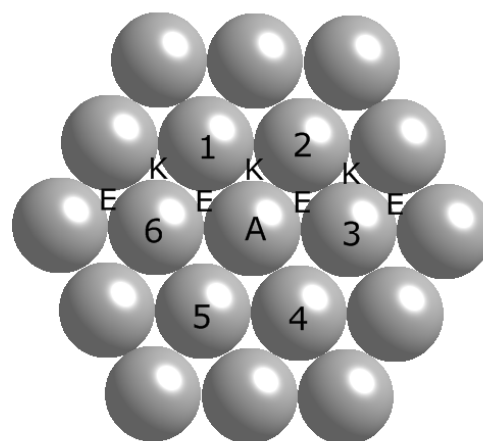
<sup>1</sup> Сублимација је директан прелаз супстанце из чврсте у гасовиту фазу, без појаве течне фазе.

свих шест страна, те је на тај начин обезбеђена симетрија. У овом наизглед једноставном раду Кеплер, који је имао невероватан таленат да изведе дубоке закључке из једноставних ствари, је поставио основе кристалографије.

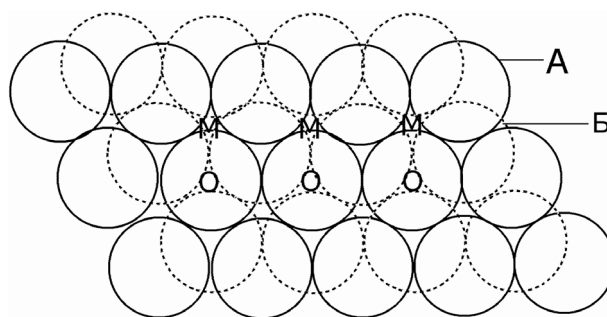
Кеплерово интересовање за „самоорганизацију” и слагање честица материје довело га је до другог питања - који је најефикаснији начин да се честице ређају у три димензије и тако заузму најмањи могући простор (запремину)? Ако претпоставимо да су честице сферног облика јасно је да ће, ма како оне биле распоређене у простору, увек неминовно постојати шупљине, а изазов је био пронаћи начин слагања који би минимизирао паразан простор. Да би решио овај проблем, Кеплер је пробао различите начине слагања честица, а затим израчунавао ефикасност паковања<sup>1</sup> за сваки од њих.

Након проучавања читавог низа различитих начина слагања Кеплер је дошао до закључка за који је сматрао да је довољно вредан да га унесе у свој рад о снежним пахуљцама. Наиме, установио је да је најефикаснији начин паковања сфера такав да се слојеви, у којима је свака сфера окружена са шест идентичних сфера (Слика 2), ређају хоризонтално један на други тако да се сфере из наредног слоја налазе иза шупљина претходног слоја. Други слој сфера може окупирати или само Е или само К шупљине првог слоја (Слика 2). Слагање трећег слоја такође може бити изведен на два начина, а управо ту лежи разлика између кубног густог паковања (*ccp*, енгл. *cubic close packing*) и хексагоналног густог паковања (*hcp*, енгл. *hexagonal close packing*). Трећи слој сфера може окупирати само једну врсту шупљина. Код *hcp* структура то су шупљине О типа (Слика 3), те ће се трећи слој сфера наћи директно изнад првог. Додатак сваког наредног слоја би следио секвенцу [... АБАБАБ ...]. Уколико трећи слој сфера окупира шупљине типа М (Слика 3), што је случај код *ccp* структура, понављајућа секвенца је [... АБВАБ ...]. Поменути начини паковања сфера су, до сада, најзначајнији са аспекта структурне хемије јер многе металне, јонске, ковалентне и молекулске кристалне структуре могу бити описане коришћењем концепта густог паковања.

Кеплерово тврђење, да је кубно густо паковање сфера уједно и најгушће, је апсолутно разумно - ефикасност код кубног густог паковања је била највећа од свих које је разматрао. Међутим, то није одбацило могућност да постоји још неки начин слагања са још већом ефикасношћу паковања, што се поставило као кључно питање математичког проблема названог Кеплерова коњектура. Дути низ векова овај проблем је остао формално нерешен. Процене су да ће прорачуни, који би требало да докажу да су поменути начини паковања заиста и најефикаснији, бити довршени за двадесетак година.



Слика 2. Густо паковани слој истоврсних сфера



Слика 3. Два густо пакована слоја сфера. Слој Б заузима Е шупљине слоја А

## ТЕРМОДИНАМИКА

Стаavimo се на трен у улогу честице која се налази унутар чистог, перфектног кристала. При загревању, на некој одређеној температури, зазвониће сирена за узбуну, морамо да напустимо своје суседе при чему се компликована архитектура кристала урушава и настаје течност. Са термодинамичког аспекта топљење се јавља јер пораст ентропије система, услед пораста просторне неуређености честица, превазилази смањење енталпије услед раскидања сила паковања у кристалу. Ово правило нема изузетака при порасту температуре система. По истом принципу, хлађењем растопи до исте температуре при којој се кристал топи, требало би да се сирена поново огласи и да се честице враћају на места која су заузимале у првобитном кристалу градећи исту кристалну форму. Смањење ентропије, услед пораста просторног уређења честица у систему, је више него компензовано порастом неуређења околине услед особаћања топлоте топљења. Међутим, течност која се понаша на описан начин приликом хлађења представља пре изузетак него правило. Упркос другом принципу термодинамике, кристализација се обично дешава на нижим температурама, што значи да је кристал много лакше разорити него направити. Слично томе,

<sup>1</sup> Ефикасност паковања или коефицијент паковања представља однос запремине честица и запремине простора у коме се честице налазе.

обично је много лакше растворити идеалан кристал у растварачу него кристализацијом из истог добити добар кристал. Раст кристала је пре кинетички него термодинамички контролисан процес, што значи да се процесом кристализације добија кристална форма која најбрже настаје, а која уједно није нужно најстабилнија.

## СИЛЕ

Молекул се састоји од позитивно наелектрисаних језгара окружених електронским облаком. Укупна шаржа молекула једнака је нули, али због сталног или привремено несиметричног распореда супротно наелектрисаних честица које они садрже (језгра атома и електрони), молекули могу имати било сталну, било привремену поларност. Електростатички потенцијал посматраног молекула је расподела наелектрисуња по повшини тог молекула. Стога, наелектрисуња која се приближавају посматраном молекулу сопственим електростатичким пољем утичу на расподелу електронске густине у молекулу, што је феномен који називамо поларизација.

Узрок постојања привлачних сила које држе молекуле на окупу је управо електростатички потенцијал индивидуалних молекула. Код јонских кристала за рачунање електростатичког потенцијала може послужити Кулонов закон, док се код органских молекула користе знатно компликованији изрази.

Различити атоми имају различите електронегативности. Што је већа раздвојеност шаржи унутар молекула, већа је поларност и јаче су интермолекулске силе. Јонски кристали су стога врло тврди и стабилни, док на пример нафталан и камфор сублимују релативно брзо. Ови неполарни органски молекули морају се ослонити на узајамну поларизацију да би настало интермолекулско привлачење; резултујуће силе су слабе -

дисперзионе или ван дер Валсове силе (два имена за исту врсту силе).

На кратким растојањима се јављају одбојне силе јер електрони суседних молекула не могу заузимати исти простор (Слика 1). Стога, ове одбојне интеракције усмеравају електроне да се међусобно избегавају.

Водонична веза (интеракција) је најефектнији начин препознавања и привлачења међу молекулима у кристалу, тако ефикасна да ће молекули са донорским и акцепторским групама наградити водоничну везу скоро без изузетка.

На слици 4 су сумирани типови интермолекулских интеракција.

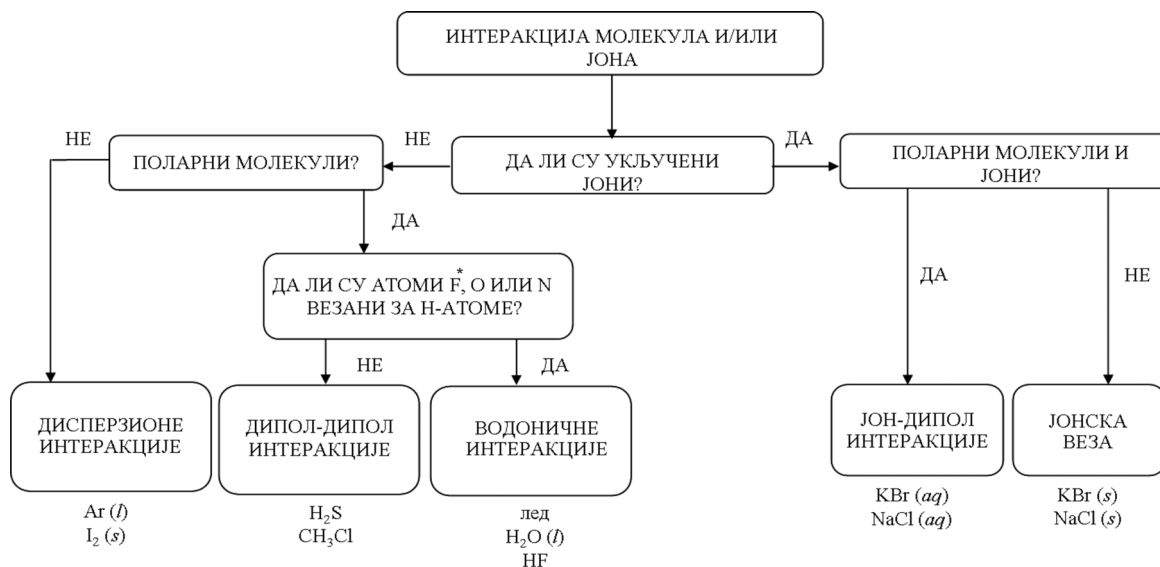
Директне, али неспецифичне, мере јачине сила у кристалу су температура топљења и енталпија сублимације.

## СИМЕТРИЈА КРИСТАЛА

Интермолекулско привлачење окупља молекуле у веће групације, али то не значи да у структури нужно постоји уређеност и симетрија. Стакло, у коме су молекули насумично оријентисани, је врло често стабилно попут кристала, где су пак молекули просторно уређени. Међутим, уређивање честица укључује анизотропију<sup>1</sup>: последице оптичке, магнетне и електричне анизотропије довеле су до разноврсних технолошких примена кристалних материјала.

Каква веза постоји између уређености, симетрије и стабилности кристала?

Захваљујући математици показано је да могуће комбинације елемената симетрије дају тачно 230 тродимензионалних просторних група - 230 јединствених начина уређења молекула у три димензије. Међутим, молекули не могу да „бирају“ по ком шаблону од понуђених 230 ће просторно бити организовани у кристалу.



Слика 4. Flowchart дијаграм главних типова интермолекулских интеракција. (\* атоми F и H су директно везани само у HF).

<sup>1</sup> Анизотропија је појам који означава да је нека посматрана величина (апсорбанца, индекс рефракције, густина, итд) директно зависна од правца посматрања.

Напротив, морају бити задовољени стриктни услови паковања што се постиже комбинацијом ограниченог броја елемената симетрије. До сада решене кристалне структуре органских и неорганичких једињења припадају ограниченом броју просторних група (Слика 5.) [R.P. Scaringe, 1988; W.H. Vaug и други, 1992].

Када у молекулу постоји равномерна расподела наелектрисања, без могућности грађења водоничних веза, тада сваки део молекула има скоро исти потенцијал ка интермолекулском привлачењу. За очекивати је да ће сваки молекул бити окружен са што је више могуће суседних молекула. Како је приликом паковања празан простор бескористан, молекули ће се просторно организовати како би минимизирали појаву шупљина. Уређивање и симетрија долазе у први план јер је за низ идентичних објеката периодична, уређена и симетрична структура неопходан (мада не и довољан) услов за ефикасно густо паковање. Утврђено је да сви стабилни кристали имају коефицијент паковања од 0,65 до 0,80 [A. Bondi, 1964; A. Cavazzotti, 1983].

### ОД ЕЛЕМЕНАТА СИМЕТРИЈЕ ДО ПРОСТОРНИХ ГРУПА

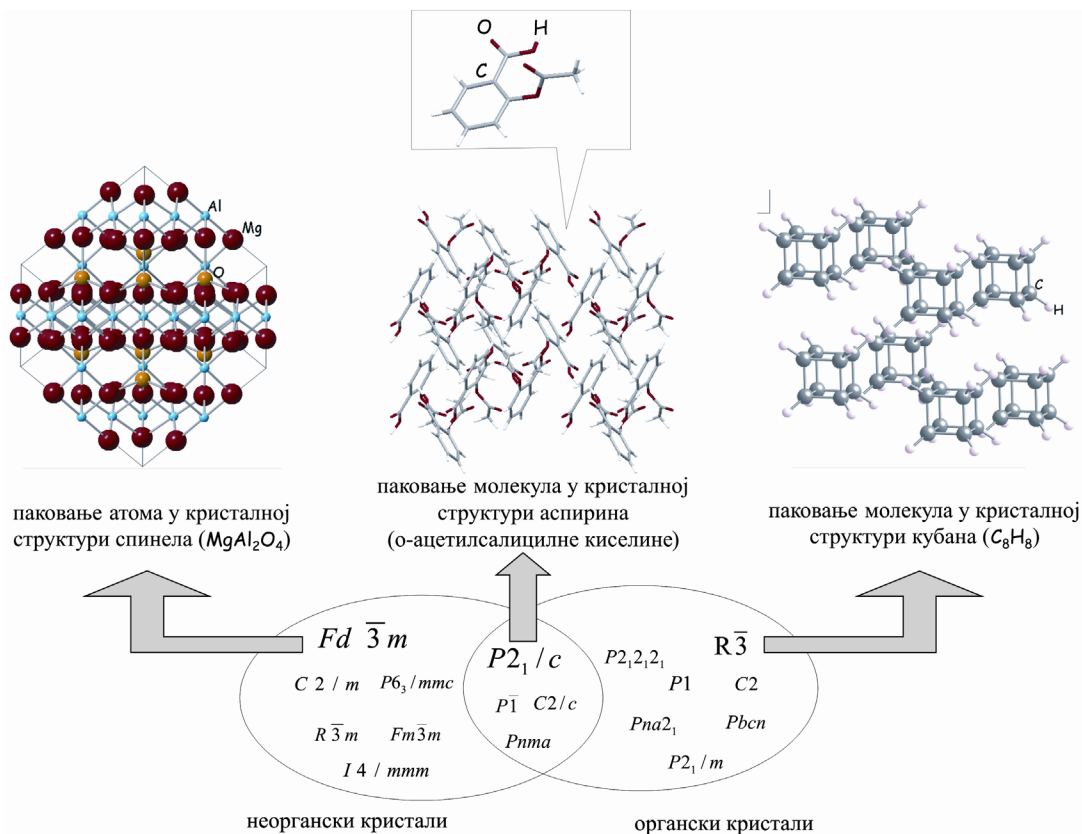
Операција симетрије је такво покретање након кога се свака тачка тела подударе са еквивалентном или са истом тачком. Другим речима, ако запамтимо позицију и оријентацију тела пре и након покретања, тада такво покретање можемо назвати симетријском операцијом уколико се почетна и крајња позиција тела не

могу разликовати. Операција симетрије је стога ефекат који доводи тело у еквивалентну конфигурацију која се не може разликовати од почетне, али која није неопходно идентична оригиналној конфигурацији (Слика 6).

Елементи симетрије су геометријски појмови, попут тачке, праве и равни, у односу на које могу бити изведене једна или више симетријских операција. Операције и елементи симетрије су тако блиско повезани јер се операција може дефинисати само уз помоћ елемената, а истовремено постојање елемената симетрије може бити демонстрирано само ако се покаже да одговарајућа симетријска операција постоји.

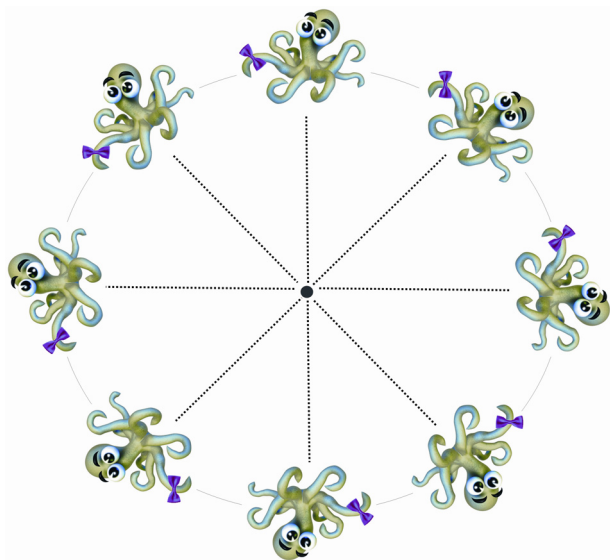
Постоје две номенклатуре за обележавање елемената симетрије (Табела 1). Херман-Могенов (Hermann-Mauguin) систем се користи у кристалографији, док је Шенфлис (Schönflies) систем у употреби у спектроскопији. Разлог постојања два различита начина обележавања лежи у чињеници да се у кристалографији користе и елементи просторне симетрије које не срећемо у спектроскопији, док се с друге стране у спектроскопији користи далеко већи опсег елемената симетрије тачке него у кристалографији.

Да би одредили симетрију молекула или кристала морамо применити строге математичке критеријуме. Део математике који се бави тим критеријумима је теорија група која спада у апстрактну алгебру, а развијена је у 19. веку од стране генијалног француског математичара Евариста Галоа (Évariste Galois). Група јесте скуп



Слика 5. Неке од најзаступљенијих просторних група у кристалним структурама неорганичких и органских супстанци

елемената који су међусобно повезани на основу одређених правила.



Слика 6. Ротација октопода око осе која је нормална на раван папира. Угао једне ротације износи  $45^\circ$ .

Табела 1. Елементи симетрије који се користе у кристалографији и спектроскопији

	Елемент симетрије	Херман-Могенов симбол	Шенфлисов симбол
симетрија тачке	центар симетрије (инверзије)	$\bar{1}$	$i$
	раван симетрије (рефлексije) или огледалска раван	$m$	$\sigma_v, \sigma_R$
	права оса ротације	$n$ ( $n = 1, 2, 3, 4, 6$ )	$C_n$
	ротоинверзиона оса	$\bar{n}$	-
	роторефлексиона оса	$\bar{n}$	$S_n$
симетрија простора	клизна раван	$a, b, c, n, d$	-
	завртањска оса	$2_1, 3_1$ , итд	-

Сви кристали могу бити сврстани у седам кристалних система на основу дужине кристалографских оса и величине углова између оса. Комбинацијом кристалних система са трансляцијом, кључном симетријском операцијом у кристалографији, настају Бравеове решетке. Групе симетрије тачке, којих има 32, добијају се комбинацијом елемената симетрије који не садрже трансляциону компоненту. Даљом комбинацијом свих расположивих елемената симетрије са Бравеовим решеткама добија се 230 просторних група.<sup>1</sup>

## ПОЛИМОРФИЗАМ

Раније је речено да је раст кристала врло често кинетички контролисан процес. Крајњи производ - кристал, може настати од мање стабилног језгра које брже расте. Трансформација у термодинамички стабилну

фазу је забрањена услед енергетске баријере - морају се превазићи силе које владају у метастабилној фази да би се молекули реорганизовали у стабилну кристалну форму. У неким случајевима, просторна реорганизација је толико једноставна да се врло лако дешава трансформација из једне у другу кристалну форму. Последица тога јесте полиморфизам - способност супстанце да кристалише у различитим формама. На основу термодинамике за очекивати је да ће само једна форма бити стабилна на датом притиску и температури, али кинетика с друге стране дозвољава истовремено постојање више фаза [J.A.R.P. Sarma и други, 1990].

Иако идентични по хемијском саставу, полиморфи се разликују према биорасположивости,<sup>2</sup> растворљивости, физичко-хемијској стабилности, боји, густини, температури топљења и многим другим особинама. Контрола процеса добијања жељене полиморфне форме је од великог значаја за фармацеурску индустрију, с обзиром да варијације у растворљивости различитих полиморфа могу утицати на ефикасност лека, али и на безбедну употребу [A. Linás и други, 2008].

## ЕКСПЕРИМЕНТИ

Дифракција рендгенских зрака, као и неутронска дифракција дају детаљну слику паковања у кристалној структури. Поменуће експерименталне технике дају врло поуздане податке. Међутим, информације добијене овим путем претежно пружају увид у статичну слику система. Динамика кристала може бити испитивана различитим спектроскопским техникама. Механичке, електричне, оптичке и магнетне особине кристалних материја су у блиској вези са паковањем. Од интереса, како за науку тако и за технологију, јесте систематско истраживање зависности поменутих особина од паковања.

Да би уопште могли да проучавамо паковање неопходно је да имамо квалитетан кристал испитиване супстанце. Стога је један од најзначајнијих експерименталних, који се скоро свакодневно изводи у хемијским лабораторијама, кристализација из раствора. Поред тога, развијене су и многобројне технике раста кристала како из течне, тако и из гасовите и чврсте фазе.

Методе које укључују примену високог притиска за раст кристала нашле су своју примену у синтези необичних кристалних структура. Фазе синтетисане овим методама имају веће густине у поређењу са фазама добијеним под атмосферским притиском, што понекад води појави неуобичајених координационих бројева код неорганских комплекса. Употребом високог притиска могуће је стабилизovati јоне у неуобичајеним оксидационим стањима попут  $\text{Cr}^{4+}$ ,  $\text{Cr}^{5+}$ ,  $\text{Ni}^{3+}$ ,  $\text{Cu}^{3+}$  и  $\text{Fe}^{4+}$ . Индустриски важна примена метода високог притиска јесте добијање дијаманта из графита.

<sup>1</sup> Број могућих просторних група је заправо бесконачан, а бројка од 230 просторних група добија се увођењем ограничења у избору оса симетрије.

<sup>2</sup> Биорасположивост је мера степена у коме ће терапеутски активна супстанца (једноставније лек) која доспе у крв (односно буде ресорбована пошто пацијент лек прогута) доспети до места на коме делује. Такво место дејства су обично ензими унутар хелије, протеини који се налазе у крви или рецептори на површини одређених хелија.



## ЗАКЉУЧНЕ НАПОМЕНЕ

Иако се експериментом дифракције рендгенских зрака могу добити подаци за извођење структурног модела који даје увид у паковање кристала, предвиђање начина и контрола паковања представљају још увек далеке циљеве. Чак не постоји ни генерални одговор на фундаментално питање: зашто неке супстанце кристалишу, а неке не? Какав је утицај величине и облика молекула, конформације и поларности на способност кристализације? Стратегијом акумулације и систематске анализе података из кристалографских база вероватно ће се у будућности доћи до одговора на ова фундаментална, али и даље отворена питања.

## ЛИТЕРАУРА И ИНТЕРНЕТ ЛИНКОВИ

- Anthony R. West, Basic Solid State Chemistry, John Wiley & Sons, New York, 2000.
- F. Albert Cotton, Chemical Applications of Group Theory, John Wiley & Sons, New York, 1963.
- C. Giacovazzo, H.L. Monaco, G. Artioli, D. Viterbo, G. Ferraris, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti, Fundamentals of Crystallography, 2<sup>nd</sup> Edition, Oxford University Press, New York, 2002.
- Љиљана Карановић, Дејан Полети, Рендгенска структурна анализа, Завод за удџбенике и наставна средства, Београд, 2003.
- A.I. Kitaigorodski, Organic Chemical Crystallography, Consultants Bureau, New York, 1961.

R.P. Scaringe, in Electron Crystallography of Organic Molecules, edited by J.R. Frzser and D.L. Dorset, Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1988., p. 85

W.H. Baur, D. Kassner, Acta Cryst., B48, 1992, 356.

A. Bondi, J. Phys. Chem., 68, 1964, 441.

A. Gavezzotti, J. Am. Chem. Soc., 105, 1983, 5220.

J.A.R.P. Sarma, J.D. Dunitz, Acta Cryst., B46, 1990, 784.

A. Linás, J.M. Goodman, Drug Discovery Today, 13, 2008, 198.

[http://en.wikipedia.org/wiki/Johannes\\_Kepler](http://en.wikipedia.org/wiki/Johannes_Kepler)

[http://en.wikipedia.org/wiki/Kepler\\_conjecture](http://en.wikipedia.org/wiki/Kepler_conjecture)

## Abstract

### CRYSTAL PACKING

**Tamara Todorović**, Faculty of Chemistry, Belgrade

Crystal packing is a fascinating, and at the same time, such complicated phenomenon. The physics of the interaction between particles in a crystal is relatively simple, but the rules that govern the ways in which these forces can be modulated are complex and still obscure. In this short review a brief history of discovery of close packing, experiments for crystal structure determination, basic principles of geometrical crystallography, and importance of crystal packing for various properties and applications of crystals are presented. For complete understanding of rules which relate nature of forces in crystals with crystal symmetry and various properties one must master basic principles of crystal packing.



Иван ГУТМАН, Душица СИМИЈОНИЋ, Зорица ПЕТРОВИЋ  
Природно-математички факултет Крагујевац (e-mail: gutman@kg.ac.zu)  
ЈОВАНА КРМАР, Гимназија „Вељко Пејровић”, Сомбор

## МИРИС РУЖЕ

Ружа је цвети изузетне лепоће и изузетно пријатној мириса. Мирис руже потиче од комбиноване мешине хемијских једињења, при чему разне сорте ружа свој мирис доују различитом саставу мешине или чак различитим хемијским једињењима. У овом чланку упознајемо читаоце „Хемијској прилици” са основним хемијским подацима о мирису руже.

### О РУЖАМА

Фамилија ружа (латински: Rosaceae) обухвата зелене и дрвенасте врсте, жбунове и дрвеће.<sup>1</sup> Ружа (латински: Rosa) је члан те фамилије. Постоји око сто врста дивљих ружа, које расту у умереним и суптропским крајевима Северне Африке, Етиопије, Хималаја и Филипина, а неке и у Европи. Укрштањем, хибридизацијом и селекцијом добивено је преко 5000 сорти ружа, које се данас узгајају широм целе наше планете. Најпознатија, и за производњу мириса најважнија врста руже је Rosa damascena (Rosaceae), која би се могла

назвати „Дамашанка ружа”, а коју ћемо у даљем тексту називати једноставно: „ружа”.



Слика 1. Ружа [Rosa damascena (Rosaceae)].

Ружа је цвет изузетне лепоте и мириса, у коме су, са сигурношћу се може рећи, сједињење све чари биљнога света. Зато се и сматра „краљицом цвећа”. Подсећамо да је ружа, између осталог, симбол љубави и вечита инспирација песника.

Разне сорте ружа разликују се по боји и облику цвета, по трњу и по мирису. Нас у овом чланку занима мирис и хемијска природа супстанци од којих овај мирис потиче.

Из ружиних латица добива се такозвано „ружино уље”, које се од античких времена користи као драгоцену мирисну материју, било у чистом облику било као састојак различитих парфема. Ружино уље се добива из свеже убраних латица. За килограм уља потребно је обратити 3 до 4 тоне ружиних латица. Због тога производња ружиног уља захтева ангажовање великог броја радника. Највећи произвођач ружиног уља је Бугарска, а следе Турска, Мароко и Кина.



Слика 2. Брање руже у Бугарској у 19. веку.

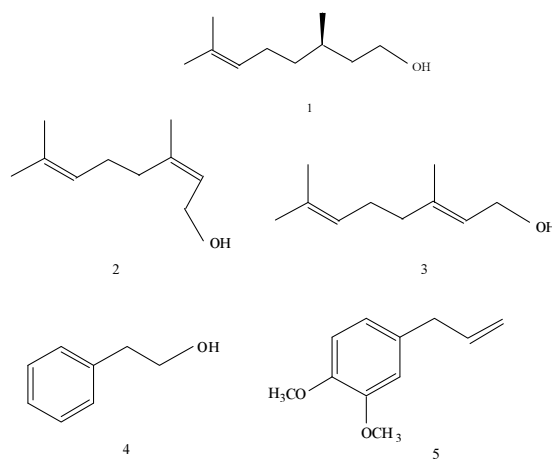
Стандардни поступак за добивање ружиног уља је дестилација воденом паром. Примењује се и екстракција органским растварачима, а у новије време и екстракција суперкритичним угљен-диоксидом.<sup>2</sup>

## ХЕМИЈСКИ САСТАВ РУЖИНОГ УЉА

Потпуно је разумљиво да је опојни мирис руже, односно ружиног уља, одувек приваћило пажњу хемичара. Главни састојци ружиног уља били су идентификовани још у првој половини 20. века. Међутим, прави напредак је постигнут тек увођењем савремених инструменталних метода, пре свега гасне хроматографије. Данас је за анализу хемијског састава ружиног уља, као и других производа добивених из ружиних цветова најефикаснија гасна хроматографија комбинована са ма-

сеном спектрометријом. До данас је у ружином уљу идентификовано преко 350 једињења.<sup>2-5</sup> Треба одмах рећи да је хемијски састав ружиног уља прилично променљив, и да зависи од сорте руже, њеног географског порекла, времена и услова брања и сл.

Главни састојци мириса руже су три хемијски сродна незасићена алкохола: цитронелол, гераниол и нерол (слика 3). Истичемо да је највише заступљено једињење цитронелол, а не гераниол како пише у неким домаћим убвеницима органске хемије. У једној од новијих анализа ружиног уља<sup>3</sup> нађено је 31% цитронелола, 17% нонадекана, 16% гераниола, 8% нерола, 7% хеникозана, 5% 9-еикозена и 4% метил-еугенола (в. слику 3). Интересантно је да је количина 2-фенилетанола варијала, тако да га је у једном узорку било мање од 0,01%, а у другом значајних 3%.



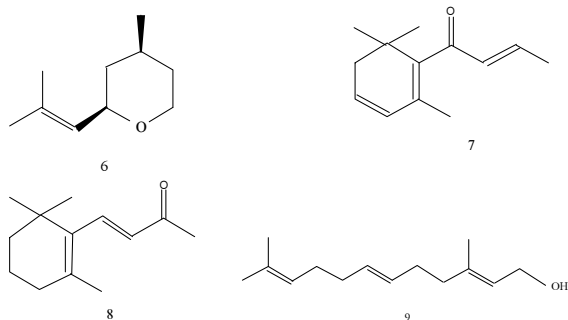
Слика 3. Главни састојци мириса руже: (-)-цитронелол ( $C_{10}H_{17}OH$ , 1), гераниол (*цис*-изомер  $C_{10}H_{15}OH$ , 2), нерол (*транс*-изомер  $C_{10}H_{15}OH$ , 3), 2-фенилетанол (4) и метил-еугенол (5). Осим ових једињења у ружином уљу се налази и значајна количина засићених угљоводоника, са угљеничним ланцем дужине од 15 до 31 атома, највише нонадекана ( $C_{19}H_{40}$ ) и хеникозана ( $C_{21}H_{44}$ ), као и неких незасићених угљоводоника, највише 9-еикозена ( $C_{20}H_{40}$ ). Ови угљоводоници немају мирис, али успоравају брзину испаравања мирисних компоненти, и тиме продужавају трајање мирисног ефекта.

Иако цитронелол и гераниол имају мирис који наликује мирису руже, ипак то није „оно право”. Тек релативно недавно откривено је да неке супстанце у ружи и у ружином уљу, присутне у врло малим количинама, имају значајан удео у ономе што ми осећамо као „мирис руже”.

## РУЖИН ОКСИД, ДАМАСКЕНОН И СРОДНЕ МИРИСНЕ КОМПОНЕНТЕ

Новија истраживања показала су да нека једињења која се у ружином уљу налазе само у траговима имају значајан утицај на укупни утисак који изазива мирис руже. Прво су откривена једињења названа ружин оксид (6) и бета-дамаскенон (7). Њих у типичном ружи-

ном уљу има 0,5% односно 0,1%. Њихове формуле дате су на слици 4.



**Слика 4.** Неки споредни, али не и мање важни, састојци мириса руже: (-)-цис-ружин оксид (6), бета-дамаскенон (7), бета-јонон (8) и фарнезол (9).

Касније се показало да једињења 6 и 7 не постоје у ружи, него настају током дестилације воденом паром. Она, свеједно, ружином уљу дају један карактеристичан, веома пријатан, мирис (или као што то стручњаци за парфеме кажу: карактеристичну ноту).

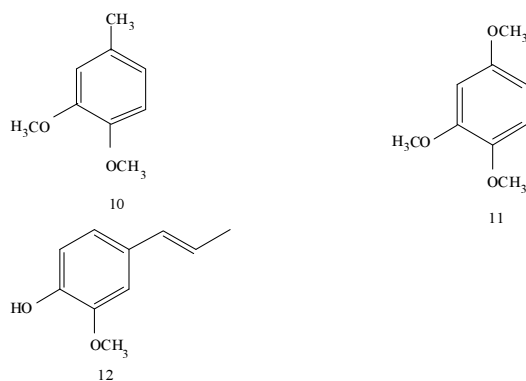
Као што смо већ истакли, мирис руже потиче од (најмање) неколико стотина једињења. Не долази у обзир да их све набројимо. Овде помињемо бета-јонон (8), који сам за себе има мирис љубичице (али га у љубичици нема) и фарнезол (9), кога има и у многим другим цветовима. Њихове формуле су приказане на слици 4.

## НЕКЕ НЕТИПИЧНЕ РУЖЕ И ЊИХОВЕ МИРИСНЕ КОМПОНЕНТЕ

Ружа која се латински назива *Rosa odorata* (у преводу: мирисна ружа) је за нас интересантна јер се њен мирис заснива на хемијским једињењима која су потпуно различита од оних код *Rosa damascena*. Енглези ову ружу називају “tea rose” (у преводу: чајна ружа или чајавка). То име је резултат неспоразума. Наиме, „чајну ружу” су узгојили Кинези, а неки Енглез је, почетком 19. века, на њу наишао на локалитету Фа Ти (близу града Кантона). Како се чај на енглеском каже „ти”, настало је име „чајна ружа”.

Представљало је велико изненађење када је пре неколико година откривено<sup>6</sup> да су две најважније супстанце у мирису „чајне руже” ароматична једињења 3,5-диметокситолуен (10) и 1,3,5-триметоксибензен (11), слика 5, при чему се 10 јавља у количинама већим него 11.

Детаљно је проучен<sup>7</sup> и хемијски састав руже *Rosa rugosa* (у преводу: наборана ружа), која се због порекла назива и „јапанска ружа”. Она данас расте на морским обалама северноевропских земаља, а специфична је по томе да јој не смета слана вода. Мирис јапанске руже одликује се по томе што се у њему уместо метил-еугенола (5, слика 3) налази еугенол (12, слика 5).



**Слика 5.** Главни састојци мириса „чајне руже”: 3,5-диметокситолуен (10) и 1,3,5-триметоксибензен (11). У мирису „јапанске руже” уместо метил-еугенола (5, слика 3) налази се еугенол (12).

## ВЕШТАЧКИ МИРИС РУЖЕ

Познавање хемијске структуре мирисних супстанци руже омогућава да се мириси налик на ружу производе вештачки. То се данас врши у индустријским размерама, а тако добивене супстанце служе за прављење јефтиних парфема, а додају се у сапуне, детерџенте и слична средства која се масовно користе у домаћинствима. О њима у овом чланку не говоримо. Једино напомињемо да (до данас) ни једна од синтетичких ружиних мириса не може да превазиђе оно што се производи у природној лабораторији баршунастих латица цветара руже.

### Abstract

### THE FRAGRANCE OF ROSE

Ivan Gutman, Dušica Simijonović Zorica Petrović and Jovana Krmar

Faculty of Science Kragujevac and „Veljko Petrović” high school, Sombor

The substances that give the rose its pleasant odor, and that are contained in rose oil are described from a chemists' point of view. The chemical structures of the most important of these substances are given.

### ЛИТЕРАТУРА

- P. Јанчић, *Botanica farmaceutica*, Службени лист СЦГ, Београд, 2004.
- E. Reverchon, G. Della Porta, D. Gorgoglione, *Flavour Fragr. J.* 12 (1997) 37.
- L. Jirovetz, G. Buchbauer, A. Stoyanova, A. Balinova Z. Guangjiun, M. Xihan, *Flavour Fragr. J.* 20 (2005) 7.
- M. Verma, B. B. Borse, G. Sulochanamma, B. Raghavan, *Flavour Fragr. J.* 20 (2005) 122.
- F. Ayci, M. Aydinli, Ö. Bozdemir, M. Tutas, *Flavour Fragr. J.* 20 (2005) 481.
- A. Joichi, K. Yomogida, K. Awano, Y. Ueda, *Flavour Fragr. J.* 20 (2005) 152.
- Y. Hashidoko, *Phytochem.* 43 (1996) 535.

## „ТИПОВИ“ АРОМАТИЧНОСТИ

У ирејходном броју смо већ рекли да је још од Мајерови (Meier) открића тинофена, који је веома сличан бензену по физичким и хемијским осодинама, постојало јасно да је појам ароматичности мноо шире од хемије бензена и његових једињења. Данас постоји мноо „тинова“ ароматичности, а самом појму ароматичности су додати разни префикси (анти-, нон-, хомо-, псеудо-, квази-, супер-, итд.). Сви ови тинови ароматичности указују да се концепт ароматичности састоји од мноодрожних структурних, хемијских и физичких манифестација, тј. да је ароматичност један мултидимензиони феномен. У овом чланку биће представљени неки од најраспрострањенијих тинова ароматичности.

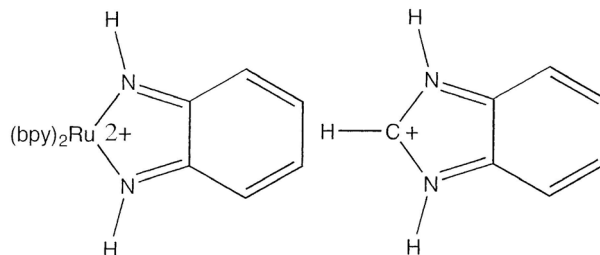
### (I) МЕТАЛОАРОМАТИЧНОСТ

Концепт металоароматичности је први пут поменуто у раду Калвина (Calvin) и Вилсона (Wilson) 1945. године да би се објаснила велика стабилност бакар(II)-1,3-дикетоната комплекса али је интересовање за ову област све до недавно било само спорадично. Сам израз „металоароматичност“ се први пут појавио у чланку Fenske (Fenske) и сарадника 1979. године<sup>2</sup>. У тим раним данима за велику стабилност хелатних прстенова користили су се још и изрази „псеудо-ароматичан“ и „квази-ароматичан“<sup>3-5</sup>. У задњих десет година је установљено да металоароматична прелазна стања имају важну улогу у реакцијама које катализују органометална једињења, тако да је интересовање за област металоароматичности нагло порасло.

Један од основних принципа за разумевање металоароматичности је изолобална аналогија коју је први увео нобелобац Роалд Хофман<sup>6</sup> (Roald Hoffmann). По Хофману неоргански фрагмент је изолобалан са органским фрагментом „...ако су им број, симетријске особине, ајроксимативне енергије и облици граничних орбитала и број електрона у њима слични – неидентични неће слични...“<sup>6</sup>. Као последица тога изолобални фрагменти би требали да учествују у сличним реакцијама. На пример;  $Mn(CO)_5$  фрагмент је изолобалан са  $CH_3$  фрагментом, јер је полупопуњена гранична  $d$  орбитала  $Mn(CO)_5$  фрагмента веома слична полупопуњеној  $p$  орбитали метил радикала. Оба фрагмента подлежу реакцији димеризације формирајући  $Mn(CO)_5-Mn(CO)_5$  и  $CH_3-CH_3$  молекуле. Шта више, један од фрагмената може да замени други у реакцији димеризације и да се добије  $Mn(CO)_5-CH_3$  молекул. По истом овом принципу супституција једног атома у ароматичном молекулу са изолобалним металним фрагментом би требала да очува ароматичност у новом молекулу.

Један од лепших примера изолобалне аналогије са  $\alpha, \alpha'$ -незасићеним лигандом су дали Масуи (Masui) и

сарадници на рутенијумском комплексу са бензохинондиимином (Слика 1)<sup>7</sup>.



Слика 1. Изолобална аналогија између  $[Ru(bpy)_2(bqdi)]^{2+}$  комплекса и бензимидазолијум јона. Приказане резонантне структуре су мање заступљене форме, али су овде приказане да би се нагласила аналогија између неорганског и органског система.

Овај комплекс се може упоредити са бензимидазолијум јоном, тако што је  $(bpy)_2Ru^{2+}$  фрагмент изолобалан са  $HC^+$  фрагментом<sup>8</sup>. Неоргански  $(bpy)_2Ru^{2+}$  фрагмент има граничне орбитале које су сличне по енергији, оријентацији, попуњености и знаку<sup>9</sup> са граничним орбиталама  $HC^+$  фрагмента, иако једне потичу од  $4d$  орбитала а друге од  $2p$  орбитала. Изолобална аналогија може се применити и на остале системе као нпр. комплекси прелазних метала са  $\alpha, \beta$ -незасићеним лигандима са азотом, као што су дииминато лиганди, су изолобални са протонваним пиримидином<sup>9</sup>. Међутим, изолобална аналогија није довољно јасно дефинисана да би се само на основу ње могло са сигурношћу говорити о ароматичним хелатним прстеновима у комплексима прелазних метала. Највећи проблем код изолобалне аналогије представља енергија граничних орбитала фрагмента, за коју не постоји начин да се експериментално одреди или довољно прецизно израчуна.

Проучавајући особине (трис( $N, N'$ -диметил-1,2-етандииминато)-гвожђе(II)) комплекса Бајер (Bayer) је његову чудну реактивност приписао металоароматичности<sup>10</sup>. То је закључио на основу реакције комплекса са елементарним бромом. Уместо да дође до оксидације гвожђа(II) у гвожђе(III) како је Бајер очекивао дошло је до супституције водоника са угљеникових атома хелатног прстена атомима брома. Бајер је ову реакцију поистоветио са електрофилном ароматском супституцијом и на основу тога извео закључак да је хелатни прстен овог комплекса ароматичан.

Колман (Collman) је проучавао реакцију електрофилне ароматске супституције на трис(ацетилацетонато)-комплексима  $Cr(III)$ ,  $Co(III)$  и  $Rh(III)$ <sup>11,12</sup>. Истраживање је укључивало замену водоника из  $C-H$  групе

ацетилацетонато лиганда са I, Cl, Br, SCN, SAr, SCl, NO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>Cl, CH<sub>2</sub>N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, COR, CHO електрофилима. Закључио је да су сва три комплекса реактивна према електрофилној ароматској супституцији и да су комплекси са Cr(III) и Co(III) металним јонима реактивнији. Други значајан закључак овог истраживања је да постоји значајна комуникација између хелатних прстенова у овим трис(ацетилацетонато) комплексима. Наиме када дође до супституције електрофилом на једном прстену, супституција постаје много тежа на осталим прстеновима. Ова кооперативност указује да до делокализације π електрона долази преко сва три лиганда.

Из NMR спектра [Ru(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(bqdi)]<sup>2+</sup> комплекса се може видети да овај комплекс показује одређену магнетну анизотропију. Водоници са аксијалних NH<sub>3</sub> лиганда се налазе у области повећане заштите због кружних струја хелатног прстена, тако да су њихови хемијски помаци померени ка нижим δ вредностима. Водоници са екваторијалних NH<sub>3</sub> лиганда се налазе у области у којој су линије сила магнетног поља, индукваног кружним кретањем делокализованих електрона из хелатног прстена, паралелне са линијама сила спољашњег магнетног поља тако да ће они бити померени ка већим δ вредностима<sup>13</sup>. Ова магнетна анизотропија [Ru(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(bqdi)]<sup>2+</sup> комплекса је протумањена као последица металоароматичности хелатног прстена<sup>14,15</sup>.

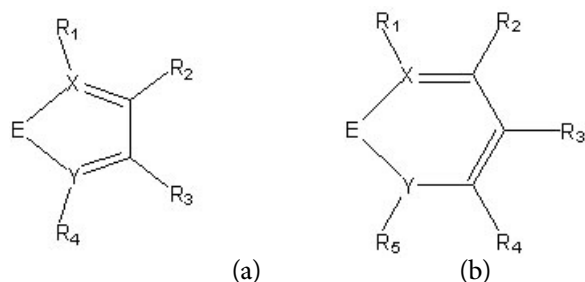
На основу високих вредности <sup>1</sup>H-NMR хемијских помака водоника из СН групе ацетилацетонато лиганда претпоставило се да је велики број комплекса са овим лигандом металоароматичан. Међутим, ове претпоставке су оборене истраживањем Холма (Holm) и Котона (Cotton)<sup>16</sup>. Они су синтетисали низ ацетилацетонато комплекса са различитим металима од којих су неки имали способност да граде π везе са лигандом а други нису. Упоредијујући NMR спектре ове две групе комплекса установили су да нема разлике у хемијским помацима водоника из СН групе ацетилацетонато лиганда (највећа разлика је била 0,1 ppm). Очигледно је да су истраживачи олако приписали високе δ вредности централног водоника Лондоновом дијамагнетизму и нису довољно пажње посветили осталим факторима који утичу на хемијске помаке водоника. Кур (Kühr) и сарадници<sup>17</sup> су употребили мезитил и антранил групу ковалентно везане за ацетилацетонато лиганд као <sup>1</sup>H-NMR узорке за испитивање дијатропне магнетне анизотропије у околини хелатног прстена. Пронашли су да је анизотропија око прстена веома мала и да нема никакве систематске зависности од тога да ли централни метални јон може да гради π везу са лигандом или не. Ови резултати говоре против постојања ароматичности у хелатним прстеновима са ацетилацетонато ли-

гандом. Са друге стране, користећи исти принцип са мезитил групом ковалентно везаном за лиганд као пробом Хефелингер (Häfelinger) је показао да у комплексима прелазних метала са α, α'-дииминским лигандима постоји веома изражена анизотропија.

Повећање дијамагнетне суспектибилности (Λ) је обично немогуће израчунати за комплексе прелазних метала јер референтни параметри за различите типове веза нису одређени. Зато је употребљено неколико експерименталних метода које се заснивају на поређењу хемијских помака атома водоника испитиваног комплекса са хемијским помацима у неком сличном молекулу у коме ароматичност не може да постоји. Овакви приступи су дали доста поузданих резултата и разрешили многе недоумице по питању металоароматичности<sup>16-18</sup>.

*Ab-initio* прорачуни<sup>19,20</sup> и синтезе<sup>21-23</sup> хетероатомних аналога бензена формуле (X<sub>3</sub>Y<sub>3</sub>R<sub>6</sub>) су показали да што је већа разлика у електронегативности атома који чине прстен то ће молекул бити мање ароматичан. Ипак, електронегативност чланова прстена није једини фактор који одређује ароматичност молекула, што је евидентно из Шлејерових (Schleyer) прорачуна на петочланим C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>X системима<sup>24</sup>. Молекул пирила показује већу ароматичност него његов фосфински аналог, иако је фосфор по електронегативности ближи угљенику него азот. Очигледно је да се енергије граничних орбитала хетероатома морају поклопити са орбиталама угљеника да би дошло до стварања делокализованих π орбитала. У комплексима прелазних метала то значи да ће од типа донорског атома лиганда и металног фрагмента зависити да ли ће награђени комплекс бити ароматичан или не<sup>25</sup>.

Приказ литературе у којој се констатује да је испитивани комплекс прелазног метала ароматичан дат је за комплексе са лигандом α, α'-типа (слика 2(a)) у табели 1 а за комплексе са α, β-незасићеним лигандима (слика 2(b)) у табели 2.



Слика 2. (а) комплекс прелазног метала (E) са лигандом α, α'-типа. (б) комплекс прелазног метала (E) са α, β-незасићеним лигандом.

Табела 1. Примери металоароматичних хелатних прстенова са лигандом α, α'-типа

X*	Y	E	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	референца
S	S	W	-	<i>p</i> -C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> X	<i>p</i> -C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Y	-	26
S	S	Ni	-	разни	разни	-	27
S	S	Ni, Pd, Pt	-	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> X	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> X	-	28

S	S	V, Re, Mo	-	H	H	-	29, 30
S	S	разни метали	-	разни	разни	-	31
C	S	Ir(PEt <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> H	Me	H	¼	H	32
N	N	Fe	H	H	H	H	10,33,34
N	N	Fe, Co	H	мезитил	H	H	35
N	N	Fe, Co, Ni	Me	Me	Me	Me	36
N	N	Mo(CO) <sub>x</sub> (PPh <sub>3</sub> ) <sub>y</sub>	разни	H, Me	разни	H, Me	37,38
N	O	Mo(CO) <sub>x</sub> (PPh <sub>3</sub> ) <sub>y</sub>	разни	H, Me	разни	H, Me	37,38

\* Положај сваке групе је приказан на слици 4(a)

Табела 2. Примери металоароматичних хелатних прстенова са  $\alpha,\beta$ -незасићеним лигандом

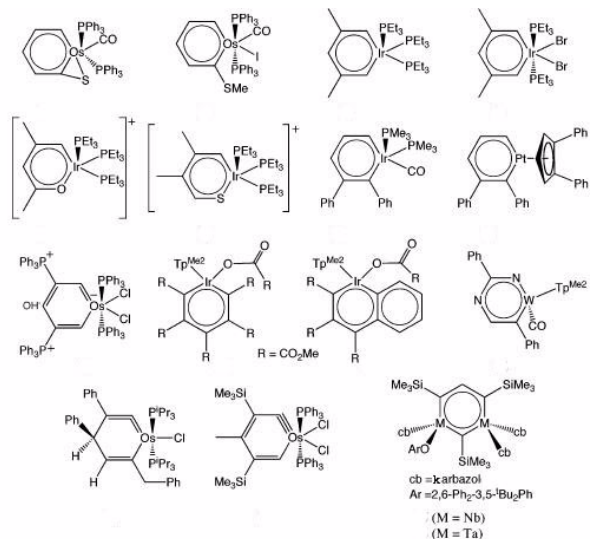
X*	Y	E	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	референца
N	N	Pt, Au	H	Me	H	Me,CF <sub>3</sub>	H	39
N	N	Ni	алкил	H	H	H	алкил	40
N	N	Co	алкил	Me	H	Me	алкил	41
N	O	Si, Ge, Sn, Pb	H	Me	H	Me	H	42
N	O	Ni, Cu	алкил	Me,Ph	H,Cl,Br	Me	-	43
O	O	Be, Al, Sc, Zr, Th	H	Me	H	Me	H	44
O	O	разни	H	Me	H	Me	H	11,16
O	O	Cr, Co, Fe, Ni, Cu	-	Me	H	фурил	-	45
O	O	Ru	-	Me, Ph	Ru-acac	Me, Ph	-	46
S	S	Co, Ni, Pd	-	Me	H	Me	-	47

\* Положај сваке групе је приказан на слици 4(b).

Осим „стандардних“ комплекса прелазних метала још два типа једињења са металима показују ароматичне особине: (i) металолеи и металабени; (ii) метални кластери.

Металолеи су класа органометалних једињења са петочланим прстеном (C<sub>4</sub>R<sub>4</sub>E) који су аналогни са циклопентадиеном. Многи металолеи граде  $\eta^5$ -везу са прелазним металима у ниском оксидационом стању као и циклопентадиенилни анјон. Постоје бројни теоријски, НМР и кристалографски докази да су металолеи ароматична једињења. Разни металолеи силицијума<sup>48,49</sup>, германијума<sup>50</sup>, арсена<sup>51</sup>, гвожђа<sup>52</sup> и рутенијума<sup>53</sup> имају све C-C везе у прстену исте дужине и граде  $\eta^5$ -комплексе у којима се метал налази изнад центра прстена металолеиа. Ипак, код неких металолеиа као што су металолеи иридијума<sup>54</sup>, родијума, титанијума, хафнијума, паладијума и кобалта<sup>55</sup> постоји локализација C-C веза у прстену, иако у овим молекулима постоји значајна делокализација електрона.

Металабени су органометална једињења са шесточланим прстеном и општом формулом C<sub>5</sub>R<sub>5</sub>E<sup>56</sup>. Многа од ових једињења имају структуре и НМР спектре који указују на њихову ароматичност<sup>57-61</sup>. У обимном истраживању ароматичности металабеница Мартина (Martin) и сарадника<sup>62</sup> синтетисани су, одређена је стабилност и реактивност металабеница Os, Ru, Fe, Ir, Rh, Pt, Pd и Re (Слика 3).



Слика 3. Примери изолованих и испитаних металабеница и сличних једињења из референце 62.

Теоријским методама високог нивоа испитани су геометријски параметри ових једињења и упоређени су са параметрима добијеним из решених кристалних структура. Одређени су параметри реакције настајања осмалабеница, иридабеница и платинабеница, израчунате су реакционе баријере, геометрије прелазних стања као и највероватнији реакциони путеви по којима се дешавају ове реакције. Одређене су молекулске орбитале испитиваних металабеница и упоређене су са моле-

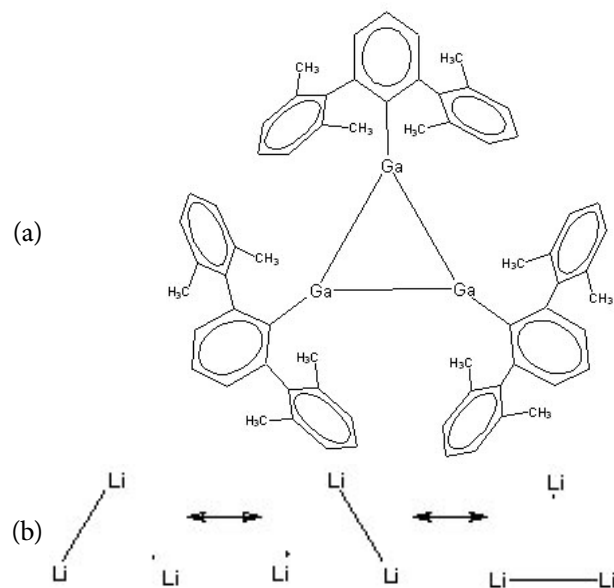


кулским орбиталама бензена. Од магнетних особина ових молекула израчунате су вредности НИЦС<sup>1</sup> параметара и анизотропије магнетне суцептибилности ( $\Delta\chi$ ). Резултати овог веома обимног и комплетног истраживања показују да металабензени имају планарне геометрије хелатних прстена са С-С везама једнаких дужина. Молекулске орбитале металабензена су веома сличне орбиталама бензена. НИЦС вредности указују да би неки од њих (не сви) могли бити ароматични, док анизотропија магнетне суцептибилности даје другачију слику. Једино један рутабензенски комплекс је задовољио оба магнетна критеријума ароматичности. Што се реактивности тиче утврђено је да иако металабензени подлежу реакцијама електрофилне ароматске супституције много лакше ступају у реакције циклоадиције. На основу ових резултата није се могло закључити ништа поуздано о ароматичности металабензена, тако да је ово питање остало отворено.

Метални кластери који у себи имају ароматични прстен сачињен искључиво од атома метала су трећа класа једињења на које се примењује појам металоароматичности. Прво синтетисано органометално једињење са „све металним“ ароматичним прстеном било је  $\text{Na}_2[(\text{Mes}_2\text{C}_6\text{H}_3)\text{Ga}_3]$  (слика 4(a))<sup>63</sup>. Ово једињење садржи  $\text{Ga}_3^{2-}$  прстен у геометрији једнакоугаоног троугла са  $\text{Ga-Ga}$  растојањем од 2,441 Å, као и  $\text{Ga-Ga-Ga}$  углова од тачно 60,0°. Ароматични карактер овог једињења је доказан прорачунима магнетне заштите на одређеним местима као функције електронске густине<sup>64, 65</sup>. Такође су примећена померања ка нижим  $\delta$  вредностима за алкалне катјоне који имају улогу контрајона у овом једињењу. Та померања износе 6,57 и 108 ppm за  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$  и  $\text{K}^+$  и указују на постојање кружних струја у  $\text{Ga}_3^{2-}$  прстену. Израчунате вредности НИЦС параметара у овом молекулу су веома негативне што додатно указује на постојање ароматичности<sup>66</sup>. Прорачуни електронске структуре  $\text{Ga}_3^{2-}$  анјона указали су на постојање два потпуно делокализована  $\pi$  електрона веома слична онима у  $\text{C}_3\text{H}_3^+$  јону<sup>67</sup>. Овакви ароматични системи са два  $\pi$  електрона се зову  $4n + 2$  ( $n=0$ ) Хикелови ароматични системи.

Најједноставнији метални кластер који има ароматични карактер је *цикло*- $[\text{Li}_3]^+$  кластер, чији је глобални минимум у геометрији једнакоугаоног троугла<sup>68</sup>. Теоријским прорачунима је објашњена планарност и релативна стабилност овог кластера<sup>69</sup>. Пошто литијум има само 2s валентну орбиталу очекује се да ће овај кластер имати  $\sigma$  ароматичност. У складу са тим квантно-хемијски прирачуни су показали да *цикло*- $[\text{Li}_3]^+$  кластер има само једну комплетно делокализовану везивну  $\sigma$  молекулску орбиталу која се састоји од суме 2s атомских орбитала сва три атома литијума. Ова орбитала веома подсећа на одговарајућу  $\pi$  молекулску орбиталу ароматичног циклопропенијум катјона  $[\text{C}_3\text{H}_3]^+$ . У оквиру теорије валентне везе  $\sigma$  ароматичност се може објаснити резонанцијом три класичне структуре како је то приказано на слици 4(б). Резонантна енергија добијена услед стабилизације електрона

због делокализације у  $\sigma$  орбитали израчуната је као разлика у енергији између *цикло*- $\text{Li}_3\text{Cl}$  ароматичног молекула и  $\text{Li}_2$  и  $\text{LiCl}$  референтних молекула. Вредност ове  $\sigma$ -резонантне енергије износи 35,7 килокалорија по молу. Предложено је да уколико је  $\sigma$ -ароматична молекулска орбитала начињена од s атомских орбитала тада важи Хикелово  $4n+2$  електронско правило<sup>70,71</sup>. Наравно уколико систем има  $4n$  делокализованих електрона онда је он  $\sigma$ -антиароматичан. Такав је  $[\text{Li}_3]^-$ , који поседује четири  $\sigma$  електрона, и који подлеже веома израженој Јан Телер-овој дисторзији која тера систем у линеарну конформацију<sup>68</sup>.



Слика 4. (а)  $[(\text{Mes}_2\text{C}_6\text{H}_3)\text{Ga}_3]^{2-}$  органометални кластер. (б) Резонантне структуре  $[\text{Li}_3]^+$  јона

## (II) ХОМОАРОМАТИЧНОСТ

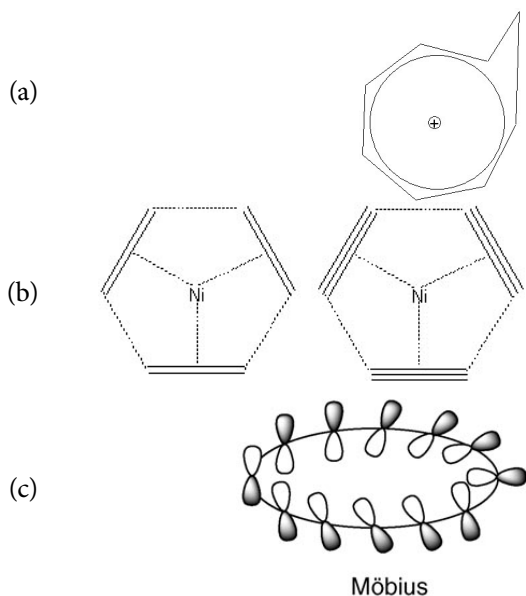
Историјски, други откривени тип ароматичности је хомоароматичност коју је први приметио Винштајн (Winstein)<sup>72</sup> 1959. године. Хомоароматичност је особина једињења која показују карактеристична ароматична својства иако имају један или више засићених атома у прстену који формално прекидају цикличну коњугацију. Хомоароматичност се најчешће јавља у катјонским и анјонским системима у којима делокализација наелектрисања представља додатну покретачку силу за хомоароматичност. Занимљиво је да код неутралних радикала не долази до хомокоњугације и код њих се не јавља хомоароматичност. Потенцијални хомоароматични молекули могу се извести од цикличних, коњугованих  $(4n+2)$   $\pi$ -електронских угљоводоника додавањем  $-\text{CH}_2-$  групе у прстен. Најпознатији хомоароматични систем, хомотропилиум катјон, се добија додавањем  $-\text{CH}_2-$  групе у молекул бензена (Слика 5(а)). Хомоароматичност се јавља и у комплексима прелазних метала са три молекула етена или ацетилена као лигандима у планарном распореду око метала. Прорачуни које је урадио Хергес (Herges)<sup>73</sup> на трис(етен)никл(0) и трис(етин)никл(0) (слика 5(б)) комплексима, помоћу

<sup>1</sup> Значење акронима се објашњава у првом тексту.

своје АЦИД (*anisotropy of the induced current density*) методе показују да у овим молекулима постоји велика тежња ка цикличној делокализацији електрона између лиганда.

### (III) МОБИЈУСОВА АРОМАТИЧНОСТ

Мобијусова (Möbius) ароматичност је особина једињења са ригидним  $\sigma$ -костуром који узрокује постепено извртање коњугованих орбитала (Слика 5(ц)). У Мобијусовој ароматичности моноциклични низ орбитала, у коме постоји барем један, или уопштеније непаран број, преклапања изван равни се понаша супротно у односу на Хикелов ароматични систем; Мобијусова једињења са  $4n$   $\pi$  делокализованих електрона су стабилна, тј. ароматична, док су једињења са  $4n+2$   $\pi$  електрона нестабилна, тј. антиароматична. Концепт Мобијусове ароматичности је први увео Хајлбронер (Heilbronner)<sup>74</sup>, 1964. године. Име Мобијусове ароматичности се изводи из тополошке аналогије између уређења коњугованих орбитала и „бесконачне“ Мобијусове траке.



Слика 5. (а) хомотропилиум катјон. (б) трис(етен)никл(0) и трис(етин)никл(0) хоомароматични комплекси. (ц) Коњугација  $\pi$  орбитала у Мобијусовој структури.

### (IV) АНТИАРОМАТИЧНОСТ

Антиароматичност је први пут примећена као појава 1965. године у истраивањима Бреслова (Breslow)<sup>75</sup>. Антиароматични молекули су они молекули који имају циклични, планаран  $\pi$ -коњуговани систем са  $4n$  електрона. У антиароматичним молекулима везе нису једнаке дужине већ иду наизменично проста и двострука, нема стабилизације резонанцијом а магнетне особине су им потпуно супротне од ароматичних система. Антиароматичност неког молекула може се смањити тако што ће молекул постати непланаран као што је то случај код циклооктатетраена.

### (V) СУПЕРАРОМАТИЧНОСТ И 3Д-АРОМАТИЧНОСТ

Појмови суперароматичност<sup>76</sup> и 3Д-ароматичност<sup>77</sup> се користе да опишу ароматичност тродимензионих система са геометријом која је близу сферне, као што су делтаедарски борани и карборани, водонични и литијумски кластери,... Данас се ове врсте ароматичности најчешће спомињу у контексту еикосаедарских фуларена, који су сферни молекули са коњугованим  $\pi$  електронски системом. Молекули који поседују суперароматичност или 3Д-ароматичност се понашају по  $2(n+1)^2$  електронском правилу, што значи да ће стабилни бити молекули са 2, 8, 18, 32, 50...  $\pi$  електрона.

Овде су поменути само неки од многобројних „типова“ ароматичности јер циљ овог рада није детаљно улажење у све области иначе сложеног појма ароматичности. Неки „типови“ који још увек нису баш најјасније дефинисани, као што су d-ароматичност<sup>78</sup>, локална ароматичност, двострука ароматичност<sup>79</sup> су намерно избачени, док су неки други, као што су  $\sigma$  ароматичност и квази-ароматичност већ поменути у делу о металоароматичности.

#### Abstract

#### “TYPES” OF AROMATICITY

Miloš K. Milčić and Snežana D. Zarić

Faculty of Chemistry University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, Srbija

The field of aromaticity continues to be controversial. The central theme of this controversy is the definition of aromaticity itself. Today, the proliferation of “types” of aromaticity goes far beyond the conventional confines and has been extended to include heterosystems, chelate metallocycles in which metalloaromaticity stabilizes coordinated chelate ligands, inorganic molecules, and transition metal oxides. A considerable number of prefixes joined to the term of aromaticity (*anti*-, *non*-, *homo*-, *quasi*-, *pseudo*-, etc.) and other “types” of aromaticity suggested so far, such as classical aromaticity, magnetic aromaticity, Möbius aromaticity,  $\sigma$ -aromaticity, local-aromaticity, 3D-aromaticity and spherical aromaticity pose additional problems.

All these terms related to specific properties of the molecular system illustrate that aromaticity should take into consideration multiple structural, chemical and physical manifestations – it must be a multi-dimensional phenomenon. In the following we will briefly outline the various “types” of aromaticity for the reader, to get insight into the complexity of the vexing and nebulous concept of aromaticity.

#### REFERENCE

1. Calvin, M.; Wilson, K. W. *J. Am. Chem. Soc.* **1945**, *67*, 2003.
2. Bursten, B. E.; Fenske, R. F. *Inorg. Chem.* **1979**, *18*, 1760.
3. D.P. Craig, *J. Chem. Soc.* **1951**, 3175;
4. D.P. Craig, in: D. Ginsberg (Ed.), *Non-Benzenoid Aromatic Compounds*, Interscience, New York, 1959, p. 1.
5. D. Lloyd, D.R. Marshall, in: E.D. Bergmann, B. Pullman (Eds.), *Aromaticity, Pseudo-Aromaticity*, The Israel Academy of Sciences and Humanities, Jerusalem, 1971, pp. 85–89.
6. Hoffmann, R *Les Prix Nobel* (1983) 169.
7. Masui, H.; Lever, A.B.P. *Inorg. Chem.* **1993**, *32*, 258;



8. Lever, A.B.P.; Masui, H.; Metcalfe, R.A.; Stufkens, D.J.; Dodsworth, E.S.; Auburn, P.R. *Coord. Chem. Rev.* **1993**, 125, 317.
9. Masui, H. *Coord. Chem. Rev.* **2001**, 219–221, 957–992
10. Bayer, E. *Angew. Chem.* **1961**, 73, 533.
11. Collman, J.P. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1965**, 4, 132;
12. J.P. Collman, in: R. Carlin (Ed.), *Transition Metal Chemistry*, vol. 2, Marcel Dekker, New York, 1966, pp. 35–45.
13. Metcalfe, R.A.; Lever, A.B.P. *Inorg. Chem.* **1997**, 36, 4762.
14. Bayer, E.; Breitmaier, E.; Schurig, V. *Chem. Ber.* **1968**, 101, 1594.
15. Tasuku, I.; Tanaka, N. *J. Inorg. Nucl. Chem.* **1970**, 32, 155.
16. Holm, R.H.; Cotton, F.A. *J. Am. Chem. Soc.* **1958**, 80, 5658.
17. Kuhr, M.; Bock, B.; Musso, H. *Chem. Ber.* **1976**, 109, 1195.
18. Daltrozzo, von E.; Feldmann, K. *Ber. Bunsen-Ges. Phys. Chem.* **1968**, 72, 1140.
19. Matsunaga, N.; Cundari, T.R.; Schmidt, M.W.; Gordon, M.S. *Theor. Chim. Acta* **1992**, 83, 57;
20. Fink, W.H.; Richards, J.C. *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, 113, 3393.
21. Waggoner, K.M.; Power, P.P. *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, 113, 3385;
22. Olmstead, M.M.; Power, P.P.; Shoner, S.C. *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, 113, 3379;
23. Power, P.P. *J. Organomet. Chem.* **1990**, 400, 49 (
24. Schleyer, P.v.R.; Freeman, P.K.; Jiao, H.; Goldfuss, B. *Angew Chem. Int. Ed. Engl.* **1995**, 34, 337.
25. Miller, E.J.; Landon, S.J.; Brill, T.B. *Organometallics* **1985**, 4, 533.
26. Shrauzer, G.N. *Acc. Chem. Res.* **1969**, 2, 72
27. Shrauzer, G.N.; Mayweg, V.P. *J. Am. Chem. Soc.* **1965**, 87, 3585;
28. Shrauzer, G.N.; Mayweg, V.P. *J. Am. Chem. Soc.* **1965**, 87, 1483;
29. Schrauzer, G.N.; Mayweg, V.P. *J. Am. Chem. Soc.* **1966**, 88, 3235.
30. Boyde, S.; Garner, C. D.; Joule, J.A.; Rowe, D.J. *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* **1987**, 800.
31. Eisenberg, R. in: S. Lippard (Ed.), *Progress in Inorganic Chemistry*, vol. 12, Wiley, New York, 1970, pp. 295–369.
32. Bleeke, J.R.; Ortwerth, M.F.; Chiang, M.Y. *Organometallics* **1993**, 12, 985.
33. Ito, T.; Tanaka, N.; Hanazaki, I.; Nagakura, S. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1968**, 41, 365.
34. Busch, D.H.; Bailar Jr., J.C. *J. Am. Chem. Soc.* **1956**, 78, 1137.
35. Hafelinger, G.; Weissenhorn, R.B.; Hack, F.; Westermayer, G. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1972**, 11, 725.
36. Figgins, P.E.; Busch, D.H. *J. Am. Chem. Soc.* **1960**, 82, 820.
37. Dieck, H. tom; Renk, I.W. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1970**, 9, 793;
38. Dieck, H. tom; Renk, I.W. *Chem. Ber.* **1971**, 104, 110.
39. Brawner, S.A.; Lin, I.J.B.; Kim, J.-H.; Everett, G.W. *Inorg. Chem.* **1978**, 17, 1304;
40. Hussain, M.S.; Schlemper, E.O.; Yelon, W.B. *Acta Crystallogr. B* **1981**, 37, 347.
41. Roberts, G.W.; Cummings, S.C.; Cunningham, J.A. *Inorg. Chem.* **1976**, 15, 2503.
42. Agrawal, M.; Tandon, J.P. *J. Indian Chem. Soc.* **1985**, 62, 61.
43. Kasuga, K.; Nagahara, T.; Masuda, T.; Kiyota, S.; Yamamoto, Y. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1984**, 57, 1631
44. Singh, P.R.; Sahai, R. *Aust. J. Chem.* **1970**, 23, 269.
45. Sasaki, T.; Kanematsu, K.; Kinoshita, G. *J. Org. Chem.* **1968**, 33, 680.
46. Reimers, J.R.; Hall, L.E.; Crossley, M.J.; Hush, N.S. *J. Phys. Chem. A* **1999**, 103, 4385.
47. Martin, R.L.; Stewart, I.M. *Nature* **1966**, 210, 522
48. Goldfuss, B.; Schleyer, P.V. *Organometallics* **1997**, 16, 1543
49. Freeman, W.P.; Tilley, T.D.; Liable-Sands, L.M.; Rheingold, A.L. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, 118, 10457
50. Freeman, W.P.; Tilley, T.D.; Arnold, F.P.; Rheingold, A.L.; Gantzel, P.K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **1995**, 34, 1887.
51. Sunderlin, L.S.; Panu, D.; Puranik, D.B.; Ashe, A.J.; Squires, R.R. *Organometallics* **1994**, 13, 4732.
52. Luo, S.; Ogilvy, A.E.; Rauchfuss, T.B.; Rheingold, A.L.; Wilson, S.R. *Organometallics* **1991**, 10, 1002;
53. Low, P.J.; Udachin, K.A.; Enright, G.D.; Carty, A.J. *J. Organomet. Chem.* **1999**, 578, 103;
54. Bleeke, J.R.; Behm, R.; Xie, Y.-F.; Clayton, T.W., Jr.; Robinson, K.D. *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, 116, 4093
55. Thorn, D.L.; Hoffman, R. *Nouveau J. Chem.* **1971**, 3, 39
56. Bleeke, J.R.; *Acc. Chem. Res.* **1991**, 24, 271
57. Jutzi, P. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1975**, 14, 232
58. Ashe, A.J. *J. Am. Chem. Soc.* **1971**, 93, 3293.
59. Elliott, G. P.; Roper, W. P.; Waters, J. M. *J. Chem. Soc. Chem Commun.* **1982**, 811.
60. Kralik, M.S.; Rheingold, A.L.; Ernst, R.D. *Organometallics* **1987**, 6, 2612;
61. Bleeke, J.R.; Xie, Y.-F.; Peng, W.-J.; Chiang, M.Y. *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, 111, 4118.
62. Iron, M. A.; Lucassen, A. C. B.; Cohen, H.; van der Boom, M.; Martin, J. M. L. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, 126, 11699–11710.
63. Li, X.-W.; Pennington, W. T.; Robinson, G. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, 117, 7578.
64. Li, X.-W.; Xie, Y.; Schreiner, P. R.; Gripper, K. D.; Crittendon, R. C.; Campana, C. F.; Schaefer, H. F., III; Robinson, G. H. *Organometallics* **1996**, 15, 3798.
65. Xie, Y.; Schreiner, P. R.; Schaefer, H. F., III; Li, X.-W.; Robinson, G. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, 118, 10635.
66. Xie, Y.; Schreiner, P. R.; Schaefer, H. F., III; Li, X.-W.; Robinson, G. H. *Organometallics* **1998**, 17, 114.
67. Robinson, G. H. *Acc. Chem. Res.* **1999**, 32, 773,
68. Bishop, D. M.; Chaillet, M.; Larrieu, K.; Pouchan, C. *Mol. Phys.* **1984**, 51, 179.
69. Alexandrova, A. N.; Boldyrev, A.I. *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107, 554.
70. Tsipis C. A. *Coord. Chem. Rev.* **2005**, 249, 2740–2762.
71. Boldyrev, A. I.; Wang, L. S. *Chem. Rev.* **2005**, 105, 3716–3757
72. Winstein, S. *J. Am. Chem. Soc.* **1959**, 81, 6524.
73. Herges, R.; Papafilippopoulos, A. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, 40, 4671–4673
74. Heilbronner, E. *Tetrahedron Lett.* **1964**, 1923.
75. Breslow, R. *Chem. Eng. News* **1965**, 90
76. Osawa, E. *Philos. Trans. R. Soc. London A* **1993**, 343, 1.
77. Aihara, J. *J. Am. Chem. Soc.* **1978**, 100, 3339.
78. Tsipis, A. C.; Tsipis, C. A. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**,
79. Chandrasekhar, J.; Jemmis, E. D.; Schleyer, P. v. R. *Tetrahedron Lett.* **1979**, 3707–3710.



## ВЕСТИ из ШКОЛЕ ВЕСТИ за ШКОЛЕ

Вера МУЖДЕКА, Школска управа Министарства просвете у Крагујевцу

### СЦЕНАРИО ЗА ЧАС: ЗАКОН СТАЛНИХ МАСЕНИХ ОДНОСА

**Разред:** VII

**Тип часа:** обрада новог градива

**Циљеви:**

- да ученици уоче да су у једињењима елементи сједињени у масеним односима који су стални (непроменљиви),
- да ученици разумеју зашто се закон односи на хемијска једињења, а не и на смеше (као произвољну мешавину две или више супстанци),
- да ученици самостално дефинишу уочену правилност (законитост).

**Материјал:** радна табела (дата и прилогу), уџбеник хемије, свеска

**Ток часа**

**Корак 1.** *Крајко обнављање о једињењима и смешама, и хемијским формулама (5 минута)*

Наставник поставља питања о разликама између једињења и меша, о саставу једињења (воде, сумпор(IV)-оксида, магнезијум-оксида и других), о квалитативном и квантитативном значењу хемијске формуле, о врстама супстанци које се представљају формулом.

**Корак 2.** *Индивидуални рад ученика на задацима (10-15 минута)*

Наставник даје инструкцију да сви ученици препишу у своју свеску табелу која је дата на табли (дата у прилогу). Потом, да свако индивидуално израчуна масу водоника и кисеоника у датим масама воде и да из добијених вредности математички одреди који је најједноставнији однос масе водоника према маси кисеоника у води, изражен целим бројевима.

Када израчунају све три вредности, треба исто израчунавање да ураде за оне примере из табеле за које је то могуће израчунати. (На крају се може дати пар минута да парови у клупи размене резултате рачунања и упореде их). Током рада могу користити уџбеник хемије, радне свеске, таблицу ПСЕ. Праћењем рада ученика, наставник ће проценити колико им треба помоћи у рачунском делу.

**Корак 3.** *Дискусија о резултатима (15-20 минута)*

Наставник позива једног ученика да на табли испише израчунате масе водоника и кисеоника у води а остали ученици проверавају своје резултате. Треба тражити да се изнесу и другачије вредности, уколико их има. Дискусија се води о томе који су подаци ко-

ришћени, одакле су узимани, како се математички дошло до најједноставнијег односа маса елемената водоника и кисеоника у води. После дискусије наставник даје прилику да неко од ученика каже једну нову вредност за масу воде и да још једанпут, на табли, израчуна масени однос два елемента.

Дискусија се наставља о преосталим примерима из табеле: за које супстанце су прерачунавали однос маса елемената, за које не, у чему је разлика и зашто.

Наставник усмерава дискусију тако да ученици разумеју да је одређена хемијска формула последица сталности састава хемијског једињења (може ли се у једињењу наћи пола, или „нецели“ број атома елемента, зашто, мења ли се маса једног истог елемента од атома до атома, на основу чега то можемо рећи, шта је релативна атомска маса...)

**Корак 4.** *Извођење закључака (5-10 минута)*

Наставник даје нови задатак свим ученицима: „На основу дискусије, покушајте индивидуално, а можете се договарати са паром из клупе, да извучете закључак о томе како хемијски елементи међусобно реагују имајући у виду њихове масе у конкретном једињењу.“

Ако има значајнијих разлика наставник тражи од ученика објашњење, и усмерава дискусију ка усаглашавању једне реченице, саопштава да је реч о основном хемијском закону, његов назив и име научника који је тај закон открио. Истовремено треба да помогне да сви ученици имају о томе запис у својим свескама.

**Прилог: Радна табела**

18 g воде	64 g сумпор(IV)-оксида	40 g магнезијум-оксида	76,5 g смеше воде и кухињске соли
162 g воде	192 g сумпор(IV)-оксида	100 g магнезијум-оксида	18 g смеше воде и кухињске соли
0,54 g воде	32 g сумпор(IV)-оксида	1,2 g магнезијум-оксида	58,5 g смеше воде и кухињске соли

**Abstract**

TEACHING THEME: LAW OF CONSTANT COMPOSITION

**Vera Muždeka**

This paper presents an approach to the elaboration of teaching theme *Law of constant composition* by methods of active learning.

# ПРОПОЗИЦИЈЕ ЗА ТАКМИЧЕЊЕ ИЗ ХЕМИЈЕ УЧЕНИКА ОСНОВНИХ ШКОЛА ЗА ШКОЛСКУ 2008/09. ГОДИНУ

## ОРГАНИЗАЦИЈА ТАКМИЧЕЊА

Организатори такмичења су Српско хемијско друштво и Министарство просвете Републике Србије.

Стручни део спроводе Школска, Општинска, Округна/градска/међуокругна и Републичка комисија. Комисију чине најмање три члана.

Школску комисију образује стручно веће за Хемију.

Општинску комисију образује стручно друштво, односно заједница школа, на предлог општинског актива наставника.

Округну/градску/међуокругну комисију образује стручно друштво и други организатори у сарадњи са Школском управом. Један члан комисије је представник стручног друштва, односно заједнице школа.

Републичку комисију образује организатор, а најмање један члан је представник Министарства просвете.

Општински активи наставника хемије су одговорни за организацију општинских, а начелници школских управа за организацију Округних/градских/међуокругних такмичења. Округна/градска/међуокругна такмичења не морају да се одржавају у седишту одељења Министарства за просвету.

## ВИДОВИ ТАКМИЧЕЊА

I тест и практични део

II тест и самостални истраживачки рад

### I - ТЕСТ И ПРАКТИЧНИ ДЕО

*Број учесника и начин квалификовања*

На такмичењу ученици се деле у две категорије: ученици VII и ученици VIII разреда.

Нивои такмичења су: Школско, Општинско, Округно/градско/међуокругно и Републичко.

Школско такмичење је обавезни ниво такмичења. Организује га стручно веће школе. Школа која не организује школско такмичење не може учествовати на вишем нивоу такмичења.

Општинско такмичење организују стручна већа школа са територије општине и општински активи хемије. Пласман ученика након општинског такмичења утврђује се на основу освојених бодова:

I место од 91-100 бодова

II место од 81-90 бодова

III место од 71-80 бодова

На Округно/градско/међуокругно такмичење из сваке општине пласира се ученик са највећим бројем поена. У зависности од броја школа у општини, Општинске комисије имају право да на Округно/градско/међуокругно такмичење пријаве још једног ученика по школи за седми, односно осми разред, који су освојили више од 70 бодова. Ранг-листу са Општинског такмичења општинска стручна комисија доставља Округној/градској/ међуокругној комисији најкасније седам дана по завршетку такмичења.

Округно/градско/међуокругно такмичење организује стручно друштво и други организатори у сарадњи са Школском управом. Пласман ученика након Округног такмичења утврђује се на основу освојених бодова:

I место од 91-100 бодова

II место од 81-90 бодова

III место од 71-80 бодова

На Републичко такмичење из сваког Округа пласирају се првопласирани ученици. Уколико се организује Међуокругно такмичење, на Републичко такмичење се пласира један ученик по округу. Према броју освојених поена Републичка комисија позива на Републичко такмичење још највише 40 ученика који су освојили више од 70 бодова. Округне/градске/међуокругне комисије су дужне да ранг листе и радове ученика који су освојили више од 70 бодова, пошаљу Републичкој комисији у року од седам дана од завршетка Округног/ градског/међуокругног такмичења.

Републичко такмичење организује Републичка комисија у сарадњи са Министарством просвете. Списак учесника Републичког такмичења објављује се најкасније две недеље пре почетка такмичења. Прво, друго и треће место на Републичком такмичењу освајају ученици који су на ранг листи заузели 1., 2. односно 3. место према освојеним поенима.

### *Пријава такмичара*

Пријава такмичара за Округно/градско/међуокругно такмичење садржи следеће податке: име и презиме ученика, име школе, општине, разред и одељење, адресу стана и телефон, име и презиме ментора. Пријаве се подносе Округним/градским/међуокругним комисијама најкасније седам дана пре почетка Округног/градског/међуокругног такмичења. Округне/градске/међуокругне комисије шаљу пријаве ученика који су се квалификовали за Републичко такмичење на основу наведених критеријума, организационом одбору у месту где ће се одржати Републичко такмичење. Пријаве треба да стигну најкасније 7 дана пре почетка такмичења. Место одржавања Републичког такмичења одређује Српско хемијско друштво и Министарство просвете.

### *Програм такмичења и начин бодовања*

Такмичење се састоји из два дела:

- **тест** (теоријски део, који се састоји из решавања тестова са 15 проблемских задатака), што доноси максимално 100 поена на општинском и 70 поена на Округном/градском/међуокругном и Републичком такмичењу.
- **практични део** (експерименталне вежбе које обухватају садржаје наставног програма VII, односно VIII разреда, постављене као проблемски практични задатак), што доноси максимално 30 поена.

Школска и Општинска такмичења састоје се само из тестирања. Окружна/градска/међуокружна и републичко такмичење састоје се из теста и практичног дела. Тестирању приступају сви ученици који су се квалификовали према критеријумима претходног нивоа такмичења.

Израда теста траје 120 минута. За оцењивање теста Републичка стручна комисија прецизно одређује критеријуме за бодовање.

Практичном делу такмичења приступа 30% ученика према броју освојених поена на тесту. За оцењивање практичног дела Републичка стручна комисија прецизно одређује критеријуме за бодовање, с обзиром да се ради о практичним проблемским задацима. Практични део траје 60 минута. Тестове за Општинско, Окружно/градско/међуокружно и Републичко такмичење припрема Републичка стручна комисија.

На тестирању се од ученика захтева познавање градива по програму одговарајућих разреда за редовну и додатну наставу. За Школско, Општинско и Окружно/градско/међуокружно такмичење тестовима је обухваћено градиво које се изучава до датума датих у календару такмичења. За Републичко такмичење од ученика се захтева познавање целокупног градива. За ученике VIII разреда подразумева се да знају и градиво из VII разреда.

У случају једнаког укупног броја поена код такмичара, предност на ранг-листи имају ученици са већим бројем поена освојених на тесту.

#### *Жалбе*

Рок за жалбе је један сат по објављивању резултата на тесту, односно један сат по објављивању привремене ранг-листе.

Жалбе се подносе искључиво у писменој форми.

#### *Напомене*

За освојено 1., 2. односно 3. место у одговарајућој категорији на Републичком такмичењу такмичару се додељује диплома и награда. За освојено 4., 5. и 6. место у одговарајућој категорији на Републичком такмичењу такмичару се додељује похвалница.

Дипломе се додељују и наставницима чији ученици освоје прво место на Републичком такмичењу.

За освојено 1., 2. односно 3. место у одговарајућој категорији на Окружном/градском/ међуокружном и Општинском такмичењу, такмичару се додељује диплома коју обезбеђује школа домаћин, а потписује директор школе домаћина и председник одговарајуће комисије.

## **II - ТЕСТ И САМОСТАЛНИ ИСТРАЖИВАЧКИ РАД**

Такмичење се састоји од израде теста и самосталног истраживачког рада (текстуални део и одбрана рада).

Нивои такмичења су: Школско, Општинско, Окружно/градско/међуокружно и Републичко.

Прави се јединствена ранг-листа за ученике VII и VIII разреда.

Истраживачки рад могу да раде највише два ученика који се одвојено бодују.

За Републичко такмичење свака Школска управа шаље највише по два рада у свакој категорији.

Самостални истраживачки рад може да буде и изван програма редовне и додатне наставе и треба да буде на нивоу могућности боље опремљене школске лабораторије (примењене методе и технике истраживања). Оријентационо, истраживачки рад ученика основних школа треба да има до 5 куцаних страна, не рачунајући прилоге ( проред 1; фонт Тимес Роман 12; све маргине 2 цм).

Текст рада треба да садржи: увод са назначеним циљевима рада, теоријски део (кратак преглед сазнања о теми која се обрађује), експериментални део (приказ коришћених метода, инструмената, прибора и хемикалија), приказ резултата и њихову дискусију, закључак, преглед литературе и прилоге. Рад треба конципирати тако да ученици прикажу део експеримента на такмичењу. Такмичари су обавезни да обезбеде одговарајуће материјалне услове за демонстрацију практичног дела (уређаје, прибор, потребне хемикалије и остале материјале).

Радови се у три истоветна примерка достављају комисијама одређеног нивоа такмичења, најкасније седам дана пре такмичења.

Приликом пријављивања такмичара Општинским и Окружним/градским/међуокружним комисијама, као и Републичкој комисији школе су у обавези да уз сваки рад приложе пријаву са основним подацима: име и презиме ученика, школа, општина, разред и одељење, адреса стана и телефон, име и презиме ментора и назив рада.

Такмичари прво раде тест који је исти као и за вид такмичења I. Истраживачки рад брани се пред оцењивачком комисијом почев од општинског такмичења. Одбрани рада приступају такмичари који су на тесту освојили више од 50% поена првопласираног ученика за оба вида такмичења, а у категорији разреда у којој се такмичи. Ученици који нису освојили наведен број поена на тесту могу приказати резултате свог рада пред жиријем и заинтересованима, без могућности освајања поена и рангирања.

Одбрана се састоји од презентације истраживачког рада и одговора на питања члановима оцењивачке комисије, а која су непосредно везана за област из које је рад рађен. Ако су у изради рада учествовала два ученика, оба учествују у одбрани рада. Комисија оцењује одговоре и технику рада сваког ученика појединачно. Максималан број поена на одбрани рада износи 25. Писани део рада се бодује од 0 до 25 поена (исти број за оба ученика). Овим поенима се додају кориговани поени освојени на тесту (добијају се множењем освојених поена на тесту фактором 50/70). Укупан број поена у овом виду такмичења износи 100.

На ранг листи се рангирају ученици који су приступили одбрани рада. У случају да два ученика имају

једнак број поена предност на ранг листи има ученик који има већи број поена за писани део рада и одбрану рада. Ако су и ови поени једнаки, предност се даје ученику који је освојио већи број поена на одбрани рада.

#### Жалбе

Рок за жалбе је један сат по објављивању резултата на тесту, односно један сат по објављивању привремене ранг листе.

Жалбе се подносе искључиво у писменој форми.

#### Награде

Резултати такмичења на свим нивоима са вреднују:

I место

II место

#### III место

Прво, друго и треће место освајају ученици који су на ранг листи заузели 1, 2. односно 3. место према освојеним поенима.

За освојено једно од прва три места у одговарајућој категорији на Републичком такмичењу такмичару се додељује диплома и награда. Дипломе се додељују и наставницима чији ученици освоје прво место на Републичком такмичењу.

За освојено 1., 2. односно 3. место у одговарајућој категорији на Окружном/градском/ међуокружном и Општинском такмичењу, такмичару се додељује диплома коју обезбеђује школа домаћин, а потписује директор школе домаћина и председник одговарајуће комисије.

## ШКОЛСКЕ УПРАВЕ СА ОКРУЗИМА

	ШКОЛСКА УПРАВА		ОКРУГ
1	БЕОГРАД	1	ГРАД БЕОГРАД
2	КРАГУЈЕВАЦ	1	ШУМАДИЈСКИ ОКРУГ
3	ПОЖАРЕВАЦ	1	БРАНИЧЕВСКИ
		2	ПОДУНАВСКИ
4	ЗРЕЊАНИН	1	СЕВЕРНОБАНАТСКИ
		2	СРЕДЊЕБАНАТСКИ
		3	ЈУЖНОБАНАТСКИ
5	СОМБОР	1	СЕВЕРНОБАЧКИ
		2	ЗАПАДНОБАЧКИ
6	НОВИ САД	1	ЈУЖНОБАЧКИ
		2	СРЕМСКИ
7	УЖИЦЕ	1	ЗЛАТИБОРСКИ
8	ВАЉЕВО	1	КОЛУБАРСКИ
		2	МАЧВАНСКИ
9	КРАЉЕВО	1	РАШКИ
		2	РАСИНСКИ

10	ЧАЧАК	1	МОРАВИЧКИ
11	ЗАЈЕЧАР	1	ЗАЈЕЧАРСКИ
		2	БОРСКИ
12	НИШ	1	ПИРОТСКИ
		2	ТОПЛИЧКИ
		3	НИШАВСКИ
13	ЛЕСКОВАЦ	1	ЈАБЛАНИЧКИ
		2	ПЧИЊСКИ
14	КОСОВСКА МИТРОВИЦА	1	ПЕЊКИ
		2	КОСОВСКИ
		3	ПРИЗРЕНСКИ
		4	МИТРОВАЧКИ
15	РАНИЛУГ	1	КОСОВСКО-ПОМОРАВСКИ
16	КРУШЕВАЦ	1	РАСИНСКИ
17	ЈАГОДИНА	1	ПОМОРАВСКИ ОКРУГ
18	НОВИ ПАЗАР	1	РАШКИ
19	ПРИЈЕПОЉЕ	1	ЗЛАТИБОРСКИ



# ХЕМИЈА НА ИНТЕРНЕТУ

Александар ДЕКАНСКИ, Владимир ПАНИЋ, ИХТМ – Центар за електрохемију, Београд и Драгана ДЕКАНСКИ, Галеника А.Д. - Институт, Земун  
E-mail: [aleksandar@dekanski.com](mailto:aleksandar@dekanski.com), [panic@ihtm.bg.ac.yu](mailto:panic@ihtm.bg.ac.yu), [dragana@dekanski.com](mailto:dragana@dekanski.com)

## ПРЕТРАЖИВАЊЕ ЛИТЕРАТУРЕ X


Први чланак у овој рубрици под насловом Претраживање литературе објављен је у Хемијском прегледу новембра 2002. године (43. годиште, број 5). У том чланку је представљен и **ScienceDirect**, интернет сервис за претрагу и приступ научној литератури. Данас, скоро шест година касније, одлучили смо да странице ове рубрике поново посветимо овом сервису из два разлога. С једне стране, шест година је дугачак период са становишта развоја интернета, електронских комуникација и електронског издаваштва, те су промене у изгледу, садржају и могућностима овог сајта су огромне (могло би се рећи да је све сем адресе и лого знака другачије). С друге стране, верујемо да је Хемијски преглед добио велики број нових, нарочито младих читалаца којима ће наредни редови бити од користи.

**ScienceDirect** је сервис **Elsevier**-а ([www.elsevier.com](http://www.elsevier.com)), једног од највећих светских издавача научне литературе, и, како сами за себе кажу, један од најнапреднијих светских система за дистрибуцију научних, техничких и медицинских информација. Тренутно се у његовим базама података налази више од 2.500 часописа и више од 6.000 књига из свих области науке, са преко девет милиона чланака у пуном садржају. Треба напоменути да највећи део часописа и књига представљају издања **Elsevier**-а, али да су у базу укључена и издања неких других, углавном мањих издавача.

Појединачни корисници сервиса могу приступити свим његовим садржајима и могућностима претраге, али им је преузимање пуног садржаја могуће само *online* куповином сваког појединачног чланка или књиге. Такво преузимање садржаја је скупо и непрактично. Сервис је првенствено конципиран тако да се његовим садржајима приступа преко институционалних лиценци, при чему појединачни корисници могу да се региструју у циљу персонализације (личног подешавања) претраге и коришћења садржаја сервиса. Другим речима, лиценцу за коришћење сервиса купује институција (библиотека, универзитет, факултет, институт,...) која на одређени начин омогућава својим члановима да приступе садржајима **ScienceDirect**-а. У Србији је приступ садржајима омогућен корисницима академске мреже преко **Конзорцијума библиотеке Србије за обједињену набавку (KoBSON)**. Детаљно упутство како је могуће приступити сервису може се пронаћи на адреси [nainfo.nbs.bg.ac.yu/KoBSON/](http://nainfo.nbs.bg.ac.yu/KoBSON/). Приступ је могућ

уколико се сервису приступа директно преко академске мреже и одговарајућег *proxy* сервера, али и са било ког другог рачунара, уколико корисник испуњава основне услове (наједноставније речено, да је припадник академске заједнице наше земље). Услови и потребни подаци за приступ такође се могу наћи на Интернет страници **KoBSON**-а.

Приказ сервиса и његових могућности даћемо из угла корисника који му приступа преко **KoBSON**-а, пошто предпостављамо да ће му већина корисника из Србије приступати на тај начин.

Када се приступи основној страни сервиса на адреси [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com), на врху стране ће бити исписана информација да је приступ омогућен преко **KoBSON**-а. То је потврда да је омогућен пуни приступ свим садржајима које лиценца обухвата. При претрази, уз сваки пронађени садржај појављиваће се иконица , чија боја означана доступност садржају; зелена – лиценца омогућава пуни приступ садржају и бела – лиценца не обухвата преплату на тај садржај (могуће је видети само абстракт чланка или основне информације о књизи, као што је садржај, издавач и сл.).

Пре било какве претраге, препоручујемо корисницима да се региструју (пречица ка формулару за регистрацију налази се у горњем десном углу основне странице). Регистрација не утиче на количину садржаја којој корисник може приступити, али омогућава читав низ сервиса и других корисних алата који кориснику могу олакшати како претрагу, тако и преглед пронађених садржаја. Уколико је корисник већ регистрован, при свакој посети сајту може да се пријави (*login*).

Након пријављивања, кориснику се приказује страница под именом *Home + Recent Actions*. На њој се налази формулар за брзу претрагу која се може вршити по једном параметру, свим параметрима или било којој комбинацији следећих параметара: *наслов, абстракт и кључне речи; име аутора; наслов часописа или књиге; волумен; број и страница*. Постоје и опције напредног, па и експертског претраживања са могућношћу задавања много детаљнијих и сложенијих параметара претраге.

Испод овог обрасца налазе се четири поља (која се по жељи корисника могу искључити или укључити):

- **Излиставање (Browse)** публикација по насловима (разврстаним по абecedном реду) или по

научним областима подељеним у четири велике групе: *Физичке науке и инжењеринг* (у овој групи се налази и хемија), *Биолошке науке (Life Sciences)*, *медицинске науке (Health Sciences)* и *социјалне и хуманистичке науке*.

- **Скорашње акције (Recent Actions)** – приказ последњих 100 акција корисника. Уколико жели, корисник ову опцију може искључити кликом на текст *Turn off*. Прати се број извршених претрага и приступа пуним текстовима и излистаним часописима/књигама, при чему је у сваком тренутку могућ детаљан преглед извршених акција. Уколико корисник жели, у сваком тренутку може да избрише податке о дотадашњим акцијама (опција *Clear all*).
- **Брзи линкови (Quick Links)** – пречице које омогућавају тренутан приступ неким деловима сајта, односно другим сродним садржајима на Интернету. Подељене су у три групе: *омиљени часописи/књиге (Favorite Journals/Books)* – приступ часописима и/или књигама које је корисник издвојио у посебну листу њему најзначајнијих, са опцијом да листу ажурира; *брзи линкови у оквиру ScienceDirect-a (Quick Links in ScienceDirect)* – скуп пречица ка појединим садржајима сервиса које сваки корисник дефинише за себе. Садржи пречице ка кратким обавештењима (*Alerts*); сачуваним претрагама (*Recall Saved Searches*); 25 најважнијих наслова у секцији *My subject area (Top 25 articles in my subject area)* и ка сајту са детаљним информацијама о сервису ScienceDirect (*ScienceDirect Info Site*).
- **О ScienceDirect-у (About ScienceDirect)** – упутства и детаљне информације за лакше, брже и ефикасније коришћење свих опција које сервис нуди.

Изнад обрасца за претрагу налазе се линкови ка појединим секцијама сајта. Поред линкова ка *прелистивању (Browse)* и *прејрази (Search)* које смо већ описали, ту су и линкови ка секцијама *моја подешавања (My Settings)*, *ујозорења (Alerts)*, *колица за куповину (Shopping Cart)*, *помоћ (Help)* и *разговор уживо (Live Chat)*. Последње три секције ћемо описати само укратко, док ћемо мало више простора посветити секцији *моја подешавања*, у оквиру које се налази и секција *ујозорења (Alerts)*.

У *Колица за куповину* можете убацили разноврсне „производе“ током претраге или прелиставања сајта, а након тога у неколико корака извршити *online* куповину неком платном картицом. *Помоћ* је стандардна *Help* опција, позната свим корисницима компјутера, па је нећемо посебно описивати, док *разговор уживо* омогућава комуникацију са техничким особљем *ScienceDirect-a* у реалном времену (24 сата дневно, од понедељка до петка) за помоћ у решавању техничких проблема при коришћењу сервиса.

*Моја подешавања* је секција у којој сваки регистровани и пријављени корисник може извршити пер-

сонализацију сервиса, односно подесити и/или поставити велики број опција у складу са својим потребама, жељама и афинитетима.

Прва од опција је подешавање *ујозорења* – електронских порука које корисника обавештавају о новим садржајима или променама на *ScienceDirect-у*, а на основу критеријума или захтева који сваки корисник претходно дефинише. Постоје четири врсте упозорења:

*Ујозорења о прејрази (Search Alerts)* – информација о новом податку који задовољава раније дефинисане и сачуване параметре претраге (нпр. нови чланак који садржи задату кључну реч, или нови чланак одређеног аутора). Дефинисану и извршену претрагу потребно је претходно сачувати као *Search Alert*.

- *Ујозорења о теми (Topic Alerts)* – кориснику се прослеђује информација о наслову који се појавио у једној од тема на *ScienceDirect-у*. Потребно је само изабрати један или више постојећих *Topic Alerts-a*.

- *Ујозорења о волумену/броју (Volume/Issue Alerts)* – информација да је нови број часописа или волумен књиге или серије укључен у базу *ScienceDirect-a*. За жељену публикацију треба само назначити да буде укључена у *Alert*.

- *Ујозорења о цитирању (Citation Alerts)* – обавештава корисника о цитирању изабраног чланка у новим насловима који су додати у *ScienceDirect*. При прегледу чланка потребно је само кликнути на опцију: *Save as Citation Alert*.

У оквиру секције *моја подешавања* могуће је и кориговати или изменити личне податке и подешавања (*Modify Personal Details and Preferences*), променити лозинку за пријаву (*Change Password*) – прва се насумично генерише при пријави, и формирати документ са списком свих садржаја *ScienceDirect-a* који су кориснику доступни на основу тренутно важеће лиценце (*ScienceDirect Electronic Holdings Reports*).

Крајњи резултат сваке претраге је списак наслова који задовољавају задате критеријуме претраге. За сваки наслов могуће је видети апстракт (опција *Preview*), а ако лиценца коју корисник има то дозвољава, и пун текст рада у HTML и PDF формату. Уз сваки наслов постоји и линк *Related Articles*, који води ка списку наслова са тематиком и садржајем блиским изабраној публикацији. Један или више наслова са списка могуће је обележити, а обележене наслове могуће је директно проследити електронском поштом на жељену адресу (опција *Email Articles*), или сачувати списак публикација у којима су изабрани наслови цитирани (*Export Citations*) – у једном од три понуђена формата (*RIS*, *RefWorks Direct Export* или *ASCII*).

Са леве стране списка резултата претраге налази се образац за прецизнију претрагу у оквиру добијених резултата. Он омогућава да се у даљу претрагу укључе или из ње искључе наслови из једног или више часописа/књиге или године.

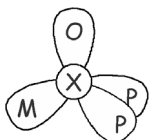
На крају напомињемо да се на страници *KoBSON-a (nainfo.nbs.bg.ac.yu/KoBSON/s/sd.aspx)* може пронаћи мало упутство за претрагу сервиса *ScienceDirect*, са низом сугестија које олакшавају претрагу.





## ВЕСТИ ИЗ СХД

„КРЕАТИВНО УЧЕЊЕ ХЕМИЈЕ“  
УДРУЖЕЊЕ НАСТАВНИКА ХЕМИЈЕ, БЕОГРАД



ОБАВЕШТАВАМО ВАС ДА ЈЕ ОВОГ ЛЕТА У ПЕРИОДУ ОД 11.08-18.08. НА МИТРОВЦУ  
НА ТАРИ, ОДРЖАНА ПРВА ЛЕТЊА ШКОЛА ХЕМИЈЕ

Овог лета је одржана прва Летња школа хемије, на Митровцу на Тари, у организацији удружења наставника „Креативно учење хемије“ из Београда.

Школу су похађали ученици основних школа из Београда и Обреновца.

Организовање Летње школе је имало за циљ да се кроз експеримент повеже знање стечено у школи са знањима важним за очување природне средине и здравља уопште.

Ученици су у Школи решавали експерименталне задатке, састављали и презентовали пројекте, прилагођене њиховом узрасту.

Један од задатака Школе је популарисање хемије и природних наука уопште, што је постигнуто популарним програмским садржајима који повезују апстрактна знања са средином у којој живимо и законима природе и потребом да се она очува.

Опуштена радна атмосфера у којој су сви ученици знатижељно решавали постављене задатке, не скривајући радост при извођењу експеримента је још једна предност образовних летњих активности ученика.

У спроведеној анкети, ученици су са одушевљењем поздравили одржавање Летње школе попут Школе хемије, што показује да су ученицима потребне ради



проширивања сопствених знања и примене у конкретним задацима, ради осмишљавања слободног времена, ради проширивања интересовања ученика ка осталим природним наукама и природној средини и њеном очувању.

Изузетно је занимљиво да су, по речима ученика, најлепши део дана представљали часови хемије и експериментални рад. Ученици су својим активним радом у Летњој школи, доказали да више воле учење, на њима прихватљив, савремен начин, у коме они активно учествују него слободно време које треба сами да осмисле.

Сви ученици су изразили жељу да поново буду учесници Школе хемије, како сами кажу, ма где она била.

Програм је Летње школе је написао и осмислио тим Удружења наставника хемије „Креативно учење хемије“ из Београда.

**Надамо се да ће ово бити интересантан материјал за објављивање у листу и да ћете обавестити наше колеге о нашим активностима.**

Председник Удружења  
**Олгица Петровић**, проф.  
Тел. 063/82-44-920

## НИЈЕ ОТПАД СВАКА АМБАЛАЖА, НАУЧИ ШТА ЈЕ РЕЦИКЛАЖА!

Српско хемијско друштво и Технолошко-металуршки факултет, уз финансијску помоћ града Београда, више од годину дана раде на реализацији програма намењеним ученицима основних школа под називом *Није отпад свака амбалажа, научи шта је рециклажа!*

122 Хемијски њреїлег

Циљ програма је упознавање деце са основним принципима заштите животне средине и правилним управљањем отпадом. Током четири дана трајања програма деци се представља појам рециклаже и разврставања отпада кроз предавања у виду презентација пра-



ћених низом интерактивних игара и показних вежби. Укључена је и посета Рециклажном дворишту Градске чистоће, Лабораторији за макромолекуле и штампарији ТМФ-а. На крају програма ученици добијају дипломе Српског хемијског друштва након чега и сами могу бити едукатори својим вршњацима. Овом приликом Друштво је издало и књижицу под називом *Не дацај, искористи*, прилагођену узрасту деце којем је програм намењен.

Током летњег и зимског распуста организована су два семинара на Технолошко-металуршком факултету на којима је присуствовало 70 ученика из различитих београдских школа. Деца су, уз помоћ асистената у Лабораторији за макромолекуле ТМФ-а, имала прилику да виде добијање најлона и полиуретанске пене, као и да разговарају са запосленима у Рециклажном дворишту и виде сортирање отпада у пракси. Организовани су и излет на Авалу и посета ReSan рециклажном центру који се бави сакупљањем лименки.

У марту ове године је започет посебан пројекат у сарадњи са основном школом „Владислав Рибникар“ из Београда. Пројекат је заснован на вршњачкој едукацији и састоји се из два дела:

- први део је тродневна радионица на ТМФ-у на којој је 30 деце из школе прошло кроз обуку и добило дипломе предавача јуниора

- други део је вршњачка едукација у ОШ „В. Рибникар“ где су полазници курса-предавачи јуниори држали предавања својим вршњацима из петог и шестог разреда (250 ученика је прошло вршњачку едукацију)

Предавачи јуниори су недељу дана држали презентације у свечаној сали школе уз помоћ координатора пројекта и наставника школе. Свако одељење посебно је имало прилику да у току два школска часа чује од својих вршњака нешто о ефекту стаклене баште и глобалном загревању, третирању отпада, рециклажи пластике, папира, метала и стакла, опасном отпаду, а час би се завршио показном вежбом где су ученици добијали различите предмете и имали задатак да их на лицу места сортирају у одговарајуће контејнере. Најмлађи



предавачи СХД-а су припремили квиз и укрштеницу за ученике, тако да су на крају часа деца уз игру могла да провере своје знање. Тим предавача-јуниора је наставио да едукује и млађе ученике – од првог до четвртог разреда тако да је на крају цела школа прошла обуку. Након тога ОШ „В. Рибникар“ је, уз помоћ СХД-а и Агенције за рециклажу, од Градске чистоће добила контејнере за отпадни папир, ПЕТ и метал чиме је пројекат заокружен. Оно што је најбитније је да је овај програм школа уврстила у свој редован наставни програм.

Велики број деце је након програма показао значајно интересовање за ову област и координатори програма су у контакту са њима, одговарају им на сва питања, размењују информације, а најзаинтересованија деца су у редовни предавачи на нашим радионицама и догађајима.

Тако смо били гости Агенције за рециклажу на манифестацији одржаној код хотела Југославија поводом обележавања Дана планете Земље 22. априла 2008. године. Манифестација је замишљена као промоција институција Србије које као своју делатност имају и бригу о планети Земљи, као и низ популарно образовних активности које доприносе очувању планете. Предавачи јуниори „Српског хемијског друштва“ су одржали неколико презентација на тему очувања планете, заштите животне средине и рециклаже. Ученици из Рибникара су носили транспарент „Ми из ОШ „В. Рибникар“ знамо све о рециклажи“, а на централној бини манифестације су показали да је он заиста истинит.

На Дан заштите животне средине 05.06.2008. године у ОШ „Владислав Рибникар“ уприличена је свечаност додела дипломе школи, као и тиму предавача јуниора, од стране Српског хемијског друштва и Технолошко-металуршког факултета, као знак признања и захвалности за све што су учинили у области едукације. Од Агенције за рециклажу школа је на поклон добила Појмовник из области заштите животне средине као и едукативне материјале а деца су за узврат припремила кратак али садржајан програм – презентације, поезију, поезију на француском језику, а све на тему очувања здраве и чисте животне средине.



Троје деце - највећих еколога је, заједно са координатором програма, гостовало у емисији радио Београда чија тема је управо био рад Друштва са децом у овој области. Деца су након емисије на поклон добила књигу о екологији издавачке куће Клио и били су њени гости.

С обзиром на то да је екологија све значајнија тема у нашој земљи, на низ закона чије усвајање предстоји, као и ниску свест становништва, Српско хемијско друштво планира да настави са овим програмом. У

припреми је и семинар за наставнике чиме ће се обезбедити одрживост пројекта, јер ће наставници стечено знање преносити и будућим генерацијама.

Ови примери показују да можемо очекивати и од најмлађих да ће дати свој допринос у очувању животне средине и због тога треба улагати што више у рад са њима, јер на крају они су основа за успешан одрживи развој.

Бојана Вукадиновић



## ПРВО ТАКМИЧЕЊЕ ЗА ТРОФЕЈ СРЕБРНИ ЕРЛЕНМАЈЕР

У Торину је од 16. до 20. септембра 2008. године одржан 2nd EuCheMS Chemistry Congress (<http://www.euchems-torino2008.it/site/home.asp>) који је окупио око 1800 учесника са свих континената. Пленарни предавачи били су добитници Нобелове награде Peter AGRE (Baltimore, USA), Robert H. GRUBBS (Pasadena, USA), K. Barry SHARPLESS (La Jolla, USA), затим Avelino CORMA (Valencia, Spain), Jean M.J. FRECHET (Berkeley, USA), Kyriacos C. NICOLAOU (San Diego and La Jolla, USA), Martyn POLIAKOFF (Nottingham, UK). Детаљи предавања могу се наћи на наведеном сајту.

Главне тема Конгреса обухватају улогу катализе у органским синтезама различитих једињења, нпр., лекова и полимерних материјала, теоријске аспекте најновијих достигнућа, хемију која користи раствараче и реагенсе што не загађују околину ("зелена хемија"), хемију комплексних једињења, биохемију, природне производе, медицинску хемију и заштиту околине.

У оквиру Конгреса велика пажња посвећена је популаризацији хемије у Европи, и Италији као земљи домаћину. Један вид популаризације обухватио је и такми-

чење за *Сребрни ерленмајер*, које је окупило око 1500 гледалаца у Teatro Colosseo у Торину. Такмичари-презентатори били су представници хемијских друштава из Енглеске, Француске, Србије, Немачке и земље-домаћина Италије. Као и увек, публика (највише је било ђака) је уживала, а и навијала не за појединачног такмичара, већ за оглед да успе. Наши представници су били Бојан Вуловић и Филип Бихеловић, обојица са Хемијског факултета, а око технике је помагао Богдан Шолаја. Сви учесници су искусни и вични том послу и одушевили су публику. Огледи које су извели Бојан и Филип оставили су снажан утисак на жири (председници Француског и Италијанског хемијског друштва, председник организационог одбора, председник EuCheMS и организатор такмичења), који је једину награду *Сребрни ерленмајер* (*Silver Flask*) доделио управо Филипу и Бојану.

Српско хемијско друштво им честита на освојеном трофеју, и жели да и даље са својим колегама успешно популаризују хемију, као и до сада.

Богдан Шолаја



## 111 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
- Бранислав Николић, добитник Медаље за трајан и изванредан допринос науци за 2007. годи-

ну: "Титан • Оксиди • Електрокатализа и суперкапацитивност"

- Уручивање годишњих награда и признања Друштва
- Мелина Калагасидис Крушић, добитник Медаље за прегалаштво и успех у науци за 2007. годину: "Хидрогелови"
- Из историје Друштва

Свечана скупштина одржаће се у среду, 10. децембра 2008. године у Свечаној сали Српске академије наука и уметности у Београду, Кнез Михаилова 35, са почетком у 11.00 часова.