

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-ICH_{TM}, 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 ињѡрација 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	
1. задатак	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.
2. задатак	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	
1. задатак	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.
2. задатак	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 ₂	2 mol	$18 \cdot 10^{23}$ N	3 mol	192 g S
1 mol	64 g S	2 mol	128 g O ₂	4 mol	$24 \cdot 10^{23}$ O
1 mol	$18 \cdot 10^{23}$ H ₂ O	2 mol	90 g H ₂ O	4 mol	490 g H ₂ SO ₄
1 mol	$24 \cdot 10^{23}$ H	2 mol	12 g H ₂	4 mol	264 g CO ₂
1 mol	35 g Li	3 mol	54 g H ₂ O	5 mol	140 g N ₂
1 mol	$36 \cdot 10^{23}$ N	3 mol	$24 \cdot 10^{23}$ S	5 mol	$36 \cdot 10^{23}$ SO ₂
2 mol	64 g O ₂	3 mol	$3 \cdot 10^{24}$ Cl ₂		

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, panic@ihtm.bg.ac.rs, 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 C₁ катализатора** (*C₁-Catalyst DB*): У питању је база података резултата јапанског C₁ националног пројекта која садржи реакционе податке каталитичке синтезе EG, EtOH и AcOH из C₁ једињења (CO, CH₃OH) 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 -*