

трацијама, предност која се даје HPLC методи је оправдана. Међутим, у великом броју квалитативних али и квантитативних анализа предност треба дати методи планарне хроматографије, посебно с обзиром на развој постигнут у тој области у новије време. Такође, често једна метода није довољна за решење аналитичког проблема те је тада потребно комбиновати различите хроматографске технике.

Abstract

THE CHROMATOGRAPHY METHODS: HIGH PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY AND THIN LAYER CHROMATOGRAPHY

Jadranka Odović, Mirjana Aleksić, Jasna Trbojević-Stanković¹, Institute of Analytical chemistry, Faculty of Pharmacy, Vojvode Stepe 450, 11221 Belgrade, Serbia

¹Department of Hemodialysis, Clinic of Urology, Clinical Center "Dr Dragiša Mišović", Heroja Milana Tepića 1, 11000 Beograd, Serbia

Chromatographic methods represent the most frequently used methods in both qualitative and quantitative studies of various samples. High performance and thin layer chromatography have important place among these methods. They are widely applied in many scientific and technological researches. The choice of specific

chromatographic method depends on the type of research, and sometimes two or more methods are combined.

The main features, advantages and disadvantages of the two most widely used chromatographic methods has been discussed in this short presentation.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] J. M. Miller, *Chromatography, Concepts and Contrasts*, Drew University, Madison, New Jersey, 2005.
- [2] K. Tyrpien, B. Janoszka, D. Bodzek, *J. Chromatogr. A*, **774** (1997) 111 – 120.
- [3] G. Milovanović, *Hromatografske metode odvajanja*, PMF Univerziteta u Beogradu i Jugoslovenski zavod za produktivnost rada i informacione sisteme, Beograd, 1985.
- [4] S. Gocan, *Modern Thin-Layer Chromatography*, N. Grinberg (Ed.), Dekker, New York, 1990.
- [5] W.J. Lough, I.W. Wainer, *High Performance Liquid Chromatography, Fundamental principles and practice*, 1995.
- [6] V. D. Krasikov, *J. Anal. Chem.*, **58** (8) (2003) 706 – 719.
- [7] R.J. Vervoort, E. Ruyter, A.J.J. Debets, H.A. Claessens, C.A. Cramers, G.J. de Jong, *J. Chromatogr. A*, **931** (2001) 67 – 79.
- [8] C.F. Poole, *J. Chromatogr. A*, **856** (1999) 399 – 427.
- [9] C.F. Poole, *J. Chromatogr. A*, **1000** (2003) 963 – 984.



Милош К. МИЛЧИЋ и Снежана Д. ЗАРИЋ, Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија
(e-mail: mmilcic@ibms.sinica.edu.tw)

КРАТКА ИСТОРИЈА ПОЈМА АРОМАТИЧНОСТИ

Један од најчешће коришћених појмова у модерној хемијској литератури је појам ароматичности¹⁻⁵. Ова тврдња се може и квантитативно доказати; од 1981. године до средине 2006. године појавило се више од 300 000 чланака о ароматичним особинама хемијских система. Најзначајнији хемијски часопис, *Chemical Reviews*, је у задњих 5 година посветио два пуна издања прегледу најновијих достигнућа на пољу ароматичности (свеска бр. 5, 2001. године и свеска бр. 10, 2005. године). Ипак, упркос великој заступљености у хемијској литератури, ароматичност, као и многи други веома корисни и популарни хемијски концепти (као што су парцијална наелектрисања на атомима, хемијска веза, хиперкоњугација, електронегативност,...) нема недвосмислену и чврсту физичку основу. Такође ароматичност се не може квантитативно изразити, нити се може директно експериментално измерити. Другим речима, ароматичност је апстрактна величина, пре него физичка опсервабла. Можда је најбољи опис ароматичности дао Шлејер (Paul von Ragué Schleyer) рекавши да је ароматичност као и лепота у очима посматрача⁶. За оба ова појма може се рећи да се лако препознају (мада не увек), јављају се у разним облицима, тешки су за

упоређивање, још тежи за квантитативно одређивање и свако има своје мишљење за које сматра да је једино исправно. Због недостатка јасне дефиниције појма ароматичности 70.-тих година прошлог века почели су „напади“ на овај појам. Неки истраживачи су чак предлагали да појам ароматичност треба напустити као нејасан, неоснован и збуњујући⁷⁻¹⁰. Чињеница је да је концепт ароматичности еволуирао током времена као и да ће наставити и даље да се употпуњује новим аспектима. Данас је добро познато да је континуална делокализација електрона, која изазива ароматичност, веома широк феномен, који није ограничен само на π електроне планарних прстенова са sp^2 хибридованим атомима. Ипак, било би неозбиљно престати користити концепт ароматичности само зато што нисмо у стању да га јасно дефинишемо и измеримо¹¹. Најновија квалитативна дефиниција појма ароматичности, која обухвата најразлицитије аспекте овог концепта и у складу је са тенденцијама нових истраживања гласи:

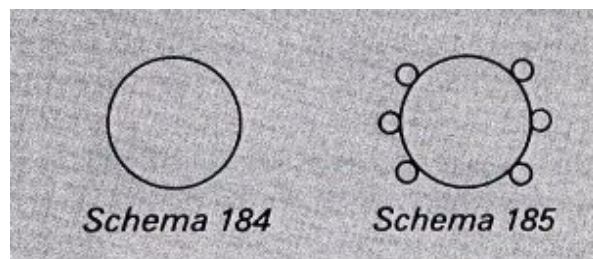
„Ароматичност је последица делокализације електрона у затвореним колицама, било у две или три димензије. То резултује у снижењу енергије, често веома значајном, као и великом броју нео-

бичних хемијских и физичких особина. Ту је укључена и ијендениција ка изједначавању дужина веза, необична реактивност, и карактеристичне спектроскопске особине. Пошто се ароматичност ијовезује са индукованим кружним струјама, мајнејне особине су изузетно важне за њено ојкривање и одређивање.“⁶

Међутим појам ароматичности није одувек био тако компликован. Пре два века хемичари су користили израз „ароматичан“ за органске супстанце пријатног мириса. Нешто касније, међу првим класификацијама органских супстанци на основу хемијских особина јављају се две групе: ароматичне и алифатичне супстанце. Израз ароматичан постао је нераскидиво везан за молекул бензена (упркос његовом не баш пријатном мирису) тек 1825. године када га је Мајкл Фарадеј (Michael Faraday) изоловао и окарактерисао из петролеја за светиљке.¹² Године 1991. на прослави 200-те годишњице од рођења Фарадеја урађена је анализа узорка из једне његове бочице и нађено је да је узорак бензен чистоће 99,7%. Фарадеј је изоловану супстанцу назвао „дикарбурет“ водоника, са формулом $(C_2H)_3$, јер се у то време мислило да је атомска маса угљеника 6 а не 12. Фарадеј је такође изоловао и „карбурет“ водоника (највероватније *trans*-2-бутен) и установио велику разлику у хемијским особинама два једињења. Упркос већем C/H односу (већа незасићеност) бензен је много мање реактиван. Следећих тридесетак година протичу у напорима најбољих хемичара тог времена да открију структуру молекула бензена која ће бити у складу са валенцом атома угљеника и водоника. Према постојећој историјској документацији то је прво пошло за руком Џозефу Лошмидту (Josef Loschmidt) 1861. године. Те структуре бензена су приказане у једном памфлету¹³ који је Лошмидт штампао о сопственом трошку и делио осталим европским хемичарима. У структури Лошмидтовог бензена костур од шест угљеникових атома је представљен великим кругом, док су појединачни атоми водоника представљени мањим круговима (Слика 1(а)). Положај водоникових атома није симетричан већ се налазе груписани у две групе по три атома постављене са леве и десне стране великог прстена.

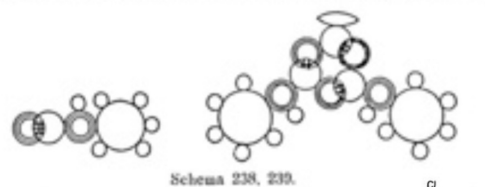
Иако је Џозеф Лошмидт био угледни професор Бечког универзитета, ниједан од тадашњих хемијских часописа није хтео да штампа његове структурне формуле, јер су сматрали да за њих нема довољно експерименталних доказа.

Четири године након Лошмидта, Август Кекуле (August Kekulé) објављује своју цикличну структуру бензена,¹⁴⁻¹⁷ за коју је тврдио да му се учинила у полу сну као змија која је сама себе угризла за реп. Он уводи структурну теорију у хемију и покушава да дефинише ароматичност на основу структуре бензена. Његова структура молекула бензена је временом еволуирала тако да је тек 1872. објавио свој финални рад¹⁸ у коме је молекул бензена представљен, такозваним, осцилаторним валентним структурама. Данас се те две циклохексатриенске структуре повезане двоструком стрелицом крајње погрешно називају Кекулеов бензен. Експери-



(а)

nyleyanamid sch. 238, und beim Einwirken von Chloreyanur $C_2N_2Cl_2$ auf zwei Äquivalente Anilin das Diphenylchlor-



Schema 238, 239.

cyanuridiamin¹⁸⁶ $C_3N_3H_3Cl$, Sch. 239. W Chloreyan auf zwei Äquivalente Anilin, so erhält

(б)

Слика 1. (а) Лошмидтове структурне формуле молекула бензена. (б) део странице Лошмидтовог памфлета¹³ на коме се види структура 2,4-дисупституисаног 1,3,5-триазена. У дну слике се налази модерни приказ структуре овог молекула.

менти рађени у то време су недвосмислено показали да молекул бензена мора имати високу симетрију јер није било никакве разлике између 1,2- и 1,6-дисупституисаних бензена. Уколико је структура циклохексатриена тачна тада би се ова два изомера морала разликовати. До краја свог живота Кекуле није успео да пронађе одговарајући начин да представи овај високо-симетрични молекул бензена јединственом структуром.

Убрзо након објављивања Кекулеове прве цикличне структуре молекула бензена, Ерленмајер¹⁹ (Erlenmeyer) је предложио формулу за молекул нафталена и увео концепт по коме би се ароматична једињења могла разликовати од неароматичних по реактивности. Због тога је одмах дошло до сукоба између њега и Кекулеа који је и даље тврдио да је много исправније одређивати ароматичност неког једињења преко структурног критеријума него преко реактивности.

Виктор Мајер (Victor Meyer) је 1883. године показао да је тиофен веома сличан бензену по физичким и хемијским особинама и тиме проширио концепт ароматичности и на цикличне молекуле са хетероатомима.

Следећих четрдесетак година је прошло у безуспешним напорима хемичара да повежу необичну стабилност бензена са његовом структуром. Међутим, у овом периоду се десило нешто што је имало великог утицаја на хемију 20. века. Године 1987. Џ. Џ. Томсон (J. J. Thomson) је открио електрон.²⁰ Хемичари су одмах схватили важност електрона за објашњавање појма валенце и хемијске везе али је било потребно да прођу две деценије да би се појавиле прве теорије хемијске везе засноване на електронима. За време Првог светског рата Томсон, Луис, Лангмир и Косел (Thomson, Lewis,

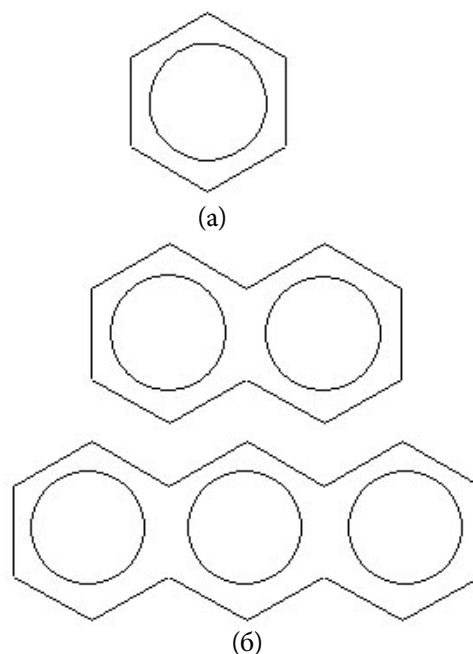
Langmuir i Kossel) су поставили своје теорије о везивању атома у молекуле. Десет година касније (1926.) појавила се квантна теорија заснована на Шредингеровој (Schrödinger) једначини а 1927. године Хајтлер и Лондон²¹ (Heitler i London) су извели први квантнохемјски прорачун на молекулу водоника.

Године 1925. у чланку чији су аутори Џејмс Нилсон Армит (James Nilson Armit) и Нобеловац Роберт Робинсон (Robert Robinson) први пут је употребљен израз „ароматични секстет“ који јасно описује „групу од шест електрона који се опиру нарушавању“.²² Предложено је да се овај стабилни π електронски секстет означава кружницом уписаном унутар хексагона, који представља костур од угљеникових атома (Слика 2(a)). По Армиту и Робинсону да би неки прстен био ароматичан мора поседовати шест π електрона организованих као ароматични секстет. Први проблеми са оваквим начином приказивања ароматичности су се јавили у структурама нафталена и антрацена. Пошто су сви прстенови у овим молекулима ароматични Армит и Робинсон су их представили са ароматичним секстетом и због тога су имали два електрона мања у молекулу нафталена и четири електрона мања у молекулу антрацена (Слика 2(б)). Да би решили овај проблем изабрисали су по два σ електрона који су заједничка за сваки пар спојених прстенова. Робинсон је покушао да објасни овај поступак тиме да су угљеникови атоми број 9 и 10 повезани ковалентним везама у које су укључени искључиво електрони из ароматичног секстета. Армит-Робинсонов чланак је у каснијој литератури увек цитиран као први у коме се појављује идеја ароматичног секстета. Међутим модерна истраживања су пронашла једну публикацију Крокера (E. C. Crocker) из 1922., три године пре Армит-Робинсона, у којој се помиње израз „шест ароматичних електрона“²³ одговорних за стабилност бензена.

Иако су Крокерови резултати били публиковани у водећем америчком часопису за хемију никада нису били примећени нити цитирани. Зато се све до данашњих дана откриће π електронског секстета, као једног од важних фактора ароматичности, вероватно незаслужено, приписивало Армит-Робинсону.

Потврда да је структура бензена заиста високосиметрични хексагон стигла је 1929. године од стране Катлин Лонсдејл (Kathleen Lonsdale), једне од првих жена кристалографа. Она је успешно решила кристалну структуру хексаметилбензена²⁴ а пар година након тога и хексахлорбензена²⁵.

Један од ретких физичара који је дао значајан допринос теорији ароматичности је Ерих Хикел (Erich Hückel). Иако прилично потцењен за живота, данас је познат по својим радовима заједно са Питером Дебајем (Peter Debye) на теорији јаких електролита²⁶ и на примени поједностављене верзије квантне теорије на π електроне у коњутованим молекулима, што ће касније постати познато као Хикелова молекулско-орбитална (НМО) теорија.^{27,28} Занимљиво али Хикел никада није експлицитно формулисао „ $4n + 2$ “ правило ароматичности, мада је оно било очигледно из његових закључа-



Слика 2. (а) Структура молекула бензена како су је представили Армит и Робинсон. (б) Армит и Робинсонова репрезентација молекула нафталена и антрацена са два и три ароматична секстета. Централне везе су изостављене да би се испоштовао укупан број електрона

ка. Он је показао да моноциклични системи са континуалном коњугацијом који имају 6, 10, 14... π електрона поседују додатну стабилизацију и ароматични су.

Период од 1931. године до данас се назива пост-Хикелов период у развоју теорије ароматичности. Овај период је започео са бриљантним теоретичарем и двоstrukим Нобеловцем Линусом Полингом (Linus Pauling) (Нобелова награда за хемију 1954. године; Нобелова награда за мир 1962. године) и његовим доприносом теорији валентне везе као и увођењу појма резонаније.^{29,30} Свега пар година након што је Полинг увео појам резонаније у хемију, Кистјаковски (Kistiakowski) је експериментално одредио резонанциону енергију бензена.³¹ Вероватно најважнији допринос Полинга разумевању појма ароматичности је његова теорија кружних струја у прстену (ring currents) публикована 1936. године.³² На основу ове теорије, по којој електрони могу слободно да круже по бензеновом прстену, Френк Лондон (Frank London) је само годину дана касније извео нешто што се данас назива Лондоновим дијамагнетизмом.³³ То је допринос π електронских кружних струја у прстену укупној магнетној суцептибилности молекула бензена. Сви данашњи критеријуми за одређивање ароматичности који се заснивају на мерењу или рачунском одређивању магнетних особина молекула имају корене у овом Лондоновом пионирском раду.

Следећих петнаест година настаје застој у динамици истраживања појма ароматичности због Другог светског рата. Године 1953. Мајер (Meyer) са сарадницима примећује разлику у хемијским померањима ато-

ма водоника у NMR спектрима ароматичних и неароматичних молекула.³⁴

Попл (Pople), 1956. године повезује ова необична хемијска померања водоника са ароматичних молекула са ефектом индукованих струја у прстену.³⁵⁻³⁷ Након тога Даубен (Dauben) уводи повећање дијамагнетне суццептибилности (Δ) као први критеријум за одређивање ароматичности заснован на одређивањима магнетних особина молекула,^{38,39} а недуго затим Флигаре (Flygare) предлаже анизотропију магнетне суццептибилности као критеријум ароматичности.⁴⁰⁻⁴⁵

Од како је Кутцелниг (Kutzelnigg) 1980. године употребио IGLO (*Individual Gauges for Localized Orbitals*) приступ да квантно хемијским методама израчуна разне магнетне особине молекула,⁴⁶⁻⁴⁹ као што су хемијска померања, магнетне проводљивости и анизотропије магнетних проводљивости, наступа ера одређивања ароматичности рачунским методама.

Један од најважнијих параметара који се може одредити једино рачунским методама је NICS⁵⁰ (*Nucleus-Independent Chemical Shift*, хемијски помак независан од језгра) параметар који је први пут поменут у радовима Paul von Rague Šlejera 1996. године. Од тада па до данас уведено је неколико побољшања у NICS технику, као што су растављање укупне вредности NICS параметра на допринос σ и π локализованих молекулских орбитала,^{51,52} или анализа анизотропије NICS параметра на основу канонских молекулских орбитала.⁵³⁻⁵⁵

ЛИТЕРАТУРА

- Minkin, V. I.; Glukhovtsev, M. N.; Simkin, B.Y. *Aromaticity and Antiaromaticity*; John Wiley & Sons: New-York, 1994.
- Schleyer, P. v. R.; Jiao, H. *Pure Appl. Chem.* **1996**, *68*, 209.
- Lloyd, D. J. *Chem. Inf. Comput. Sci.* **1996**, *36*, 442.
- Krygowski, T. M.; Cyranski, M. K.; Czarnocki, Z.; Hafelinger, G.; Katritzky, A. R. *Tetrahedron* **2000**, *56*, 1783.
- Schleyer, P. v. R., Guest Ed. Special issue on aromaticity. *Chem. Rev.* **2001**, *101*, (5)
- Chen, Z.; Wannere, C. S.; Corminboeuf, C.; Puchta, R.; Schleyer, P. v. R. *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 3842-3888.
- Binsch, G. *Naturwissenschaften* **1973**, *60*, 369-374.
- Binsch, G. In *Aromaticity, Pseudoaromaticity, Anti-Aromaticity*; Bergmann, E. D., Pullmann, B., Eds.; The Israel Academy of Sciences and Humanities: Jerusalem, 1971; p 25.
- Heilbronner, E. In *Aromaticity, Pseudoaromaticity, Anti-Aromaticity*; Bergmann, E. D., Pullmann, B., Eds.; The Israel Academy of Sciences and Humanities: Jerusalem, 1971; p 21.
- Labarre, J. F.; Crasnier, F. *Fortschr. Chem. Forsch.* **1971**, *24*, 33-54.
- Katritzky, A. R.; Karelson, M.; Sild, S.; Krygowski, T. M.; Jug, K. *J. Org. Chem.* **1998**, *63*, 5228.
- Faraday, M. *Philos. Trans. R. London* **1825**, 440.
- Loschmidt, J.; Anschutz, R. *Konstitutions-Formeln der organischen Chemie Graphischer Darstellung*; **1861**, 154ss.
- Може се набавити као каталог на <http://www.sig-maaldrichthttp://www.armstrongwynne.org>
- Kekulé, A. *Bull. Soc. Chim. Paris* **1865**, *3*, 98.
- Kekulé, A. *Ann. Chem.* **1866**, *137*, 129.
- Kekulé, A. *Bull. Acad. R. Belg.* **1865**, *19*, 551
- Kekulé, A. *Lehrbuch der Organische Chemie*; Enk.:Erlangen, 1866; Vol 2.
- Kekulé, A. *Ann.* **1872**, *162*, 77.
- Erlenmeyer, E. *Ann. Chem.* **1866**, *137*, 327-359.
- Thomson, J. J. *Philos. Mag.* **1897**, *44*, 293.
- Heitler, W., and London, F., *Zeit. Physik*, **1927**, *44*, 455.
- Armit, J. W.; Robinson, R. *J. Chem. Soc.* **1925**, *127*, 1604-1618.
- Crocker, E. C. *J. Am. Chem. Soc.* **1922**, *44*, 1618-1630.
- Lonsdale, K. *Proc. Royal Soc.* **1929**, *123A*, 494.
- Lonsdale, K. *Proc. Royal Soc.* **1931**, *133A*, 536.
- Debye, P.; Hückel E. *Phys. Z.* **1923**, *24*, 185-206.
- Hückel, E. *Z. Phys.* **1931**, *70*, 204-86.
- Hückel, E. *Grundzüge der Theorie ungesättigter und aromatischer Verbindungen*; Verlag Chemie: Berlin, 1940; p 71.
- Pauling, L.; Sherman, J. *J. Chem. Phys.* **1933**, *1*, 606.
- Pauling, L. C. *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd ed.; Cornell University Press: Ithaca, New York, **1960**.
- Kistiakowski, B.; Ruhoffm, J. R.; Smith, H. A.; Vaughan, W. E. *J. Am. Chem. Soc.* **1936**, *58*, 146
- Pauling, L. *J. Chem. Phys.* **1936**, *4*, 673.
- London, F. *J. Phys. Radium* **1937**, *8*, 397.
- Meyer, L. H.; Saika, A.; Gutowski, H. S. *J. Am. Chem. Soc.* **1953**, *75*, 4567.
- Bernstein, H. J.; Schneider, W. G.; Pople, J. A. *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **1956**, *236*, 515-528.
- Pople, J. A. *J. Chem Phys.* **1956**, *24*, 1111.
- Pople, J. A. *Mol. Phys.* **1958**, *1*, 175.
- Dauben, H. J., Jr.; Wilson, J. D.; Laity, J. L. *J. Am. Chem. Soc.* **1968**, *90*, 811;
- Dauben, H. J., Jr.; Wilson, J. D.; Laity, J. L. Diamagnetic Susceptibility Exaltation as Criterion of Aromaticity. In *Nonbenzenoid Aromatics*; Snyder, J. P., Ed.; Academic Press: New York, 1971; Vol. 2
- Benson, R. C.; Flygare, W. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1970**, *92*, 7523.
- Benson, R. C.; Norris, C. L.; Flygare, W. H.; Beak, P. *J. Am. Chem. Soc.* **1971**, *93*, 5591-5593.
- Schmalz, T. G.; Norris, C. L.; Flygare, W. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1973**, *95*, 7961.
- Schmalz, T. G.; Gierke, T. D.; Beak, P.; Flygare, W. H. *Tetrahedron Lett.* **1974**, *33*, 2885.
- Flygare, W. H. *Chem. Rev.* **1974**, *74*, 653.
- Hutter, D. H.; Flygare, W. H. *Top. Curr. Chem.* **1976**, *63*, 89.
- Kutzelnigg, W. *Isr. J. Chem.* **1980**, *19*, 193.
- Schindler, M.; Kutzelnigg, W. *J. Chem. Phys.* **1982**, *76*, 1919.
- Schindler, M.; Kutzelnigg, W. *J. Am. Chem. Soc.* **1983**, *105*, 1360.
- Kutzelnigg, W.; Fleischer, U.; Schindler, M. *NMR, Basic Principles and Progress*; Springer-Verlag: Berlin, 1990; Vol. 23, p165.

50. Schleyer, P. v. R.; Maerker, C.; Dransfeld, A.; Jiao, H.; Hommes, N. J. R. v. E. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 6317.
51. Schleyer, P. v. R.; Jiao, H.; Hommes, N. J. R. v. E.; Malkin, V. G.; Malkina, O. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 12669.
52. Schleyer, P. v. R.; Manoharan, M.; Wang, Z. X.; Kiran, B.; Jiao, H.; Puchta, R.; Hommes, N. J. R. v. E. *Org. Lett.* **2001**, *3*, 2465.
53. Corminboeuf, C.; Heine, T.; Weber, J. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, *5*, 246.
54. Heine, T.; Schleyer, P. v. R.; Corminboeuf, C.; Seifert, G.; Reviakine, R.; Weber, J. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 6470.
55. Corminboeuf, C.; Heine, T.; Seifert, G.; Schleyer, P. v. R.; Weber, J. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2004**, *6*, 273

Abstract

SHORT HISTORY OF AROMATICITY CONCEPT

Miloš K. Milčić and Snežana D. Zarić

One of the most used concepts in modern chemical literature is concept of aromaticity. However, aromaticity, similar to some other very useful chemical concepts, cannot be quantified and directly measured. Hence, aromaticity is more abstract concept than observable. With the time, concept of aromaticity has evolved. Nowadays, aromaticity is connected with the delocalization of the electrons in rings, and from it emerged magnetic properties of the systems, that are considered as very important.



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

КАКО ИЗГЛЕДА ФАЈЛ КОЈИ ОПИСУЈЕ 3Д СТРУКТУРУ МОЛЕКУЛА?

У броју 1/2008 Хемијској Прејледа исцрпачили смо иричу о томе како можемо описати молекул записом у једној линији шексиа, дводимензионалном или тродимензионалном формулом. Поред тога дајте су линкови ка веб сајтама произвођача који десилајно нуде програме за ирирање и визуализацију молекула. Надам се да сће програме иреузели, инсалирали и мало се иирирали са њима. Као насипавак иредходној, у овом кирајиком шексиу ћу иокушати да објасним како рачунар “иамити” 2Д или 3Д слику молекула. Врло је вероватно да већи део овога шито ћете ирочитати схватиће интуитивно или вам је иознаито на основу иредходној знања, али се надам да иенерализација овој шитиа може иомоћи дољем разумевању.

Они који свакодневно употребљавају рачунар, претпостављамо већина младих читалаца Часописа, знају да генерално постоје две врсте фајлова. Први су бинарни, направљени тако да штеде простор на тврдом диску (hard disc) или неком носачу информација (нпр. CD-у, DVD-у итд.). Запис таквих фајлова овде нећемо детаљно дискутовати, само ћемо напоменути да се састоје од секвенце бајтова, односно да су бинарне цифре (битови) сврстане у осам група у оквиру једне линије “текста”. Чак иако знате шта такав фајл садржи, када га отворите текст едитором (нпр. Note Pad-ом или Word Pad-ом у Windows оперативном систему) ни после мало више труда није јасно како је запис који видите повезан са садржајем фајла.

Друга врста фајлова су ASCII текст фајлови, чији се запис врло лако може повезати са садржајем фајла. Већина фајлова који бележе тродимензионалне структуре молекула су те врсте, да није тако не би било ни овог текста.

Различити произвођачи рачунарских програма за цртање и визуелизацију молекула су увели сопствене стандарде за бележење молекула које називамо форматом фајла. Рачунар препознаје формат фајла према екстензији, као што већина вас зна то су она три слова после тачке на крају имена фајла у Windows опеативним систему, док Linux дозвољава екстензије од 2, 3 или 4 слова. Према ек-

стензији рачунар “зна” који програм одређени фајл треба да отвори.

Иако различити произвођачи на тај начин штите права својине за одређени тип фајла, захваљујући логици сртвари већина таквих фајлова је врло слична. Даље ћемо видети шта је заједничко у таквим фајловима. У овом тексту ћемо дискутовати фајлове који су направљени тако да описују мале молекуле - органске или неорганске, значи молекуле молекулске масе до ~ 1000 Da (и ово само оријентационо). У неком од следећих текстова следи прича о томе како изгледају фајлови који описују протеине и нуклеинске киселине.

Као пример задржавамо парацетамол који смо користили у предходном тексту (Схема 1).

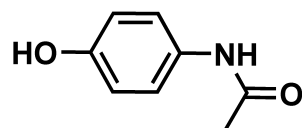


Схема 1

Прво и основно - када било који објекат приказујемо у три димензије, морамо да опишемо где се свака тачка тог објекта налази у простору. Ако користимо декартов правоугли координатни систем, свакој тачки ћемо приписати бројчану вредност по x, y и z оси.

Тако на слици 1 видимо две тачке од којих доња има координате 1, 2 и 3, док горња има координате 4, 5 и 6. Те тачке можемо повезати линијом као на слици 2. На исти начин програми приписују положај атомима у молекулу, значи сваки атом има координате по x, y и z оси, а у једном делу фајла се бележи који атоми су међусобно повезани, то је наша плава линија са слике 2. И да видимо како то практично изгледа (слике 3 и 4):

На слици 3 је приказан молекул парацетамола са нумерисаним атомима. Програм арбитарно приписује координате са вредностима 0, 0, 0 једном од атома (атом 1 на слици 3); координате свих осталих атома се приписују у