

Ниједан ученик није знао да објасни процес фото-синтезе, као и шта је нафта по хемијском саставу.

Након обраде дате теме, резултати на финалном тесту су били следећи: 74% ученика је показало знање преко 50%, при чему је најбољи резултат био 90% тачних одговора, а најслабији 43% тачних одговора.

Резултати очигледно говоре да се ниво знања ученика вишеструко побољшао оваквим начином радом. С друге стране, повезивање појмова који се претходно нису доводили у везу, као и сам начин рада заснован на претраживању и коришћењу различите литературе, договарању и размени знања, при-

премању презентација и извештавању других о раду, изазвао је право одушевљење код ученика. Њихова мотивација за даљим, сличним радом максимално је покренута.

Abstract

FROM THE SUN TO THE POLYETHYLENE WRAPPING MATERIAL

Brankica Savić

The paper contains one of the ways of overcoming the fragmentary students' knowledge with the aim of connecting the themes, diferent teaching topics under the title "From the Sun to the polyethylene wrapping material".



Александар ДЕКАНСКИ, Владимир ПАНИЋ, ИХТМ – Центар за електрохемију, Београд и Драгана ДЕКАНСКИ, Галеника А.Д. - Институт, Земун
E-mail: dekanski@ihtm.bg.ac.yu, panic@tmf.bg.ac.yu, dragana@ihtm.bg.ac.yu

ХЕМИЈСКИ СОФТВЕР II

ADVANCED CHEMISTRY DEVELOPMENT (WWW.ACDLABS.COM)

Као што смо и најавили, рубрику Хемија на интернету у овом броју посвећујемо приказу још једног сајта на коме се могу пронаћи различити компјутерски програми корисни за хемичаре. Овај пут представљамо сајт канадске компаније *Advanced Chemistry Development, Inc.* (www.acdlabs.com).

На врху сваке странице овог сајта, поред знака компаније налазе се линкови ка осам основних секција сајта: *Products, Solutions, Support, Online services, Rasources, Downloads, Events* и *About ACD/Labs*. *Products* и *Downloads* су најзначајније секције па ћемо њима посветити овај чланак.

У оквиру секције *Products* излистано је око 50 различитих програма, пакетних или по намени, а дате су и информације о променама у најновијим верзијама постојећих програма. Такође, у овој секцији се могу преузети каталози производа и наручити демонстрациони компакт дискови и други корисни материјали.

У даљем тексту дајемо најосновнији опис програма по групама.

Analytical Laboratory:

– **ACD/SpecManager** – пружа могућност обраде и креирања база података NMR, масених, IR, UV-Vis и Ramан експерименталних спектра, XRPD, DSC, TGA и других аналитичких кривих, као и хроматограма.

– **Predicting NMR Spectra** - шест програма овог пакета (*ACD/HNMR Predictor, ACD/CNMR Predictor, ACD/FNMR, ACD/NNMR, ACD/PNMR, ACD/2D NMR Predictor*) нуди могућност предвиђања ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P и 2D NMR спектра, уз могућност куповине или креирања базе података.

– **ACD/MS Fragmenter** – програм за предвиђање цепања и преуређивања молекула у масеној спектроскопији.

– **Solve Complex Spectroscopy Tasks** - два програма у овом пакету (*ACD/CombiNMR* и *ACD/Structure Elucidator*) служе за обраду, анализу и квантификацију података кроз одабране примере. Такође, програми потврђују претпостављене структуре или их предлажу на основу експерименталних спектра.

Chemical Naming

– **ACD/Name** – Програм предлаже хемијска имена на основу структуре и обрнуто, у сагласности са правилима о номенклатури Интернационалне уније за чисту и примењену хемију (IUPAC), Интернационалне уније биохемије и молекуларне биологије (IUBMB) и Chemical Abstracts Service (CAS). Постоје и две групе (*Batch*) верзије овог програма: *ACD/Name Batch* and *ACD/Index Name Batch*, као и бесплатна верзија *ACD/Name Freeware* скромнијих могућности.

Physico-Chemical Laboratory

– **ACD/MedChem Advisor** – програм је намењен онима који се баве хемијом у медицини, а омогућава дизајнирање једињења са побољшаним ADME особинама.

– **LogD Suite/LogD Sol Suite** – програм нуди низ алата за предвиђање физичко-хемијских особина супстанци.

– **LogD** – програм за предвиђање октанол-вода дистрибуционих коефицијената јонизујућих једињења за област pH вредности од 0 до 14.

– **LogP DB** - за предвиђање октанол-вода партиционих коефицијената неутралних једињења.

– **pKa DB** - за предвиђање киселинско-базних константи дисоцијације.

– **Solubility DB** - за предвиђање растворљивости у води у опсегу pH вредности од 0 до 14.

– **Boiling Point** – за предвиђање тачке кључања, напона паре и температуре паљења супстанци.

– **Hammett Electronic Constants** – за одређивање Hammett-ове константе субституената у органским једињењима.

– **Liquid Properties** – за процену индекса рефракције, површинског напона, моларне запремине супстанци и сл.

– **Curve Manager** - за анализу експерименталних података термичке анализе, калориметрије, титрација, и кинетичких испитивања.

– **PhysChem Batch** - комбинација више програма (pK_a , LogP, LogD, Solubility, Boiling Point, Sigma и ChemSketch)

Chromatography Laboratory

– **ACD/ChromManager** - За анализу и обраду експерименталних хроматограма, са уграђеном базом података структура, успешних раздвајања и других релевантних података

– **ACD/LC Simulator** – За оптимизацију експериментално регистрованих раздвајања у течној хроматографији, у зависности од различитих параметара. Предвиђа pK_a уз оптимизацију за дату pH вредност.

– **ACD/GC Simulator** – Моделује гасне хроматограме на основу структуре једињења и оптимизује експерименталне услове раздвајања.

– **ACD/Method Development Suite** – Уз помоћ архиве успешних раздвајања помаже у планирању сепарација.

– **ACD/ChromGenius** – Овај програм генеричким методама успешно, брзо и ефективно предвиђа структуре једињења и помаже у LC/MS анализи узорака. Омогућава да се за дати узорак уместо коришћења читавог сета генеричких метода, изабере најпогоднији пре његовог убризгавања (жељена резолуција, ретенционо време или оба) на основу познатих или очекиваних једињења у узорку.

– **ACD/Column Selector** – Пружа помоћ у избору хроматографских колона, или тражењу одговарајућих замена.

– **ACD/Waters Advanced Structures Package** – Програмски пакет за рад са експерименталним хроматограмима. Омогућава да се опција претраживања хемијских структура (и низ других опција које је развио ACD/Labs) уграде у Millennium®³² и Empower™ хроматографске софтвере.

Chemical Drawing and Databasing

– **ACD/ChemSketch** – Програмски пакет за цртање хемијских структура са укљученом IUPAC базом назива једињења. Пакет садржи и софтверске пакете ACD/ChemPalm и ACD/ChemPocket за целне компјутере - PDA (Personal Digital Assistants).

– **ACD/Dictionary** – Једноставан и брз преглед структура за преко 120.000 једињења на основу трговачких и тривијалних назива.

– **ACD/ChemFolder** – База података која у себи садржи целокупни ACD/ChemSketch, ACD/Chem-Coder (израда и скенирање 2D бар-кодова хемијских структура), као и ACD/ChemPalm и ACD/ChemPocket програмске пакете.

– **ACD/ChemBasic** – Програмски језик за напредне коришћење ACD/ChemSketch програма.

Enterprise Solutions and Software Integration

Ова група садржи 13 програма различите намене који могу бити корисни у организацији рада у различитим институцијама или предузећима, или су намењени интеграцији са другим софтверским пакетима побољшавајући и проширујући њихове могућности. Опис сваког од њих би захтевао превише простора, па ћемо овде само навести њихова имена, која сама довољно говоре о намени. Подељени су у три групе:

1. За интернет и серверску примену

– ACD/Web Librarian

– ACD/Labs Predictors for Intranets

– ACD/I-Lab: Intranet Edition.

– ACD/Workflow Manager

– ACD/SpecManager SQL

– ACD/Automation Server

2. За интеграцију са другим програмима

– ACD/Labs Add-ins for ISIS

– ACD/Labs Extension for ChemDraw

– ACD/NuGenesis Integration

3. Интеграција софтверских компоненти

– ACD/Web Librarian Web Services

– ACD/Labs ActiveX Components

– ACD/Mol2Gif

– ACD/Structure Drawing Applet

– ACD/ChemCoder SDK

Секција Download нуди преузимање, поред комерцијалних програма, низ корисних, потпуно бесплатних програма, упутстава, база података и слично. Између осталог бесплатно је могуће преузети верзију програма ChemSketch 8.0, која од 1. јуна 2005. године у себи садржи и InChI протокол (кратка информација о овом протоколу штампана је у Белешкама ХП 46(3) (2005) 71-72), као и програме:

– InChI ChemBasic Add-in,

– TLC Plate Tool for ChemSketch,

– Web-based IUPAC Naming software,

– Name for ISIS/Draw and ISIS/Base,

– 3D Viewers for ISIS/Base and ISIS/Draw,

– Structure Drawing Applet 1.30.

Посебно истичемо линк **Tools for Academia** на Download страници, који води ка секцији сајта посве-

ћеној академским институцијама. На њој се могу пронаћи информације о куповини комерцијалних програма по повољнијим ценама за овакве институције - *Professional Software for Researchers*, преузети бесплатни програми корисни у образовању - *Educational Resources* и пронаћи корисне информације и бесплатни програми који ће помоћи у осавремењавању наставе хемије на разним нивоима - *Tools for Teaching Chemistry*.

На крају овог чланка укратко ћемо описати и садржаје осталих секција сајта:

Solutions – Секција нуди конкретна софтверска решења за различите кориснике подељена према областима (индустрија, истраживање, јавне установе, образовање...)

Support – Секција нуди техничку помоћ у вези производа компаније, информације о обукама за ко-

ришћење производа, одговоре на најчешће постављана питања (*FAQ*), информације о новим верзијама производа и сл.

Online services – нуди 3 *Online* сервиса:

– *I-Lab* – Интернет сервис за брзи приступ хемијским базама података и програмима за предвиђање особина једињења.

– *ACD/Public Chromatography Applications Database*

– *IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry*

Rasources – Секција нуди преглед и претраживање публикација различитих врста, од часописа, приручника и база података, до приказа софтвера.

Events – Календар сајмова, скупова и семинара везаних за делатност компаније.

About ACD/Labs – Детаљније информације о компанији.



ЦИЉ И ПУТ

Постоји изрека "Прави циљ је пут до неког циља" јер, без обзира да ли је циљ достижан, реалан, правилно и са смислом постављен, већину времена проведемо на путу и пут има прави утицај на наш живот. Реформа Универзитета има више циљева међу којима су свакако и унапређење квалитета истраживачког рада на Универзитету што се мора одразити и на укупан квалитет како додипломских тако и последиломских студија. Но, велико је питање да ли би требало да је прави пут/циљ ове реформе брига о квалитету појединца подигнута на ниво Министарства за науку квантификована у облику А/Б категоризације или би требало да је то стварање услова да се надлежне институције адекватно развијају, а да оне даље брину о квалитету, уз подршку и контролу Министарства.

Непосредан повод за овај текст је писмо у коме сам замољен да дам своје мишљење о једном од кандидата за место предавача Департамана за Физиологију Школе Биомедицинских Наука са Медицинског Факултета Универзитета у Ливерпулу, Велика Британија. Уз писмо сам добио и конкурсни материјал који у скраћеном облику презентирам овде.

1. Најпре нешто о самом Департману. Депарتمان за Физиологију у Ливерпулу је део недавно формиране Школе Биомедицинских Наука са професором Бобом Бургознеом као Деканом. На сваком оцењивању квалитета до сада овај Депарتمان постигао је највећи рејтинг (тренутно 5**). Главна област истраживања Департамана протеклих година била је област трансдукције сигнала у ћелији. Област се сада проширује на истраживања основних аспеката ће-

лијске сигнализације а и њиховог значаја за механизме развоја патолошких процеса. Запослени у Департману за Физиологију и они са којима сарађују у Департману за Медицину, Хирургију и Онкологију имају значајну међународну репутацију сто се илуструје главним пројектима, публикацијама у часописима са високим импактом и позивима на престижне међународне конференције. Тако, могућности за истраживања на светском нивоу заједно са Департаманском и Факултетском стратегијом да подрже рад на основним сигналним механизмима укључујући њихов значај за клиничке проблеме, омогућавају установљење ових нових академских позиција. Важност овог развоја је препозната од стране факултета и институција и биће подржана са главним програмом обнове лабораторија који треба да почне ускоро. Успешни кандидати ће бити укључени у планирање новог лабораторијског простора који ће бити изграђен у складу са највећим стандардима. Развој ове области је кључни приоритет школе биомедицинских наука на Медицинском факултету и Универзитету. Штавише, уз широк спектар опреме доступне у постојећим истраживачким групама, истраживање у Школи биомедицинских наука је подржано и са бројним кључним предностима које омогућавају савремен приступ квантитативном протеомику, испитивање протеин-протеин интеракција, електронској микроскопији и конфокалној микроскопији. Академски персонал у одељењу за физиологију тренутно има спољне уговоре у вредности која прелази 13 милиона фунти.