

2.	Љиљана Стојановић	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	I
3.	Александар Михајловић	Медицинска школа "7. април"	Нови Сад	Веселинка Шкиљевић	I
4.	Виктор Чолић	Хемијско-технолошка школа "Лазар Нешић"	Суботица	Јелисавета Кикић	II
5.	Иван Мркић	XIII београдска гимназија	Београд	Анита Стојчевски-Миљановић	II
6.	Живојин Шуштран	XIII београдска гимназија	Београд	Анита Стојчевски-Миљановић	II
7.	Младен Миловић	Медицинска школа	Ужице	Милена Јевђовић	III
8.	Милош Матковић	Гимназија "Јован Јовановић Змај"	Нови Сад	Бранка Влаховић	III
9.	Немања Степановић	Гимназија "Бора Станковић"	Ниш	Љиљана Миладиновић	III
10.	Стеван Самарцић	Гимназија "Светозар Марковић"	Јагодина	Марија Станић	III
11.	Драгана Васић	XIII београдска гимназија	Београд	Анита Стојчевски-Миљановић	III
12.	Душан Маленов	Гимназија "Борислав Петров Браца"	Вршац	Везирка Добарцић	III
13.	Невена Шајиновић	Гимназија	Обреновац	Ружица Ковачевић	III
14.	Валентин Шоти	Гимназија "Светозар Марковић"	Суботица	Ева Демек	III

#### I И II РАЗРЕД - ТЕСТ И ИСТРАЖИВАЧКИ РАД

Пласман	Име и презиме ученика	Назив школе	Место	Име и презиме ментора	Ранг
1.	Александра Трајковић	Гимназија "Светозар Марковић"	Ниш	Душица Миљковић	I
2.	Гордана Крстић	Гимназија "Бора Станковић"	Врање	Смиљана Голубовић	II

#### III И IV РАЗРЕД - ТЕСТ И ИСТРАЖИВАЧКИ РАД

Пласман	Име и презиме ученика	Назив школе	Место	Име и презиме ментора	Ранг
1.	Иван Савић	Хемијско-технолошка школа "Божидар Ђорђевић-Кукар"	Лесковац	Анка Јовановић	I
2.	Јелена Благојевић	XIII београдска гимназија	Београд	Милена Бојацић	II



## ХЕМИЈА НА ИНТЕРНЕТУ

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 SOFTWARE I WWW.CHEMISTRY-SOFTWARE.COM

Овај и наредни наставак рубрике **Хемија на интернету** посветићемо приказу два сајта са различитим компјутерским програмима за хемичаре.

Први од њих, је сајт са једноставним именом: [www.chemistry-software.com](http://www.chemistry-software.com) који, како је то на основ-

ној страни сајта наведено, нуди software за хемичаре, биохемичаре и све лабораторијске послове. У питању је комерцијали сајт и све што се на њему нуди могуће је купити било наручивањем, било on line, уз плаћење кредитном картицом. Демо верзије већине

програма могуће је преузети из секције *demo download*, при чему је један део приказа програма могућ искључиво на интернету уз претходно заказивање (потребно је попунити мали образац, а након тога вам се телефонски јавља представник компаније са којим договарате демон-страцију – детаљи се могу пронаћи на страници [http://www.chemistry-software.com/web\\_demo.htm](http://www.chemistry-software.com/web_demo.htm)).

Производи компаније подељени су у 11 категорија, а линкови ка свакој од њих налазе се на левој страни сваке странице сајта. За сваку категорију постоји кратак опис сваког производа у њој, а кликом на назив производа добијају се детаљнији подаци о њему, укључујући и детаљне информације о демо верзији, односно начину демонстрације његових могућности путем интернета. Представимо сваку од категорија и програме у њима:

**1. Chemical Inventory** садржи приграм *Molsearch Chemical Database* и програм *Chemical Inventory System® - CISPro* у верзијама *Desktop*, *Web* и *Enterprise*. У питању су програми за креирање база података за инвентар хемикалија. Први је намењен мањим лабораторијама или складиштима, док је други намењен великим системима, са великим бројем различитих хемикалија (факултети, велике фабрике, добављачи и сл.). Поред евидентирања и праћења тока хемикалија програми омогућавају да за сваку хемикалију постоје и основне информације о особинама, структури и сл, као и *MSDS (Material Safety Data Sheet)* подаци о стандардизованим процедурама за руковање и рад са њима.

**2. LIMS<sup>1</sup> and Sample Tracking** нуди два програма: *STIS - Sample Tracking and Inventory System* - и *Itemtracker*. Оба су мрежни програми за праћење тока узорака или хемикалија у једном систему, на пример факултету. Помоћу њих је могуће у било ком тренутку, са било ког терминала у систему пронаћи где се одговарајућа хемикалија налази. Први има у себи укључене и могућности инвентарисања, док други спречава да се на истом месту складиште или користе супстанце које се међусобно могу загадити (онечистити).

**3. e-Lab Notebooks** је програм сличан word processor-у, али прилагођен хемичарима. Направљен је као електронска верзија лабораторијске свеске, односно намењена је бележењу потребних података током рада у лабораторији. Као и на папиру, оно што је записано не може се избрисати, већ прецртати и поново написати исправно. Тиме је касније лако прати целокупни ток неког експеримента. Уграђени интерфејси омогућавају лако уношење хроматограма, спектара, структурних формула, једначина и сл.

**4. MSDS<sup>2</sup> Management** садржи два програма:

*Lycos Athena 4* - покрива све аспекте достављања и транспорта опасних супстанци у складу са Европским законима (нпр. садржи класификацију опасних супстанци, омогућава израду одговарајућих транспортних етикета свих формата и димензија, да-

је процедуре и стандарде за израду транспортне документације, укључујући и обрасце међународне асоцијације ваздушног транспорта - *IATA - International Air Transport Association*). Програм постоји у верзијама на свих 27 језика чланица Европске Уније.

**MSDS Digital Filing Cabinet** – апликација за чување и коришћење *MSDS* докумената. Дизајнирана је тако да се документи чувају као слике, и зато се брзо и без грешака могу приказати на екрану компјутера или одштампати. Чување је централно, а преглед и штампање могу бити изведени на било ком терминалу мреже. Тиме је омогућена једноставна замена докумената новијим верзијама, уз аутоматско архивирање старих.

**5. Chemical Drawing** категорију чини програм *Chemistry 4-D Draw* за цртање структурних формула једињења. Овај програм најновије генерације омогућава цртање структуре молекула једноставним уношењем имена по IUPAC номенклатури. Поред тога има могућности писања реакција и механизма, цртања дијаграма, интер-активне тродимензионалне ротације, провере синтакси, креирања образаца (template), па и дефинисања тривијалних имена молекула по избору корисника, итд. Подржава велики број графичких формата. Доступан је у чак 9 различитих верзија, у зависности од намене и уграђених опција (*Standard, Standard-Educational, Standard-Student, Professional, Professional-Educational, Professional-Student, Office, Office-Educational, Office-Student*)

**6. Molecular Modeling** садржи чак 9 различитих програма за моделовање молекула. Опције, могућности и цене су им различите, али с обзиром на расположиви простор, навешћемо само њихова имена, а детаље о сваком од њих можете пронаћи на страници: <http://www.chemistry-software.com/molec-mod.htm>

- *Hyperchem 7.5 Professional*
- *Spartan 04*
- *Student HyperChem*
- *ChemSite standard*
- *Q-Chem 2.1*
- *ChemSite Pro*
- *Molecular Modeling Pro*
- *Molecular Modeling Pro Plus*
- *MolSuite*

**7. Chemical Databases** садржи три програма хемијских база података. Први је већ поменути програм *Molsearch Chemical Database*. Ову базу је могуће претраживати текстуално или на основу хемијске структуре, а прикази сваког од преко 10 милиона уноса могу бити у облику формулара или табеле. Преостале две базе података су: *Chemical Databases* (база рецепата лекова и база *ChemicaElectrica*, са 5442 једињења која се најчешће налазе у лабораторијама) и токсиколошка база: *Developmental Toxicological databases*.

**8. Quality Control** категорију чини *ControlChart Pro Plus*, графички програм за *Microsoft Windows*,

1 *Laboratory Information Management Systems*

2 *Material Safety Data Sheet*

дизајниран за израду дијаграма аналитичке контроле квалитета у лабораторијама. Верзија истог програма *ControlChart Pro Plus with Datalink* има уграђене драјвере (drivers) за конекцију са стандардним (desktop) базама података као што су *Microsoft Access, Paradox, Dbase; ODBC* драјвере, као и драјвере за *Enterprise Database Managers* као што су *Oracle* (верзија 6 и више), *Microsoft SQL Server (6.X)* и *Interbase* (верзија 2 и више).

9. **Laboratory Management** је, како јој и име каже, категорија у којој се могу пронаћи програми корисни у руковођењу лабораторијама. На првом месту ту је поменути програм *STIS - Sample Tracking and Inventory System*. Поред њега ту су још два програма:

**Instrument Maintenance & Calibration System Pro, IMCSPRO** – Windows програм намењен праћењу историје инструмената. Термин «instrument history» подразумева врсту и тип инструмента, кварове инструмента и начин његове поправке, као и термине периодичних сервиса, калибрација или контрола исправности.

**Laboratory Document Control System** – Програм за креирање, дистрибуцију и праћење докумената у једној лабораторији, према стандардним процедурама (*SOP-Standard Operating Procedures*).

10. **Educational** категорија је, уствари, електронска књига са насловом: *Named Organic reactions and their mechanisms*, чији је аутор *Dr Bert Kruiswijk*. Преко 1000 органских реакција описано је на преко 2000 страна текста. Примери реакција дати су описивањем сваког степена реакције, уз детаљна објашњења шта се и како током реакције догађа. Књига има преко 7200 литературних навода, закључно са јануаром 2005, са директним линковима ка оним насловима који су бесплатно доступни.

11. У **Other Products** се налазе 4 програма која није било могуће сврстати ни у једну од горе наведених категорија:

**Enzyme Kinetics** – користан програм за све који се баве кинетиком ензима. Помоћу њега могуће је израчунати Michaelis-ову константу ( $K_m$ ), максималну брзину ( $V_{max}$ ) и константу инхибиције ( $K_i$ ).

**Peptide Companion** - програм дизајниран за хемичаре који се баве пептидима, пептидометријом (peptidometrics) и протеинима. Погодан је за манипулацију полинуклеотидима, угљеним хидратима и другим органским молекулима састављеним од дефинисаних субјединица. Израчунава молекулске масе и обрађује податке елементарне анализе (који се могу кориговати за различите додатне молекуле присутне у лиофилизатима), са могућношћу да израчунава и садржај воде и сирћетне киселине, аминокиселински састав и масене спектре пептида.

**Multimedia Spellchecker** – програм који омогућава приступ ка 22 стандардна речника са преко 300 000 дефиниција, укључујући могућност провере исправног писања енглеских речи (check spelling). Између осталих обухвата и следеће публикације: Brody's Medical Dictionary, General Purpose Dictionary, Bouvier's Law Dictionary, Chemistry Dictionary, Physics Dictionary, Electronics Dictionary, Mechanical Engineering Dictionary, Computer Science Dictionary, Dictionary of Investment Terminology, Slang Dictionary, Medical Speller, General Speller, Legal Speller и Science & Technical Speller.

**Mass Spectroscopy Calculator Pro** – Програм са атласом спектра; помоћ у интерпретацији масених спектра.

На крају напоменимо да на сајту постоје посебна секција за куповину, као и секција са ценовником. Могуће је и пријавити се за добијање информација о новим производима (и месечним посебним понудама) путем електронске поште.



## БЕЛЕШКЕ

### IUPAC INTERNATIONAL CHEMICAL IDENTIFIER (INCHI™) WWW.IUPAC.ORG/INCHI

**IUPAC International Chemical Identifier (InChI™)** је јавни (опште доступни) компјутерски програм за идентификацију хемијских супстанци у штампаним и електронским изворима података. Настао је као резултат IUPAC-овог Пројекта 2000-025-1-800, реализованог од 2000. до 2004. године (детаљи о пројекту могу се пронаћи на интернет адреси: <http://www.iupac.org/projects/2000/2000-025-1-800.html>). Верзија 1 овог програма (software, документација, приступни кодови и услови лиценцања) је бесплатно доступна на IUP-

AC-овом сајту: [www.iupac.org/inchi](http://www.iupac.org/inchi). Међутим, пре преузимања (*downloading*), потенцијални корисници морају прихватити услове лиценцања **InChI™** програма, у циљу заштите интегритета алгорита и његове софтверске имплементације (*InChI™ License Agreement*).

За потпуно искоришћење могућности InChI програма, биће неопходно да га креатори софтвера уграде у своје програме. До сада је он уграђен као интегрални део *Chemical Markup Language (www.uml-*