

# **ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД**

год. 50

бр. 4 (септембар)

YU ISSN04406826

UDC 54.001.93

# ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД CHEMICAL REVIEW



Годиште 50

број 4  
септембар

Editor-in-Chief  
RATKO M. JANKOV  
Deputy Editor-in-Chief  
DRAGICA TRIVIĆ  
Honorary Editor  
STANIMIR R. ARSENIJEVIJ  
Publisher  
SERBIAN CHEMICAL SOCIETY  
Belgrade/Serbia, Karnegijeva 4

Volume 50  
NUMBER 4  
(September)

Издаје  
СРПСКО ХЕМИЈСКО ДРУШТВО

Телефон 3370-467

Карнегијева 4

излази двомесечно

ОДГОВОРНИ И ГЛАВНИ УРЕДНИК  
Ратко М. Јанков

ПОМОЋНИК ОДГОВОРНОГ И ГЛАВНОГ  
УРЕДНИКА  
Драгица Тривић

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

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

УРЕЂИВАЧКИ ОДБОР

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

Годишња чланарина, укључује часопис „Хемијски преглед“,  
за 2009. годину износи:

- за запослене..... 1.400,00  
- за пензионере, студенте, ђаке и незапослене.....600,00  
- претплата за школе и остале институције.....3.000,00  
- за чланове из иностранства.....€ 40,-  
- претплата за институције из иностранства .....€ 50,-

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

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

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

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

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

## САДРЖАЈ

### ЧЛАНЦИ

Милка КОСТИЋ  
*Milka KOSTIĆ*

ЖИВИ КОМПАСИ: ПРИЧА О МАГНЕТОТАКТИЧНИМ  
БАКТЕРИЈАМА  
*LIVE COMPASSES: A TALE OF MAGNETOTACTIC BACTERIA* \_\_ 2

Милена КРСТИЋ  
*Milena KRSTIĆ*

МИКОТОКСИНИ – наша стварност  
*MYCOTOXINS* ----- 12

Иван ГУТМАН  
*Ivan GUTMAN*

Елеменат 112 зове се коперницијум  
*ELEMENT 112 IS NAMED COPERNICIUM* ----- 18

Бранко Ј. ДРАКУЛИЋ  
*Branko J. DRAKULIĆ*

У ТРОДИМЕНЗИОНАЛНОМ СВЕТУ МОЛЕКУЛА. 3Д  
СТРУКТУРЕ МАЛИХ МОЛЕКУЛА – КАКО ИХ ГЕНЕРИСАТИ И  
ГДЕ ИХ НАЂИ НА ИНТЕРНЕТУ?  
*HOW TO GENERATE AND WERE TO FIND 3D  
STRUCTURES OF SMALL MOLECULES?* ----- 20

### ВЕСТИ за ШКОЛЕ

Мирјана МАРКОВИЋ, Миомир РАНЂЕЛОВИЋ,  
Драгица ТРИВИЋ  
*Mirjana MARKOVIĆ, Miodir RANĐELOVIĆ, Dragica TRIVIĆ*

КАКО ХЕМИЧАРИ БРОЈЕ  
*HOW DO THE CHEMISTS COUNT?* ----- 23

### ХЕМИЈА НА ИНТЕРНЕТУ

Александар ДЕКАНСКИ, Владимир ПАНИЋ, Драгана  
ДЕКАНСКИ

БАЗЕ ПОДАТАКА ИНФОРМАЦИЈА ЗА ИСТРАЖИВАЊА  
RIO-DB  
*RESEARCH INFORMATION DATABASE* ----- 26



## УВОДНИК

У жељи да у овогодишњем јубиларном, педесетом годишту “одемо корак даље” од првог овогодишњег броја почели смо да штампамо *Хемијски преглед* у боји... Но, приметили сте да смо се у прошлом броју поново вратили црно-белом издању јер се, нажалост, финансијски никако није могло, материјална ситуација Српског хемијског друштва то не дозвољава. Нисмо се лако предали: том проблему било је посвећено неколико састанака Уредника *XI* за Председником Друштва, као и један састанак целог Председништва. Решење нисмо нашли. Не помаже ни да напишемо колику нам суму новца као Друштву, од почетка године, дугује Министарство за науку и технолошки развој. И остали досадашњи спонзори су у финансијској и пословној кризи. Тек, узмакли смо корак натраг, у двадесети век, у стандардну црно-белу технику. Искрено се извињавамо ауторима који су своје прилоге припремали за штампање у боји.

Док се не пронађе неко решење за излажење *Хемијског прегледа* у боји, можемо вас једино упутити на Интернет презентацију сваког броја која је, наравно, у боји.

\* \* \*

И овај број *XI* који је пред вама пун је веома интересантних чланака. Први од чланака у овом броју описује једну посебну групу из разноликог света микроорганизама. У том свету постоје и такве бактерије које имају способност да детектују Земљино магнетно поље и да га користе за навигацију да би пронашле повољне услове за живот. Ове бактерије се зову магнетотактичне бактерије, а **Милка Костић**, аутор рада о овим бактеријама дала је изванредан преглед њихових необичних магнетских особина, и описала хемијске и биолошке процесе који су неопходни за њихово постојање. Погледајте овај занимљиви текст. Редакција *XI* и СХД се захваљују Elsevier Inc. и Nature Publishing Group, Macmillan Publishers Ltd. за права коришћења слика у тексту “Живи компаси: прича о магнетотактичним бактеријама”.

\* \* \*

Колико сте пута у кухињи наишли на буђав хлеб, плесив сир или мрко-браон флеке, као почетак труљења, на воћу? Већина од вас рећи ће да су то плесни или гљивице, али шта су гљивице и колико су оне заиста опасне по здравље људи? Гљивице су мали организми врло прилагодљиви за живот на и у чврстим подлогама. Присуство гљивица у храни познато је мање-више од постанка света.. Учестала повезаност плесни са болестима нагнала је научнике да се позабаве истраживањима на пољу микотоксина и открију каква су заправо та једињења и шта све она могу. Одговоре на ова питања можете лако открити у чланку “МИКОТОКСИНИ – наша стварност”, аутора Милене Крстић.

\* \* \*

Елеменат редног броја  $Z=112$  синтетизован је још 1996. године. Детаљније информације о томе могу се наћи у чланцима објављеним у *Хемијском прегледу* у неколико претходних година и литератури коју они цитирају. Док није добио своје коначно име, одобрено од стране Међународне уније за чисту и примењену хемију (IUPAC), елеменат  $Z=112$  се привремено називао *унунбијум*. У случају унунбијума требало је да протекне више од тринаест година да би IUPAC-ова комисија потврдила да је он заиста добијен. Нема сумње да је разлог за толику спорост био то што је до сада експериментално доказано постојање само неколико атома тог елемента који живе краће од хиљадитог дела

секунде. Напокон, 11. јуна ове године, IUPAC-ова комисија је донела одлуку да призна откриће унунбијума и упутила писмо Зигурду Хофману са молбом да предложи његово коначно име. Хофман је 14. јула ове године предложио да се елемент  $Z=112$  назове *коперницијум* (енглески: copernicium), те да му хемијски симбол буде латинично *Cp*. Овај предлог ће свакако бити званично прихваћен, мада ће IUPAC-овој администрацији за то бити потребно још извесно време. О свему овоме, на свој леп и занимљив начин, пише у свом чланку **Иван Гутман**.

\* \* \*

У овом броју наћи ћете и трећи наставак приче започете у бројевима 1/2008 и 4/2008 *Хемијског Прегледа* о визуализацији 3Д структура молекула. У овој “епизоди” видећете како се могу генерисати 3Д структуре малих молекула и где се базе података које садрже такве структуре налазе на интернету. Аутор **Бранко Дракулић** детаљно је описао инсталацију и руковање потребним програмским пакетима (бесплатним и легалним). Као и претходна два и овај текст је првенствено намењен ученицима основних и средњих школа, као и њиховим професорима, који су циљна група и нашег часописа.

\* \* \*

Хемичари с лакоћом одређују број честица у неком узорку користећи основну физичку величину *количину суйсџанце*, чија је SI јединица мол (mol). Веза између масе супстанце и количине супстанце први пут се уводи у настави хемије у седмом разреду основне школе. Међутим, испитивање ученичких постигнућа и редовна наставна пракса показују да ученици тешко овладавају везама између масе супстанце, количине супстанце и броја честица. Зато верујемо да ће наставницима и у основној и у средњој школи бити од користи предлог часа за обнављање и утврђивање знања о количинским односима у првом разреду средње школе који можете наћи у У чланку под насловом „КАКО ХЕМИЧАРИ БРОЈЕ“ аутора **Мирјане Марковић**, **Миомира Ранђеловића** и **Драгице Тривић**.

\* \* \*

Из различитих области науке и технологије креирано је 119 база података у Јапану. Већина база је отвореног типа, односно континуално се допуњавају новим подацима и информацијама. Један мањи број база је у облику архива, без даљег допуњавања. Наша стална ауторска екипа, која пише за рубрику *Хемија на интернету*, у саставу **Александар Декански**, **Владимир Панић** и **Драгана Декански** написала је прилог и за овај број Хемијског прегледа. Тема је „Базе података информација за истраживања”.

\* \* \*

По први пут у *XI* објављујемо уметничку слику (графички прилог). У овом прилогу видећете како је текст “Игре за ДНК рачунаре” (*Хемијски Преглед* 1/2009) видело уметничко-хемијско око колегинице **Савке Стојановић**, која је професор биохемије из Панчева и сликар. Нама се веома допао овај оригинални производ споја хемије и уметности, а ви нам јавите да ли вам се овакви прилози свиђају, па да их припремамо и у наредним бројевима *XI*.

Надамо се да сте се добро одморили и да сте се с новом енергијом вратили послу и свом *Хемијском прегледу* у ову јесен.

**Ратко М. Јанков**



## ЧЛАНЦИ



Милка КОСТИЋ, научни уредник, Cell Press, 600 Technology Square, Cambridge, MA 02139, USA,  
e-mail: [mkostic@cell.com](mailto:mkostic@cell.com)

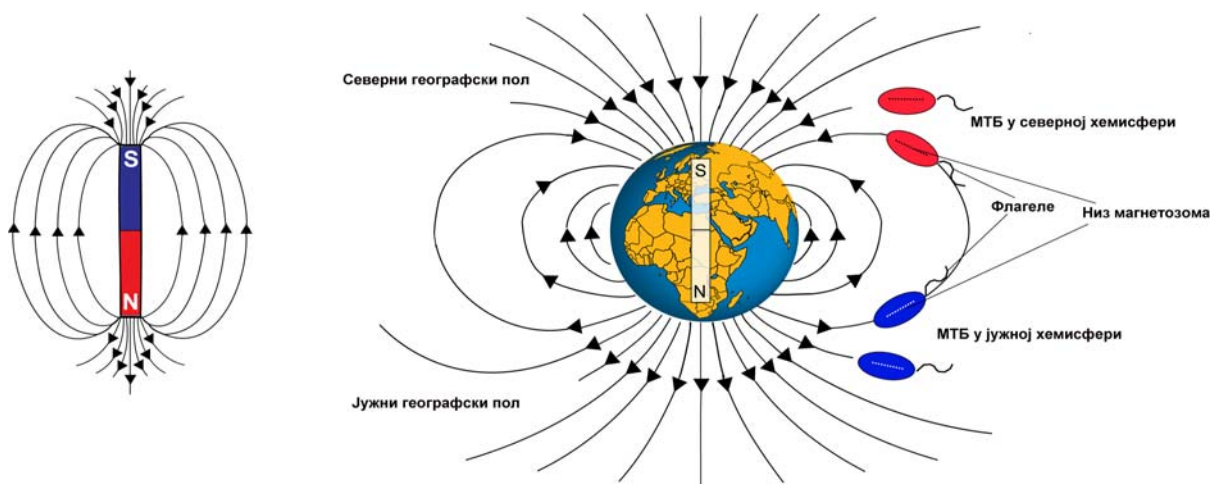
### ЖИВИ КОМПАСИ: ПРИЧА О МАГНЕТОТАКТИЧНИМ БАКТЕРИЈАМА

У разноликом свећу микроорјанизама постоје и такве бактерије које имају способност да детектују Земљино магнетно поље и да га користе за навигацију да би пронашле повољне услове за животи. Ове бактерије се зову магнетотактичне бактерије и овај чланак ће понудити преглед њихових необичних магнетских особина, и описати хемијске и биолошке процесе који су неопходни за њихово постојање.

Земљина кугла је диполски магнетни дипол, са јужним магнетним полом лоцираним у близини Земљиног географског јужног пола и северним магнетним полом у близини северног географског пола. Геолошки говорећи, пошто се географски и магнетни полови не поклапају, магнетна оса, линија која спаја центре северног и јужног магнетног пола, је под углом

од око  $11^\circ$  степени у односу на осу Земљине ротације. Познато је да се овај угао мења током времена зато што се положај Земљиних магнетних половина мења. Јачина Земљиног магнетног поља варира између од приближно 30 микро Тесла ( $\mu\text{T}$ ), (0,3 Гауса<sup>1</sup> (G)) у региону екватора до око 60 микро Тесла ( $\mu\text{T}$ ), (0,6 Гауса (G)) на половима. Линије Земљиног магнетног поља у првој апроксимацији имају исти облик и распоред око Земљине магнетне осе као линије магнетног поља око обичног линеарног магнета, што је шематски приказано на Слици 1.

Миграционе животиње, као што су неке врсте риба, птица, пчела и китова, које морају да пређу велике раздаљине током годишњих миграција имају способност да детектују Земљино магнетно поље и да се помоћу њега оријентишу. Ова способност се назива маг-



Слика 1. Шематски приказ линија магнетног поља и понашања магнетотактичних бактерија (МТБ).

Два панела показују просторни распоред линија магнетног поља око сталног магнетног дипола и око Земљине кугле. МТБ имају способност да детектују линије магнетног поља и да се дуж њих оријентишу користећи специјалне унутарћелијске компоненте, магнетозоме. МТБ са северне хемисфере су овде приказане као црвени овали, а оне са јужне као плави. Магнетозоме су шематски назначени као низ црних односно белих тачака. Ћелије се крећу ка северном или јужном полу, у зависности од локације и при том кретању се користе флагелама, такође приказаним на слици.

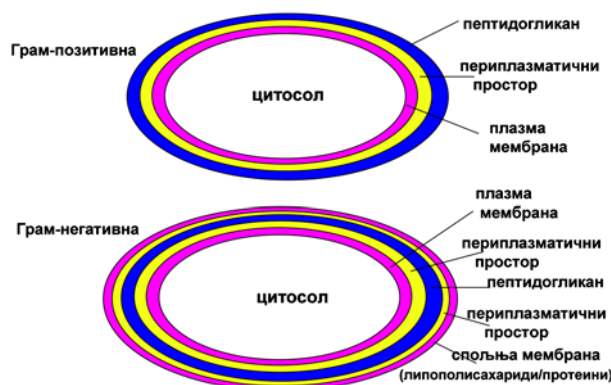
<sup>1</sup> Тесла (T) је јединица за јачину магнетног флукса у SI систему, док је одговарајућа величина у старијем CGS систему Гаус (G).

нетно чуло, јер се сматра да су животиње способне да детектују јачину магнетног поља у својој околини путем посебних рецептора, и да се та информација преноси до центра у мозгу помоћу специфичних неурона, на сличан начин на који сва остала чула, на пример вида или слуха, преносе информације.<sup>[1]</sup>

Људи такође већ вековима користе Земљино магнетно поље да би се оријентисали у простору. Али, пошто ми немамо унутрашње инструменте којима би могли да се служимо, пронађен је други начин за постизање сличних резултата. Наша могућност да се управљамо помоћу Земљиног магнетног поља заснива се на употреби компаса као навигационог инструмента. Компас је у принципу једноставна направа изграђена од магнетизоване игле са стални магнетни дипол, која је слободна да ротира у простору, при чему коначни положај игле указује на правац магнетног поља.

Бактеријски свет, због својих димензија скривен од нашег голог ока, поседује невероватно богатство ензима који катализују велики број зачуђујућих хемијских трансформација и које се врло често могу наћи само у бактеријама. Живи организми који бактеријски свет сачињавају поседују необичан низ особина, на пример способност да живе без кисеоника, или на високим температурама, или у срединама пуним хлороводичне киселине. Између осталих, јединствене у шароликом бактеријском свету, су магнетотактичне бактерије које имају способност да детектују Земљино магнетно поље и пливају дуж његових линија. Примерци ових бактерија у узорку воде у северној хемисфери показују карактеристично кретање ка северном полу, веома налик игли на компасу, тако да су ове бактерије живи компаси. Као што је и за очекивати, поларност бакетрија које настањују јужну хемисферу је супротна, тако да све магнетотактичне бактерије (МТБ) из јужне хемисфере пливају ка јужном полу. Ово понашање је симболично приказано на Слици 1 где су МТБ из северне хемисфере симболично приказане као црвени овали и МТБ са југа као плави. Смер кретања је симболично назначен положајем флагела, бактеријског пропелера, који гура бактерије у одређеном смеру. Дакле, на исти начин на који су древни морепловци користили компасе да путују далеким морима у потрази за златом, драгим камењем и зачиницама, ове посебне бактерије путују дуж линија Земљиног магнетног поља вођене својим унутрашњим компасима.

Уопштено говорећи, МТБ нису посебна бактеријска класа већ представљају разнолику групацију прокариотских организама различитих величина и облика. Неке од основних особина које све магнетотактичне бактерије деле: све припадају Грам-негативним бактеријама (карактеристична структура бактеријских мембрана Грам-позитивних и Грам-негативних бактерија је приказана на Слици 2), све се крећу помоћу флагела, и све поседују специфичне субћелијске структуре, магнетозоме. Листа идентификованих МТБ непрекидно расте, пошто се сваке године от-



Слика 2. Шематски приказ карактеристичних делова ћелијског омотача Грам-позитивних и Грам-негативних бактерија.

кривају нове врсте које имају ове основне особине и, наравно, неуобичајено магнетно понашање.

Овај чланак је организован у неколико основних делова. Прво ћемо се упознати са МТБ, њиховим открићем и природним стаништем, и самим процесом и врстама магнетотаксије, способности детекције и кретања дуж линија спољашњег магнетног поља која је карактеристична за ове бактерије. Затим ћемо прећи на детаљнију дискусију и опис магнетозома, јединствених субћелијских структура које ове бактерије поседују. Расправу ћемо завршити детаљним описом процеса магнетозомске биогенезе и ћелијских компоненти које у овом процесу играју значајну улогу.

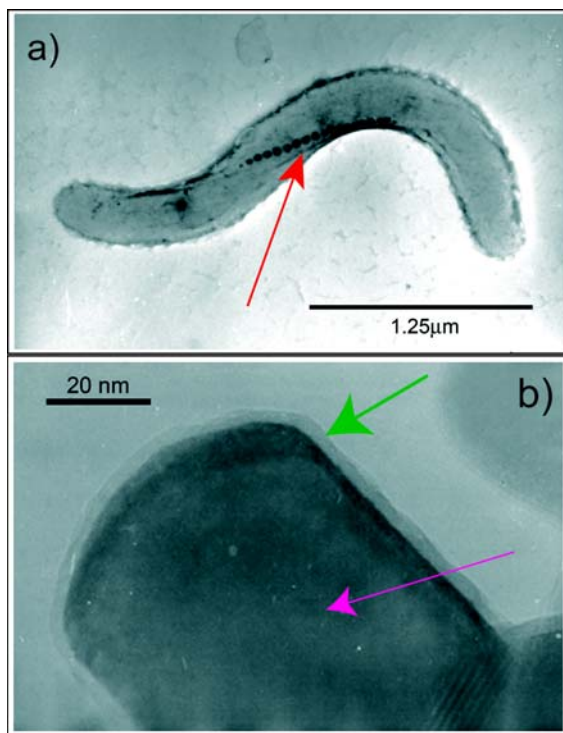
Биолошки, геобиолошки, микробиолошки, хемијски и биохемијски аспекти МТБ су до детаља описани у многим ревијским радовима, а неки од најновијих, за оне које интересује да прочитају и науче више, се могу наћи на крају овог текста.

## ОТКРИЋЕ И ОСНОВНЕ БИОЛОШКЕ ОСОБИНЕ МАГНЕТОСТАТИЧНИХ БАКТЕРИЈА

Први опис магнетотактичних бактерија (МТБ) је објавио Ричард Блејкмор у часопису *Science*, 1975.<sup>[2]</sup> У узорку морског блата Блејкмор је приметио једну врсту бактерија које су све пливале у истом правцу и прво објашњење које је понудио било је да бактерије могу да осете где се налази извор светлости и да пливају ка њему. Међутим, након детаљног истраживања, Блејкмор је успео да докаже да се бактерије које је открио крећу ка Земљиним магнетним полу. Када је узорак ових бактерија ставио под микроскоп, Блејкмор је уочио да су МТБ Грам-негативне, да су им димензије око 1 микрометра ( $\mu\text{m}$ ) и да се крећу помоћу флагела, што их у принципу не чини другачијим од хиљада других бактеријских врста. Међутим, под микроскопом је такође било лако уочљиво да ове бактерије поседују интересантне тамне субћелијске контуре које садрже минерални материјал окружен биолошком мембраном. Микроскопска слика једне од МТБ је приказана на Слици 3а, где се јасно може видети присуство низа тамних минералних контура. Слика 3б је



снимљена са јачим увеличањем и фокусарана на минералне формације, тако да се ту јасно може видети њихова fina структура о којој ће бити више говора касније. Бактерија коју је Блејкмор овде описао је касније класификована и названа *Magnetospirillum magnetotacticum*.



**Слика 3.** Електронски микрографија *Magnetospirillum magneticum* АМВ-1 под различитим увеличањем.

а) На овој слици *M. magneticum* АМВ-1 низ магнетозома се јасно види као низ тамних контура лоцираних у средини цитоплазме и назначених црвеном стрелицом. б) снимак исте ћелије са јачим увеличањем и фокусарана на субћелијске формације које имају јасно уочљиву фину структуру изграђену од неорганске компоненте (ружичаста стрелица) и биолошке мембране (зелена стрелица). Слика је репродукована са допуштењем из Trends in Microbiology, Elsevier, Inc. (Matsunaga, T., Okamura, Y. (2003) Trends Microbio. 11, 536).

Следећи оглед који је Блејкмор извео је била рендгенска (X-ray) микроанализа. Спектар који је на овај начин снимлио, са два јака сигнала на 6.4 keV и 7.0 keV, је јасно показао да минерални материјал унутар ћелија садржи гвожђе пошто се енергије линија у спектру поклапају са рендгенским емисионим линијама K $\alpha$  и K $\beta$  карактеристичним за гвожђе. На основу ових запажања Блејкмор је закључио да веза између особине ових бактерија да пливају дуж линија Земљиног магнетног поља, магнетотаксије, и велике количине субћелијских структура испуњених гвожђем не може бити случајна и да присуство минерала гвожђа игра улогу у магнетотаксији. Пошто се зна да минерали гвожђа поседују магнетне особине, логично је претпо-

ставити да је присуство велике количине гвожђа у овим бактеријама узрок магнетотаксије.

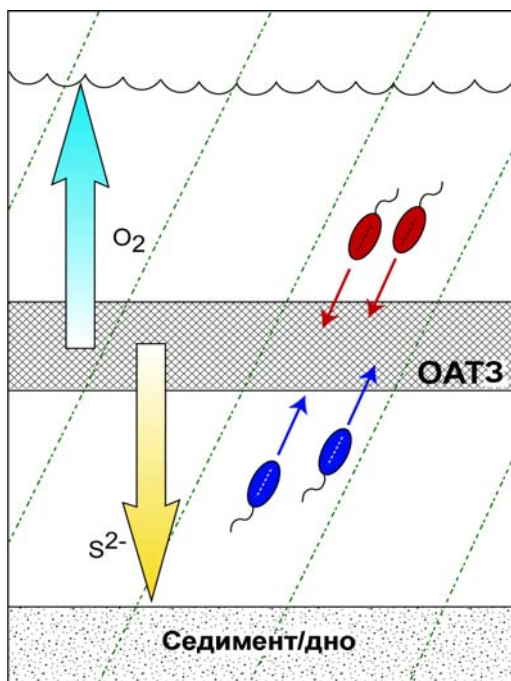
Каква су могућа објашњења за магнетотаксију? Две основна могућа механизма која би могла да објасне кретање МТБ у магнетном пољу су пасивни и активни. У пасивном моделу, бактерије би биле привучене ка магнетном полу спољашњег магнетног поља због велике количине магнетног материјала које садрже у себи и та сила би их вукла дуж линија магнетног поља ка полу. Са друге стране, активни механизам би био заснован на активном учешћу бактерија у процесу. У овом моделу, унутрашњи магнетни материјал служи да оријентише ћелије дуж линија магнетног поља, а бактерије онда морају да користе своју енергију да пливају ка полу користећи флагеле. Најједноставнији оглед чији би резултат показало да ли је улога магнетских компоненти у овим бактеријама активна или пасивна је заснован на посматрању понашања мртвих ћелија. Уколико се мртве ћелије још увек крећу ка полу онда је пасивни модел тачан. Међутим, оно што је Блејкмор опазио било је да су мртве ћелије, иако оријентисане дуж линија поља, престале да се крећу. Дакле, Блејкмор је закључио да количина магнетног минералног материјала у свакој ћелији мора да буде довољна да оријентише ћелије дуж линија магнетног поља, и да ћелије онда пливају путем севера или југа користећи своје моторе.

Овај први опис магнетотаксије у бактеријском свету је послужио као катализатор и заинтересовао научнике из различитих области, од биологије, хемије, физике, астробиологије, до инжењера током следећих деценија, и то интересовање траје све до данас. Једна од директних последица овог интереса је велика количина података о МТБ која је на располагању.

Магнетотактичне бактерије представљају веома разнолику групацију бактерија различитог филогенетског порекла (највећи број припада  $\alpha$ -протобактеријама); МТБ се разликују по облика и могу бити коке, бацили, вибрили и спиреле; разликују се и по величини и по природном станишту и, што се може и очекивати, по метаболизму. МТБ укључују факултативне анаеробе, анаеробе и микроаерофиле. Многе од ових бактерија могу да користе нитрате и сулфате као електрон акцепторе за производњу енергије потребне за одржавање нормалних метаболичких процеса.

МТБ настањују различите водене екосистеме и могу се наћи и у слатким и у сланим водама. У речним токовима, мочварама и језерима МТБ најчешће обитавају у седиментима и муљу, на дубини од неколико милиметара.<sup>[3]</sup> У морима и океанима, МТБ се могу наћи у приобалним областима, мада постоје научни извештаји у којима је описано да су МТБ пронађене на дубинама од 3000 метара.<sup>[4]</sup>

Пошто научници настављају да трагају за новим врстама МТБ, њихов број се непрестано повећава и изненађења се појављују на сваком кораку. На пример, недавно је описана једна нова врста МТБ са јединственим особинама. Као што смо предходно поменули, мисли се да све МТБ из северне хемисфере пливају ка



**Слика 4.** Шематски приказ природног станишта магнетотактичних бактерија (МТБ).

Овде су МТБ приказане као црвени и плави овали (као на Слици 1). Окисчна-аноксична транзициона зона (ОАТЗ) је детаљније описана у тексту. Градијент концентрације кисеоника и сулфида је назначен стрелицама. Линије спољашњег магнетног поља су обележене испрекиданим зеленим линијама.

северном магнетном полу, док оне из јужне хемисфере пливају ка јужном. Тренутно прихваћено објашњење овог понашања се заснива на геометрији и смеру линија Земљиног магнетног поља које су у јужној хемисфери усмерене на горе а у северној на доле. Међутим, ова опажања су доведена у питање са новоописаном врстом МТБ изолованом из узорка воде из северне хемисфере која плива ка јужном магнетном полу<sup>5]</sup> и за то до сада не постоји објашњење.

Додатно питање на које још увек није у потпуности пронађен одговор је питање магнетотаксије као појаве. Тренутно је широко прихваћено објашњење за постојање ове појаве засновано на чињеници да су МТБ, генерално говорећи, еволуционо усавршене да живе у веома уском распону концентрације кисеоника. Многе бактерије, не само МТБ које живе под неатмосферским кисеоничним условим, су способне да детектују оне области у својој околини које имају повољну концентрацију кисеоника потребну за њихов опстанак и да се крећу ка тим областима. Овај процес се у биологији назива аеротаксија. У воденим екосистемама, концентрација кисеоника се мења посте-

пено са дубином, што ствара вертикални градијент шематски приказан на Слици 4. На овој слици је посебно назначен простор који се зове оксична-аноксична транзициона зона, ОАТЗ (на енглеском *oxic-anoxic transition zone*) која раздваја слојеве воде са и без кисеоника. МТБ најчешће живе баш у тој зони и око ње. На Слици 4, првац линија спољашњег магнетног поља је представљен зеленим испрекиданим линијама и МТБ које се крећу ка ОАТЗ из два супротна смера су приказане као црвени и плави овали. Дакле, МТБ користе линије магнетног поља да на ефикаснији начин дођу до средине са идеалном концентрацијом кисеоника па је магнетотаксија заправо комбинација два процеса и правилније би било назвати је магнетоаеротаксија. Иако многа питања о магнетоаеротаксији остају отворена, једно је сигурно: без присуства магнетних минерала у цитоплазми МТБ ове бактерије не би имале магнетне способности. У следећем делу ћемо описати ове наноманете, магнетозоме, и сазнати од чега су направљени.

#### МАГНЕТОЗОМИ: СПЕЦИЈАЛИЗОВАНЕ ОРГАНЕЛЕ МАГНЕТОТАКТИЧНИХ БАКТЕРИЈА

У узорцима вода прикупљеним на локацији, МТБ-е се могу идентификовати веома једноставно, без изолације и пречишћавања, због њихове јединствене способности да пливају ка половима било спољашњег Земљиног магнетног поља или магнетног поља лабораторјских магнета. На тај начин се МТБ могу одвојити од осталих бактерија присутних у узорцима прикупљањем у магнетном пољу. С друге стране, неке МТБ је могуће узгајати у лабораторији у суспензији у присуству строго контролисаних хранљивих материја и под контролисаном количином кисеоника док не достигну одређену густину ћелијске популације (другим речима док их не буде довољно за жељени експеримент). После тога је изолација магнетозома због њихових магнетних особина, релативно једноставан процес. Прво се суспензија ћелија природно добијена или лабораторјски узгојена центрифугира, при чему жива материја, односно ћелије од интереса, падају на дно и затим лако одвајају декантовањем супернатанта или сличним поступком. У следећем кораку ћелије се лизирају, односно ћелијска мембрана се уништи механичким путем или помоћу специфичних ензима. Овим поступком се све компоненте које су се налазиле у унутрашњости ћелије ослобађају у раствор из кога је онда веома једноставно одвојити магнетозоме помоћу магнетне колоне.<sup>1\*</sup> Овако припремљени магнетозоми се могу даље подвргнути различитим аналитичким методама.

Као што се види на Слици 3б., магнетозоми се састоје од две основне компоненте, неорганске на коју

<sup>1</sup> Апаратура за коришћење магнетних колоне се састоји од две компоненте: колоне чија је стационарна фаза направљена од материјала у којем може да се индукује магнетно поље и сталног магнета у који се колоне поставља и који онда у колони индукује градијент магнетног поља. Уколико узорак садржи магнетне компоненте оне ће бити привучен за стационарну фазу, и све немагнетне компоненте ће моћи да се исперу са колоне. Након испирања колоне се уклони из сталног магнета и демагнетизује, а потом се магнетне компоненте сперу и изолују.

на слици указује ружичаста стрелица, и биолошке, назначене зеленом стрелицом. Неорганска компонента је наноманет, а биолошка компонента је магнетозомска мембрана.

Структура неорганских кристала у магнетозомима је првобитно одређена користећи дифракцију електрона (трансмисиона електронска микроскопија високе резолуције), методу која пре свега служи за анализу узорака у чврстом стању. Овде се узорци изолованих магнетозома излажу снопу електрона одређе не енергије и добијена дифракциона слика садржи по датке о саставу и просторном распореду елементата који се налазе у кристалу. Први од ових експеримента су показали да је магнетни материјал у МТБ мешовити оксид гвожђа, магнетит, по хемијској структури  $\text{FeO} \times \text{Fe}_2\text{O}_3$  ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), који припада групи инверзних спинела.<sup>1 [6]</sup>

Још једна метода која је успешно коришћена за испитивање магнетозома је Мозбауерова спектроскопија.<sup>[7 а), б)]</sup> МТБ су одгајане у лабораторији у присуству спин-активног изотопа гвожђа, Fe-57. На тај начин, сви присутни магнетозоми у узорку су садржали Fe-57, што је неопходан предуслов за коришћење Мозбауерове спектроскопије која се заснива на принципу резонантне емисије и апсорпције гама зрачења. Ова метода је веома слична нуклеарној магнетној резонанцији зато што се заснива на детекцији прелаза између нуклеарних нивоа у атомима са спин активним језгрима. Извор гама зрака је (за потребе детекције гвожђа) Co-57 који у процесу бета-распада производи језгро Fe-57 у побуђеном енергетском стању и емитује гама зрачење у процесу релаксације. Ово гама зрачење пролази кроз узорак магнетозома и језгра Fe-57 која су присутна у том узорку апсорбују само зраке одређене енергије у зависности од њиховог локалног окружења, тако да снимљени спектар садржи информације о локалном окружењу језгара Fe-57 у узорку. У првом опису резултата Мозбауерове спектроскопије, аутори су директно показали да је спектар магнетозома идентичан спектру добијеном анализом чистог минералног узорка магнетита.<sup>7а)</sup> Интересантно је напоменути да су аутори такође израчунали укупни магнетни момент магнетозома присутних у МТБ ( $m=1,3 \times 10^{-15} \text{ A m}^2$ ). Ово је значајно зато што јачина интеракције између ћелије и спољашњег магнетног поља може да буде довољно велика да надјача утицај топлотне енергије на кретање, тако да магнетотаксија може да функционише. Математички говорећи,  $mV_0 > k_B T$ , где је  $m$  магнетни момент,  $V_0$  је магнетна индукција Земљиног магнетног поља, око  $60 \mu\text{T}$ ,  $k_B$  Болцманова константа, и  $T$  температура (300 K). Под овим условима и користећи вредност од  $m = 1,3 \times 10^{-15} \text{ A m}^2$  коју су аутори израчунали, добија се јасан резултат да је вредност  $mV_0$  око 10 пута већа од термалне енергије, што значи да је главна сила која утиче на оријентацију МТБ интеракција са магнетним пољем.

Све ове изведене анализе су показале да је, у највећем броју случајева, магнетит у магнетозомима чист кристал без унутрашњих дефеката у кристалној решетки. Магнетозоми су дугачки од 35 до 120 нанометара (nm), што указује на чињеницу да су довољно мали да сваки магнетозом представља једнодоменски стални магнет, са специфичним трајним диполним моментом. Унутар ћелија, магнетозоми су најчешће организовани дуж праве линије и формирају магнетозомске ланце (као што се може видети на Слици 3а). Свака МТБ врста поседује различити број магнетозома и може имати један или више магнетозомских ланаца. У магнетозомским ланцима, магнетни диполи индивидуалних магнетозома се налазе у паралелној оријентацији и самим тим укупни магнетни диполни момент је збир свих индивидуалних момената, у горе описаном случају (референца 7а))  $m = 1,3 \times 10^{-15} \text{ A m}^2$ . Дакле, способност оријентисања дуж линија магнетног поља зависи директно од броја магнетозома и магнетозомских ланаца унутар одређене ћелије: што има више магнетозома, већи је магнетни диполни момент и већа способност оријентације.

Осим магнетита, неорганска компонента магнетозома може да буде и мешовити сулфид гвожђа. Први извештаји о МТБ које уместо магнетита, садрже сулфид гвожђа, греигит (који је добио име по научнику који је први описао овај минерал, Јосеф Греиг)  $\text{Fe}_3\text{S}_4$ , је објављен 1990.<sup>[8]</sup> По понашању, унутар ћелијској организацији магнетозома, процесу биоминерализације, величини и облику МТБ које садрже греигит су веома налик МТБ које садрже магнетит. Једна битна разлика које се може узети као разлог зашто ове МТБ стварају  $\text{Fe}_3\text{S}_4$  уместо  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  је да бактерије произвођачи  $\text{Fe}_3\text{S}_4$  живе у срединама које садрже веће концентрације сумпорних једињења. Додатни резултати указују на чињеницу да генетска предиспозиција саме МТБ врсте може бити фактор који одређује да ли МТБ гради  $\text{Fe}_3\text{S}_4$  или  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  магнетозоме.

Под микроскопом се може тачно видети да су магнетозоми организовани као еукариотске органеле, и да поред минералног материјала имају и јасно видљиву мембрану (Слика 3б) чија је дебљина око 3-4 нанометра (nm). Анализа изолованих магнетозомских мембрана је показала да је њихова композиција врло слична композицији ћелијске мембране и да су основне компоненте липиди, укључујући неутралне липиде, гликолипиде, сулфолипиде, фосфатиде, фосфолипиде и масне киселине. Релативни међусобни односи идентификованих липидних компоненти присутних у магнетозомској мембрани су сличним релативним количинама ових липида у ћелијској мембрани. Осим тога, показано је да су липиди у магнетозомској мембрани организовани у липидни двослој, веома налик на ћелијску мембрану. Поред липида, магнетозомске мембране садрже и различите протеи-

<sup>1</sup> Спинели су класа минерала са општом формулом  $\text{A}^{2+}\text{B}^{3+}_2\text{O}_4$ , где су А и В најчешће магнезијум, цинк, гвожђе или хром, који формирају кристалне решетке са карактеристичном структуром у којима су катјони  $3^+$  лоцирани у октаедарском положају, а  $2^+$  у тетраедарском. У инверзним спинелима због присуства јона прелазних метала долази до инверзије у структури.



не што даље указује на биолошко порекло ових мембрана. [9]

Процес настајања магнетозома се назива магнетозомска биогенеза а, сам процес стварања кристалне компоненте магнетозома се назива биоминерализација. Оба процеса су међусобно повезана и зависе један од другог. Они такође зависе од великог броја унутарћелијских компонента које заједнички омогућавају формирање магнетозома, на строго контролисан начин. Следећи део овог текста ће дати уопштене информације о томе како магнетозоми настају и објаснити зашто је њихова унутарћелијска морфологија и организација онаква каква јесте.

## МАГНЕТОЗОМСКА БИОГЕНЕЗА И БИОМИНЕРАЛИЗАЦИЈА

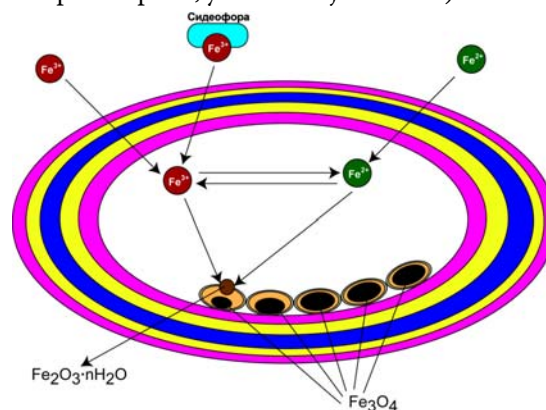
Процес биоминерализације магнетозома је изузетно интересантан биолошки процес зато што представља јединствени пример у бактеријском свету и један од ретких примера у целом биосистему где једноћелијски организми имају могућност да у веома строгом контролисаном процесу са великом прецизношћу произведу унутарћелијске нанометарске структуре неорганске природе и порекла. МТБ на јединствени начин користе своје гене и генетски дефинисане процесе као платформу за производњу наномангнетизма изграђених у потпуности од неорганских материјала увезених из околне средине.

Извођењем огледа под контролисаним лабораторијским условима, откривени су неки интересантни детаљи о процесу биоминерализације и производње магнетозома. Иако научници тренутно не размеђу све детаље процеса стварања магнетозома, на основу резултата вишегодишњих истраживања је јасно да се овај процес одвија у неколико корака од којих су најважнији: формирање празних магнетозомских везикула, транспорт гвожђа из спољашње средине у цитосол и биоминерализација тј. производња неорганских, кристалних компоненти магнетозома, било магнетита или греигита.

Средином 80-тих, Франкел и сарадници [7 6] су предложили следећи детаљни модел који би објаснио биогенезу магнетозома. Према њиховом моделу, МТБ прво импортују Fe(III) из спољашње средине, затим долази до редукције Fe(III) у Fe(II) у цитоплазми, и Fe(II) се онда транспортује у унутрашњост претходно формираних празних магнетозомских липидних везикула. Унутар везикула, Fe(II) се под строго контролисаним условима оксидује до Fe(III) и настаје хидратисани гвожђе(III)-оксид,  $Fe_2O_3 \cdot nH_2O$ . У последњем кораку овог процеса, пола гвожђа се редукује до Fe(II), затим долази до дехидратације и тако настаје магнетозомски магнетит,  $Fe_3O_4$ . Даља испитивања су показала да је процес конверзије Fe(III) од тренутка када Fe(III) увезе у цитоплазму, до коначне депозиције кристала  $Fe_3O_4$  унутар магнетозомских мембрана веома брз и током овог процеса не долази до акумулације интермедијерних производа. [10] Ово представља основни предложени модел за формирање магнетозома који је

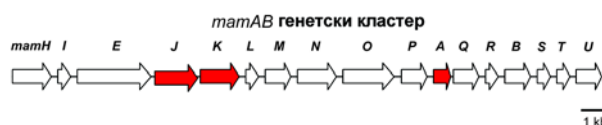
временом делимично модификован и рафиниран на основу различитих нових експерименталних резултата.

Слика 5 шематски представља процес биогенезе магнетозома, а начин приказа информација је заснован на Сlici 6 преузет из ревијског рада Базилинског. [11] Као што је претходно поменуто, процес почиње транспортом, увозом катјона гвожђа из околне



Слика 5. Шематски приказ процеса формирања магнетозома и биоминерализације.

У овом процесу, ћелије увозе Fe(II) и Fe(III) (слободно или везано за сидерофору) из спољашње околине у цитоплазму. Затим унутар ћелије долази до редукције Fe(III) у Fe(II), и Fe(II) се онда транспортује у унутрашњост претходно формираних празних магнетозомских липидних везикула. Унутар везикула, Fe(II) се под строго контролисаним условима оксидује до Fe(III) и настаје хидратисани гвожђе(III)-оксид,  $Fe_2O_3 \cdot nH_2O$ . У последњем кораку овог процеса, пола гвожђа се редукује до Fe(II), затим долази до дехидратације и тако настаје магнетозомски магнетит,  $Fe_3O_4$ . Начин приказа информација је заснован на Сlici 6 из Bazylinski, D. and Frankel, R.B. (2004) Nat. Rev. Microbiol. 2, 217.



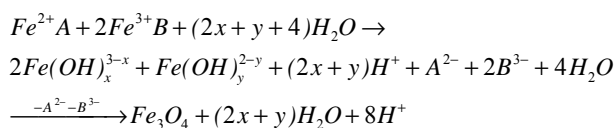
Слика 6. Организација гена повезаних са процесом формирања магнетозома.

Генетски кластер, *tamAB*, садржи гене чији производи, протеини, играју активну улогу у биогенези магнетозома. Гени су овде шематски приказани стерлицима, где дужина стрелице одговара дужини гена. Скала од 1 kb (килобаза) је дата при дну, ради оријентације. Три гена од посебног значаја за ову расправу су *tamA*, *tamJ* и *tamK*, обојени црвено.

средине. МТБ могу да уведу гвожђе у оба оксидациона стања и као Fe(II) и Fe(III); Fe(II) је представљен зеленом сфером, а Fe(III) је представљен као смеђа сфера. Елементарна анализа је показала да дехидратисане МТБ садрже око 3% гвожђа, што је неколико хиљада

пута више од уобичајне количине гвожђа коју остале, немагнетотактичне бактерије садрже.<sup>[12]</sup> Чињеница да МТБ садрже изузетно велику количину гвожђа је очекивана с обзиром на број и састав њихових магнетозома. Интересантно је међутим да МТБ нису развиле посебне системе и механизме за транспорт и манипулацију гвожђа, већ се користе процесима налик на све друге бактерије, са неким варијацијама. На пример, под нормалним физиолошким условима (pH око 7) Fe(III) је тешко растворљив (производ растворљивости Fe(OH)<sub>3</sub> је око 10<sup>-39</sup> што значи да концентрација слободног Fe(III) јона у раствору не може бити већа од око 10<sup>-18</sup> M). Због тога највећи број немагнетских бактерија користе специјалне молекуле, сидерофоре (приказане шематски као плави заобљени квадар у контакту са Fe(III) на Слици 5), који граде комплексе са Fe(III) и на тај начин одржавају Fe(III) у раствору. У случају МТБ, изгледа да могућност производње сидерофора зависи од врсте до врсте тако да се тренутно зна да неке врсте МТБ не производе сидерофоре (на пример *Magnetospirillum gryphiswaldense*,<sup>[13]</sup> док их друге производе у количинама које омогућавају детекцију (на пример *Magnetospirillum magneticum*, MV-1).<sup>[14]</sup>

Претпоставља се да се сва количина унетог гвожђа у цитоплазми редукује у оксидационо стање +2, и новонастали Fe(II) се локализују у близини ћелијске мембране. У облику Fe(II), гвожђе је везано за једну специјализовану врсту мембранских протеина, званих феритини, чија је генерална улога и у магнетотактичним и у свим другим бактеријама да вежу Fe(II) и заштите ћелију од превелике концентрације слободног Fe(II) која је штетна. У наредном кораку, долази до транспорта гвожђа у празне магнетозоме и, када је довољна количина гвожђа присутна унутар магнетозома, долази до неопходне хемијске реакције и биоминерализације. Научници тренутно сматрају да је средина унутар магнетозомске мембране базна и да се реакција одвија на следећи начин:



Овако написана хемијска једначина наглашава чињеницу да катјони гвожђа који се налазе у систему нису слободни већ да су везани у облику комплекса за два протеина, А чији тачни идентитет још увек није познат и В, феритин. Као што се може видети из дате хемијске једначине, у процесу стварања магнетита се ослобађа релативно велика количина протона који имају директан утицај на повећање киселости у средини. Пошто је за ефикасно стварање магнетита неопходна базна средина, да би се овај процес одвијао као што је показано, неопходно је присуство протеинске протонске пумпе. Присуство таквог протеина, иако очекивано, још увек није формално доказано.

Критична карактеристика магнетозомских кристала је њихова величина. Генерално говорећи, магнетне особине нанокристала зависе од њихове доменске

структуре и пошто сваки магнетозом мора да има стални магнетни диполни момент сви елементарни магнети унутар магнетозомског кристала морају да буду оријентисани у истом смеру. Такво стање је могуће само када су димензије кристала мање од око 100 нанометра (nm). Међутим, када димензије кристала постану превише мале, испод 30 нанометара (nm), утицај термалних флукуација је довољан да поништи интеракције између индивидуалних елементарних магнетних момената и кристал малих димензија не може да одржи стање сталног магнета. Дакле, у МТБ димензије магнетозомских кристала се крећу од 30 до око 140 нанометара (nm) и варирају од једне до друге бактеријске врсте. Раст и коначна величина кристала мора да буде строго контролисан процес, и до недавно научници су мислили да је величина кристала одређена величином празних магнетозома, тј. кристали магнетита и греигита расту док не испуне потпуно целу запремину магнетозома одређену димензијама магнетозомске мембране. И у овом случају као и у многим претходно поменутих, нови резултати указују на активну улогу протеина, у овом специфичном случају протеина који су локализовани у магнетозомској мембрани.<sup>[1]</sup>

Најновији резултати указују на чињеницу да се магнетозомске везикуле формирају пре првих кристала и да се нуклеација магнетита одвија на магнетозомској мембрани. Присуство мембране дакле највероватније игра двојаку улогу: површина мембране може да послужи као платформа за брзу нуклеацију на тај начин што је ефективна концентрација катјона гвожђа повећана због интеракције са мембраном; и након што је нуклеационо језгро за биоминерализацију формирано, мембрана игра улогу заштитног слоја који штити кристал током раста.

Шта се тренутно зна о магнетозомској мембрани? Као што је поменуто у претходном делу, магнетозомска мембрана је изграђена од липидног двослоја, садржи већи број протеина и, генерално говорећи, ова мембрана је по саставу веома слична ћелијској мембрани. Ова чињеница је основа за тренутно прихваћену теорију о биолошком пореклу магнетозомских мембрана, која каже да магнетозомске мембране настају од ћелијских мембрана процесом инвагинације и отцепљивања. Детаљни опис нових резултата који пружају доказ за ову теорију биће дат мало касније а овде ћемо се упознати прво са протеинима магнетозома.

Анализа свих протеина присутних у магнетозомској мембрани, протеомска анализа, је показала да су неки од ових протеина веома различити од оних који се нормално налазе у ћелијској мембрани.<sup>[16]</sup> Због њиховог јединственог присуства у делу генома, генетском кластеру, који кодира искључиво протеине који играју улогу у формирању и одржавању магнетозома и магнетозомске мембране, ови протеини се називају протеини магнетозомске мембране, Маm и Мem (скраћено од њиховог имена на енглеском *m*agnetosome *m*embrane и *m*agnetosome *m*embrane), протеини специфични за магнетне честице, Mms (на енглеском

magnetic particle membrane specific), и протеини специфични за магнетотаксију, Mtx (на енглеском magnetotaxis). Шематски приказ једног дела репрезентативног генетског кластера је дат на Слици 6. Овде стрелице означавају позицију и дужину појединачних гена (имена индивидуалних гена су по конвенцији назначена италиком). Неки од идентификованих протеина су по својој примарној секвенци слични другим бактеријским протеинима, на пример протеинима који омогућавају дифузију катјона, протеинима који интерагују са ћелијским скелетом, и протеинима са улогом у транспорту јона. Све ове функције би биле очекиване за протеина неопходне за изградњу и одржавање магнетозомске мембране, зато што њихове биолошке улоге највероватније захтевају да они имају могућност да транспортују катјоне гвожђа, да усидре магнетозоме и фиксирају их за компоненте цитоскелетона. Треба напоменути да су, између осталог, неки идентификовани протеини јединствени за магнетотактичне бактерије и нису присутни у другим, немагнетним прокариотама као и да неки од ових протеина нису везани за мембрану и слободни су да пливају по цитоплазми што наводи на закључак да је њихово присуство у цитоплазми неопходно за регулацију процеса магнетозомске биоминерализације.

Као што смо претходно поменули, сматра се да мембрана магнетозома настаје инвагинацијом и отцепљивањем ћелијске мембране.

У раду објављеном 2004. научници су користили крио-ултрамикроскопију да посматрају овај процес.<sup>[17]</sup> Укратко, крио-ултрамикроскопија је метода која се заснива на коришћењу трансмисионог електрон-микроскопа (ТЕМ) великог увећања (увеличање код ових инструмената зависи од убрзања електронског зрака, тако да се њихова јачина даје као максимални напон који се користи за убрзавање електрона, на пример у експерименту који описујемо јачина коришћеног инструмента је била 80 kV). Метода се назива „крио“ зато што се узорци ћелија након што су фиксирани на платформи за анализу, брзо излажу температурама теченог азота и замрзну. Да би могли да посматрају празне магнетозомске везикуле, у овом раду су аутори прво узгалаји *Magnetospirillum magneticum* AMB-1 бактерије у средини у којој није било гвожђа. Под овим условима бактерија расту нормално, мада немају магнетске особине. Детаљна анализа микроскопских слика је показала да и под овим условима долази до инвагинације ћелијске мембране, и на тај начин почиње формирање празних магнетозома. Када су соли гвожђа додате у ћелијску културу, под микроскопом се могло видети да су кристали магнетита почели да се формирају и испуњавају присутне празне магнетозоме. У истом раду, научници су произвели *Magnetospirillum magneticum* AMB-1 бактерију у којој је ген за протеин MamA (један од производа генетског кластера приказаног на Слици 6) избрисан. Иако способна да преживи, фенотип ове мутиране бактерије је показао да ове ћелије имају значајно мањи број присутних магнетозома и да је само мали проце-

нат ових магнетозома испуњен кристалима магнетита, што указује на чињеницу да MamA игра важну улогу у процесу формирања магнетозома и биоминерализације.

У њиховом наредном раду, објављеном 2006., настављено је испитивање овог процеса. Користећи сличне експерименталне методе, комбинацију генетских манипулација и микроскопа великог увећања, показано је да су магнетозоми производ инвагинације ћелијске мембране и да је њихово формирање и унутарћелијска организација под контролом протеина MamK (такође производа генетског кластера приказаног на Слици 6) који се налази само у магнетотактичним ћелијама, а који је по секвенци сличан актину. Користећи електронску крио-томографију (методу која је слична електронској микроскопији и омогућава реконструкцију тридимензионалне слике унутрашњости ћелије) научници су успели да јасно виде да магнетозомске инвагинације остају причвршћене за ћелијску мембрану током дужег временског периода, што указује на могућност да је интеракција између ћелијске и магнетозомске мембране важна и за сам процес стварања магнетозома. MamK формира дугаче филаменте, слично актину, који се пружају од магнетозомских инвагинација формираних у низу дуж ћелијске мембране, па је могуће претпоставити да MamK контролише распоред ових структура и њихов међусобни унутарћелијски положај. У закључку овог рада, аутори су на основу експерименталних доказа претпоставили да је током процеса биоминерализације значајно одржавање контакта између ћелијске мембране и магнетозомске мембране јер је могуће да се магнетозоми снабдевају гвожђем из периплазме; што, наравно, остаје да буде доказано. Овај рад такође указује на чињеницу да ћелијски скелетон игра активну улогу у унутарћелијској организацији магнетозома и контроли њихове унутарћелијске локације.<sup>[18]</sup>

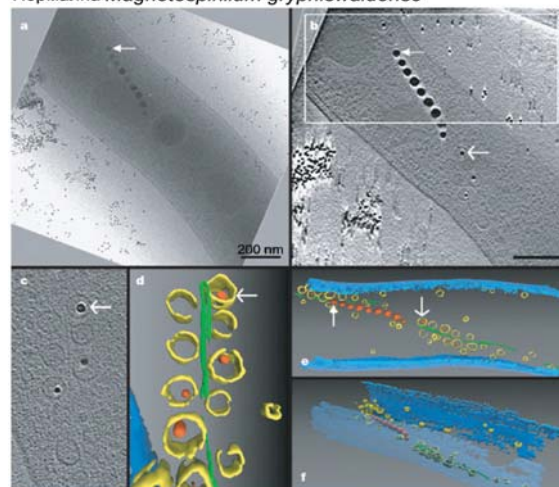
Пошто магнетни диполни момент појединачних кристала магнетита из једног магнетозома није довољан да превазиђе нормалну кинетичку енергију ћелије и доведе до њене оријентације дуж линија магнетског поља, свака МТБ мора да поседује већи број магнетозома који су у највећем броју случајева организовани у дуге низове у којима су појединачни магнетозоми паралелно оријентисани као што је приказано на Слици 3а, а то је необична појава из једног чисто физичког разлога. Ако би се више појединачних магнетних дипола (магнета) нашла у међусобној близини, они би имали тенденцију да формирају агломерате да би на тај начин постигли енергетски минимум. Дакле, чињеница да су магнетозоми МТБ организовани и распоређени дуж правих линија указује на то да ово није резултат спонтаног процеса већ да ћелије поседују биолошке компоненте које интерагују са магнетозомима и директно утичу на њихов положај у ћелији. Да би одржале сталан распоред и геометријску структуру магнетозомских низова, ћелије користе мрежу филамената који се протежу од магнетозома ка периферији цитоплазме, као што смо претходно напоме-

нули. На тај начин низови магнетозома успостављају контакт са ћелијским скелетом који им пружа механичку подршку. Додатно питање које се овде намеће је како ови низови магнетозома настају.

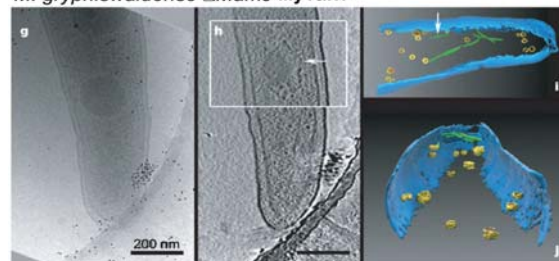
Године 2006. објављен је рад који је понудио објашњење овог процеса и разоткрио идентитет ћелијске компоненте која игра главну улогу.<sup>[19]</sup> Трагајући за протеином са потенцијалном способношћу да интерагује са магнетозомима у геному једне МТБ врсте (*Magnetospirillum gryphiswaldense*), аутори су уочили ген присутан у генетском кластеру са којим смо се упознали на Слици 6, *mamJ*, и који кодира протеин, MamJ, изграђен од 426 аминокиселина, са великим процентом аспарагинске и глутаминске киселине, и репетитивном примарном аминокиселинском структуром. Репетитивност у примарној структури и много киселих аминокиселинских остатака су две особине које су раније описане за друге протеине са улогом у процесима биоминерализације. Зато су Шефел и сарадници су одлучили да детаљно испитају MamJ. Њихов приступ се заснивао на коришћењу трансмисионе електронске микроскопије (ТЕМ) и томографије, у комбинацији са генетским манипулацијама, укључујући производњу мутанта ове бактерије који не поседује MamJ, тј.  $\Delta$ MamJ мутант. Резултати ових испитивања су показани на Слици 7, где се могу видети слике узорка ћелија без и са дилецијом (гена MamJ) снимљене помоћу ТЕМ и томографије. Фасцинантно је уочити детаље које томографска реконструкције разоткрива. Оно што се може јасно уочити је да у одсуству MamJ, ћелије и даље успешно производе магнетозоме, међутим произведени магнетозоми више нису правилно распоређени као у нормалним ћелијама, већ формирају агрегате.

На основу свих експерименталних запажања, аутори су у закључном делу свог рада предложили модел који би објаснио и процес унутарћелијске организације магнетозома и улогу MamJ у њему. Као што је показано експерименталним путем на Слици 7 и шематски илустровано на Слици 8, у овом раду су описане две врсте понашања, једна карактеристична за нормалну ћелију (на енглеском 'Wild type' – WT) приказано на Слици 8 на панелима а) и б), и једна карактеристична за бактерије са делецијом MamJ, приказано на панелима в) и г). На овим панелима, MamJ је приказан као црвена компонента, празни магнетозоми су жути кругови, копоненте ћелијског скелета су приказане као зелена линија, и кристали магнетита у разним фазама раста су илустровани као црни кругови различитих величина. У нормалним ћелијама празни магнетозоми су распоређени дуж цитоплазме и њихов распоред је већ у тим раним фазама биоминерализације магнетита под контролом ћелијског скелета са којим празни магнетозоми интерагују помоћу MamJ. Затим, током раста кристала магнетита укупни магнетни момент магнетозома се повећава и делимично или потпуно формиран магнетозоми почињу да интерагују путем својих магнетних дипола и магнетозомских мембрана, уз помоћ филамената ћелијског

Нормална *Magnetospirillum gryphiswaldense*



*M. gryphiswaldense*  $\Delta$ MamJ мутант



Слика 7. Резултати коришћења крио-електронске томографије за испитивање процеса формирања магнетозомских низова.

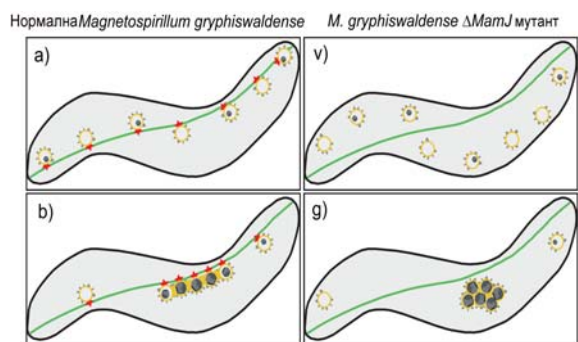
Комплетна слика је репродукована са дозволом од издавача Nature Publishing Group, Macmillan Publishers, Ltd., из текста (Scheffel, A., Gruska, M., Faivre, D., Linaroudis, A., Plitzko, J.M., Schüler, D. (2006) Nature 440, 110). У тродимензионалним реконструкцијама, мембране магнетозома су приказане жуто, ћелијски филаменти су обојени зелено, кристали магнетита црвено и ћелијска мембрана плаво. Нормалне ћелије су приказане на панелима а-ф, а  $\Delta$ MamJ мутант на панелима г-ј. На свим панелима се могу видети различити детаљи процеса стварања магнетозомских низова. Разлике између нормалне ћелије и мутанта су лако уочљиве и јасно се може видети да су магнетозоми у ћелијама са делецијом изгубили способност да интерагују са ћелијским филаментима и стварају низове.

скелета формирају стабилне магнетозомске низове типичне за ове бактерије. У одсуству MamJ, празни магнетозоми немају способност да интерагују са ћелијским скелетом што значи да се потпуно формиран магнетозоми без подршке ћелијског скелета понашају као стални магнети у раствору и уместо формирања низова једноставно стварају неспецифичне агрегате.

## ЗАКЉУЧАК: “ЧЕМУ ОВО СЛУЖИ А УЗ ТО И НЕ РАДИ?”

Епизоде “Микијеве радионице” са којима је аутор овог рада одрастао су се завршавале приказујући Пају Патка како гледа у механизам једне чудне направе пу-





**Слика 8.** Предложени модел за процес формирања магнетозомских низова.

Комплетна слика је репродукована са дозволом од издавача Nature Publishing Group, Macmillan Publishers, Ltd., из текста (Scheffel, A., Gruska, M., Faivre, D., Linaroudis, A., Plitzko, J.M., Schüler, D. (2006) Nature 440, 110). Панели а) и б) описују ситуације предложене за случај нормалних МТБ, док панели в) и г) дају преглед догађаја за бактерије са делецијом MamJ. У свим панелима, MamJ је приказан као црвена компонента, празни магнетозоми су жути кругови, копоненте ћелијског скелета су приказане као зелена линија, и кристали магнетита у разним фазама раста су илустровани као црни кругови различитих величина. Главна разлика између нормалних и мутираних ћелија је да у одсуству MamJ празни магнетозоми немају способност да интерагују са ћелијским скелетом што резултује у формирању неспецифичних магнетозомских агрегата.

не точкава који се окрећу. Након извесног времена, Паја слеже раменима и констатује: “Чему ово служи, а уз то и не ради?”

Могуће је да вас је овај опис магнетотактичних бактерија оставио са утиском да су оне једноставно група неких чудних створења, као што је на пример кљунар, о којима се још увек много што шта не зна и чије истраживање наизглед нема практичну вредност. Хемијска, биохемијска и биолошка испитивања МТБ су мотивисана не само жељом да се ове бактерије боље разумеју само за себе, већ и због практичне чињенице да су МТБ успеле да у процесу еволуционог развоја усаврше процес производње хемијски чистих и униформних наномагнета који имају битан потенцијал за употребу у биотехнологији и нанотехнологији. Неке од области у којима је употреба бактеријских магнетних честица могућа укључују имунолошке анализе, анализу и изоловање ДНК и РНК, процес за магнетну ћелијску сепарацију, детекцију протеинских интеракција и слично. За оне које занимају детаљи могуће употребе МТБ и магнетозома, информације се могу пронаћи у ревијском раду Мацунаре.<sup>[20]</sup>

### ЗА ДАЉЕ ЧИТАЊЕ:

1. Bazylnski, D. and Frankel, R.B. (2004) Nature Reviews Microbiology 2, 217-230
2. Faivre, D. and Schüler, D. (2008) Chimerical Reviews 108, 4875-4898

3. Komeili, A. (2007) Annual Reviews of Biochemistry 76, 351-366.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Walker, M.M., Diebel, C.E., Haugh, C.V., Pankhurst, P.M., Montgomery, J.C., Green, C.R. (1997) Nature 390, 371 - 376
2. Blakemore, R. (1975) Science 190, 377-379
3. Flies, C.B., Jonkers, H.M., de Beer, D., Bosselmann, K., Bottcher, M.E., Schuler, D. (2005) FEMS Microbiology Ecology 52, 185-195
4. Stolz, J.F., Chang, S.-B. R., Kirschvink, J.L. (1986) Nature 321, 849-851
5. Simmons, S.L., Bazylnski, D.A., Edwards, K.J. (2006) Science 311, 371-374
6. Mann, S., Sparks, N., Blakemore, R.P. (1987) Proceedings of the Royal Society of London, Series B: Biological Sciences 231, 469-476
7. a) Frankel, R.B., Blakemore, R.P., Wolfe, R.S. (1979) Science 203, 1355-1356  
b) Frankel, R.B., Papaefthymiou, G.C., Blakemore, R.P., O'Brien, W.O. (1983) Biochimica et Biophysica Acta, Molecular Cell Research 763, 147-159
8. Mann, S., Sparks, N.H.C., Frankel, R.B., Bazylnski, D.A., Jannasch, H.W. (1990) Nature 343, 258-261
9. Gorby, Y.A., Beveridge, T.J., Blakemore, R.P. (1988), Journal of Bacteriology 170, 834-841
10. Schüler, D., Baeuerlein, E. (1998) Journal of Bacteriology 180, 159-162
11. Bazylnski, D., Frankel, R.B. (2004) Nature Reviews Microbiology 2, 217-230
12. Blakemore, R.P. (1982) Annual Reviews of Microbiology 36, 217-238
13. Schüler, D., Baeuerlein, E. (1996) Archive of Microbiology 166, 301-307
14. Calugay, R.J., Miyashita, H., Okamura, Y, Matsunaga, T. (2003) FEMS Microbiology Letters 218, 371-375
15. Scheffel, A., Gardes, A., Grünberg, K., Wannier, G., Schüler, D. (2008) Journal of Bacteriology 190, 377-386
16. a) Grünberg, K., Müller, E.-K., Otto, A., Reszka, R., Linder, D., Kube, M., Reinhardt, R., Schüler, D. (2004) Applied and Environmental Microbiology 70, 1040-1050  
b) Matsunaga, T., Okamura, Y. (2003) Trends in Microbiology 11, 536-541
17. Komeili, A., Vali, H., Beveridge, T.J., Newman, D.K. (2004) Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 101, 3839-3844
18. Komeili, A., Li, Z., Newman, D.K., Jensen, G.J. (2006) Science 311, 242-245
19. Scheffel, A., Gruska, M., Faivre, D., Linaroudis, A., Plitzko, J.M., Schuler, D. (2006) Nature 440, 110-114
20. Matsunaga, T., Suzuki, T., Tanaka, M., Arakaki, A. (2007) Trends in Biotechnology 26, 182-188

### Abstract

#### LIVE COMPASSES: A TALE OF MAGNETOTACTIC BACTERIA

**Milka Kostić**, Cell Press, 600 Technology Square, Cambridge, MA 02139, USA

There exist in a diverse world of microorganism such bacteria that can detect the Earth's magnetic field and use it to navigate towards the desirable environmental conditions. These bacteria are called magnetotactic bacteria, and this article will provide an overview of their unusual magnetic properties and chemistry and biology behind it.





Милена КРСТИЋ, Факултет ветеринарске медицине, Универзитет у Београду  
([milena@vet.bg.ac.yu](mailto:milena@vet.bg.ac.yu))

## МИКОТОКСИНИ – НАША СТВАРНОСТ

Посвећено проф. др Злајану Синовицу, 1958.-2007.

Колико сте пута у кухињи наилазили на буђав хлеб, плесни сир или мрко-браон флеку, као почетак труљења, на воћу? Не једном. Већина од Вас рећи ће да су то плесни или гљивице, али шта су гљивице и колико су оне опасне по здравље људи?

Гљивице су мали организми врло прилагодљиви за живот на и у чврстим подлогама. Развијају мицелијуме и путем спора брзо се размножавају најчешће ваздухом али се не искључују ни вода ни инсекти. Сувоземне гљивице (изузев квасаца) називамо плеснима а токсине које продукују – микотоксинима. У организам животиња и људи доспевају путем хране али и респираторним путем, као и преко коже. Промене тј. болести које изазивају називају се микотоксикозе.

Присуство гљивица у храни познато је мање-више од постанка света. Први забележени подаци о штетним ефектима датирају још од пре 5000 година, у Кини, као последица употребе плесниве хране. Колико тровања микотоксинима могу да буду опасна и широких размера је и пример из Лиможа, Француске, где је као последица микотоксикозе изазване токсинима ражене главице (ергот алкалоиди) умрло око 40 000 људи ("St. Antony fire"). Крајем XIX века у Јапану је након употребе плеснивог пиринча дошло до разних поремећаја код људи, а током Другог светског рата у Русији је велики број људи оболело од алиментарне токсичне алеукије (АТА) изазване житарицама контаминираним плеснима врсте *Fusarium* [1].

Учестала повезаност плесни са болестима нагнано је научнике да се позабаве истраживањима на пољу микотоксина и открију каква су заправо та једињења и шта све она могу.

Микотоксини су природни молекули, мале молекулске масе, секундарни метаболити филаментозних гљивица. До сада је откривено 300-400 различитих једињења класификованих у микотоксине која имају негативан ефекат на здравље људи и животиња. Сама токсичност зависи од дозе и циљне групе. Производи гљивица који су у већој мери штетни за бактерије (као што је пеницилин) називају се антибиотцима. Фитотоксини су метаболити гљивица штетни за биљке, а микотоксинима су названи само они продукти који су токсични за људе и животиње чак и у малим концентрацијама [2]. Аналитичким методама можемо да утврдимо присуство и садржај микотоксина. Међу најчешће примењеним методама су: флуориметрија (флуородензитометрија), капиларна електрофореза, имуноензимске методе (ELISA), као и различите хроматографске методе (GS, HPLC, LC, TLC) од којих је

најчешће до сада примењивана танкослојна хроматографија. Међутим, најслабија карика у тачном одређивању садржаја микотоксина још увек је узимање узорака, обзиром на неједнаку расподелу плесни и токсина у храни.

Храна која је подложна контаминацији микотоксина може бити биљног (житарице, воће, поврће) и животињског порекла (месо, млеко). У храну микотоксини доспевају директно (продукцијом гљивица) или индиректно (већ синтетизовани микотоксин који постаје саставни део намирнице). До синтезе микотоксина од стране гљивица долази када су за то повољни услови средине (рН, температура, влажност), а количина продукције зависи од хемијског састава супстрата, способности брзог развијања и размножавања гљивице, времена инкубације. Оно што је важно за микотоксине то је да када гљивица и нема, односно када се одстране са или из намирнице, они опстају и задржавају своју биолошку активност. Када доспеју у организам микотоксини општењу различите органе, тако да је и најприменљивија подела микотоксина на основу деловања на организам, и то на:

1. Хепатотоксине (афлатоксин, фумонизин) - оштећења јетре, канцерогеност
2. Нефротоксине (охратоксин, цитринин) - оштећења бубрега
3. Естрогене (зеараленон, зеараленол) - естрогена дегенерација репродуктивних органа
4. Неуротоксине (патулин, Т-2 токсин) - оштећења нервног система
5. Цитоксине (трихотецени) - оштећења коже и слузокоже дигестивног тракта
6. Гастроинтерстиналне (Т-2 токсини, афлатоксини, деоксиниваленол) - оштећења јетре и осталих унутрашњих органа
7. Респираторне (трихотецени) - оштећења плућа
8. Имуносупресивне (готово сви микотоксини) - промене и трајна оштећења имунитета

Како ниједна подела није потпуна, прича о микотоксинима заснива се на оним најзаступљенијим и најнепожељнијим.

### АФЛАТОКСИНИ

Продукти рода *Aspergillus*, најчешће *Aspergillus flavus*, ређе *Aspergillus parasiticus* су афлатоксини (AF), група хемијски сличних, дифуранокумаринских деривата. Афлатоксини који флуоресцирају под UV светлом зелено означени су као AFG, плаво AFB група, а они који су утврђени у млеку припадају AFM групи. Спадају у хроматографски врло мобилна једињења, а

и најчешће се одређују хроматографски. Могу се наћи у зранастој храни, споредним производима њихове прераде али и хранивима животињског порекла.

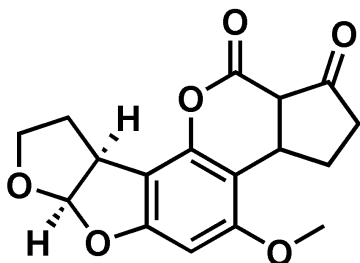
Афлатоксин В<sub>1</sub> је најтоксичнији представник афлатоксина и најјачи је до сада природни канцероген. Приписана су му и мутагена и тератогена својства. АFB<sub>1</sub> се може наћи у кукурузу, кикирикију, пиринчу, коштуњавом воћу [2].



Слика 1. *Aspergillus flavus* на клипу кукуруза

Афлатоксини унети храном брзо доспевају у крвоток, за само 30 минута, а у јетру за један сат. АFB<sub>1</sub> има тенденцију да се депоније у свим меким ткивима као и у ћелијама масног ткива, а највећи степен акумулације је у јетри и бубрезима, органима у којима се врши његова биотрансформација.

Акутна афлатоксикоза резултира смрћу, док хронична узрокује канцер, имуносупресију и друге патолошке промене. Многа истраживања на ову тему давала су различите резултате, а огледи *in vivo* на животињама показала су да су неизвесни сви ефекти и не могу се са сигурношћу повезати са ефектима који би се испојили код људи. Интересантан је случај жене-самоубице која је прогутала 40 mg пречишћеног афлатоксина, а остала у животу наредних 14 година! Сви биохемијски налази урина и крви, као и томографске анализе абдомена, кичме и јетре дали су нормалне резултате. Афлатоксин је манипулативни токсин и потенцијално биолошко оружје. Повезују га са ратом у Ирану, али за то нема поузданих доказа [2].

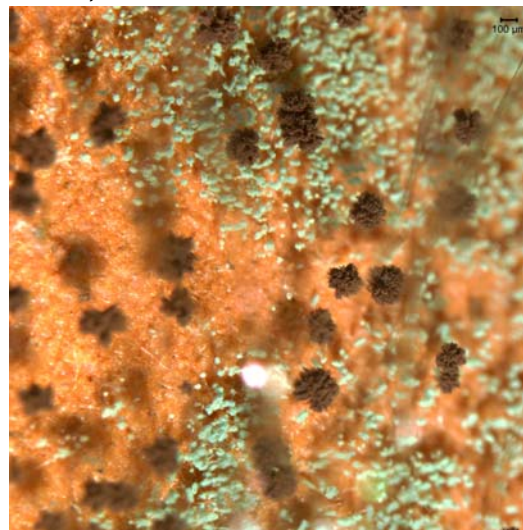


Слика 2. Афлатоксин В<sub>1</sub>

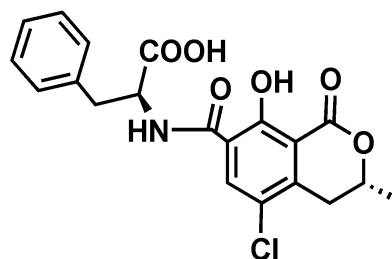
## ОХРАТОКСИНИ

Охратоксини (ОТ) су изокумаринска једињења, производи метаболизма гљивица рода *Aspergillus* (*A. ochraceus*, *A. alliaceus*, *A. niger*) и *Penicillium* (*P. verrucosum*, *P. palitans*). До данас је идентификовано

више форми од којих су најпознатије ОТА, ОТВ, ОТС, ОТ $\alpha$  и ОТ $\beta$ .



Слика 3. *Aspergillus niger*



Слика 4. Охратоксин А

Контаминирају различите производе као што су житарице, кафа, зачини, брашна, сушено воће, махунарке, вино, пиво, воћне сокове, а могу се наћи и у месо и месним прерађевинама. Најпознатији међу охратоксинима, охратоксин А (ОТА) је први пут изолован 1965. године, као производ *Aspergillus ochraceus*. Сви охратоксини токсични су за бубреге, али и за јетру. Осим тога, за ОТА је доказано да испољава имуносупресивну активност, потенцијално је тератоген и канцероген. Повезан је са болешћу код људи назване „ендемска балканска нефропатија“, прогресивном хроничном нефропатијом, са појавом тумора уринарног тракта, на подручју дунавске регије, тј. делова Румуније, Бугарске, Босне али и Србије. Ова болест је непознате етиологије и нагађања су да је ОТА један од могућих узрока њеног настанка и прогреса [3].

Експертски комитет за адитиве на нивоу Светске здравствене организације (JEFCA) спровео је истраживање у Хонг Конгу о уносу ОТ путем различитих намирница. Подаци су следећи: 3,88 ng/kg телесне масе ОТ /недељно за средњошколце, односно 8,97 ng/kg телесне масе /недељно за одрасле, што спада у релативно низак унос у односу на толерантну дозу од 100 ng/kg [4]. Узимајући у обзир намирнице које су узете у испитивање, као и количине (Табела 1.) треба добро размислити где ћемо и да ли ћемо попити више шоља кафе или чаја на дан-колико смо се приближили лимиту; не

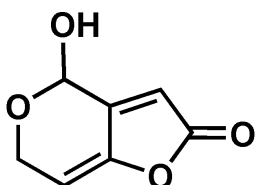
заборављајући при томе поднебље које нагиње овим микотоксиколама.

Табела 1. Унос хране код средњошколаца (ЈЕФСА)

Намирнице	Количина (г/дневно)
Житарице и производи од житарица	495,3
Махунарке и њихови производи	121,2
Месо, живина и њихове прерађевине	171,3
Чоколада	11,3
Свеже воће	0,6
Воћни сокови	119,1
Кафа & чај	133,9

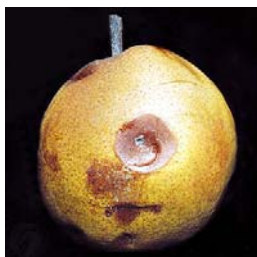
## ПАТУЛИН

Још један микотоксин кога продукују гљивице рода *Penicillium* (*P. urticae*, *P. griseofulvum*) и *Aspergillus* је патулин (Слика 5.).



Слика 5. Патулин

Први пут изолован далеке 1940. године као продукт *Penicillium patulum* и окарактерисан по својим антимикробним својствима, да би му педесетих година прошлог века била приписана антивирусна и антипротозоална активност. Али, патулин се показао и као токсин како за биљни тако и за животињски свет. Употребљиван на почетку као антибиотик, он је прекласификован као микотоксин. Испитивања на лабораторијским животињама показала су канцерогеност овог микотоксина, док у мањим дозама изазива стомачне тегобе, мучнину, хеморалгије и улцерације [2].



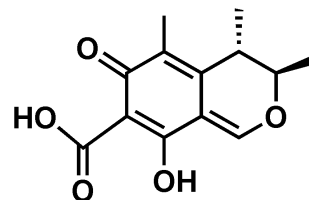
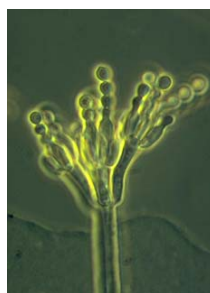
Слика 6. *Penicillium expansum* на крушци

*Penicillium expansum* (слика 6.) или плава плесан која продукује патулин чести је становник јабука, крушака, трешњи и осталог воћа али и поврћа, житарица као и хране за животиње. Најчешће је присутан у воћним соковима, првенствено од јабуке. Алкохолним врењем патулин се уништава, али не и пастеризацијом. Најосетљивија популација на патулин су деца, управо због сокова и кашлица које се производе на бази воћа и поврћа. Светска здравствена организација

(WHO) је прописала лимит од 10 ppb или 10  $\mu\text{g/l}$  патулина у воћним соковима и храни за бебе [5]. Неопходно је рећи и то да треба водити рачуна о исправности намирница и контроли квалитета како би се избегле нежељене последице.

## ЦИТРИНИН

Изолован по први пут из *Penicillium citrinum* (слика 7.), али и као токсин рода *Aspergillus*, цитринин (слика 8.) је микотоксин који може бити присутан у широкој лепези намирница. Продукује га и *Penicillium camemberti* (користи се у производњи сирева), као и *Aspergillus oryzae* (употребљава се за производњу сакеа, миса и соја соса), контаминира намирнице као што су пшеница, овас, раж, јечам, кукуруз и пиринач.



Слика 7. *Penicillium citrinum* Слика 8. Цитринин

Присутан је махом у вегетаријанској храни, али је доказано његово присуство и у домаћим кобасицама, у Италији! Окарактерисан је као нефротоксичан у свим тестовима на животињама, док акутна токсичност зависи од врсте. Синергизам са охратоксином А изазива депресију РНК синтезе у бубрезима. Недовољна испитаност или недостатак пажње усмерене на овај токсин и те како присутан у свакодневној исхрани, оставља велики знак питања на значај и последице по људско здравље [2].

## ЗЕАРАЛЕНОН

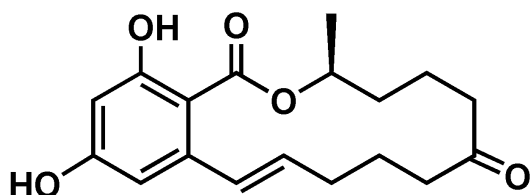
Зеараленон или F-2 токсин спада у фитоестрогена једињења које у основи своје хемијске структуре има фенолно језгро и врло је сличан  $17\beta$ -естрадиолу. Продукт је гљивице рода *Fusarium* (*F. graminearum*, *F. cerealis*). Ове гљивице контаминирају зрна житарица још у пољу, а продукција токсина се наставља и даље током складиштења. Намирнице које су подложне контаминацији су пре свих кукуруз, али и јечам и пшеница.



Слика 9. *Fusarium graminearum*



Након уношења F-2 токсин се брзо и лако ресорбује. У плазми је већ након 30 минута, а акумулира се у јетри. У јетри се и метаболише у зеараленол, који као  $\alpha$  форма има већу биоактивност од осталих метаболита. Интересантно је да се осим фећесом и урином, зеараленон излучује и млеком и то само 42-44 часа након контаминације, а екскреција се врши наредних 5 дана по престанку уношења контаминираних хране! Органи где се дистрибуирају зеараленон и његови метаболити су утерус, црева, тестиси, оваријуми и масно ткиво. Оштећења и патолошке промене примећене су у облику цистичних формација, а негативно делује и на сперматогенезу [1].



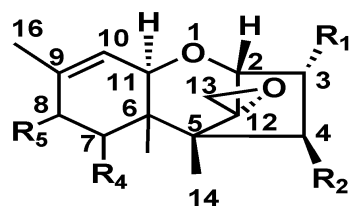
Слика 10. Зеараленон

Међутим, овај микотоксин је мање токсичан од осталих што се објашњава његовом сличношћу са естрогеним хормонима. Редуковани облик зеараленон, зеараленол, у мањим дозама повећава естрогену активност. Синтетски добијено ово једињење има и комерцијални назив ЗЕАРАЛЕНОЛ, и успешно се користи као анаболик код неких животиња. Његова примена је и у ублажавању постменопаузалних тегоба код жена. Зеараленол и његови деривати патентирани и као орални контрацептиви, што само потврђује танку линију између корисног и штетног [2].

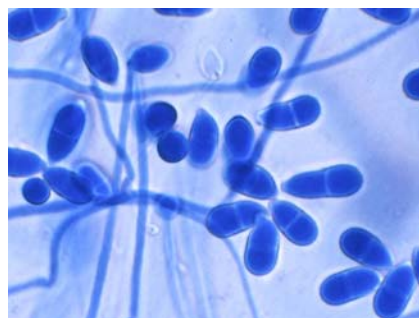
## ТРИХОТЕЦЕНИ

Трихотецени су најчешће метаболити гљивица рода *Fusarium*, *Myrothecium*, *Stachybotrys*, *Trichoderma* и обухватају велику групу више од 60 секвитерпеноида. Назив ових микотоксина потиче од првог који је изолован-трихотецина. Сви трихотецени садрже 12,13-епокситрихотеценски скелет и двоструку везу у различитим положајима прстена (Слика 11.), и могу бити макроциклични или не-макроциклични у зависности од естра којим је супституисан прстен. Не-макроциклични трихотецени су подељени у две групе, групу А (Т-2, неосоланиол, деацетоксискирпенол) која има водоник или естар везан за С-8 атом прстена и групу Б (фузаренон-х, ниваленол, деоксиниваленол) који садрже кето групу. Контаминенти су зрнастих хранива (пшеница, јечам, кукуруз, соја, пиринач) али се могу наћи и у споредним производима њихове прераде. Могу бити присутни и у сунцокрету, кикирикију, кромпиру, банамама, као и у многим другим намирницама. Отпорни су на температурне промене, временске услове, слабе киселине и базе, веома су стабилни.

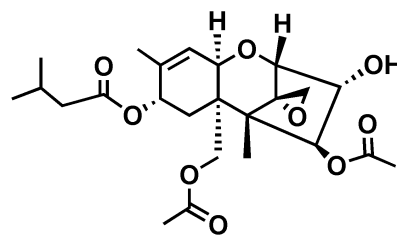
Трихотецени су екстремно потенцијални инхибитори синтезе протеина еукариотских ћелија, репликације ДНК. Познат је случај интоксикације људи и животиња у Јапану, приписане *Fusarium* микотоксикоза-



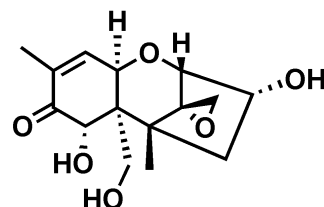
Слика 11. Општа формула трихотецена



Слика 12. *Trichotecium*



Слика 13. Т-2 токсин



Слика 14. Деоксиниваленол

ма. Присутност микотоксина гљивице *Fusarium graminearum* потврђена у јечму, зоби, ражи и пшеници, сматра се узроком болести "црвене буђи" (Акакаби токсикоза). Диоксиниваленол је један од најчешће присутних микотоксина у зрнелу и за животиње је назван фактором одбијања хране [2]. Код људи изазивају хеморагије, а у директном контакту дерматитис.

Алиментарна токсична алеукија (АТА) у људској популацији, повезана је са присуством трихотецена у храни и праћена је упалним процесима на кожи, повраћањем и оштећењима хепатопоеетског ткива. Ова болест имала је своје жртве у XIX веку у Русији, а потврђена је и током Другог светског рата на ширем подручју СССР-а [1].

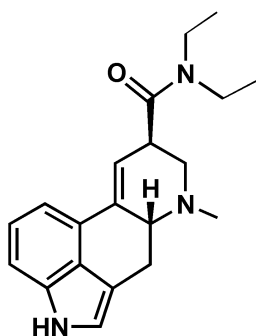
Макроциклични трихотецени продукти су гљивица рода *Myrothecium*, *Stachybotrys* и *Trichotecium*. Неки од њих, као што је глутинозин, поседују антимикробна својства, док са друге стране *Stachybotrys* токсини су изазвали токсикозе са леталним исходом код



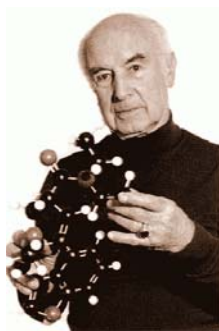


гангрена, абортуси, конвулзије, атаксија, хиперсензибилитет као и супресија лактације [2].

Међутим, управо су абортуси код животиња изазвани ергот алкалоиди нагнали народну медицину да примени исти третман и на жене и употреби их за изазивање контракција материце [6]. Ту се не завршава прича о примени ових једињења. Комбиновањем различитих пептида са лизергинском киселином, Hofmann је у Сандоз Лабораторији у Швајцарској по први пут синтетисао ергобазин. Даљим синтезама добио је укупно 25 деривата лизергинске киселине, а двадесет пети био је диетиламид-D-лизергинске киселине (LSD-25). Године 1943. нехотичним уносом ове супстанце у организам, открио је његова халуциногена својства, а LSD је избацио у орбиту психијатријских лекова [7].



Слика 19. LSD



Слика 20. Albert Hofmann

Безуспешно је примењиван у лечењу шизофреније, а помиње се и као серум истине који је примењивала ЦИА. Ерготамин се данас примењује као фармаколошки препарат у лечењу мигрене и алкохолизма [8], док његови деривати имају примену и као инхибитори пролактина, у лечењу Паркинсонове болести као и неких случајева цереброваскуларне инсуфицијенције. На крају приче о LSD-у не може се заобићи његово халуциногено и опуштајуће дејство у малим дозама, док је у већим проблем који ово једињење сврстава у савремене и опасне дроге. Али, како су дозе ипак битне, граница између штетног и корисног често бива злоупотређена [2].

## МИКОТОКСИНИ ДАНАС

Савремена прича о микотоксинима се ту не завршава. У последње време помињу се као фактори болести затвореног простора. Све више у окружењу постоје подлоге које су погодне за раст и развој гљивица, почевши од хране преко намештаја, дрвених подлога, клима уређаја и слично. Услови у којима живимо често постају потенцијални извори обољења. Респираторне инфекције, иритације очију, коже, главобоље, неспецифичне хиперсензибилне реакције само су почетак низа идентификованих обољења непознате етиологије које се доводе у везу управо са микотоксинима. Токсична гљивица, *Stachybotrys* помиње се као најчешће присутна у човековом окружењу [2, 9].

Друга, али не мање битна сфера злоупотребе микотоксина је биотероризам. Сазнања о великој ток-

сичности ових једињења ратну индустрију је са производње класичног оружја преbacило у лабораторије. Афлатоксин, као један од најмоћнијих међу њима, био је на програму ирачких научника 1980. године. Његова могућност селективне употребе против одређених етичких или верских група могла би да доведе чак и до истребљења! Налик афлатоксину, други по реду су трихотецени на које се одмах по контакту јављају реакције организма, док је само неколико милиграма Т-2 токсина летална доза. Могућност њиховог мешања са храном и доступност, микотоксине баца у орбиту веома опасних молекула [2]. Године 1972. у селима Лаоса и Камбоџе, помиње се “жута киша” која је била катастрофална за становништво у подручјима на којима је она пала. Ретки преживели сведоче о авионима који су бацали жути прах што је за последице имало унутрашња крварења, пликове по кожи и слично. Касније се, на основу симптома и дошло до открића да је у питању употреба микотоксина из групе трихотецена, а тадашњи Совјетски Савез био је оптижен за употребу био лошког и хемијског оружја [10]. Међутим, све се свело само на оптуживања без одговорности...

Табела 2. Дозвољене количине појединих микотоксина у храни за људску употребу,  $\mu\text{g}/\text{kg}$

Микотоксин	количина, $\mu\text{g}/\text{kg}$
Афлатоксин	4-15
Охратоксин А	2-10
Патулин	10-50
Деоксиниваленол	200-1750
Зеараленон	20-200
Фумонизини	200-2000

На крају приче о микотоксинима треба рећи да су они саставни део околине, да улазе у ланац исхране још у пољу, на и у биљкама, складиштењем се њихова количина може повећавати и на крају доспевају до крајњег одредишта-организма. Микотоксикозе се тешко доказују, само присуство гљивица и буђи не значи и присуство микотоксина. Са друге стране, гљивице не морају бити присутне, али су микотоксини излучени и њих има. У условима лабораторијских испраживања лако је наћи везу између узрока и последице, да је микотоксин изазвао тровање, канцер, хеморагије. Услови средине и начин живота су склоп разних чинилаца који не могу јасно и да укажу на разлоге, већ су видљиве последице. Чињеница да су микотоксини и те како битни доводе нас до контроле квалитета и спречавања настанка погодне средине за њихово стварање. Хемија, као и медицина још траже њихово место, између корисног и штетног. На нама је да postanемо свесни њиховог неизоставног присуства свуда око нас.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Синовец, З., Ресановић, Р., Синовец, С. Микотоксини, појава, ефекти и превенција, Факултет ветеринарске медицине, Београд, 2006.

- Bennet, J. W., Klich, M. *Clin. Microbiol. Rev.*, **16** (2003), 497.
- Stefanović, V., Tončeva, D., Atanasova, S., Polenaković, M., *Am. J. Nephrol.*, **26** (2006), 1.
- [http://www.fehd.gov.hk/safefood/report/och\\_a2/images/cfs\\_news\\_ras\\_23\\_och.pdf](http://www.fehd.gov.hk/safefood/report/och_a2/images/cfs_news_ras_23_och.pdf)
- COMMISSION REGULATION (EC) No 1881/2006, Official Journal of the European Union, L 364/5.
- Riddle, J. M. *Eve's Herbs*, Harvard University Press, 1999.
- Dyck, E. *Can. Biochemists*, **29** (2007), 20.
- Mangini, M. *J. Psihoac. Drugs*, **30** (1998), 381.
- Jarvis, B. B., Miller, D. J. *Appl Microbiol Biotechnol* **66** (2005), 367.
- Meselson, M., Robinson, J. P. *The Yellow Rain Affair: Lessons from a Discredited Allegation*, Stanford University Press, 2008.

## Abstract

### MYCOTOXINS

**Milena KRSTIĆ**, Department of Chemistry, Faculty of Veterinary Medicine, University of Belgrade

*In memoriam to prof. dr Zlatan Sinovec, 1958-2007*

Mycotoxins are secondary metabolites produced by saprophytic species of fungi. They exert toxigenic activity, including carcinogenicity, immunosuppression, inhibition of protein synthesis, dermal irritation and many other metabolic problems.

Mycotoxins usually enter into the body by ingestion of contaminated food, inhalation of toxigenic spores and direct dermal contact. Molds may be present into substrat without production toxin. When mycotoxins are detected, it is not easy to prove a disease. In any way, mycotoxins are danger to human and animal health. Description of appearance, toxic profiles and chemical structures of main mycotoxins are reviewed.



Иван ГУТМАН, Природно-математички факултет Крагујевац (e-mail: gutman@kg.ac.rs)

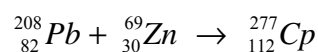
## ЕЛЕМЕНТ 112 ЗОВЕ СЕ КОПЕРНИЦИЈУМ

Елемент редног броја 112, први пут синтетизован још 1996. године, зваће се коперницијум и имаће симбол Ср. Назван је у част Николе Коперника.

### ЕЛЕМЕНТ 112

Елемент редног броја  $Z=112$  синтетизован је још 1996. године; детаљи о томе могу се наћи у чланцима<sup>1,2</sup> објављеним у *Хемијском прегледу*, као и у тамо цитира-ној литератури. У најкраћим цртама, било је то овако.

У немачком граду Дармштату постоји научни институт чије име је (у преводу) "Удружење за истраживање тешких јона". Тамо су били изграђени уређаји за производњу и убрзавање снопова вишеструко наелектрисаних јона тешких елемената (на пример, јона  $Zn^{30+}$ ), којима се бомбардују мете састављене од још тежих елемената. У нуклеарним реакцијама изазваним сударима јонова и мете, настају најтежи (до тада непостојећи) хемијски елементи. На тај начин, у Дармштату су у осамдесетим и деведесетим годинама прошлог века добивени елементи редног броја  $Z=107$ ,  $Z=108$ ,  $Z=109$ ,  $Z=110$ ,  $Z=111$ , да би 9. фебруара 1996. године био добивен и први атом елемента  $Z=112$ . Он је добивен у судару јона цинка-69 са метом од олова-208:



У ствари, у том експерименту детектован је само један једини атом елемента 112, а и он је постојао сам 280 милионитих делова секунде. Експеримент је извела екипа састављена од 21 научника из Финске, Немач-

ке, Русије и Словачке. Руководиоци су били немачки физичари Петер Армбрустер и Зигурд Хофман (Peter Armbruster, Sigurd Hofmann). Две године касније, у руском нуклеарном институту у Дубни добивена су још два атома елемента  $Z=112$ .

### КОПЕРНИЦИЈУМ

Док није добио своје коначно име, одобрено од стране Међународне уније за чисту и примењену хемију (IUPAC), елемент  $Z=112$  се привремено називао *унундијум*. Традиција је да онај ко открије (или, у нашем случају, синтетизује) нови хемијски елемент има право да му одабере и име.

У случају унундијума требало је да протекне више од тринаест година да би IUPAC-ова комисија установила да је он заиста добивен. Нема сумње да је разлог за толику спорост био то што је до сада експериментално доказано постојање само неколико атома тог елемента, који живе краће од хиљадитог дела секунде. Напокон, 11. јуна ове године, IUPAC-ова комисија је донела одлуку да призна откриће унундијума и упути ла писмо Зигурду Хофману са молбом да предложи његово коначно име. [Петер Армбрустер се у вези именовања елемента  $Z=112$  не помиње. Можда зато јер је рођен 1931. и по свему судећи већ дуже време је у пензији.] Хофман је 14. јула ове године предложио да се елемент  $Z=112$  назове *коперницијум* (елглески: copernicium), те да му хемијски симбол буде Ср. Овај предлог ће свакако бити званично прихваћен, мада ће

IUPAC-овој администрацији за то бити потребно још извесно време.



Слика 1. Николај Коперник (1473-1543). Његово латинизирано име је Nicolaus Copernicus, а код нас се обично назива Никола Коперник.

## КОПЕРНИК

Читаоцима *Хемијској њреїледа* не треба посебно објашњавати да је елемент 112 назван у част Николе Коперника. Ипак, вреди рећи следеће:

Миколај (тачније: Миколај) Коперник рођен је 1473. године у Торунју у ондашњој Прусској, а данашњој Пољској. По обичајима онога времена користио је и латинизирану верзију свог имена - Nicolaus Copernicus. Код нас се он обично назива Никола Коперник.

Никола Коперник је био свестрани геније. Највише се бавио математиком, астрономијом, канонским правом и медицином. Његово највеће дело је књига *De revolutionibus orbium coelestium* (*О кретањима небеских тела*), која је објављена 1543. године, исте године када је Коперник и умро. У том делу је показао да Земља није центар свемира, него небеско тело које се,

заједно са другим планетама, окреће око Сунца. Коперников хелиоцентрични систем представља једну од највећих револуција у науци. Да не дужимо, цитираћемо Гетеа: "Од свих открића и схватања, ни једно није имало већи утицај на људски дух од Коперникове учења."

Додајмо још само то да је Коперник прва особа која није дала никакав допринос хемији и/или физици, по којој је назван један хемијски елемент.

## ДА СЕ ПОДСЕТИМО

У већини наших школа периодни системи елемената (ако их уопште имају) су застарели и у њима нису уписани најтежи данас познати хемијски елементи. Зато овде наводимо имена, симболе и годину открића ових најтежих елемената.<sup>2,3</sup>

- Z=101 менделевијум Md (1958)
- Z=102 нобелијум No (1965)
- Z=103 лоренцијум Lr (1971)
- Z=104 радерфордијум Rd (1969)
- Z=105 дубнијум Db (1970)
- Z=106 сиборгијум Sg (1974)
- Z=107 боријум Bh (1981)
- Z=108 хасијум Hs (1984)
- Z=109 мајтнеријум Mt (1982)
- Z=110 дармштатијум Ds (1994)
- Z=111 рендгенијум Rg (1994)
- Z=112 коперницијум Cp (1996)
- Z=113 "унунтријум" (привремено) (2004)
- Z=114 "унунквадијум" (привремено) (1999)
- Z=115 "унунпентијум" (привремено) (2004)
- Z=116 "унунхексијум" (привремено) (2006)
- Z=117 није добивен
- Z=118 "унуноктијум" (привремено) (2006)

## Abstract

### ELEMENT 112 IS NAMED COPERNICIUM

Иван Гутман, Faculty of Science Kragujevac

The name copernicium and symbol Cp has recently been proposed for element 112. The history of the discovery of copernicium and details relevant for its naming are briefly outlined. A list of names, symbols, and years of discovery of the heaviest chemical elements is provided.

## ЛИТЕРАТУРА

1. И. Гутман, *Хем. њреїлед* 37 (1996) 73.
2. И. Гутман, Р. Ковачевић, *Хем. њреїлед* 45 (2004) 85.
3. И. Гутман, *Хем. њреїлед* 48 (2007) 142.





Бранко Ј. ДРАКУЛИЋ, Центар за хемију – ИХТМ, Универзитет у Београду  
e-mail: bdrakuli@chem.bg.ac.rs

## У ТРОДИМЕНЗИОНАЛНОМ СВЕТУ МОЛЕКУЛА. 3Д СТРУКТУРЕ МАЛИХ МОЛЕКУЛА – КАКО ИХ ГЕНЕРИСАТИ И ГДЕ ИХ НАЋИ НА ИНТЕРНЕТУ?

*Ово је трећи наставак наше приче зајочетје у бројевима 1/2008 и 4/2008 Хемијској Прејледа о визуализацији 3Д стурктуру молекула. У овом тексту ћемо видети како да генеришемо 3Д стурктуру малих молекула и где се базе података које садрже такве стурктуру налазе на интернету. Што се тиче последње, списак који ћете овде наћи никако није свеобухватан зато што није циљ овог текста. Изабрао сам базе података које читаоци омогућавају да лако и директно дођу до стурктуру која је интересна, и уједно нуде припремљене 3Д стурктуру молекула које могу да послуже за учење. Детаљно су описани инсталација и руковање појединим (бетајним и ланалним) програмским пакетима. Као и претходна два и овај текст је јавно намењен ученицима основних и средњих школа, као и њиховим професорима који су циљна група наше часописа.*

*Шта је поједино:*

У претходна два наставка смо говорили о томе где наћи програме за цртање формула и визуализацију 3Д структура, ти програми су нам сада потребни. Поред интернет претраживача које сигурно имате (Mozilla Firefox и Internet Explorer) са инсталираним Јава софтвером (<http://java.com/en/download/index.jsp>), који у највећем броју случајева долази са основном инсталацијом претраживача; потребан је и Chime Plug-ин за визуализацију 3Д структура. Наједноставније је га преузети са једне од веб страна које овде описујемо - <http://bioinformatics.charite.de/superdrug/>, кликните на линк MDL Chime<sup>1</sup> који се налази негде на половини ваше десне (шире) стране екрана, програм ћете преузети са следеће стране и инсталирајте га (self executing). Да би плуг-ин радио и у Internet Explorer-у и у Mozill-и, идите на ваш диск на коме су Program Files (обично диск C), затим Internet Explorer\Plugins\ и одатле прекопирајте фајл prchime.dll у директоријум Program Files\Mozilla Firefox\Plugins\. Рестартујте оба browsera зато што се плуг-ин апликације “подижу” када се browser отвори. Још нам је потребан програм Jmol<sup>2</sup> доступан са: [http://sourceforge.net/project/showfiles.php?group\\_id=23629](http://sourceforge.net/project/showfiles.php?group_id=23629). И Chime плуг-ин и Jmol нуде много напредних могућности које овде нећемо дискутовати, поиграјте се мало и откријте шта

све програми који сте управо инсталирали могу да ураде.

*Генерисање 3Д стурктура:*

Најлакши начин да жељену 3Д структуру генерисете је да направите запис у SMILES нотацији (ХП 1/2008) и из њега добијете 3Д структуру. SMILES можете генерисати у ACD Labs ChemSketch програму (ХП 1/2008) или директно на интернет страни:<sup>3</sup> [http://www.molecular-networks.com/online\\_demos/corina\\_demo.html](http://www.molecular-networks.com/online_demos/corina_demo.html) са које ћемо ми генерисати 3Д структуру. Кликните на “Create Molecule”, отвориће се “прозор” за цртање формула. Нацртајте 2Д структуру молекула. Када сте задовољни како ваша структура узгледа, кликните на “Transfer”, а затим “Submit” у основном прозору browser-a. Структура је скоро тренутно генерисана. У прозору browser-a је можете увећавати и смањивати, ротирати. Да би је трајно сачували, кликните на линк испод структуре и сачувајте фајл са именом који желите. Ово можете поновити са произвољно великим бројем молекула (саветујем вам да их све чувате у једном директоријуму). Све сачуване молекуле сада можете отворити у DS Visualizer-у 1.7 (ако сте програм преузели када сте прочитали текст у броју 4/2008) или DS Visualizer-у 2.0<sup>4</sup> ако програм преузмите пошто прочитате овај текст. И програм Jmol који сада имате у рачунару (претходни параграф) отвара овакве фајлове, наћи ћете га у списку програма вашег рачунара. На слици 1 је неколико мојих предлога, свакако слободни сте да цртате и у 3Д преводите молекуле који се вама свиђају.

*“Готови” 3Д молекули:*

На интернету можете наћи велики број база података од којих опет, свака нуди преузимање (download) великог броја молекула. Такве базе података су иако бесплатно доступне, корисне за мало напредније кориснике који циљно траже структуре одређених особина. Да би избегли сваку забуну, овде дискутујемо неколико база података које почетницима могу бити корисне: <http://www.chemistry.nmsu.edu/studntres/Molecules/>

Ово је веб страна универзитета у Новом Мексику (САД) која нуди око 190 молекула, што неорганских, што органских – почевши од воде до двоструке увој-

<sup>1</sup> <http://www.symyx.com/downloads/index.jsp>

<sup>2</sup> Jmol: An open-source Java viewer for chemical structures in 3D. <http://www.jmol.org/>

<sup>3</sup> Sadowski J., Gasteiger J. From atoms and bonds to three-dimensional atomic coordinates: automatic model builders. Chemical Reviews 93, 1993. 2567-2581.

<sup>4</sup> <http://accelrys.com/downloads/freeware/index.html>

нице ДНК. Сваки молекул се може сачувати – кликните десним мишем на панел на којем је молекул приказан \File\Save As и молекул сачувајте са екстензијом PDB или MOL.

<http://www.nyu.edu/pages/mathmol/library/>

База података универзитета у Њујорку. На страни до које прво долазите када прекопирате овај линк у browser постоје систематизоване групе молекула, од воде до лекова. Сваки од молекула се може сачувати као PDB фајл, видети са Jmol или Chime плуг-ином.

Када погледате списак молекула на оба описана сајта, запазићете да су молекули одабрани тако да добро покривају програм хемије средњих школа, па су и те како погодни за учење. На сајту 3Д молекула универзитета у Њујорку можете видети и преузети 3Д структуре свих природних аминокиселина, угљених хидрата, нуклеотида, из њих насталих аденозинмонофосфата (AMP), аденозинтрифосфата (ATP) и гуанозинтрифосфата (GTP), молекула у којима сваки живи организам складишти енергију потребну за све биохемијске процесе који се у њему тренутно одвијају. Ту је и неколико важних виших масних киселина, као и из њих насталих молекула који су важни саставни делови ћелијских мембрана.

Сада идемо даље и долазимо до много богатије базе података:

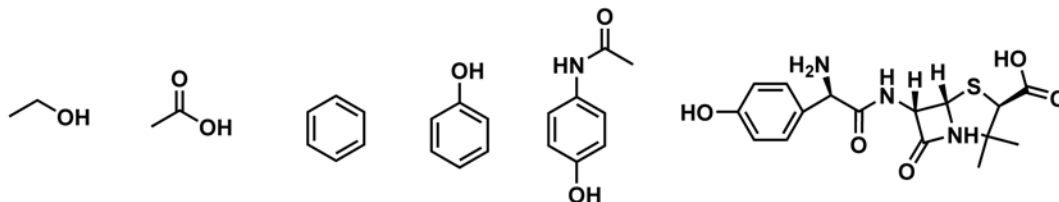
<http://bioinformatics.charite.de/superdrug/>

Овај сајт је створила и одржава група професионалних биоинформатичара и математичара из Немачке (Structural Bioinformatics Group).<sup>1</sup> Садржи ~ 2400 3Д структура лекова и много конформација за сваки флексибилни молекул (поново погледајте текст у броју 1/2008). Да покушамо да изаберемо молекуле који нас интересују. Можемо тражити по имену лека (пазите да користите енглеску транскрипцију), на пример: aspirin, ranitidine (антацид, који блокира H<sub>2</sub> хистаминске рецепторе и смањује лучење желудачне киселине). Резултат ћете добити и ако тражите по имену лека који садржи две или више активних компоненти, нпр. захтев bactrim (у основи сулфа препарат за лечење бактеријских инфекција и свакако лек који вам је лекар бар једанпут преписао када сте били болесни) ће

дати структуре обе компоненте - сулфаметаксозол и триметоприм. Ако једноставно немате идеју шта да тражите, нацртајте структуру која вас интересује (Build your own structure) и тражите структуре које су сличне или садрже структурне делове идентичне вашој нацртаној.

Занимљиво је да погледамо како резултат претраживања изгледа. Када добијете резултат кликните на FULL и добићете 3Д структуру која се може сачувати. Да погледамо шта смо још добили, ако кликнете на conformers добијате скуп реалних конформација<sup>2</sup> и сваки конформер можете посебно сачувати. Јако добар начин да 3Д структуре молекула, које вам се из неког вама знаног разлога свиђају или мислите да могу бити корисне, сачувате је да молекул прекопирате директно у програм за 3Д визуализацију. Кликните десним мишем одмах поред 3Д структуре у browser-у и идите на Edit\Copy; затим отворите DS Visualizer, идите на File\New 3D Window, а затим на Edit\Paste. Затим сачувајте фајл са жељеним именом.

Испод сваке 3Д структуре у browser-у је врло детаљна листа која укључује системско хемијско име, бруто формулу молекула, терапијску категорију којој лек припада, (вероватна сва) комерцијална имена под којима се лек продаје у свету и блок врло важних особина за сваки молекул. Овде ћемо се мало задржати. Оно што вам је свакако познато у оквиру тог блока је (релативна) молекулска маса – molecular weight. Да погледамо како изгледају још три важне особине сваког молекула. Прво број донора (HBD) и акцептора (HBA) водоничне везе. Знамо да се водонична веза у органским молекулима ствара између водоника који је везан за хетероатом (N, O, S), на пример ако молекул садржи хидроксилну (-OH), амино (-NH<sub>2</sub>) или сулфацидрилну групу (-SH), и хетероатома другог или истог молекула. Ово све ако су молекули или делови молекула довољно близу један друге (хетероатоми удаљени до ~ 4 Å) и ако су у простору повољно оријентисани. Шта значи повољно? Сваки хетероатом који је акцептор водоничне везе има слободне електронске парове (lone pairs), који су оријентисани на одређени начин. Ако је такав атом sp<sup>3</sup> хибридризован онда су слободни електронски парови на рогљевима тетраедра (нпр. код sp<sup>3</sup> O, два или код sp<sup>3</sup> N један),<sup>3</sup> ако је хетеро-



Слика 1. Са лева на десно: етанол, сирћетна киселина, бензен, фенол, парацетамол (сећате га се из предходна два текста), амоксицилин.

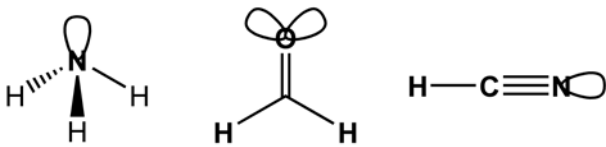
<sup>1</sup> Goede A., Dunkel M., Mester N., Frömmel C., Preissner R. SuperDrug: a conformational drug database. *Bioinformatics* 21, 2005, 1751-1753.

<sup>2</sup> Све приказане конформације су реалне, односно имају (израчунату) енергију до 20 kcal/mol већу од конформације са најнижом релативном енергијом (значи најстабилнијом).

<sup>3</sup> Да будемо довољно прецизни, нешто новија квантно механичка израчунавања показују да слободни електронски парови sp<sup>3</sup> O стоје један у односу на други под углом од ~ 90°. Значи да се такав угао разликује од "идеалног" тетраедарског (109° 28') за ~ 19.5°.

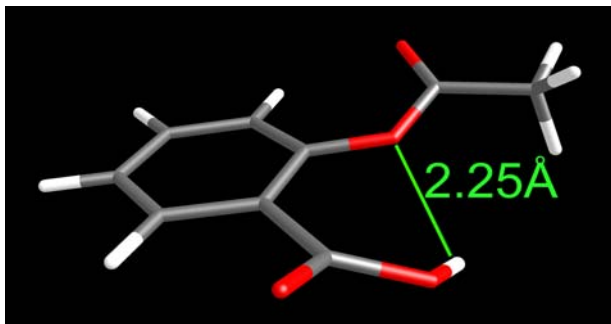


атом  $sp^2$  хибридуван онда су слободни електронски парови у правцу  $sp$  хибридних орбитала, значи мање више на рогљевима троугла (Слика 2). Најјача водонична веза се остварује ако су веза хетероатом-Н који учествује у водоничној вези и слободни електронски пар на хетероатому који прима водоничну везу на једној замишљеној правој линији.



Слика 2. Усмереност слободних електронских парова у амонијаку, формалдехиду и цијановодоничној киселини.

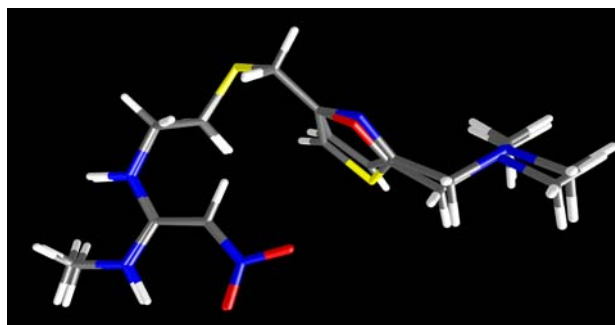
Е сада када смо се подсетили како изгледа водонична веза можемо да пребројимо све НВД и НВА у неколико изабраних молекула (изаберите их сами). Неко ко пажљивије чита овај текст ће лако закључити да нам зато није потребна 3D структура молекула, НВД и НВА можемо пребројати и из структурне формуле (2D) – тачно. Али шта је са интрамолекулским водоничним везама? Потражите аспирин и погледајте конформер 4. Прекопирајте тај конформер у DS Visualizer и идите на Structure\Monitor\Hbond, видећете да се између естарског О и карбоксилатног Н може створити водонична веза. Сада држећи Shift на тастатури кликните на естарски О, и карбоксилни Н. Пустите Shift и идите на Structure\Monitor\Distance, добијате 2.25 Å (Слика 3).



Слика 3. Конформација аспирина у којој је могуће формирање интрамолекулске водоничне везе.

Поновите ово са лимунском киселином (citric acid) и идентификујте конформере код којих је могуће стварање интрамолекулске водоничне везе. Претпостављајте да је ситуација још сложенија код већих и флексибилних молекула. Број НВД и НВА је једнак код сваког конформера као и када тај молекул претстави те 2D структурном формулом, али њихов “укини ефекат”, односно могућност да НВА и НВД допринесу поларности целог молекула, а тиме и растворљивости у поларним растварачима (да не заборавимо, сви жи-

ви организми су у великој мери водени медијуми) се битно разликује од конформера до конформера. Још једна особина коју треба нагласити је број ротабилних веза сваког молекула, и она је описана у табlici особина за сваки молекул. Погледајте нпр. ранитидин (ranitidine) који има 10 ротабилних веза и идентификујте их.<sup>1</sup> Сада ћемо се задржати на ранитидину и покушати да га упоредимо са сличним молекулима у бази података. До сада смо изабрали Compound Search, затим Ranitidine као Name of Substance и добили 3 резултата. Погледајте први резултат који има CAS број<sup>2</sup> 066357355. Сада ћемо покушати да пронађемо сличне молекуле: у последњој десној колони са ознаком 2D similarity кликните на top 10, затим Go!. Први сличан молекул је Низатидин, затим Ниперотидин, па Ци метидин. Погледајте потпуне информације за сваки лек и видећете да су сви антагонисти хистаминских  $H_2$  рецептора. Значи структурно слични молекули испољавају слично дејство.<sup>3</sup> Сада ћемо покушати да их упоредимо. У претпоследњој колони са ваше десне стране (3D superimposition) обележите (први) ранитидин као молекул 1, а низатидин као молекул 2 и кликните на Go!, затим сачекајте да се резултата појави. У средњем квадрату ћете видети преклопљене молекуле, са леве стране је први молекул који смо поредили са другим, који се налази са десне стране. Прекопирајте преклопљене молекуле у програм за визуелизацију, видећете да се разликују само по томе што први садржи тиазолински, а други фурански прстен (Слика 4). Покушајте да нађете молекул по вашем избору и да га упоредите са сличнима.



Слика 4. Преклопљени молекули ранитидина и низатидина.

Толико у овом наставку серије текстова о 3D структури молекула. Играјте се са програмима за цртање и визуелизацију молекула, генеришите 3D структуре или их прикупите из препоручених база података. Саветујем вам да ваш избор молекула направите по неком од критеријума који вам се чини интересантним нпр. антибиотици одређеног типа, пестициди, антипиретици или аналгетици. И покушајте да у оквиру таквих група пронађете особине које су сличне за већину молекула. У следећем наставку причамо причу

<sup>1</sup> Једнострукне везе које се налазе на крајевима молекула не доприносе много “мобилности” молекула. Обично се зову “метил ротори”.

<sup>2</sup> CAS број – Chemical Abstract Service registry number, погледајте: <http://www.cas.org/index.html>

<sup>3</sup> Да не изазовемо забуну, оваква тврдња о сличности важи често, али не увек. Из различитих разлога слични молекули могу да испољавају сасвим различито дејство, о томе у неком од следећих наставака.

о повезивању особина молекула са врстом и јачином дејства на биолошке системе, односно почињемо причу о односу структуре и биолошке активности молекула – причу о рационалном дизајну молекула са жељеним особинама.

#### Abstract

#### HOW TO GENERATE AND WERE TO FIND 3D STRUCTURES OF SMALL MOLECULES?

**Branko J. Drakulić**, Department of Chemistry-ICHM, University of Belgrade

As the continuation of previous two texts (HP 1/2008 and 4/2008) about molecular visualization, this text offer

information on installation and handling of freely assessable software tools for 3D molecular visualization (MDL Chime and Jmol) using common browsers; databases that includes molecules suitable for elementary and secondary schools chemistry teaching and description of basics of the superdrug database for advance users. Detail description of the generation of 3D structures from SMILES notation using on-line demo version of CORINA, as well as basics on molecular similarity and similar/dissimilar properties of different conformers of the same compound are given.



## ВЕСТИ из ШКОЛЕ ВЕСТИ за ШКОЛЕ



Мирјана МАРКОВИЋ, ОШ „Гаврило Принцип“, Земун  
Миомир РАНЂЕЛОВИЋ, ОШ „Јосиф Панчић“, Београд  
Драгица ТРИВИЋ, Хемијски факултет, Београд

### КАКО ХЕМИЧАРИ БРОЈЕ

#### УВОД

Хемичари с лакоћом одређују број честица у неком узорку користећи основну физичку величину - количина *супстанце*, чија је SI јединица мол (mol). Међутим, испитивање ученичких постигнућа и редовна наставна пракса показују да ученици тешко овладавају везама између масе супстанце, количине супстанце и броја честица [1, 2, 3]. Веза између масе супстанце и количине супстанце први пут се уводи у настави хемије у седмом разреду основне школе.

У овом чланку дат је предлог часа за обнављање и утврђивање знања о количинским односима у првом разреду средње школе. Планирано је да ученици раде у групама (осам група). Да би рад у групама био ефикаснији препоручујемо да се формирају према претходним постигнућима ученика: оценама из хемије, или резултатима на претходно изведеном тестирању. Таквим формирањем група избегава се могућност да група буде случајним избором образована од ученика слабијих предзнања и да изостане решавање задатака. У таквој подели, ученици слабијих постигнућа могу учити од бољих ученика.

Задаци су тако осмишљени да ученици могу упоређивати резултате, уочавати правилности и изводити закључке. Међусобним упоређивањем начина рада и добијених решења ученици могу самостално уочавати грешке и кориговати решења. Активности обухватају комбинацију мерења масе супстанце и израчу-

навања. Везе између макро и микро нивоа успостављају се кроз математичка израчунавања која обухватају следеће релације:

$$A_r = \frac{m_a}{u}, \quad M_r = \frac{m_f}{u}, \quad u = m_a(C) = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$n = \frac{m}{M}, \quad M = A_r \cdot g / \text{mol} \quad M = M_r \cdot g / \text{mol}$$

$$n = \frac{N}{N_A}$$

Решавање задатака доприноси сагледавању важности знања о количини супстанце, уочавању да мол „носи“ информацију о броју честица и о маси одређеног броја честица. Хемичари су заинтересовани за број атома који међусобно реагују и граде једињења и за одређивање тог броја на основу мерења масе супстанце. На тај начин мол „повезује“ микроскопски свет (атоми, молекули и јони) и макроскопски свет у коме радимо са узорцима супстанци.

Активним учешћем у решавању задатака, мерењем масе супстанци, размењивањем знања, дискутовањем, ученици обнављају и утврђују везе између масе супстанце, количине супстанце и броја честица. У сваком наредном кораку очекује се примена знања стеченог у претходном кораку, тј. решавањем претходног задатка.

У наставку текста дат је сценарио часа, радни листови за групе и картице за дидактичку игру „Хемијске домине“. Циљ дидактичке игре је да се утврђују и вежбају везе између масе супстанце, количине супстанце и броја честица.

### Сценарио часа

**Тема часа:** Количински односи

**Разред:** I разред

**Тип часа:** Обновљање и утврђивање знања

**Циљеви часа:**

- да ученици разумеју везе између масе супстанце, количине супстанце и броја честица,
- да ученици примењују знање о везама између масе супстанце, количине супстанце и броја честица за решавање различитих рачунских и експерименталних проблема.

### Материјал

Пре часа треба измерити и припремити за свако радно место следеће супстанце:

- 1. група: угљеник (3 g), 2. група: угљеник (4 g), 3. група: угљеник (6 g), 4. група: угљеник (12 g), 5. група: сахароза (85,5 g), 6. група: сахароза (114 g), 7. група: сахароза (171 g), 8. група: сахароза (342 g), алуминијумске плочице (8 комада),
- вага,
- радни листови са задацима за групе (Прилог 1),
- осам комплета картица за игру „Хемијске домине“ (Прилог 2).

**Напомена:** Уместо угљеника и сахарозе могу се користити и друге супстанце. Предложене масе одговарају количинама супстанце од 0,25 mol, 0,33 mol, 0,50 mol, 1,0 mol. Радна места треба опремити пре часа тако што ће се на сваком радном месту налазити алуминијумска плочица, узорак супстанце чија се маса ученицима не саопштава, радни лист и списак ученика који за радним местом треба да раде. Ученике треба обавестити где је у учионици постављена вага да могу мерити масу супстанци.

### Ток часа

**Корак 1.** *Формирање осам њруја.*

Пре часа наставник треба да планира састав група према резултатима претходне провере знања или оцене из хемије. На сваком радном месту треба поставити списак ученика који чине групу. Према списковима ученици седају за радна места.

**Корак 2.** *Решавање њрвој загајка.*

Наставник дели радне листове групама и даје инструкције о начину рада на часу. Обавештава ученике да, када заврше први задатак, одреде представника групе који ће извести о решењу. Такође, саопштава да ће после дискусије решења првог задатка решавати други задатак, а потом поново извештавати о решењима до којих су дошли. У оквиру овог корака очекује се да ученици измере масу алуминијумске плочице,

да израчунају број атома и да на основу тог броја израчунају колику би масу имала бакарна плочица са истим бројем атома.

**Корак 3.** *Дискусија решења њрвој загајка.*

Представници сваке групе извештавају колика је маса алуминијумске плочице коју су измерили и како су израчунали масу бакарне плочице. Решења и начини решавања се упоређују, коментаришу и, ако је потребно, коригују.

**Корак 4.** *Решавање другој загајка.*

Ученици се упућују на решавање другог задатка.

**Корак 5.** *Дискусија решења другој загајка и инџирација знања.*

Пре почетка извештавања наставник на табли припреми следећу табелу.

	Маса узорка (g)	Број честица	Количина супстанце (mol)
1. група			
2. група			
3. група			
4. група			
5. група			
6. група			
7. група			
8. група			

Представник сваке групе уписује у првој колони измерену масу узорка, а у другој колони приказује рачуном како је одређен број атома угљеника, односно молекула сахарозе у узорку и како је одређена количина супстанце. Ученици се упућују да упореде све резултате у табели и уоче правилности међу њима.

**Корак 6.** *Дидактичка игра „Хемијске домине“.*

Вежбање релација између масе супстанце, количине супстанце и броја честица изводи се кроз дидактичку игру „Хемијске домине“ (Прилог 2). У свакој групи може да игра четири играча (сваки играч добија по пет „плочица“). Ако група има пет чланова, пети члан може имати улогу контролора. На једној половини „плочице“ (картице) написан је број молова, а на другој половини маса одређене супстанце или број честица. Ученици упоређују податке о количини супстанци, маси супстанци или броју честица и, према датим подацима, ређају картице у два реда. На пример, ако прва постављена картица има податке 5 mol и  $3 \times 10^{24} \text{Cl}_2$ , следећи играч мора поставити на једном или другом крају картицу на чијој је једној половини податак који одговара количини супстанце од 5 mol. Ако ученик нема картицу са подацима за настављање низа, прескаче круг. Игру започиње ученик који има највећу дуплу картицу (иста количина супстанце на обе половине картице). Победник у игри је ученик који је поставио све своје картице, или, ако се не може наставити низ, онај ученик који на преосталим картицама има најмањи укупни број молова. Препоручујемо да картице које су ученици извукли буду виљиве свим члановима групе, тако да једни другима помажу у ређању.

**ПРИЛОГ 1.**

Радни лист за 1, 2, 3. и 4. групу

РАДНИ ЛИСТ	
<b>1. задатак</b>	На вашем столу налази се алуминијумска плочица. Одредите масу бакарне плочице која садржи исти број атома. Користите вагу и податке о релативним атомским масама наведене у табели Периодног система елемената. Простор за рад:  Маса бакарне плочице је: _____ g.
<b>2. задатак</b>	На вашем радном месту налази се узорак угљеника. Одредите колико се атома угљеника налази у узорку, ако је маса једног атома угљеника $1,994 \times 10^{-26}$ kg? Одредите колико молова угљеника има узорак. Простор за рад:  Маса узорка угљеника: _____ g. Број атома угљеника: _____ Количина угљеника: _____ mol

Радни лист за 5, 6, 7. и 8. групу

РАДНИ ЛИСТ	
<b>1. задатак</b>	На вашем столу налази се алуминијумска плочица. Одредите масу бакарне плочице која садржи исти број атома. Користите вагу и податке о релативним атомским масама наведене у табели Периодног система елемената. Простор за рад:  Маса бакарне плочице је: _____ g.
<b>2. задатак</b>	На вашем радном месту налази се узорак сахарозе. Одредите колико се молекула сахарозе налази у узорку, ако је маса једног молекула сахарозе $5,677 \times 10^{-25}$ kg? Одредите колико молова сахарозе има узорак. Простор за рад:  Маса узорка сахарозе: _____ g. Број молекула сахарозе: _____ Количина сахарозе: _____ mol.

**Прилог 2. Изглед картица за игру „Хемијске домине“**

1 mol	44 g CO <sub>2</sub>	2 mol	$18 \cdot 10^{23}$ N	3 mol	192 g S
1 mol	64 g S	2 mol	128 g O <sub>2</sub>	4 mol	$24 \cdot 10^{23}$ O
1 mol	$18 \cdot 10^{23}$ H <sub>2</sub> O	2 mol	90 g H <sub>2</sub> O	4 mol	490 g H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
1 mol	$24 \cdot 10^{23}$ H	2 mol	12 g H <sub>2</sub>	4 mol	264 g CO <sub>2</sub>
1 mol	35 g Li	3 mol	54 g H <sub>2</sub> O	5 mol	140 g N <sub>2</sub>
1 mol	$36 \cdot 10^{23}$ N	3 mol	$24 \cdot 10^{23}$ S	5 mol	$36 \cdot 10^{23}$ SO <sub>2</sub>
2 mol	64 g O <sub>2</sub>	3 mol	$3 \cdot 10^{24}$ Cl <sub>2</sub>		

Ако се јави проблем, наставник треба да помогне у решавању. Уколико на часу не буде довољно времена за ову игру, она се може извести следећег часа, а могу је ученици играти и код куће.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Д. Шишовић, С. Бојовић, Знање основних хемијских појмова у основној школи и гимназији, *Настава и васпитање*, 2 (2001) стр. 185-197
2. М. Сегединац, С. Вујовић, Љ. Летић, Анализа тестова и постигнућа ученика на средњошколском међуокружном такмичењу из хемије, *Педагошка стварност*, 48 1-2 (2002) стр. 85-96
3. Д. Шишовић, С. Бојовић, Ј. Павловић, Индивидуално и групно проверавање знања хемије на почетку

првог разреда гимназије, *Настава и васпитање*, 2-3 (2003) 139-156

## Abstract

### HOW DO THE CHEMISTS COUNT?

Mirjana Marković, Miomir Randelović, Dragica Trivić

Chemists have chosen to use the term *mole* to represent amounts of a substance that were applicable for them. The mole unit acts as a bridge between the level on which chemists actually work in the laboratory (by weight, in grams) and the way substances actually react with each other (by individual particles, such as atoms). In this paper an approach to the elaboration of the relations among the amounts of a substance, the mass of a substance and the number of particles with the first grade secondary school pupils is presented.



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.rs](mailto:panic@ihtm.bg.ac.rs), [dragana@dekanski.com](mailto:dragana@dekanski.com)

## БАЗЕ ПОДАТАКА ИНФОРМАЦИЈА ЗА ИСТРАЖИВАЊА RIO-DB : RESEARCH INFORMATION DATABASE <http://riodb.ibase.aist.go.jp/riohomee.html>

Информације и податке до којих је дошао кроз многобројна истраживања, Јапански **Национални институт за напредну индустријску науку и технологију** (*National Institute of Advanced Industrial Science and Technology - AIST*) уз помоћ **Цукуба напредног рачунарског центра** (*Tsukuba Advanced Computing Center - TACC*) је систематизовао и обрадио кроз пројекат **RIO-DB** (*Research Information Database*). Циљ пројекта је да допринесе покретању и промоцији нових истраживања и пројеката на свим нивоима, од академских средина до индустријских корпорација, путем ширења истраживачких информација путем интернета. Резултат тога је креирање 119 база података из различитих области науке и технологије. Већина база је отвореног типа, односно континуално се допуњавају новим подацима и информацијама. Један мањи број база је у облику архива, без даљег допуњавања.

Све базе података су **потпуно бесплатне**, при чему корисници треба да поштују одређене захтеве при прегледању и преузимању информација из њих (на пример, ограничена количина преузетих података у току дана, забрана употребе расположивих података у комерцијалне сврхе и сл.)

Базе су подељене у следеће области:

- Стандарди

- Геологија (Earth Sciences)
- Материјали
- Хемија
- Биологија
- Енергија
- Информационе технологије
- Сигурност

Како су за тематику овог чланка најважније базе података из хемије, набројаћемо све базе података из ове групе, а неке од њих ћемо представити и нешто детаљније.

У области хемије постоје следеће базе:

- **База спектра органских једињења** (*Spectral Database for Organic Compounds - SDBS*) – више о овој бази у наставку текста.
- **База података C<sub>1</sub> катализатора** (*C<sub>1</sub>-Catalyst DB*): У питању је база података резултата јапанског C<sub>1</sub> националног пројекта која садржи реакционе податке каталитичке синтезе EG, EtOH и AcOH из C<sub>1</sub> једињења (CO, CH<sub>3</sub>OH) на енглеском језику, уз додатну базу података са резултатима анализа, сликама и пратећим документима на јапанском језику.
- **База података израчунатих особина молекула** (*Computed Property Data Base for Molecules -*



CPDB): Садржи податке о следећим особинама молекула, одређеним наведеним методама предвиђања:

- Структура молекула
- Молекулска тежина
- Тачка кључања (K)<sup>1</sup>
- Критична температура (K)<sup>\*</sup>
- Критични притисак (bar)<sup>\*</sup>
- Критична запремина (cm<sup>3</sup>)<sup>\*</sup>
- *Acentric* фактор  $\omega$ , предвиђен Edmister методом
- *Acentric* фактор  $\omega$ , предвиђен Lee-Kesler методом
- Критична константа<sup>\*</sup>
- Густина (g cm<sup>-3</sup>), предвиђена по методу Yen-Woods
- Напон паре (mmHg), предвиђен по методу Reidel Method.
- Топлота испаравања (на температури кључања) (cal mol<sup>-1</sup>), предвиђена по Vetre методу
- Lennard-Jones-ов пречник судара (Å)
- Lennard-Jones-ова дубина потенцијалне јаме (J mol<sup>-1</sup>)
- База података Зелене одрживе хемије<sup>2</sup> (*Green Sustainable Chemistry DB*): база података за сада постоји само на јапанском језику, енглеска варијанта је у изради. Садржи информације сакупљене током истраживачких активности AIST-а у овој области хемије, као и истраживачке групе *Green Chemistry* Хемијског друштва Јапана.
- База података флуорних једињења (*Fluorine Compounds DB*): састоји се од базе структура, формула и особина чистих једињења флуора и базе равнотеже смеша флуоридних једињења.
- База Раманових спектра минерала и неорганских материјала (*Raman Spectra Database of Minerals and Inorganic Materials - RASMIN*): База тренутно садржи 576 Раманових спектра минерала и 1022 спектра других неорганских материјала.
- База података молекуларне спектроскопије високе резолуције (*High Resolution Molecular Spectroscopy DB - HRMSDB*): база представља колекцију од преко 20.000 чланака публикованих од раних педесетих година XX века, коју је направио Професор Eizi Hirota, и која се непрекидно допуњава. Сваки унос ове базе садржи: идентификациони број уноса, хемијску формулу молекула (или атома) о коме је реч, наслов и ауторе чланка, као и назив часописа у коме је чланак објављен (укључујући волумен,

број странице, годину штампања чланка и кључне речи).

- База података суперкритичних флуида (*Super Critical Fluids DB - AIST Tohoku*): Иза овог наслова крију се уствари три базе података: База података суперкритичних флуида, Корозиона база и База података особина полимера. Више о овим базама на крају овог чланка
- База податка NMR спектра чврстих узорака (*Solid-State NMR Spectral Database - SSNMR\_SD*): Садржи велику збирку NMR спектра високе резолуције, углавном чврстих материјала. Највећи део је снимљен у самом AIST-у, а број спектра се свакодневно увећава. Претрага је једноставна, а резултат претраге је слика спектра са свим основним параметрима (име једињења, хемијска формула, положај пикова..., уључујући и параметре мерења).

Из збирке од 13 база података у области науке о материјалима издвајамо базу података са 105,052 регистрованих чланака из области суперпроводљивости, под називом *Superconductivity Papers DB*. Претрагу је могуће вршити по наслову чланка и ауторима чланка; називу, волумену и години публикација часописа; свим речима у сажетку и атомским симболима елемената који се наводе у чланку. Резултат претраге је линк ка интернет извору пуног текста рада, најчешће на страницама издавача часописа у којем је чланак штампан.

Већ поменута База спектра органских једињења (*Spectral Database for Organic Compounds - SDBS*) садржи велику збирку спектра органских једињења шест спектроскопских техника:

- MS - Масена спектроскопија (*Mass spectroscopy*), са више од 24.200 спектра
  - FT-IR - Инфрацрвена спектроскопија са Фурјеовом трансформацијом (*Fourier transform infrared spectroscopy*), са више од 14.800 спектра
  - <sup>1</sup>H NMR - <sup>1</sup>H Нуклеарна магнетна резонанца (*<sup>1</sup>H nuclear magnetic resonance*), са више од 13.100 спектра
  - <sup>13</sup>C NMR - <sup>13</sup>C Нуклеарна магнетна резонанца (*<sup>13</sup>C nuclear magnetic resonance*), са више од 51.600 спектра
  - Раманова спектроскопија (*Raman spectroscopy*), са више од 3.500 спектра, и
  - ESR - Електронска спинска резонанца (*Electron spin resonance*), са више од 2.500 спектра
- Укупан број једињења чији се сви или само неки од наведених спектра могу пронаћи у овој бази је 33.500.
- База се претражује уз коришћење релативно једноставног обрасца у који се уносе подаци неопходни за проналажење тражених података. Образац се састоји из три дела:

<sup>1</sup> Предвиђени по Joback-овом методу

<sup>2</sup> Док се хемија животне средине (*environmental chemistry*) бави хемијом природе, њеним загађење и материјама које је загађују, зелена одржива хемија (*green sustainable chemistry*) се бави спречавањем загађивања и изворима загађења.

У први се уноси један или више података о треже-ном једињењу: име, молекулска формула, опсег молекулске тежине, са прецизношћу једне децимале, CAS (*Chemical Abstracts Service*) регистрациони број и/или SDBS број (број приписан једињењу у овој бази), ако је познат кориснику.

У други део обрасца се уноси број појединих атома (C, H, N, O, F, Cl, Br, I, S, P, Si) које садржи тражено једињење (могуће их је уносити у опсегу: од - до, а не само једну вредност).

Трећи део обрасца омогућава да се изабере врста спектра који се тражи. Могуће је изабрати један, више или свих шест врста спектра, при чему се претрага MS, NMR и FTIR спектра може сузити дефинисањем почетних захтева. Тако се претрага IR спектра може ограничити на један или више опсега таласних дужина и/или ниво трансмитанце, док се при претраживању NMR спектра унапред могу задати хемијски параметри од интереса (*ppm*), један или више, уз дефинисање дозвољене грешке ( $\pm$  вредност). За MS спектре се може претходно дефинисати положај (маса) и интензитет једног или више пикова.

Образац се попуњава релативно једноставно, а синтагме које треба користити при попуњавању су једноставне и јасно објашњене на самом обрасцу. Корисницима којима то није довољно или желе да се детаљније упознају са могућностима претраге, на располагању је секција **Помоћ** (*Help*), до које се долази линком у горњем делу сваке странице базе.

Претрага је брза, а резултат је страница са обиљем података. За свако једињење дати су име, молекулска и структурна формула, молекулска тежина, CAS и SDBS број (ово је нарочито корисно када је потребно неке пренети информацију о спектру; довољно је навести SDBS број да би се неко једињење и његови спектри пронашли у бази). Уз сваки спектар постоје подаци о условима и параметрима мерења, подаци о пиковима,

као и литературни навод извора спектра, уколико постоји.

Као што је раније напоменуто дајемо и нешто детаљнији приказ три базе које се крију иза наслова: База података суперкритичних флуида.

**Корозиона база** је збирка података и литературних чланака о корозији, корозионом понашању и заштити од корозије. База се претражује попуњавањем обрасца са великим бројем параметара који се дефинишу као полазни услови, као што су: температура и притисак, материјал који кородира, врста корозије, корозиони агенс, рН и други спољни фактори и сл. У обрасцу је довољно попунити само податке који су познати или су од интереса, а уколико у бази постоје подаци који одговарају постављеном захтеву, резултат упита ће садржати све расположиве податке.

**База података суперкритичних флуида** садржи хемијске, физичке и технолошке податке суперкритичних флуида, који су резултат обимног и дуго-трајног истраживања Јапанског института за хемијске иновације (*Japan Chemical Innovation Institute*) у сарадњи са јапанском Организацијом за нову енергију и индустријски технолошки развој (*New Energy and Industrial Technology Development Organization – NEDO*) под именом **Развој технологије за смањење ограничења еколошке примене суперкритичних флуида** (*Development of Technology to Reduce the Burden on the Environment Using Supercritical Fluids*). База садржи наслове, сажетке, кључне речи, дијаграме, табеле, параметре, нумеричке податке, референце и патенте приостекле из овог великог истраживања.

Трећа база у овој групи је **База података особина полимера**. Садржи основне особине полимера и система суперкритичног угљен-диоксида. Нумерички подаци ове базе су садржани у извештајима и објављеним чланцима. Употреба података захтева од корисника евалуацију и процењивање употребљивости за сопствене потребе.



## Графички прилог

или

### “Игре за ДНК рачунаре” из другог угла

Савка Стојановић, Техничка школа “23. Мај”, Панчево, savkastojanovic@yahoo.com

На слици је виђење текста “Игре за ДНК рачунаре” (Хемијски Преглед 1/2009) колегиница Савке Стојановић, професора биохемије и сликара. Јавите нам да ли вам се овакви прилози свиђају.