СХД 1897

'19

ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД

год. 60
бр. 4 (септембар)

YU ISSN 04406826
UDC 54.011.93

српско хемијско друштво

ХЕМИЈСКИ ПРЕГЛЕД CHEMICAL REVIEW

Editor-in-Chief
RATKO M. JANKOV
Deputy Editor-in-Chief
DRAGICA TRIVIĆ

Volume 60
NUMBER 4
(September)

Publisher
SERBIAN CHEMICAL SOCIETY
Belgrade/Serbia, Karnegijeva 4

Годиште 60

број 4
септембар

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
Јелена Радосављевић, Наталија Половић и Воин Петровић

УРЕЂИВАЧКИ ОДБОР

Иван Гутман, Снежана Зарић, Јован Јовановић, Славко Кеврешан, Драган Марковић, Владимир Павловић, Радомир Саичић, Живорад Чековић (председник).

Годишња чланарина, укључује часопис „Хемијски преглед", за 2018. годину износи:
- за све запослене и студенте докторских студија 1.800,00
- за професоре у основним и средњим школама..... 1.000,00
- за пензионере, студенте основних и мастер студија, ђаке и незапослене.....800,00
- претплата за школе и остале нституције..... 3.500,00
- за чланове и 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.rs/hp/
e-mail редакције: hempr_ed@chem.bg.ac.rs

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

Штампа: РИЦ графичког инжењерства Технолошко-металуршког факултета Београд, Карнегијева 4

Насловна страна и Интернет верзија часописа:
Слободан и Горан Ратковић, RatkovicDesign
www.ratkovicdesign.net
office@ratkovicdesign.net

САДРЖАЈ

Ана СИМОВИЋ
Ana SIMOVIĆ
ЦРВЕНЕ АЛГЕ И ЊИХОВЕ БИОАКТИВНЕ КОМПОНЕНТЕ
RED ALGAE AND THEIR BIOACTIVE COMPONENTS _ _ _ _ _ _ *78*

Мирјана ПЕТРОНИЈЕВИЋ, Јасмина АГБАБА, Јелена МОЛНАР-ЈАЗИЋ и Сања ПАНИЋ
Mirjana PETRONIJEVIĆ, Jasmina AGBABA, Jelena MOLNAR-JAZIĆ i Sanja PANIĆ
ПРИМЕНА ОДАБРАНИХ УНАПРЕЂЕНИХ ОКСИДАЦИОНИХ ПРОЦЕСА У ПРИПРЕМИ ВОДЕ ЗА ПИЋЕ
ADVANCED OKSIDATION PROCESSES IN DRINKING WATER PRODUCTION _ *84*

Светлана МАРКОВИЋ, Слађана ЂОРЂЕВИЋ, Изудин РЕЏЕПОВИЋ, ЖИКО МИЛАНОВИЋ
Svetlana MARKOVIĆ, Slađana ĐORĐEVIĆ, Izudin REDŽEPOVIĆ, Žiko MILANOVIĆ
СИМУЛИРАЊЕ ХЕМИЈСКИХ СПЕКТАРА ПОМОЋУ СОФТВЕРА ЗА МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛИРАЊЕ
SIMULATION OF CHEMICAL SPECTRA BY MEANS OF THE SOFTWARE FOR MOLECULAR MODELING _ _ _ _ _ _ _ _ _ _ _ *90*

ВЕСТИ из ШКОЛА / ВЕСТИ за ШКОЛЕ
ИЗВЕШТАЈ О РЕЗУЛТАТИМА СА 55. РЕПУБЛИЧКОГ ТАКМИЧЕЊА ИЗ ХЕМИЈЕ ЗА УЧЕНИКЕ ОСНОВНИХ ШКОЛА _ *95*

ИЗВЕШТАЈ О РЕЗУЛТАТИМА СА 55. РЕПУБЛИЧКОГ ТАКМИЧЕЊА ИЗ ХЕМИЈЕ ЗА УЧЕНИКЕ СРЕДЊИХ ШКОЛА _ *99*

ВЕСТИ ИЗ СХД

КРАТКИ ИЗВЕШТАЈ СА 7. РЕГИОНАЛНОГ СИМПОЗИЈУМА ЕЛЕКТРОХЕМИЈЕ ЗЕМАЉА ЈУГОИСТОЧНЕ ЕВРОПЕ – RSE-SEE-7 _ *104*

УВОДНИК

Алге се уопштено могу описати као водени, фотосинтетски, једноћелијски или вишећелијски неваскуларни организми у које се не убрајају копнене биљке (ембриофите) и лишајеви. Највећи су произвођачи кисеоника на Земљи. Већину чине морске алге, док слатководним врстама припада свега око 3 % алги. Микроалге су једноћелијски, микроскопски организми (фитопланктон), док су *макроалге* вишећелијски еукариоти, који се на основу своје боје деле у три главне таксономске групе: браон алге (*Phaeophyta*), зелене алге (*Chlorophyta*) и црвене алге (*Rhodophyta*). Црвене алге су еволутивно веома стара и разноврсна група еукариотских, углавном вишећелијских алги, са око 7000 до сада познатих врста. Црвене алге једне су од (нај)старијих фотосинтетских организама на Земљи, а човек их, од самог почетка људске цивилизације, користи у исхрани. Осим у прехрамбеној индустрији, оне налазе све већу примену у медицини и козметици, као у и производњи високовредног биогорива.

Будући да се користе за производњу листића за припремање једне врсте сушија, *нори алге* су назначајнија врста алги у људској исхрани у свим деловима света. Иако потиче из јужне Кине (VII век), данас је суши синоним за деликатес јапанске кухиње. Сама реч "суши" описује врсту пиринча, и некада се користио као "брза храна", за дуге ноћи. *Маки суши* се данас припрема тако што се на листу направљеном од пресованих (обично црвених) алги најпре дода слој пиринча, потом остали састојци (сирова риба и поврће), и све се то увије у ролну која се сече на комаде (залогаје). У чланку **Ане СИМОВИЋ** (Универзитет у Београду - Хемијски факултет) под насловом "*Црвене алге и њихове биоактивне компоненте*" укратко су приказане најважније биоактивне компоненте црвених алги, уз кратак осврт на нутритивну вредност алги и значај постојеће/будуће примене биоактивних једињења црвених алги у производњи додатака исхрани и фармацеутика.

* * *

Услед све веће потребе за квалитетном водом за пиће, као и због све загађенијих ресурса обезбеђивање здравствено безбедне воде за пиће данас представља један од највећих проблема у свету, који привлачи пажњу стручњака. С обзиром на то да су све оштрији захтеви у погледу квалитета воде за пиће, као и на тренд даљег погоршања квалитета ресурса за водоснабдевање, ради се на усавршавању постојећих технологија, као и увођењу нових поступака прераде воде. Иако је најчешћи и најраспрострањенији здравствени ризик повезан с водом за пиће контаминација патогеним микроорганизмима, не би требало занемарити ни ефекте загађујућих супстанци у дужем временском периоду на здравље људи. Тренутно доступни водни ресурси садрже разне загађујуће супстанце, што технологију њихове прераде често чини комплексном. Често неизбежна примена савремених метода третмана у комбинацији са конвенционалним технологијама додатно повећава инвестиционе и оперативне трошкове.

Једну од највећих тешкоћа у процесу припреме квалитетне воде за пиће представља повећан садржај природних органских супстанци у ресурсима који се користе за водоснабдевање. На територији АП Војводине, Република Србија, водоснабдевање становништва углавном је оријентисано на експлатацију подземних вода, које често карактерише висок садржај природних органских супстанци. То има негативан утицај на квалитет воде за пиће, проузрокујући специфичну жуту до мрку боју, лош мирис и укус воде. Поред тога, може доћи до везивања и транспорта органских и неорганских загађујућих супстанци, као и формирања токсичних оксидационих/дезинфекционих нус-производа.

Иако је развијен читав низ процеса који се примењују за уклањање природних органских супстанци из воде, њихов садржај и структура специфични су за свако подручје, те не постоји универзално решење. Ефикасност унапређених оксидационих процеса зависи од великог броја параметара и неопходно је сагледати их, како са аспекта укупног садржаја природних органских супстанци, тако и тенденције тих супстанци ка формирању нус-производа оксидације. Како би се одабрала, а потом и оптимизовала најпогоднија метода за уклањање природних органских супстанци из воде, ауторке **Мирјана ПЕТРОНИЈЕВИЋ**, **Јасмина АГБАБА**, **Јелена МОЛНАР-ЈАЗИЋ** и **Сања ПАНИЋ** (Технолошки факултет и Природно-математички факултет, Универзитета у Новом Саду) су у чланку "*Примена одабраних унапређених оксидационих процеса у припреми воде за пиће*" дале податке којима се олакшава разумевање механизма сваког појединачног процеса, као и начин на који други састојци у води утичу на његову ефикасност, а све у циљу припреме воде за пиће што бољег квалитета.

* * *

Савремене инструменталне технике нуде могућност прецизног одређивања структуре једињења па су своју примену нашле у хемијским, биохемијским, биолошким и технолошким испитивањима. Важан део овог научно-истраживачког рада представља познавање и тумачење хемијских спектара. Међу великим бројем развијених спектроскопских техника посебно су се истакле: нуклеарна магнетна резонанција (NMR), инфрацрвена (IR) и раманска спектроскопија, ултраљубичаста и видљива спектроскопија (UV-vis), и можда најутицајнија рендгенска структурна анализа.

Развој рачунарских метода и компјутерске технике омогућио је појаву програма за молекулско моделирање који веома успешно репродукују резултате неких уређаја који се користе у спектроскопској инструменталној хемијској анализи. То значи да постоји одлично слагање између експерименталних и израчунатих резултата у оним случајевима где су експериментални резултати доступни, те се може направити поређење. Да би поткрепили ове тврдње, симулирани су хемијски спектри нафталена, а потом поређени са екперименталним спектрима (литературни подаци). У тексту "*Симулирање хемијских спектара помоћу софтвера за молекулско моделирање*", аутора **Светлана МАРКОВИЋ**, **Слађана ЂОРЂЕВИЋ**, **Изудин РЕЏЕПОВИЋ**, (Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу) и **Жико МИЛАНОВИЋ** (Истраживачко-развојни центар за биоинжењеринг БиоИРЦ доо) приказани су добијени резултати.

* * *

У рубрици *Вести из/за школе* у овом броју Хемијског прегледа наћи ћете два веома детаљна изветаја о такмичењима ученика, и то: Извештај о резултатима са **55. Републичког такмичења из хемије за ученике основних школа** и Извештај о резултатима са **55. Републичког такмичења из хемије ученика средњих школа**. Низ година ови извештаји које смо публиковали у *Хемијском прегледу* садржавали су само листу награђених и похваљених ученика. Међутим, овог пута сам одлучио да оба извштаја дам у целости, како би сви заинтересовани могли да виде колико је велики посао урадила група колега који су организовали свако од ова два велика такмичења, с једне стране, али и да сви ученици, који су учествовали на ова два такмичења, могу да виде како је ко прошао, с друге стрне. У рубрици *Вести из СХД* можете прочитати и Кратки извештај са 7. **Регионалног симпозијума електрохемије земаља југоисточне Европе** – RSE-SEE-7, одржаног од 27. до 30. маја 2019. Сплиту, у Хрватској.

* * *

Овај број *Хемијског прегледа* излази у септембру, после годишњих одмора и на почетку нове школске гоине. Надамо се **да сте се добро одморили** и да сте се **с новом енергијом вратили послу** и свом *Хемијском прегледу* у ову јесен 2019.

Ратко М. Јанков

ЧЛАНЦИ

Ана СИМОВИЋ (Универзитет у Београду - Хемијски факултет, Катедра за биохемију; е-пошта: simovic.ana@gmail.com)

ЦРВЕНЕ АЛГЕ И ЊИХОВЕ БИОАКТИВНЕ КОМПОНЕНТЕ

Црвене алге једне су од (нај)старијих фотосинтетских организама на Земљи и користе се у исхрани човека од самих почетака људске цивилизације. Оне налазе све већу примену не само у прехрамбеној индустрији, већ и у медицини, козметици и производњи високовредног биогорива. У овом чланку су укратко приказане најважније биоактивне компоненте црвених алги, уз кратак осврт на нутритивну вредност алги и значај постојеће/будуће примене биоактивних једињења црвених алги у производњи додатака исхрани и фармацеутика.

УКРАТКО О (ЦРВЕНИМ) АЛГАМА

Алге се уопштено могу описати као водени, фотосинтетски, једноћелијски или вишећелијски неваскуларни организми у које се не убрајају копнене биљке (ембриофите) и лишајеви. Највећи су произвођачи кисеоника на Земљи. Већину чине морске, док свега око 3% припада слатководним врстама. Микроалге су једноћелијски, микроскопски организми (фитопланктон), док су *макроалге* вишећелијски еукариоти, који се на основу своје боје деле у три главне таксономске групе: *Phaeophyta* (браон алге), *Chlorophyta* (зелене алге) и *Rhodophyta* (црвене алге). Црвене алге (раздео *Rhodophyta*) су еволутивно веома стара и разноврсна група еукариотских, углавном вишећелијских алги, са око 7000 до сада познатих врста. Већина врста црвених алги су паренхиматозне (*Porphyra*, *Halymenia*), псеудо-паренхиматозне (*Ceramium*), или филаментозне (*Polysiphonia*).

Црвене алге су организми са вишеслојним ћелијским зидом, који је изграђен од пектина и ксилана (спољашњи) и целулозе (унутрашњи слојеви), са додатним хидроколоидним сулфонским полисахаридама као што су агар и карагинан. Ћелијски зид може бити калцификован. Дебљина плазмине мембране износи 8–10 nm, са (на појединим местима) везаним тубулама. Цитоплазма се налази уз ћелијски зид, док средину ћелије заузима вакуола. Голџи апарат црвених алги углавном се састоји од 5–15 цистерни. За разлику од других еукариота, код којих је цис-Голџи област везана за ендоплазматски ретикулум, код већине црвених алги он је у вези са митохондријама. Ендоплазматични ретикулум (глатки и рапави) се налази на периферији ћелије, у близини једра. Једро (може их бити више) је мало, пречника 3–5 μm током интерфазе ћелијског циклуса. Број хромозома варира од 2–100.

Хлоропласти (родопласти) црвених алги садрже појединачне тилакоиде. Фотосинтетски апарат црвених алги је јединствен по томе што садржи једино хлорофил *a*, уз фикобилипротеине са ковалентно везаним линеарним хромофорама који су допунски пигменти за прикупљање светлосне енергије. Фикобилизоми (агрегати фикобилипротеина) одговарају антенама које образују хлорофили *a* и *δ* код зелених алги и виших биљака. Боја црвених алги (различите нијансе црвене до/или љубичасте) зависи од односа садржаја фикоеритрина (црвени) и фикоцијанина (плави фикобилипротеин). Када алга угине, њена боја брзо прелази у зелену, пошто се у води одлично растворни фикобилипротеини исперу, и хлорофил остаје као доминантни пигмент. Други, много мање заступљени, пигменти који се налазе у родопластима црвених алги су α- и β-каротен и ксантофили лутеин и зеоксантин. Главни производ фотосинтезе је флоридеа скроб, у мањој мери и манитол, сорбитол и дулцитол. Флоридеа скроб је у води нерастворан амилопектин веома разгранате структуре (α-1,4 гликозидне везе углавном и α-1,6 гликозидне везе у бочним ланцима глукана). Занимљиво, скроб се код црвених алги складишти у цитоплазми ћелија, а не у хлоропластима као код других група макроалги и код копнених биљака.

Црвене алге карактерише и потпуно одсуство флагеларних структура. Размножавају се полно и бесполно (вегетативно и спорулативно). Вегетативно размножавање остварује се простом деобом, раскидањем колоније, или откинутим деловима талуса. Полно се размножавају оогамијом. У метаболичком погледу, постоје аутотрофне врсте (саме себи стварају храну), потпуни хетеротрофни паразити (узимају готову храну из природе), или полупаразити (епифите). Црвене алге живе на различитим дубинама (и до 250 m). Мали број може да поднесе веће промене темпера-

туре, тако да су најзаступљеније у водама тропских мора. Велики број врста црвених алги живи и у (умерено) континенталним морима, где достижу већу величину, док је у хладним морима број врста веома мали.

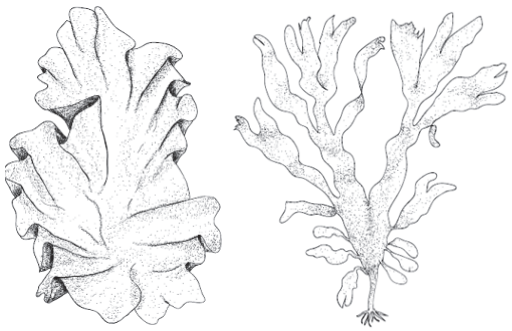
ЗНАЧАЈ (ЦРВЕНИХ) АЛГИ У ИСХРАНИ ЧОВЕКА

У погледу укупне количине и комерцијалне вредности, највећи део морских алги људи користе у исхрани, или за производњу прехрамбених адитива, док се остатак употребљава у медицинске и индустријске сврхе. За разлику од копнених биљака, велика већина алги је јестива, али нису све једнако погодне за исхрану, због тешкоћа у култивисању и, једноставно, зато што нису посебно укусне. Већину алги треба додатно третирати, обично сушењем, кувањем, или пржењем, како би се учиниле укуснијим за човека. У исхрани људи највише користе црвене и браон алге, ређе зелене и модро-зелене алге. Неке врсте црвених алги, као што су *Porphyra* spp. (нори, лавер) и *Palmaria palmata* (дулсе), користе се вековима у људској исхрани. Сматра се да се у Кини и Јапану црвене алге користе као храна више од 4000. година. У нашим крајевима алге су углавном храна макробиотичара.

Будући да се користе за производњу листића за припремање једне врсте сушија, *нори алге* су назначајнија врста алги у људској исхрани у свим деловима света. Иако потиче из јужне Кине (VII век), данас је суши синоним за деликатес јапанске кухиње. Сама реч "суши" описује врсту пиринча, и некада се користио као "брза храна", за дуге коцкарске ноћи. *Маки суши* се данас припрема тако што се на листу направљеном од пресованих (обично црвених) алги најпре дода слој пиринча, потом остали састојци (сирова риба и поврће), и све се то увије у ролну која се сече на комаде (залогаје).

Један од традиционалних састојака сушија су нори црвене алге

Према подацима светске Организације за храну и пољопривреду (ФАО) из 2011. године, светска производња нори алги је већа од 22 милиона тона свежих алги. Латински назив за нори алге (род *Porphyra*) потиче од грчке речи за љубичасто-црвену боју. Нори алге су изузетно хранљиве (**Табела 1**). Прерађују се под контролисаним условима, како би се спречило распадање (биоактивних) компоненти и да би се задржала нутритивна вредност као у свежем производу. Између 30 и 45% суве масе нори алги су протеини, од чега је око 80% сварљиво (организам може да искористи). Садржај протеина се разликује у зависности од сезоне и врсте. Садржај угљених хидрата, дијететских влакана, липида и пепела је, редом, око 40%, 33,7–34,7%, 0,7–1,6% и 8,5–8,7% суве масе. Биотехнолошки третман нори алге ензимима који разграђују влакна је један од начина да се повећа биодоступност протеина. Нори алге садрже (мање-више) једнаке количине ω-3 и ω-6 масних киселина. Садржај хлорофила а, каротеноида, фикоеритрина и фикоцијанина редом износи: 601–646, 120–130, 1289–1802 и 1255–1743 mg/100 g суве масе. Нори алга је богата минералима (посебно са K, Na, Mg, P и Zn). Садржај гвожђа, и посебно јода, је изузетно висок (Табела 1), али је нижи у односу на друге јестиве морске траве/алге. Садржај тешких метала (Cu, Cd и Cr) по правилу је веома низак. Нори је богата витаминима А и Ц. Она садржи око десет пута *више* витамина А од спанаћа, и око четири пута *више* витамина Ц од јабуке исте масе. Међутим, витамин Ц се брзо разграђује у (о)сушеном производу. Због високог садржаја витамина $Б_{12}$ (око 0,06 mg/100 g суве масе) нори алга се препоручује и у вегетаријанској исхрани.



Приказ изгледа нори (*Porphyra* spp.) и дулсе (*Palmaria palmata*) црвене алге (десно)

Богата културна историја везана је за *дулсе црвену алгу* (*Palmaria palmata*), коју су људи који насељавају обале широм света, а посебно оне северног Атлантика и Тихог океана, вековима користили у исхрани. На Исланду, где је позната као söl, дуго је била незамењиви извор дијететских влакана. Назив *Palmaria* добија пошто је талус понекад подељен у делове који изгледају као прсти на руци. Од свих морских алги дулсе има укус који је најприхватљивији за тржишта Европе и Северне Америке. Дулсе има релативно висок садржај протеина (и до 25% суве масе), што је више него у пилетини или бадемима. Међутим, недостаје јој есенцијална амино киселина триптофан. Садржи знатну количину калијума, а у поређењу са другим врстама морских алги сиромашна је липидима, посебно у односу на велике смеђе алге. Угљени хидрати који се налазе у дулсе алги су једноставније форме него у другим врстама морских алги. Као и друге алге, и дулсе је изузетно богат извор гвожђа и јода у исхрани.

Табела 1. Упросечени нутритивни састав црвених алги које се највише користе у исхрани човека: нори (*Porphyra spp.*) и дулсе (*Palmaria palmata*).

Макронутријенти (порција од 7 g)	Енергија (cal)	**Протеини** (g)	**Липиди** (g)	**Угљени хидрати** (g)	**Влакна** (g)
Нори	22	2,5	<0,1	3	2
Дулсе	18	2	<0,1	3	2
Препорука (дневно)	2300	50	65	300	25

Минерали (порција од 7 g)	**I** (μg)	**Ca** (mg)	**Na** (mg)	**K** (mg)	**Mg** (mg)	**P** (mg)	**Fe** (mg)	**Mn** (mg)	**Cu** (mg)	**Cr** (μg)	**Zn** (mg)
Нори	98	13	113	188	26	29	1	0,24	0,04	10	0,29
Дулсе	1169	15	122	547	19	29	2	0,08	0,03	10	0,20
Препорука (дневно)	50	1000	2400	3500	400	1000	18	2,0	2,0	120	15

Витамини (порција од 7 g)	**A** (IU)	**Б$_1$** (mg)	**Б$_2$** (mg)	**Б$_3$** (mg)	**Б$_6$** (mg)	**Б$_{12}$** (μg)	**Ц** (mg)	**E** (IU)
Нори	300	0,04	0,21	0,41	0,78	1,23	0,84	0,36
Дулсе	46	0,01	0,13	0,13	0,63	0,46	0,44	0,12
Препорука (дневно)	5000	1,5	1,7	20	2,0	6,0	60	30

БИОАКТИВНЕ КОМПОНЕНТЕ ЦРВЕНИХ АЛГИ

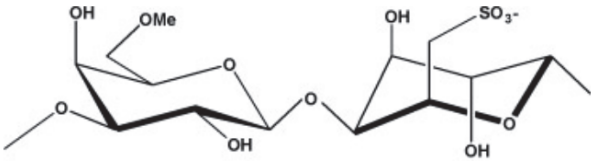
Поред своје нутритивне вредности, алге се на тржишту хране све више рекламирају као "функционална храна" и "нутрацеутици". Ови термини у основи описују храну која садржи обиље биоактивних компоненти, или фитохемикалија. Овакве супстанце, или смеше једињења, поред своје (основне) нутритивне вредности имају и *повољан утицај* на *здравље*. Оне, још увек недовољно изученим механизмима, утичу на превенцију и/или третман многих хроничних болести код људи (канцери, кардиоваскуларне болести, гојазност и/или дијабетес типа 2 и друго).

Дијететска влакна су део хране биљног порекла (у основи безскробни полисахариди) која се потпуно не разлаже деловањем дигестивних ензима. Укупан садржај влакана (растворних и нерастворних у води) код морских алги је много *већи* него у воћу и поврћу. Влакна нерастворна у води немају калоријску вредност, већ поспешују варење тако што везују воду, пружајући осећај увећане масе хране у стомаку, и олакшавају пролаз хране кроз црева и пражњење столице. У води растворна влакна се разграђују у дебелом цреву, успоравају гастрично пражњење и брзину апсорпције угљених хидрата, што помаже снижавању нивоа шећера у крви. Пигменти алги, посебно фикобилипротеини, такође представљају занимљиве молекуле за проучавање њиховог биоактивног потенцијала. Црвене алге садрже и друге, у мањој мери заступљене биоактивне молекуле, као што су пептиди или полифеноли.

Не треба занемарити ни олигоминерални састав морских алги (**Табела 1**), посебно што се у њима углавном налазе у хелираном и колоидном облику, што повећава њихову биодоступност (искористљивост) у телу човека. Епидемиолошке студије су недвосмислено утврдиле да популације које у својој исхрани користе велике количине морских алги имају *мању* стопу горе наведених хроничних обољења, што је потврђено и у неколико клиничких студија. У даљем тексту укратко је сумирано шта се зна о заштитном деловању најзаступљенијих биоактивних компоненти црвених алги. Ови и други налази свакако су додатни аргумент у корист (свакодневне) употребе алги у исхрани савременог човека.

СУЛФОНОВАНИ ПОЛИСАХАРИДИ

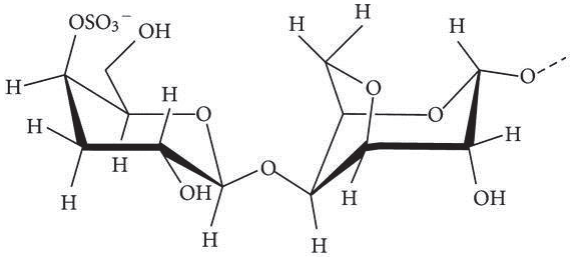
Порфиран је унутарћелијски сулфоновани агароколоид сложене структуре, који се састоји од остатака D-галактозе, L-галактозе, 3,6-анхидро-L-галактозе, 6-O-метил-D-галактозе и сулфатних естара. Примена праха сушене нори (*P. tenera*) алге у исхрани показала је хемопревентивни учинак против канцера јетре изазваног диетил-нитрозамином. Даље, на ћелијама канцера желуца, изоловани порфиран из ове алге смањује фосфорилацију рецептора за инсулину сличан фактор раста 1 и активира каспазу-3, сигнални протеин која нисходно активира процес апоптотске (програмиране) смрти канцерских ћелија. Сулфоновани полисахариди из *P. yezoensis* показали су инхибиторно дејство на раст ћелија канцера желуца и плућа, а производи њиховог разлагања, настали након третмана ултразвуком, значајно су повећали анти-пролиферативни ефекат на ћелије канцера желуца.



Основна структурна јединица порфирана, сулфонованог полисахарида алги

Нори алга поред порфирана садржи и друге антитуморске компоненте. Нађено је да њен висок унос повољно утиче на смањење ризика од канцера дојке. Примена порфирана изолованог из *P. haitenesis* повећава синтезу фактора некрозе тумора-α и интерлеукина-10 у ћелијској линији мишијих моноцит-макрофага RAW264.7, што указује на његову имуно-модуларорну активност. Порфиран из *P. haitenesis* показује и снажну *in vitro* антиоксидативну активност. Након интраперитонеалне примене код старих мишева, активност супероксид-дисмутазе и глутатион-пероксидазе, кључних ензима заштитног антиоксидативног система, као и укупан антиоксидативни капацитет значајно су увећани. Штавише, ниво пероксидације липида значајно је умањен у свим тестираним органима (плућа, јетра, срце, мозак, слезина), што указује да порфиран има и значајну *in vivo* антиоксидативну активност.

Карагенани црвених алги чине породицу од шест типова линеарних, хидрофилних, сулфонованих галактана. Три главна варијетета (капа, јота и ламбда) се разликују у степену сулфатације основне дисахаридне структуре. Због својих гелирајућих и стабилишућих својстава (снажно се везују за протеине хране) много се користе у индустрији хране. Карагенани имају добро документовани анти-вирусни ефекат, на примеру инфекција вирусом херпеса, денга вирусом, HIV-вирусом и код хуманог папилома вируса. Претпоставља се да се снажан анти-вирусни ефекат састоји из два паралелна процеса: спречавање напада и уласка вируса на/у ћелије, и јачање урођеног имуног система и ометање даље инфекције преносом вируса путем крви. Неколико студија је показало антитуморски потенцијал карагенана, као и њихове анти-ангиогене ефекте код мишева. Утврђена је и индукција апоптозе у туморским ћелијама црева човека (Caco-2) и хепатичним ћелијским линијама (HepG2), при чему токсичност није примећена на здравим ћелијама. Описано је и да су про-апоптопски ефекти карагенана посредовани каспазом-3, каспазом-9, p53, Bax и Bcl-2 протеинима у MDA-MB-231 метастатским ћелијама рака дојке.

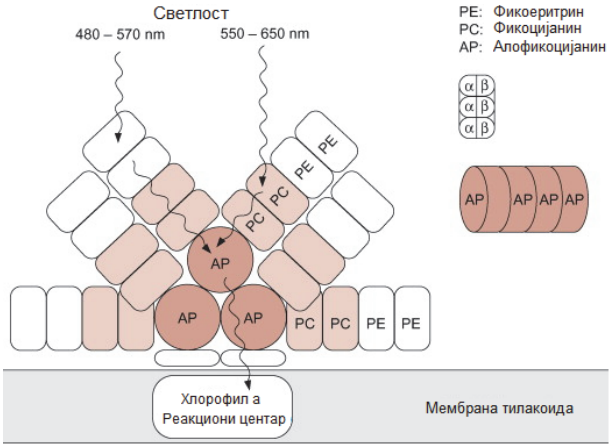


Основа структуре κ-карагенана из црвених алги

Без обзира на све ове резултате, треба бити опрезан у погледу сигурности (будуће) терапијске примене карагенана. Наиме, испитивања везе између излагања карагенанима и појаве улцерација црева и гастроинтестиналних неоплазми указала су на могућу карциногеност производа биотрансформације карагенана у животињским моделима, као и да неразложени карагенани у неким експерименталним моделима утичу на формирање тумора. Зато су даља истраживања с тим у вези неопходна.

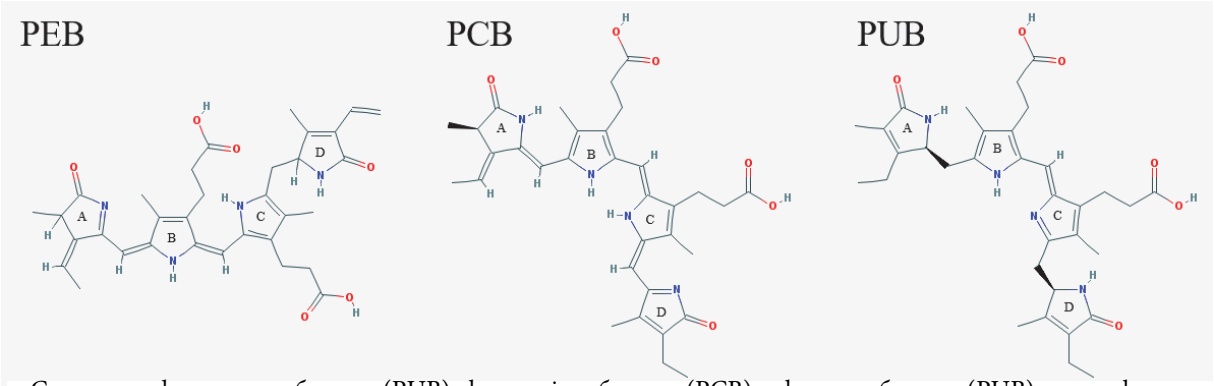
ФИКОЕРИТРИН

Фикоеритрин припада фамилији интезивно обојених флуоресцентних фикобилипротеина растворних у води. Фикобилипротеини су саставни део *фикобилизома*, супра-молекулских протеинских комплекса на мембрани тилакоида са стране строме хлоропласта. Њихова физиолошка улога је прикупљање светлосне енергије таласних дужина од 450 nm до 650 nm (у овом опсегу хлорофил *a* слабо апсорбује светлост) и потом њено преношење до фотосистема II. Према боји и апсорпционим својствима, разликују се три групе фикобилипротеина: *фикоеритрин* (PE; λ_{max}=540–570 nm; λF_{max}=575–590 nm), розе до црвене боје; *фикоцијанин* (PC; λ_{max}=610–620 nm; λF_{max}=645–653 nm), љубичасте до плаве боје; и *алофикоцијанин* (APC; λ_{max}=650–655 nm; λF_{max}=657–660), плаве боје.



Поједностављени схематски приказ структуре фикобилизома

Основна јединица структуре свих фикобилипротеина је хетеродимер кога чине α и β субјединице различите дужине (160–180 аминокиселина) и молекулске масе (16–21 kDa). Јединична структура формира $(\alpha\beta)_3$ тример, а потом два тримера образују хексамер $(\alpha\beta)_6$. Додатна γ јединица (30–33 kDa) постоји само код црвених алги и стабилизује олигомерну структуру фикоеритрина. Разлике у боји фикобилинских протеина последица су различитог садржаја линеарних тетрапиролних хромофора (*фикобилини*), које су ковалентно, тиоетарским везама везане за апопротеин. У црвеним алгама то су жуто обојени фикоуробилин (PUB), црвени *фикоеритробилин* (PEB) и плави фикоцијанобилин (PCB). Ове три хромофоре су изомери и



Структура фикоеритробилина (PUB), фикоцијанобилина (PCB) и фикоуробилина (PUB), хромофора у саставу фикоеритрина

разликују се у броју и распореду коњугованих двоструких веза и местима везивања за субјединице протеина.

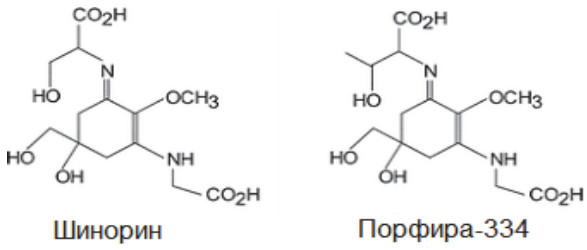
Јединствене спектралне карактеристике, сложена протеинска природа и изразита биолошка активност фикоеритрина разлог су његове све веће примене у козметици, фармацеутској индустрији и биомедицини. Фикоеритрин из црвене алге *Kappaphycus alvarezzi* показао је одличну антиоксидативну активност у великом броју *in vitro* есела. Пречишћени фикоеритрин из цијанобактерије *Phormidium tenue* олакшава симптоме настале услед стрептозоцином-изазваног дијабетеса типа 2 код пацова, док онај из *Lyngbya sp.* продужава животни век црва (*Caenorhabditis elegans*) и побољшава функције чије је опадање повезано са старошћу. Даље, фикоеритрин и његова хромофора фикоеритробилин из *P. yezoensis* испољавају снажну антиинфламаторну активност *in vitro*, супримирајући дегранулацију мастоцита. Због високог квантног приноса флуоресценције, која може да буде летална за туморске ћелије, и мале фототоксичности, фикоеритрин је обећавајући фотосензитајзер у фотодинамској терапији код различитих типова чврстих тумора. На пример, третман хепатоцелуларног карцинома пречишћеним фикоеритрином (250 mg/L), и потом озрачивање тумора Ar или He-Ne ласером, значајно инхибира његов раст и активира процесе апоптозе.

БИОАКТИВНИ ПЕПТИДИ

Црвене алге садрже различите биоактивне пептиде. Онај секвенце PPY учествује у анти-туморској ћелијској сигнализацији у процесу апоптозе, док PY-PE пептид, секвенце ALEGGKSSGGGEATRDPET, испољава пролиферативни ефекат на интестиналне епителне ћелије. Даље, хидролизат *P. yezoensis* показао је изражену инхибиторну активност на ангиотензин-конвертујући ензим (ACE), важан негативни регулатор ренин-ангиотензин система за регулацију крвног притиска. Орална примена ACE-инхибиторних пептида (Ile-Tyr; Met-Lys-Tyr; Ala-Lys-Tyr-Ser-Tyr i Leu-Arg-Tyr), изолованих из хидролизата *P. yezoensis*, показала је њихов значајан анти-хипертензивни ефекат код спонтано хипертензивних пацова. Дипептид ансерин (β-аланил-1-метил-L-хистидин), такође је идентификован као антиоксидативна компонента у *P. yezoensis* и предмет је опсежних истраживања. Протеински хидролизат из *P. columbina* показује значајну имуномодулаторну активност *in vitro*, но структура и механизам деловања ових пептида још увек нису утврђени.

МИКРОСПОРИНСКЕ АМИНОКИСЕЛИНЕ

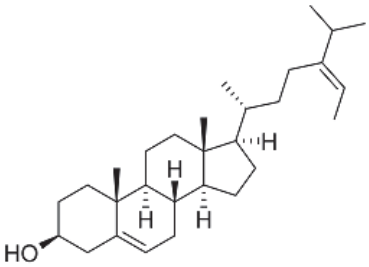
Микроспоринске аминокиселине су карактеристични метаболички производи цијанобактерија, морских (микро- и макро-) алги и гљива. Порфира-334 је најзаступљенија микроспоринска аминокиселина у *P. yezoensis*, за коју постоје подаци да има снажну антиоксидативну активност и да убрзава зарастање рана. Када је испитан заштитни ефекат порфира-334 на UV-A зрачењем-изазвано старење фибробласта коже, добијено је умањено стварање реактивних врста, као и стимулација биосинтезе компоненти ванћелијског матрикса (проколаген, колаген тип I и еластин). Даље, екстракт *P. umbilicalis*, обогаћен са порфира-334 и шинорином, другом доста заступљеном микроспоринском аминокиселином црвених алги, значајно умањује ниво оштећења ДНК молекула и степен липидне пероксидације.



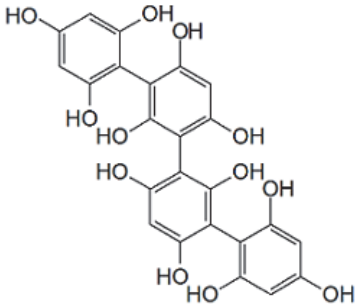
Структура микроспоринских аминокиселина црвених алги

ДУГОЛАНЧАНЕ ПОЛИНЕЗАСИЋЕНЕ МАСНЕ КИСЕЛИНЕ

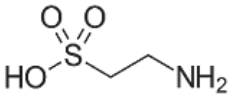
Најзаступљеније полинезасићене киселине дугог низа код црвених алги су еикозапентаенска (EPA; 20:5 ω-3) и арахидонска масна киселина (ARA; 20:4 ω-6). У црвеним алгама *Porphyra umbilicalis* и *Palmaria palmata* EPA чини и до 50% укупног садржаја масних киселина. За животиње су ове две масне киселине есенцијалне, с обзиром да не могу да их синтетишу



Фукостерол



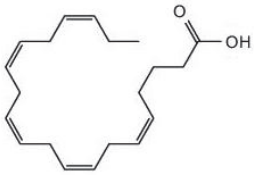
Флоротанин А

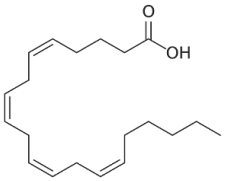


Таурин

Структуре још неких биоактивних компоненти црвених алги

(ARA у довољној количини), а од кључне су важности за здравље човека. EPA је, између осталог, важна за нормални раст фетуса и функцију кардиоваскуларног система, а ARA учествује у ћелијској сигнализацији и кључан је инфламаторни посредник. Морске макроалге, међутим, по правилу имају веома низак садржај укупних липида, тако да препоручени (реални) дневни унос црвених алги (од око 7 g суве масе) које имају висок удео полинезасићених масних киселина у својим липидима, неће обезбедити њихов препоручени дневни унос за организам (одраслог) човека.





Структура еикозапентаенске (лево) и арахидонске масне киселине, којима су црвене алге посебно богате

ДРУГЕ БИОАКТИВНЕ КОМПОНЕНТЕ ЦРВЕНИХ АЛГИ

Црвене алге садрже незанемарљиве количине и других значајних биоактивних супстанци: фенолна једињења, флоротанини, фукостерол и таурин. Најважнија фенолна једињења у *P. dentata* су катехол, рутин и хесперидин. Сирови екстракт богат овим једињењима инхибира синтезу гасовитог азот(II)-оксида, стимулисањем настајања липополисахарида. Флоротанини, полимери флороглуцинола и 1,3,5-трихидроксибензена, су једињења фенолне природе која апсорбује UV зрачење и показују значајно антиоксидативно деловање. Флоротанини су, очекивано, показали заштитни ефекат против канцерогенезе коже изазване UV-B зрачењем, као и инхибиторни ефекат на разградњу колагенског матрикса у кожи. Фукостерол је посебно заступљен у браон и (мање) у црвеним алгама, и показано је да ово једињење помаже у третману компликација дијабетеса и артеријске хипертензије. Таурин (2-аминоетансулфонска киселина) делује као неуро-трансмитер, антиоксидант и модулатор унутарћелијског нивоа калцијума и као електролит. Показао се као ефикасан у снижавању нивоа холестерола и аполипопротеина Б-100 (структурна компонента LDL-честица) у серуму, што би требало да смањује ризик од настанка атеросклерозе и коронарне болести срца. Месо и млечни производи су богати таурином, али не и храна биљног порекла, са изузетком морских алги. Сушена нори алга је веома богат извор таурина (13,0 mg/g суве масе).

ЗАКЉУЧАК

С обзиром на значај који (црвене) алге имају у исхрани човека, испитивања биодоступности (искористљивости) и биоактивности њених најважнијих компоненти, пре свега протеина и полисахарида, је од изузетног значаја. Велики потенцијал за истраживања на овом пољу упућује на заједнички рад алголога са другим научницима и клиничарима, али и на сарадњу са инжињерима који би пројектовали системе за ефикасан узгој и производњу црвених алги на комерцијалној скали.

Abstract

RED ALGAE AND THEIR BIOACTIVE COMPONENTS

Ana SIMOVIĆ, University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia

Algae have an extremely important role in the ecosystem. The nutritional potential of these marine organisms could be greatly exploited in reducing world hunger. Red algae are extremely rich in bioactive components with proven benefits for human health. In this article, the structure and emerging roles of these compounds are briefly presented.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ariffin SH, Yeen WW, Abidin IZ, Abdul Wahab RM, Ariffin ZZ, Senafi S. Cytotoxicity effect of degraded and undegraded kappa and iota carrageenan in human intestine and liver cell lines. BMC Complement Altern Med. 2014;**14**:508.
2. Bito T, Teng F, Watanabe F. Bioactive compounds of edible purple laver *Porphyra* sp. (nori). J Agric Food Chem. 2017;**65**:10685-92.
3. Bocanegra A, Bastida S, Benedí J, Ródenas S, Sánchez-Muniz FJ. Characteristics and Nutritional and Cardiovascular-Health Properties of Seaweeds. J Med Food. 2009;**12**(2):236-58.
4. Bourgougnon N, editor. Advances in botanical research: Sea plants. Amsterdam (Netherlands): Elsevier Academic Press; 2014.

5. Cai C, Wang Y, Li C, Guo Z, Jia R, Wu W, Hu Y, He P. Purification and photodynamic bioactivity of phycoerythrin and phycocyanin from Porphyra yezoensis Ueda. J Ocean Univ China. 2014;13(3):479-84.
6. Cao J, Wang J, Wang S, Xu X. Porphyra species: A mini-review of its pharmacological and nutritional properties. J Med food. 2016;**19**(2):111-9.
7. Cian RE, Drago SR, Medina FS, Martínez-Augustin O. Proteins and carbohydrates from red seaweeds: evidence for beneficial effects on gut function and microbiota. Mar Drugs. 2015;**13**:5358-83.
8. Fleurence J, Levine I, editors. Seaweed in health and disease prevention. 1st Ed. Cambidge: Academic Press; 2016.
9. Harnedy PA, FitzGerald RJ. Bioactive Proteins, Peptides, And Amino Acids From Macroalgae. J Phycol. 2011;**47**(2):218-32.
10. Mouritsen OG. Seaweeds: edible, available & sustainable. Chicago; London: University of Chicago Press, 2013.
11. Ryu J, Park SJ, Kim IH, Choi YH, Nam TJ. Protective effect of porphyra-334 on UVA-induced photoaging in human skin fibroblasts. Int J Mol Med. 2014;**34**(3):796-803.
12. Sakai S, Komura Y, Nishimura Y, Sugawara T, Hirata T. Inhibition of mast cell degranulation by phycoerythrin and its pigment moiety phycoerythrobilin, prepared from Porphyra yezoensis. Food Sci Technol Res. 2011;**17**:171-177.
13. Sangeetha P, Babu S, Rengasamy R. Antioxidant properties of R-Phycoerythrin from *Kappaphycus alvarezii* (Doty) Doty ex Silva. J Innov Res Sol. 2017;**3**:47-56.
14. Sonani RR, Rastogi RP, Patel R, Madamwar D. Recent advances in production, purification and applications of phycobiliproteins. World J Biol Chem. 2016;**7**(1):100-9.
15. Sonani RR, Singh NK, Awasthi A, Prasad B, Kumar J, Madamwar D. Phycoerythrin extends life span and health span of *Caenorhabditis elegans*. AGE (Dordr). 2014;**36**(5):9717.
16. Stadnichuk IN, Tropin IV. Phycobiliproteins: Structure, functions and biotechnological applications. Appl Biochem Microbiol. 2017;**53**(1):1-10.
17. Wells ML, Potin P, Craigie JS, Raven JA, Merchant SS, Helliwell KE, Smith AG, Camire ME, Brawley SH. Algae as nutritional and functional food sources: revisiting our understanding. J Appl Phycol. 2017; **29**(2):949-982.

Мирјана ПЕТРОНИЈЕВИЋ*, Јасмина АГБАБА, Јелена МОЛНАР ЈАЗИЋ** и Сања ПАНИЋ***
*** Технолошки факултет, Универзитет у Новом Саду,**
**** Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Трг Доситеја Обрадовића 3, Нови Сад, e-mail: mirjana.petronijevic@uns.ac.rs, jasmina.agbaba@dh.uns.ac.rs, jelena.molnar@dh.uns.ac.rs, sanjar@tf.uns.ac.rs**

ПРИМЕНА ОДАБРАНИХ УНАПРЕЂЕНИХ ОКСИДАЦИОНИХ ПРОЦЕСА У ПРИПРЕМИ ВОДЕ ЗА ПИЋЕ

УВОД

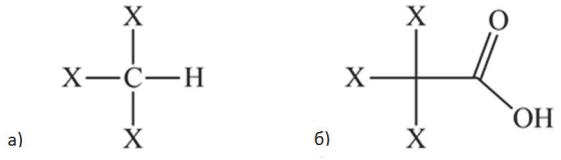
Обезбеђивање здравствено безбедне воде за пиће данас представља један од највећих проблема у свету, који привлачи пажњу стручњака услед све веће потребе за квалитетном водом за пиће, као и због све загађенијих ресурса. Тренутно доступни водни ресурси садрже разне загађујуће материје што технологију њихове прераде често чини комплексном, уз често неизбежну примену савремених метода третмана у комбинацији са конвенционалним технологијама што додатно повећава инвестиционе и оперативне трошкове. С обзиром на све оштрије захтеве у погледу квалитета воде за пиће, као и тренд даљег погоршања квалитета ресурса за водоснабдевање, ради се на усавршавању постојећих технологија, као и увођењу нових поступака прераде воде. Иако је најчешћи и најраспрострањенији здравствени ризик повезан са водом за пиће контаминација патогеним микроорганизмима, не би требало занемарити ни ефекте присуства загађујућих материја које могу у дужем временском периоду довести до штетног дејства на здравље људи.

Једну од највећих потешкоћа у процесу припреме квалитетне воде за пиће представља повећан садржај природних органских материја у ресурсима који се користе за водоснабдевање. На територији АП Војводине, Република Србија, водоснабдевање становништва углавном је оријентисано на експлатацију подземних вода, које често карактерише присуство и висок садржај природних органских материја (ПОМ). Присуство ПОМ има негативан утицај на квалитет воде за пиће проузрокујући специфичну жуту до мрку боју, лош мирис и укус воде. Поред тога, ПОМ испољавају и снажну тенденцију ка везивању и транспорту органских и неорганских загађујућих материја, као и формирању токсичних оксидационих/дезинфекционих нус-производа.

Природне органске материје представљају сложен матрикс органског материјала чији састав је веома комплексан. Њихове карактеристике варирају од локалитета до локалитета на коме су настале и условљене су сезонским променама. Груба подела природних органских материја може се извршити на: нехуминске материје (амино киселине, угљоводоници,

угљени хидрати, масти, воскови, смоле, нискомолекуларне киселине и др.) и на веома комплексне хетерогене хуминске материје. Хуминске материје чине 80-95% укупног садржаја природних органских материја и имају значајну улогу у процесима који се одвијају у природним водама. Једна од најзначајнијих подела хуминских материја је извршена на основу њихове растворљивости на хуминске киселине (растворне у базној средини), фулвинске киселине (растворне при свим условима pH) и хумине (нерастворне) [1,2]. Ова једињења представљају високо хидрофобне органске материје, које се састоје из хетерогених макромолекула сачињених од ароматичних и алифатичних угљоводоничних структура различитих молекулских маса, хидрофобности и врсте присутних функционалних група. Дефинисање прецизне хемијске структуре природних органских материја није могуће извршити због сложености ових молекула, као и због њихове разноврсности, што доводи до потешкоћа у одређивању њихових физичко-хемијских особина. Већина доступних података о природним органским материјама се односи на просечне карактеристике и структуру велике групе познатих компонената које улазе у њихов састав [3,4].

Иако природне органске материје имају веома значајну улогу у биогеохемијским циклусима у природи, њихово присуство у водним ресурсима је непожељно. Један од главних проблема везаних за присуство природних органских материја у води јесте формирање нус-производа оксидације/дезинфекције. Оксидациона средства која се користе у поступку припреме воде за пиће, у циљу дезинфекције и/или промене карактеристика воде услед оксидације, ступају у реакцију са природним органским материјама доводећи до формирања великог броја органских и неорганских нус-производа. Једињења која се формирају као резултат самог процеса дезинфекције (нпр. хлорисања, хлораминације) се могу назвати и дезинфекционим нус-производима. До данас је идентификовано преко 600 нус-производа оксидације/дезинфекције у води за пиће, међутим, још увек нису позната сва једињења која могу настати, као ни њихови могући токсични утицаји на здравље људи, посебно при хроничном уносу ниских концентрација. Једињења која се доминантно формирају у води за пиће су трихалометани и халосирћетне киселине, чије структуре су приказане на сл. 1. Нус-производи оксидације се у води јављају у веома ниским концентрацијама од неколико μg/l (ppb), па до неколико десетина или стотина μg/l. Резултати токсиколошких студија показују да ова једињења испољавају изразито токсично дејство по здравље људи, иако су присутна у овако ниским концентрацијама [5,6].Садржај одређених нус-производа је у води за пиће регулисан Правилником о хигијенској исправности воде за пиће Републике Србије [7], Директивом Европске Уније [8], као и препорукама Светске здравствене организације [9]. Због великог броја нус-производа који се могу формирати није могуће спровести испитивања за сва једињења, тако да нека од њих додатно представљају потенцијални ризик по здравље људи.



Сл. 1. Хемијска структура а) трихалометана и б) халосирћетних киселина (X представља атом халогена: Cl, Br или I).

Најбољи приступ контроли формирања нус-производа оксидације/дезинфекције представља уклањање њихових прекурсора из воде пре дезинфекције. Смањењем садржаја природних органских материја у води значајно се може смањити и настанак органских нус-производа након дезинфекције. Данас се у припреми воде за пиће примењују различити процеси, који се могу поделити на конвенционалне (озонизација, коагулација, флокулација, апсорпционе технике) и савремене (комбинација озона са ултраљубичастим (UV) зрачењем (O_3/UV), комбинација водоник-пероксида са UV зрачењем (H_2O_2/UV), O_3/H_2O_2 (пероксон процес), Фентон процес и др.). Конвенционалним поступцима третмана воде природне органске материје је могуће уклонити само до одређеног степена. Из тог разлога се све више прибегава примени комбинације два или више физичко-хемијских процеса, познатијих под називом унапређени оксидациони процеси, (енг. advanced oxidation processes, AOP).

УНАПРЕЂЕНИ ОКСИДАЦИОНИ ПРОЦЕСИ У ПРИПРЕМИ ВОДЕ ЗА ПИЋЕ

Унапређени оксидациони процеси у припреми воде за пиће имају веома значајну улогу јер омогућавају дезинфекцију воде, као и оксидацију неорганских и органских компонената присутних у води. Основна карактеристика свих унапређених процеса је формирање реактивних оксидационих врста - хидроксил радикала, који доводе до оксидације или/и минерализације органских материја у води [10-12]. Унапређени оксидациони процеси обухватају широк спектар процеса, а њихова разноликост је условљена чињеницом да се хидроксил радикали могу формирати на различите начине, што омогућава усклађивање са различитим потребама у третману вода. Перформансе процеса оксидације, односно генерисање радикалских ланчаних реакција, могу се унапредити оптимизацијом процесних параметара (подешавањем одговарајуће pH вредности, додатком водоник-пероксида или катализатора).

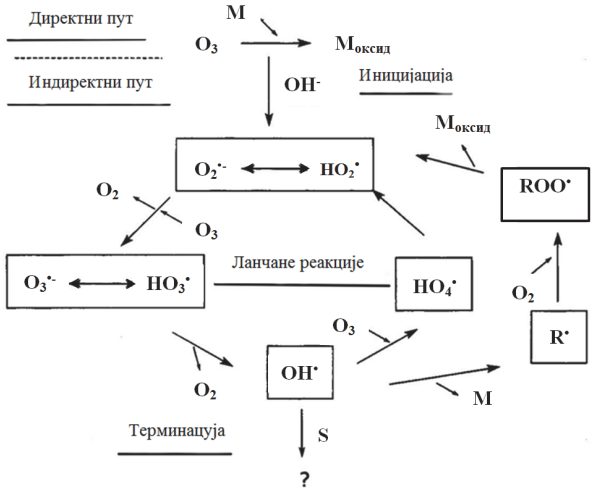
Примена озона и унапређених оксидационих процеса на бази озона

Озонизација и каталитичка озонизација

Примена озона у процесу припреме воде за пиће је веома распрострањена. Озонизацијом се поред де-

зинфекције и селективног уклањања прекурсора оксидационих/дезинфекционих нус-производа, остварује и низ других позитивних ефеката у погледу квалитета воде.

Озон са различитим материјама у води може да реагује на два начина: директним селективним реакцијама молекула озона (директан пут) и/или индиректним неселективним реакцијама радикалских врста које се формирају декомпозицијом озона (индиректан пут). Један од предложених механизама озонизације је приказан на слици 2. У зависности од циља третмана, оба пута реакције озона могу имати значајне ефекте [13]. У случају дезинфекције важнији је пут директне оксидације, док су за оксидацију одређених микрополутаната значајније реакције радикалског типа. На постојаност растворeног озона и на његов механизам деловања утиче велики број фактора као што су: температура, pH вредност, садржај супстанци присутних у раствору, садржај инхибитора и други.



Сл. 2. Предложени механизам озонизације (R - алкил/арил радикал, M - микрополутанти, S - „хватачи“ хидроксил радикала, односно инхибитори хемијске реакције) (преузето и модификовано из [14]).

Последица реакције озона и природних органских материја је промена структуре органских материја која се огледа у релативно брзом уклањању боје, лошег укуса и мириса воде, смањењу молекулских маса ПОМ, смањењу UV-апсорбанције, повећању броја киселих функционалних група и стварању поларнијих једињења, као и повећању биоразградљивости у води присутних органских материја [15]. Разградња природних органских материја може резултовати и смањењем њихове реактивности ка формирању дезинфекционих нус-производа хлорисања.

Применом озона у третману воде постижу се бројни позитивни ефекти: побољшавају се органолептичке особине воде; долази до оксидације гвожђа, мангана и сулфида; озон спада у најефикаснија дезинфекциона средства и захтева кратко време контакта; ефикаснији је од хлора, хлор-диоксида и хлорамина за инактивацију вируса; у одсуству бромида не долази до формирања халогених дезинфекционих нус-продуката, а након декомпозиције озона, као резидуал остаје само кисеоник. Међутим, примена озона има и неких недостатака: долази до формирања оксидационих нус-продуката као што су алдехиди, кетони, карбоксилне киселине, бромати [11]; цена озонизације је висока - производња озона је енергетски захтевна и мора се изводити на лицу места; озон је јако корозиван и токсичан гас [10-13,16].

Каталитичка озонизација је првобитно испитивана као хомогена каталитичка озонизација, која се заснива на активирању озона јонима метала присутним у воденом раствору, а након тога и као хетерогена каталитичка озонизација у присуству оксида метала (MnO_2, TiO_2, Al_2O_3) или оксида метала диспергованих на различитим, углавном традиционалним носачима (TiO_2/Al_2O_3, Fe_2O_3/Al_2O_3).

Каталитичка активност је највећим делом заснована на декомпозицији озона и унапређењу формирања хидроксил радикала.

Досадашња испитивања процеса каталитичке озонизације су указала на постојање различитих механизама озонизације. У циљу разумевања механизма каталитичке озонизације у присуству чистог металног оксида као хетерогеног катализатора неопходно је познавање физичких и хемијских карактеристика самог катализатора. У најважније физичке карактеристике катализатора убрајају се: специфична површина, густина, порозност, расподела величина пора по пречнику, механичка чврстоћа, чистоћа и комерцијална доступност. Најзначајније хемијске карактеристике су хемијска стабилност и присуство површинских активних центара, као што су нпр. Lewis-ови кисели центри одговорних за каталитичке реакције [17]. Дефинисана су три механизма каталитичке озонизације у хетерогеним системима: 1. хемисорпција озона на каталитичкој површини која доводи до формирања активних врста које даље реагују са не-хемисорбованим органским молекулима; 2. хемисорпција органских молекула на површини катализатора и њихова даља реакција са озоном; 3. симултана хемисорпција озона и органских молекула што за последицу има интеракцију између хемисорбованих врста.

Ефикасност процеса каталитичке озонизације зависи највећим делом од природе и површинских карактеристика катализатора, као и од pH вредности раствора која директно утиче на карактеристике активних центара на површини катализатора и декомпозицију озона. Разлике у погледу површинских карактеристика катализатора, као и интеракција између катализатора, озона и органских молекула захтевају испитивање активности сваког катализатора понаособ у процесу озонизације [18,19].

Комбинација примене озона и ултраљубичастог зрачења (O3/UV процес)

O_3/UV процес је један од хомогених унапређених процеса који се примењује у циљу постизања ефикасне оксидације и деградације у води присутних органских загађујућих материја. Увођењем UV зрачења током процеса озонизације поспешује се формирање хидроксил радикала, који затим ступају у реакцију са

природним органским материјама доводећи до њихове разградње и минерализације.

Током O_3/UV процеса, различитим реакционим путевима, долази до формирања различитих оксидационих врста као што су водоник-пероксид и хидроксил радикали. У случају када је растворени озон изложен UV зрачењу, ефикасно бива фотолизован до побуђеног атома кисеоника, који потом са водом гради водоник-пероксид. Настали водоник-пероксид даље може да ступи у реакцију са озоном или да фотолизује до хидроксил радикала [20]. Такође, одвијање процеса у базној средини фаворизује формирање хидроксил радикала. Механизам формирања хидроксил радикала у току O_3/UV процеса приказан је реакцијама 1 и 2 [21].

$$O_3 + H_2O + hv \rightarrow O_2 + H_2O_2 \quad (1)$$

$$H_2O_2 + h\upsilon \rightarrow 2\,OH^{\bullet} \quad (2)$$

Током протекле деценије O_3/UV процес је привукао велику пажњу у области припреме воде за пиће. Бројне студије указале су да је O_3/UV процес ефикаснији за разградњу природних органских материја од саме озонизације. Повећање дозе озона и UV зрачења поспешује уклањање природних органских материја током комбинованог процеса. Повећањем дозе озона обезбеђује се додатни расположиви молекулски озон и хидроксил радикали (настали фотолизом озона) потребни за минерализацију органске материје [12, 21, 22].

Примена O_3/UV процеса има низ предности: постизање дезинфекције, виша ефикасност у односу на појединачне процесе (озонизација или UV зрачење) при истим реакционим условима [21-23], висока ефикасност у уклањању прекурсора нус-производа дезинфекције [22].

С друге стране, процес поседује и бројне недостатке: енергетски је захтеван и скуп, високи су трошкови кисеоника потребног за прозводњу озона, постоји ризик од формирања бромата у водама које садрже бромид [11, 23], UV лампе представљају потенцијалну опасност од контаминације воде живом, а потенцијална опасност постоји и од формирања нус-производа дезинфекције након процеса у комбинацији са пост-хлорисањем [11].

Комбинација примене озона и водоник-пероксида (Пероксон процес)

Пероксон процес (O_3/H_2O_2) представља хомогени унапређени оксидациони процес код ког су трансформација озона и формирање хидроксил радикала убрзани додатком водоник-пероксида. Додавање водоник-пероксида представља један од најједноставнијих и најјефтинијих начина да се иницира разлагање озона и формирају високо реактивни хидроксил радикали.

Први реакциони корак пероксон процеса представља процес преноса електрона, при чему водоник-пероксид прелази у анјонски облик. Анјонски облик водоник-пероксида у реакцији са озоном доводи до формирања супероксид анјон радикала и озон анјон радикала који након низа радикалских реакција доводе до формирања хидроксил радикала. Хидроксил радикали доводе до разградње и минерализације различитих органских материја присутних у води [24]. Предложени механизам пероксон процеса је приказан реакцијама 3-9. Сумарна реакција настајања хидроксил радикала (реакција 10) указује да је за добијање два хидроксил радикала неопходно два молекула озона.

$$H_2O_2 \rightarrow HO_2^- + H^+ \quad (3)$$

$$HO_2^- + O_3 \rightarrow HO_2^{\bullet} + O_3^{\bullet -} \quad (4)$$

$$HO_2^{\bullet} \rightarrow H^+ + O_2^{\bullet -} \quad (5)$$

$$O_2^{\bullet -} + O_3 \rightarrow O_2 + O_3^{\bullet -} \quad (6)$$

$$O_3^{\bullet -} + H^+ \rightarrow HO_3^{\bullet} \quad (7)$$

$$HO_3^{\bullet} \rightarrow OH^{\bullet} + O_2 \quad (8)$$

$$OH^{\bullet} + O_3 \rightarrow HO_2^{\bullet} + O_2 \quad (9)$$

$$2O_3 + H_2O_2 \rightarrow 2\,OH^{\bullet} + 3O_2 \quad (10)$$

Хидроксил радикали могу да реагују са скоро свим органским и неорганским врстама, самим тим, O_3/H_2O_2 процес може имати вишеструку улогу у процесу припреме воде за пиће. За успешну деградацију органских загађујућих материја није довољно применити само одговарајуће концентрације озона и водоник-пероксида, већ је неопходно извршити и њихово комбиновање у правом односу. Међутим, избор концентрације озона и водоник-пероксида, као и њихов однос којим ће се постићи оптимална деградација, зависи како од врсте и концентрације органских материја, тако и од карактеристика воде, и мора се установити за сваки специфичан случај понаособ [16, 19, 22].

Примена O_3/H_2O_2 у процесу припреме воде за пиће има одређене предности: постиже се већа реактивност и брзина реакције оксидације у поређењу са применом молекулског озона, O_3/H_2O_2 је ефикасан у оксидацији тешко биоразградивих материја, а показује и високу ефикасност у оксидацији халогених једињења. С друге стране, процес поседује и одређене недостатке: водоник-пероксид је јако оксидационо средство, распада се током времена и контакт са њим може да угрози људско здравље, способност оксидације гвожђа и мангана применом O_3/H_2O_2 је мања у поређењу са применом самог озона [25].

Комбинација примене водоник-пероксида и ултраљубичастог зрачења (**H_2O_2/UV** процес)

H_2O_2/UV процес је пример хомогеног фотохемијског унапређеног оксидационог процеса. Уопштено, ефикасност хомогених фотохемијских оксидационих процеса заснована је на примени хидроксил ради-

кала који настају у реакционим смешама директном фотолизом водоник-пероксида применом UV значења (реакција 11) [20]. Даље формирање радикала се одвија према радикалском ланчаном механизму.

$$H_2O_2 + h\upsilon \rightarrow OH^{\bullet} + OH^{\bullet} \quad (11)$$

H_2O_2/UV процес се показао као ефикасан у третману вода различитог типа [26]. Применом комбинованог процеса постиже се знатно већа ефикасност у погледу уклањања природних органских материја, а самим тим и у смањењу настанка споредних нус-производа дезинфекције, у поређењу са појединачним процесима оксидације водоник-пероксидом и UV зрачењем [22].

Примена H_2O_2/UV процеса има бројне предности: не долази до формирања бромата [13], водоник-пероксид је јефтина сировина и једноставан је начин његове примене, растворљив је у води и може се применити у високим концентрацијама у процесу припреме воде за пиће. С друге стране, испитивани процес поседује и одређене недостатке: мутноћа воде умањује продирање UV зрачења, долази до формирања органских нус-производа који могу довести до смањења биолошке стабилности воде [26], постоји ризик од пораста продукције споредних производа дезинфекције у комбинацији са хлорисањем [27].

Комбинација примене Fe^{2+}/Fe^{3+} и водоник-пероксида (Фентон процес)

Фентон процес је један од најефикаснијих унапређених оксидационих процеса, који се последњих година широко примењује за оксидацију вода са високим садржајем природне органске материје и других тешко разградивих једињења. Ефикасност класичног Фентон процеса може се повећати и применом различитих физичких поља/феномена, па се сходно томе и разликује неколико типова Фентон процеса – фото-Фентон, електро-Фентон, кавитациони (ултразвучни)-Фентон и микроталасни-Фентон процес [19].

Фентон процес представља процес у коме соли гвожђа иницирају и катализују декомпозицију водоник-пероксида путем преноса електрона између водоник-пероксида и јона гвожда, доводећи до брзог формирања хидроксил радикала. Сам процес обухвата комплексне реакционе механизме који се одигравају у воденим растворима током којих се поред хидроксил радикала формирају и друге радикалске врсте различите реактивности [28].

Многе студије су показале да је Фентон процес оксидације ефикасан у киселој средини и то само у релативно уском опсегу pH вредности (2-4). Познато је да Фентонов реагенс различито делује у третману воде, у зависности од H_2O_2/Fe^{2+} односа. Када је количина Fe^{2+} већа од H_2O_2, третман испољава ефекат хемијске коагулације; у случају вишка H_2O_2 у односу на јоне гвожђа, третман испољава ефекат хемијске оксидације [29].

Примена Фентон процеса има одређене предности: гвожде је веома распрострањен и нетоксичан елемент; водоник-пероксид је јефтин, лако примењљив и безбедан по животну средину; може се постићи потпуна минерализација органских материја до угљендиоксида и воде; процес је ефикасан у третману вода богатих природним органским материјама [19, 30]. Међутим, примењени третман поседује и неке недостатке: потребно је успоставити узак опсег pH вредности како би се избегло таложење гвожђа у облику хидроксида; потребно је регенерисати растворене јоне гвожђа из третираног раствора, што захтева додатни корак обраде.

ЗАКЉУЧАК

Иако је развијен читав низ процеса који се примењују за уклањање природних органских материја из воде, њихов садржај и структура специфични су за свако подручје, па не постоји универзално решење. Ефикасност унапређених оксидационих процеса зависи од великог броја параметара и неопходно је сагледати је, како са аспекта укупног садржаја природних органских материја, тако и тенденције тих материја ка формирању нус-производа оксидације. Како би се одабрала, а потом и оптимизовала најпогоднија метода за уклањање природних органских материја из воде, важно је разумети механизам сваког појединачног процеса, као и начин на који други састојци присутни у води утичу на његову ефикасност, а све у циљу припреме воде за пиће што бољег квалитета.

Abstract

ADVANCED OXIDATION PROCESSES IN DRINKING WATER PRODUCTION

Mirjana PETRONIJEVIĆ*, Jasmina AGBABA**, Jelena MOLNAR JAZIĆ** i Sanja PANIĆ*

*** Faculty of Technology, University in Novi Sad, Novi Sad, Serbia and **Faculty of Science, University in Novi Sad, Novi Sad, Serbia**

Natural organic matter (NOM) is a complex matrix of organic substances present in all water sources. The amount and characteristics of NOM in surface and ground waters depend on the location additionally conditioned by seasonal changes. The increased amount of NOM in drinking water supplies has a negative effect on organoleptic properties of water and promotes the formation of disinfection by-products. Therefore, the removal of NOM, as a prerequisite step for the production of drinking water, represents a challenging task. The advanced oxidation processes have gained significant interest from researchers around the world, especially in the last decade. These processes used in drinking water industry are considered to be among the most suitable ones to degrade NOM and minimize the formation of disinfection by-products. In this paper, some of the widely used advanced oxidation processes are presented accompanied by their advantages and disadvantages.

ЛИТЕРАТУРА

1. C.S. Uyguner, S.A. Suphandag, A. Kerc, M. Bekbolet, Evaluation of adsorption and coagulation characteristics of humic acids preceded by alternative advanced oxidation techniques, Desalination, 210(2007), 183
2. I. Sutzkover-Gutman, D. Hasson, R. Semiat, Humic substances fouling in ultrafiltration processes, Desalination, 261(2010), 218
3. A. Stubins, T. Dittmar, Dissolved Organic Matter in Aquatic Systems, in book: Treatise on Geochemistry, Publisher: Elsevier, Editors: H. D. Holland, K. K. Turekian, (2014) 25
4. E. Brooks, C. Freeman, R. Gough, P.J. Holliman, Tracing dissolved organic carbon and trihalomethane formation potential between source water and finished drinking water at a lowland and an upland UK catchment, SCTEN, 537(2015), 203
5. S.D. Richardson, M.J. Plewa, E.D. Wagner, R. Schoeny, D.M. Demarini, Occurrence, genotoxicity, and carcinogenicity of regulated and emerging disinfection by-products in drinking water: a review and roadmap for research. Mutat. Res. 636(2007), 178
6. M.J. Plewa, E.D. Wagner, M.G. Muellner, K.M. Hsu, S.D. Richardson, Comparative mammalian cell toxicity of N-DBPs and C-DBPs. In Occurrence, Formation, Health Effects and Control of Disinfection Byproducts in Drinking Water; Karanfil, T., Krasner, S.W., Westerhoff, P., Xie, Y., Eds.; American Chemical Society: Washington, D.C., 995(2008), 36
7. Pravilnik o higijenskoj isparvnosti vode za piće, Službeni list SRJ, 42/98
8. Directive 98/83/EC of 16 February 1998 on the qualitu of water itended for human consumption, Offical Journal L 123,24.4.1998, 26
9. WHO, Guidelines for drinking-water quality. World Health Organization, Geneva, 2011
10. M. Sillanp??, M.C. Ncibi, A. Matilainen, Advanced oxidation processes for the removal of natural organic matter from drinking water sources: A comprehensive review, Environ. Manage., 208(2018), 56
11. J. Agbaba, J. Molnar Jazić, A. Tubić, M. Watson, S. Maletić, M. Kragulj Isakovski, B. Dalmacija, Oxidation of natural organic matter with processes involving O_3, H_2O_2 and UV light: formation of oxidation and disinfection by-products, RSC Adv., 6(2016), 86212
12. M. Petronijević, J. Agbaba, J. Molnar Jazić, S. Ražić, A. Tubić, M. Watson, B. Dalmacija, Fate of bromine-containing disinfection by-products precursors during ozone and ultraviolet-based advanced oxidation processes, IJEST, 16(2019), 171
13. U. von Gunten, Ozonation of drinking water: part I. Oxidation kinetics and product formation. Wat. Res. 37(2003), 1443
14. M. Drozdovà, R. Jablonka, R. Kučerová, H. Kašáková, Application of ozonation to intensify nitrification and denitrification processes, GeoScience Engineering, LX (2014), 37
15. P.C. Singer, C. Arlotta, N. Snider-Sajdak, R. Miltner, Effectiveness of pre- and intermediate ozonation on the enhanced coagulation of disinfection by-product precursors in drinking water, Ozone: Sci. Eng., 25(2003), 453
16. A. Tubić, Efekti primene ozona, ozon/vodonikperoksida i hipohlorita na promenu sadrţaja prirodnih organskih materija i oksidacionih nusproizvoda u vodi nakon procesa koagulacije, flokulacije i adsorpcije, Doktorska disertacija, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad, 2010
17. B. Kasprzyk-Hordern, M. Ziółek, J. Nawrocki, Catalytic ozonation and methods of enhancing molecular ozone reactions in water treatment, ApplCatal B Environ., 46(2003), 639
18. R. Mosteo, N. Miguel, N. Martin-Muniesa, M.P. Ormad, J.L. Ovelleiro, Evaluation of trihalomethane formation potential in function of oxidation processes used during the drinking water production process, J. Hazard. Mater., 172(2009), 661
19. J. Molnar, Efekti odabranih unapredenih procesa oksidacije i koagulacije na sadržaj prirodnih organskih materija u vodi, Doktorska disertacija, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad, 2011
20. K. Zoschke, N. Dietrich, H. Börnick, E. Worch, UV-based advanced oxidation processes for the treatment of odour compounds: efficiency and by-product formation, Water Res., 46(2012), 5365
21. T. Ratpukdi, S. Siripattanakul, E. Khan, Mineralization and biodegradability enhancement of natural organic matter by ozone–VUV in comparison with ozone, VUV, ozone–UV, and UV: Effects of pH and ozone dose, Water Res., 44(2010), 3531
22. R. Lamsal, M.E. Walsh, G.A. Gagnon, Comparison of advanced oxidation processes for the removal of natural organic matter, Water Res., 45(2011), 3263
23. G. Zhao, X. Lu, Y. Zhou, Q. Gu, Simultaneous humic acid removal and bromate control by O_3 and UV/O_3 processes, Chem. Eng. J., 232(2013), 74
24. C. Gottschalk, J.A. Libra, A. Saupe, Ozonation of Water and Waste Water, Wiley-VCH, 2000
25. USEPA, Alternative Disinfectants and Oxidants Guidance Manual, EPA 815-R-99-014 U.S. Environmental Protection Agency, Office of Water, Washington, DC, 1999
26. M.M. Bazri, B. Barbeau, M. Mohseni, Impact of UV/H2O2 advanced oxidation treatment on molecular weight distribution of NOM and biostability of water, Water Res., 46(2012), 5297
27. H. Sakai, O. Autin, S. Parsons, Change in haloacetic acid formation potential during UV and UV/H_2O_2 treatment of model organic compounds, Chemosphere, 92(2013), 647
28. Y. Wu, S. Zhou, F. Qin, K. Zheng, X. Ye, Modeling the oxidation kinetics of Fenton's process on the degradation of humic acid, J. Hazard. Mater., 179(2010), 533
29. E. Neyens, J. Baeyens, A review of classic Fenton's peroxidation as an advanced oxidation technique, J. Hazard. Mater., 98(2003), 33

C.A. Murray, S.A. Parsons, Removal of NOM from drinking water: Fenton's and photo-Fenton's processes, Chemosphere, 54(2004), 1017

Светлана МАРКОВИЋ, Слађана ЂОРЂЕВИЋ, Изудин РЕЏЕПОВИЋ, Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу; ЖИКО МИЛАНОВИЋ, Истраживачко-развојни центар за биоинжењеринг БиоИРЦ доо; (e-mail: mark@kg.ac.rs, sladjana.djordjevic@pmf.kg.ac.rs, izudin.redzepovic@pmf.kg.ac.rs, milanoviczikо463@gmail.com)

СИМУЛИРАЊЕ ХЕМИЈСКИХ СПЕКТАРА ПОМОЋУ СОФТВЕРА ЗА МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛИРАЊЕ

Савремене инструменталне технике нуде могућност прецизног одређивања структуре једињења па су своју примену нашле у хемијским, биохемијским, биолошким и технолошким испитивањима. Важан део овог научно-истраживачког рада представља познавање и тумачење хемијских спектара. Међу великим бројем развијених спектроскопских техника посебно су се истакле: нуклеарна магнетна резонанција (NMR), инфрацрвена (IR) и раманска спектроскопија, ултраљубичаста и видљива спектроскопија (UV-vis), и можда најутицајнија рендгенска структурна анализа.

Развој рачунарских метода и компјутерске технике омогућио је појаву програма за молекулско моделирање који веома успешно репродукују резултате неких уређаја који се користе у спектроскопској инструменталној хемијској анализи. То значи да постоји одлично слагање између експерименталних и израчунатих резултата у оним случајевима где су експериментални резултати доступни, те се може направити поређење [1]. Да би поткрепили ове тврдње, симулирали смо хемијске спектре нафталена, а потом их поредили са експерименталним спектрима (литературни подаци). У тексту који следи биће приказани добијени резултати.

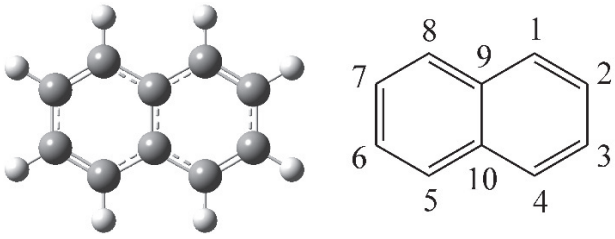
МЕТОДОЛОГИЈА ИЗРАЧУНАВАЊА

Прорачуни су обављени помоћу функционала густине B3LYP [2] и B3LYP-D3 [3] у комбинацији са базисним скупом 6-311+G(d,p). Будући да се ради о молекулу у мировању, резултати добијени помоћу две методе су готово идентични, а у раду су представљени резултати добијени помоћу функционала B3LYP. Вршена је оптимизација геометрије и израчунавање фреквенција у гасовитој фази и у растворима. Резултати израчунавања у гасовитој фази су искоришћени за симулацију вибрационих спектара. За симулацију NMR и UV-vis спектара било је неопходно оптимизовати нафтален у хлороформу и етанолу. У те сврхе коришћен је солватациони модел CPCM (*Polarizable Continuum Solvation Model*) [4]. NMR спектри нафталена израчунати су помоћу методе GIAO (*Gauge-Independent Atomic Orbital*), са тетраметилсиланом (TMS) као стандардом. Симулација UV-vis спектра изведена је помоћу временски зависне теорије функционала густине (*Time Dependent Density Functional Theory – TD-DFT*) [5], која подразумева израчунавање електронских прелаза из основног у нижа побуђена стања нафталена. Сва израчунавања су изведена помоћу програмског пакета Гаусијан (Gaussian 09) [6]. Визуелизација добијених резултата вршена је помоћу програма Гаусвју (GaussView 5.0.8) [7].

ОПТИМИЗОВАНА ГЕОМЕТРИЈА И РЕНДГЕНСКА СТРУКТУРНА АНАЛИЗА

Рендгенска структурна анализа је техника за одређивање кристалне и молекулске структуре супстанце, која користи дифракциону слику (дифрактограм) добијену дифракцијом рендгенског зрачења у много специфичних смерова на испитиваном узорку. На основу углова и интензитета дифрактованих рендгенских зракова креира се тродимензионална слика густине електрона у узорку [8].

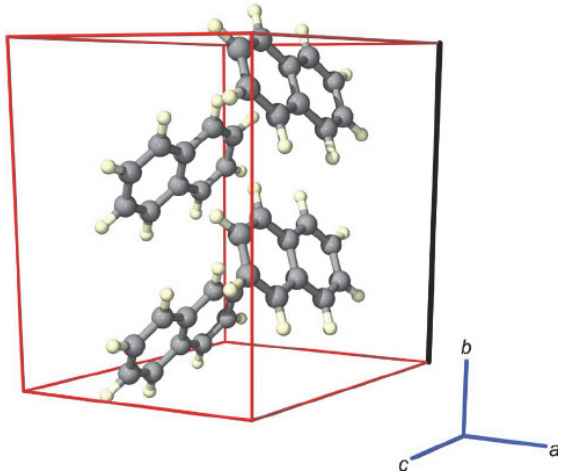
Свако оптимизовање равнотежне геометрије било које молекулске врсте на неки начин симулира кристалографски експеримент. Резултат оптимизације је структура молекула са свим његовим дужинама, угловима веза и диедарским угловима, а то су величине које обезбеђује и рендгенска структурна анализа. Оптимизована равнотежна геометрија нафталена приказана је на Слици 1.



Слика 1. Оптимизована геометрија (лево) и структурна формула нафталена са нумерисаним атомима (десно)

Резултати рендгенске структурне анализе нафталена преузети су из *The Cambridge Crystallographic Data Centre* [9]. Јединична кристална ћелија нафталена приказана је на Слици 2. Уочава се специфичан начин паковања који је стабилизован π-π интеракцијама ароматичних прстенова. Експериментални и израчунати подаци указују на различите дужине C-C веза у молекулу нафталена, што је последица Милс-Никсоновог (Mills-Nixon) ефекта [10].

Анализа добијених података указује да примењени теоријски модел веома добро репродукује кристалну структуру нафталена (Табела 1). Мала разлика у дужинама и угловима веза може се објаснити чињеницом да се геометрија молекула у кристалу разликује од



Слика 2. Јединична кристална ћелија нафталена

геометрије изолованог молекула у гасовитој фази. Разлог ове појаве је постојање интермолекулских интеракција у кристалу, које код изолованог молекула, у гасовитој фази, не постоје.

Табела 1. Експерименталне и израчунате вредности дужина и углова веза код нафталена

Везе	Дужина везе (pm)	
	Експ. вредности	B3LYP/6-311+G(d,p)
C1-C2	137.4	137.4
C2-C3	141.6	141.5
C4-C10	141.7	141.9
C9-C10	142.2	143.1
C1-H1	108.3	108.5
C2-H2	108.3	108.4
Углови	Угао везе (°)	
C1-C2-C3	120.2	120.2
H3-C3-C4	119.5	120.1
H4-C4-C10	118.3	118.8
C4-C10-C5	121.7	122.3

ВИБРАЦИОНИ СПЕКТРИ

Када се кроз простор испуњен одређеном супстанцом пропусти електромагнетно зрачење примећује се да на појединим фреквенцијама долази до већег или мањег слабљења пропуштеног зрачења. Разлог ове појаве је селективна апсорпција зрачења од стране молекула који са тим зрачењем долазе у додир. Молекул апсорбује енергију када фреквенција његовог одређеног кретања одговара фреквенцији електромагнетног зрачења. Сваку хемијску везу одликује јединствена вибрациона енергија, захваљујући чему свако једињење има свој јединствени вибрациони спектар на основу ког се могу идентификовати функционалне групе присутне у молекулу [11]. Постоје два типа вибрационе спектроскопије: IR и раманска. За побуђивање веза IR спектроскопија користи зрачење у инфрацрвеној области (700 nm - 1000 nm), док раманска спектроскопија користи зрачење у инфрацрвеној, видљивој и ултраљубичастој области (10 nm - 1000 nm).

Симулација вибрационих спектара неког молекула се постиже израчунавањем његових таласних бројева, који се, као и у експерименталној спектроскопији, називају вибрационе фреквенције. Добро је познато да израчунате вредности вибрационих фреквенција садрже систематску грешку која великим делом потиче од занемаривања ефеката нехармоничности површине потенцијалне енергије у близини стационарних тачака. Допринос грешци потиче и од непотпуне инкорпорације корелације електрона и примене коначних базисних скупова. То условљава да су израчунате фреквенције у већини случајева прецењене, што значи да се оне морају скалирати (помножити фактором скалирања) како би се што је могуће више приближиле експерименталним вредностима вибрационих фреквенција.

Симулација вибрационих спектара нафталена извршена је применом наведеног теоријског модела у гасовитој фази. Експериментални подаци за IR и раманске спектре преузети су са *Spectral Database for Organic Compounds, SDBS* [12]. Спектар је снимљен у гасовитој фази (KBr диск). Будући да за примењени ниво теорије не постоји литературни податак за фактор скалирања, он је одређен методом најмањих квадрата на основу експерименталних и израчунатих вредности, и добијена је вредност 0.978. Потом су израчунати таласни бројеви помножени овом вредношћу како би се добило боље слагање између експерименталних и израчунатих вредности. У Табели 2 приказани су експериментални и израчунати положаји трака у IR и раманском спектру нафталена. Нафтален има 48 вибрационих облика, а приказани су само они за које постоје експерименталне вредности. Такође, приказани су IR и рамански интензитети. Треба нагласити да су израчунати интензитети вибрационих облика који се не јављају у експериментално одређеном спектру врло блиски нули.

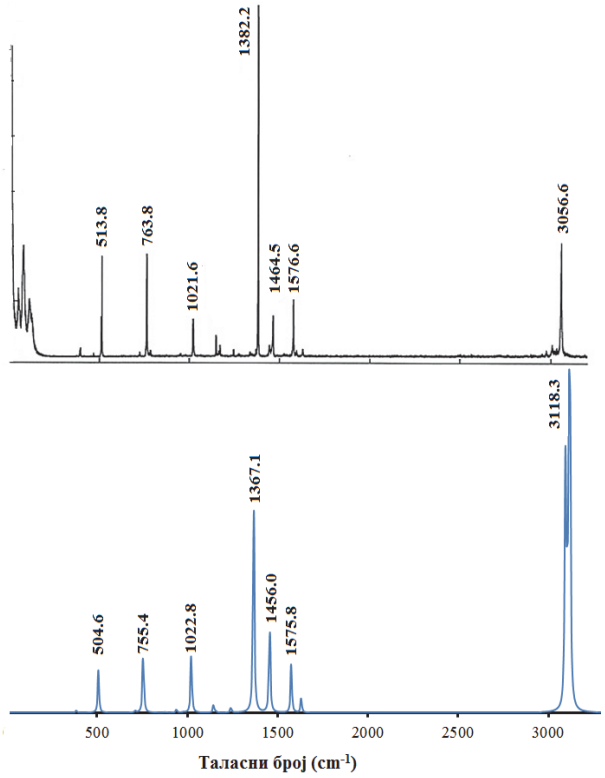
Симулацијом вибрационих спектара нафталена репродуковане су све траке карактеристичне за ароматичне системе. Асигнацију вибрационих облика умногоме је олакшала употреба програма Гаусвју који има способност да анимира молекулске вибрације. Ако се посматрају приказани рамански и IR спектри на Сликама 3 и 4, уочавају се разлике у броју и интензитету трака. У IR спектру, интензивна трака на 779.8 cm^{-1} потиче од C-C-C-C торзионе вибрације ван равни прстена. Познато је да је област од 3850 до 3200 cm^{-1} карактеристична за C-H истежуће вибрације. Тако се у IR спектру налазе две траке на 3109.4 cm^{-1} и 3115.3 cm^{-1} које потичу од C-H истежућих вибрација. Такође, траке које потичу од C-H истежућих вибрација јављају се у раманском спектру на 3056.6 cm^{-1}. Интензиван сигнал у раманском спектру на 1382.2 cm^{-1} потиче од C-C истежуће вибрације.

Експерименталне и израчунате вредности таласних бројева образују праве чији коефицијенти корелације износе 0.99995 и 0.99990 за IR и рамански спектар. Можемо, дакле, закључити да примењени тео-

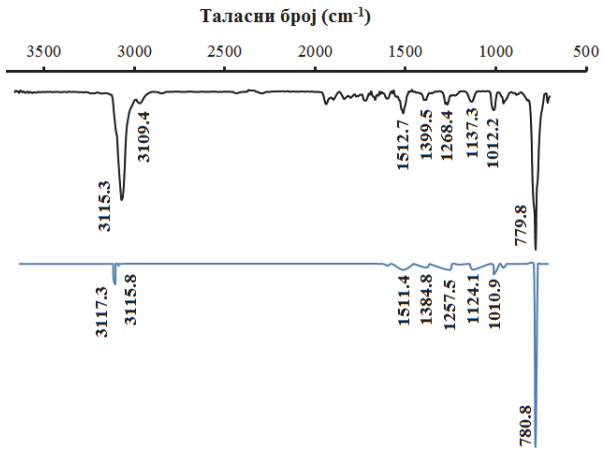
Табела 2. Експериментални и израчунати положаји трака у IR и раманском спектру нафталена

Тип вибрације	Експериментална вредност		Израчуната вредност		Интензитет IR	Интензитет Raman
	ν_{IR} (cm^{-1})	ν_{Raman} (cm^{-1})	ν (cm^{-1})	ν (cm^{-1}) скалирано		
CH истежућа		**3056.6**	3188.4	3118.3	0.0	612.8
CH истежућа	**3115.3**		3187.4	3117.3	50.9	0.0
CH истежућа	**3109.4**		3175.9	3115.8	69.5	0.0
CH истежућа	**3073.6**		3158.3	3088.8	7.2	0.0
CC истежућа	**1596.1**		1637.0	1601.0	7.0	0.0
CC истежућа		**1576.6**	1611.2	1575.8	0.0	40.5
CC истежућа CCH савијајућа	**1512.7**		1546.1	1512.1	20.7	0.0
CCH савијајућа		**1464.5**	1488.5	1455.8	0.0	58.5
CCH савијајућа	**1399.5**		1416.6	1385.4	12.8	0.0
CC истежућа		**1382.2**	1397.9	1367.1	0.0	189.0
CCH савијајућа	**1268.4**		1286.4	1258.1	21.1	0.0
CCH савијајућа	**1137.3**		1149.9	1124.6	19.9	0.0
CC истежућа CCH савијајућа		**1021.6**	1044.8	1021.8	0.0	45.4
CC истежућа	**1012.2**		1034.1	1011.4	35.9	0.0
CCCC торзиона	**940.7**		979.7	958.1	13.5	0.0
CCCC торзиона	**779.8**		798.7	781.1	637.6	0.0
CC истежућа		**763.8**	772.4	755.4	0.0	46.3
CCC савијајућа		**513.8**	516.6	504.6	0.0	9.3

ријски модел веома успешно репродукује вибрационе спектре нафталена.



Слика 3. Експериментални (горе) и израчунати (доле) рамански спектар нафталена



Слика 4. Експериментални (горе) и израчунати (доле) IR спектар нафталена

NMR СПЕКТРИ

NMR спектроскопија је једна од најпопуларнијих метода за одређивање структуре молекула. Нуклеарна магнетна резонанција се јавља када се атомска језгра изложе дејству јаког, хомогеног магнетног поља, и истовремено изложе електромагнетном зрачењу из радиофреквентног дела спектра. На тај начин, један број језгара апсорбује, а преостали број емитује зрачење исте фреквенције. NMR спектре могу давати многа језгра, али се најчешће користе ^{1}H и ^{13}C NMR спектри [11].

Експериментални ^{1}H и ^{13}C NMR спектри нафталена преузети су из *Spectral Database for Organic Compounds, SDBS* [13]. Оба спектра снимљена су у хлороформу на 400 MHz. На описани начин симулирани су NMR спектри нафталена и TMS-а у хлороформу. Излазни подаци за два једињења омогућили су израчунавање хемијских померања свих водоникових и угљеникових атома у односу на TMS (Табела 3). Треба нагласити да су оригиналне вредности помножене факторима скалирања, и то 0.954 за ^{1}H и 0.949 за ^{13}C спектре.

Табела 3. Експерименталне и израчунате вредности хемијских померања у ^{1}H и ^{13}C NMR спектру нафталена

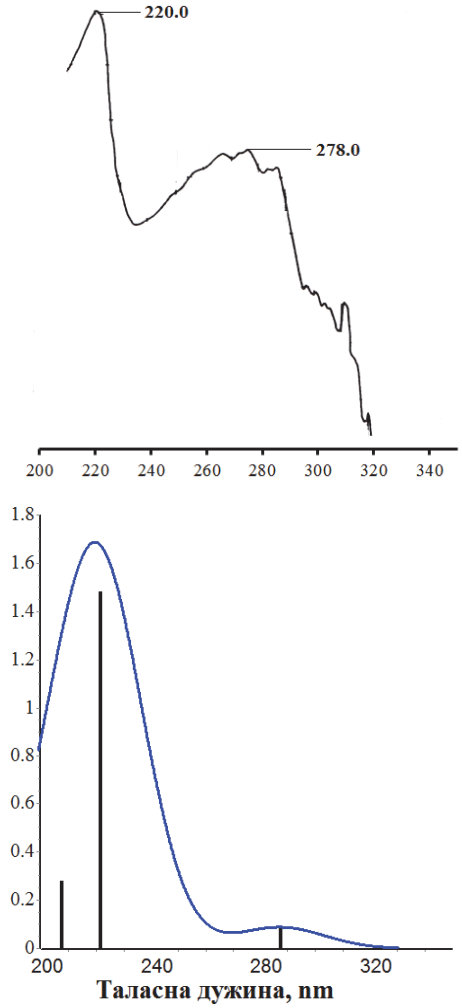
H-атоми	^{1}H NMR	
	Хемијско померање (δ, ppm)	
	Експериментални	Израчунати
H-1, H-4, H-5, H-8	7.84	7.84
H-2, H-3, H-6, H-7	7.48	7.48
C-атоми	^{13}C NMR	
C-1, C-4, C-5, C-8	127.8	127.4
C-2, C-3, C-6, C-7	125.8	125.7
C-9, C-10	133.5	133.9

За ароматичне системе карактеристично је да се хемијска померања протона налазе на 6,5 – 9 ppm. Код нафталена имамо два типа H атома, па су померања на различитим вредностима и оба су мултиплицитети. За угљеник је такође карактеристично померање на вредностима од 120 – 150 ppm, и појава три сигнала, јер се угљеници налазе у различитим окружењима [11]. Између експерименталних и израчунатих хемијских померања готово да нема разлике (Табела 3), па се може закључити да је примењена методологија у потпуности задовољила у остварењу постављеног циља.

UV-VIS СПЕКТАР

Када неки молекул апсорпбује електромагнетно зрачење у видљивој и ултраљубичастој области електромагнетног спектра долази до побуђивања електрона из основног у ексцитована стања. Метода која је заснована на овој појави је UV-vis спектроскопија (UV-vis спектрофотометрија). Ова метода нема широку примену за структурна одређивања јер велики број органских једињења не апсорбује у овом делу спектра, али има примену као комплементарна метода за идентификацију дела молекула који апсорбује у овој области, тзв. хромофора. Ова метода је веома корисна у анализи природних конјугованих једињења (биљни пигменти, полиацетилени, порфирини, флавоноиди, антрахинони, итд.) као и комплекса прелазних метала који садрже овакве молекуле као лиганде, и биолошких макромолекула [11].

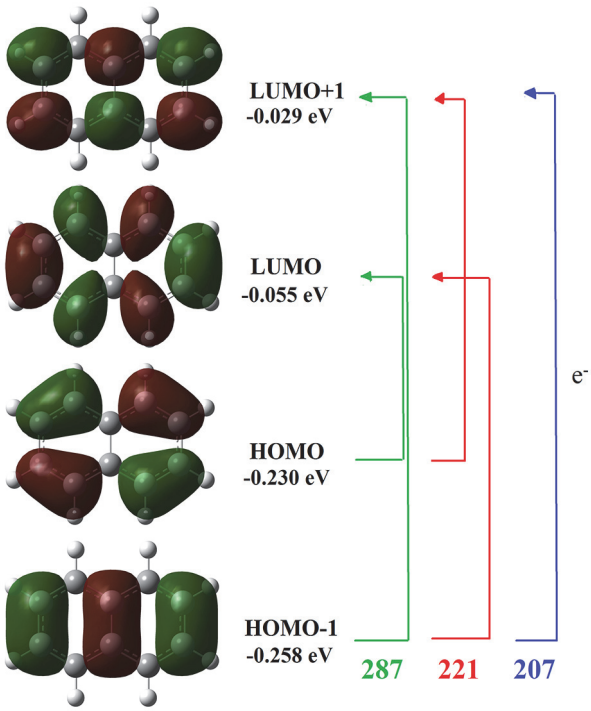
Експериментални UV-vis спектар нафталена снимљен је у етанолу [14], а репродукован је на описани начин. На Слици 5 приказан је експериментални и израчунати UV спектар нафталена, док се у Табели 4 налазе таласне дужине које одговарају апсорпционим максимумима, вредности за осцилаторну јачину (f), као и тип електронских прелаза.



Слика 5. Експериментално (горе) и теоријски (доле) одређен UV спектар нафталена

Табела 4. Експериментални и израчунати електронски прелази нафталена

Експ. таласне дужине λ (nm)	TD-B3LYP/6-311+G(d,p)		
	λ (nm)	f	Главни електронски прелази
278.0	287	0.088	HOMO→LUMO (69%) HOMO-1→LUMO+1 (14%)
220.0	221	1.484	HOMO-1→LUMO (50%) HOMO→LUMO+1 (49%)
	207	0.279	HOMO-1→LUMO+1 (68%)



Слика 6. Орбитале нафталена одговорне за електронске прелазе

Максимум, чија је експериментална вредност 278 nm предвиђен је на 287 nm применом методе TD-B3LYP. Даље, максимуму на 220 nm у експерименталном спектру одговарају два електронска прелаза у израчунатом спектру: на 221 и 207 nm, при чему прелаз на 221 nm карактерише највећа осцилаторна јачина. Метода TD-B3LYP нам открива које молекулске орбитале су укључене у електронске прелазе (Табела 4 и Слика 6). И коначно, Гаусвју визуелизује те молекулске орбитале (Слика 6), тако да видимо да у електронским прелазима учествују молекулске орбитале π-типа, и то попуњене орбитале највише енергије (HOMO-1 и HOMO) и непопуњене орбитале најниже енергије (LUMO и LUMO+1).

ЗАКЉУЧАК

Циљ овог рада је био да демонстрира софистицираност модерних програма за молекулско моделирање. Циљ је постигнут тако што су симулирани вибрациони, NMR и UV-vis спектри нафталена, а потом су поређени са постојећим експерименталним спектрима. Такође, геометрија оптимизоване структуре испитиваног једињења поређена је са резултатима рендгенске структурне анализе. У сагласности са очекивањима једног хемичара, методе B3LYP и B3LYP-D3 производе практично идентичне резултате, јер је у питању молекул у мировању. Анализа и поређење израчунатих са експерименталним спектрима су показали да обе методе изванредно репродукују експериментално добијене резултате. Може се претпоставити да се теоријски модели примењени у овом истраживању могу успешно користити приликом симулације спектара деривата нафталена и других полицикличних ароматичних угљоводника, чији спектри нису довољно разјашњени или уопште не постоје. Не смемо занемарити значај програма за визуелизацију резултата израчунавања, јер нам они приказују (нпр. молекулске орбитале) и анимирају (нпр. молекулске вибрације) различите хемијске феномене.

Abstract

SIMULATION OF CHEMICAL SPECTRA BY MEANS OF THE SOFTWARE FOR MOLECULAR MODELING

Svetlana MARKOVIĆ, Slađana ĐORĐEVIĆ, Izudin REDŽEPOVIĆ, *Faculty of Science, University of Kragujevac;* **Žiko MILANOVIĆ**, *BioIRC – Bioengineering Research and Development Center;* (email: mark@kg.ac.rs, sladjana.djordjevic@pmf.kg.ac.rs, izudin.redzepovic@pmf.kg.ac.rs, milanovicziko463@gmail.com)

The aim of this work is to demonstrate how sophisticated contemporary programs for molecular modeling are. The goal was achieved by simulating the vibrational, NMR, and UV-vis spectra of naphthalene, and comparing the experimental and computational results. In addition, the optimized geometry of the compound examined was compared to the results of the X-ray crystallography. In accord with one's expectations, the B3LYP and B3LYP-D3 methods yield practically identical results, as they refer to the molecule at rest. Careful inspection of the experimental and calculated spectra revealed that both methods exhibit excellent performance in reproducing experimental results. One can assume that theoretical models applied in the present investigation can be successfully used for simulation of the spectra of naphthalene derivatives, as well as of other polycyclic aromatic hydrocarbons. Many of these spectra have not been fully elucidated, or even have not been reported. We should not neglect the significance of the programs for visualization of the computational output, because they display (e.g. molecular orbitals) or animate (e.g. molecular vibrations) various chemical phenomena.

ЛИТЕРАТУРА

1. Marković S., Marković Z. (2012), *Molekulsko modeliranje*, Centar za naučno-istraživački rad, Srpske akdemije nauke i umetnosti, Kragujevac, Srbija.
2. Becke, A.D. (1993), *Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange*, The Journal of Chemical Physics 98 (7): 5648-5652.
3. Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S., Krieg, H. (2010), *A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu*, The Journal of Chemical Physics, 132(15): 154104.
4. Cossi, M., Rega, N., Scalmani, G., & Barone, V. (2003), *Energies, structures, and electronic properties of molecules in solution with the C-PCM solvation model*, Journal of Computational Chemistry, 24(6): 669-681.
5. Casida, M. E. (2009), *Time-dependent density-functional theory for molecules and molecular solids.* Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 914(1-3): 3-18.
6. Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., et al. (2010), *Gaussian 09*, Revision C. 01; Gaussian, Inc: Wallingford, CT, USA.

7. Dennington II, R. D.; Keith, T. A.; Millam, J. M. (2008), *GaussView 5.0*, Gaussian, Inc.: Wallingford, CT.
8. Karanović Lj., Poleti D. (2003), *Rendgenska strukturna analiza*, Zavod za udžbenike i nastavna sredstva, Beograd, Srbija.
9. Robertson, J. M. (1933), *The crystalline structure of naphthalene. A quantitative X-ray investigation*, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 142(847): 674-688.
10. Maksić, Z. B., Eckert-Maksić, M., Mó, O., Yáñez, M. (1999), *The mills-nixon effect: Fallacies, facts and chemical relevance*, Theoretical and Computational Chemistry, 6: 47-101.
11. Milosavljević S.M. (1994), *Strukturne instrumentalne metode*, Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija.
12. Kinugasa, S., K. Tanabe, T. Tamura (2009), *Spectral Database for Organic Compounds, SDBS*, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan.
13. Saito T., Yamaji T., Hayamizu K., Yanagisawa M., Yamamoto O.,(2017), *Spectral database for organic compounds, SDBS. NMR,* National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan.
14. Vollhardt, K. P. C., Schore, N. E. (2014), *Organic Chemistry*; Palgrave version: Structure and Function. Macmillan International Higher Education.

ВЕСТИ из ШКОЛЕ
ВЕСТИ за ШКОЛЕ

ИЗВЕШТАЈ О РЕЗУЛТАТИМА СА 55. РЕПУБЛИЧКОГ ТАКМИЧЕЊА ИЗ ХЕМИЈЕ ЗА УЧЕНИКЕ ОСНОВНИХ ШКОЛА

Републичко такмичење из хемије за ученике основних школа, у организацији Министарства просвете, науке и технолошког развоја и Српског хемијског друштва, одржано је на Природно-математичком факултету Универзитета у Новом Саду. Такмичење је одржано у периоду од 17. до 19. маја 2019. године.

На отварању такмичења, које је приређено 17. маја са почетком у 18 ч, у амфитеатру А1 на Природно-математичком факултету у Новом Саду, присутним ученицима и наставницима обратили су се продекан за науку, међународну сарадњу и развој Природно-математичког факултета, проф. др Срђан Рончевић, директор Департмана за хемију, биохемију и заштиту животне средине, проф. др Јасмина Агбаба, потпредседник Српског хемијског друштва и председник Српског хемијског друштва – хемијског друштва Војводине, др Сања Панић и председник Републичке комисије за такмичење ученика основних школа, доц. др Душица Родић.

Након тога су чланови певачке групе АКУД „Соња Маринковић" из Новог Сада извели сплет песама.

Први такмичарски дан је започео израдом теста у три такмичарске категорије: Тест и практична вежба за ученике 7. разреда (72 ученика), Тест и практична вежба за ученике 8. разреда (66 ученика) и Тест и истраживачки рад за ученике 7. и 8. разреда (3 ученика 7. и 3 ученика 8. разреда). Истовремено је проф. др Божо Далмација одржао предавање за наставнике под насловом „Климатске промене и квалитет воде". Након израде теста, комисија их је детаљно прегледала и саопштила прелиминарне резултате. На основу резултата теста, најуспешнији ученици су се пласирали на други део такмичења (1 ученик у категорији Тест и истраживачки рад за ученике 7. и 8. разреда, 24 ученика у категорији Тест и практична вежба за ученике 7. разреда и 22 ученика у категорији Тест и практична вежба за ученике 8. разреда). Првог такмичарског дана одржана је одбрана истраживачког рада јединог пласираног ученика, а практична вежба, у трајању од једног сата, је одржана другог такмичарског дана. Док су ученици радили практичну вежбу, за наставнике пласираних ученика је одржана едукативна радионица под називом „Израда интерактивних тестова у настави хемије", коју је водила проф. др Јасна Адамов. На основу збирних резултата остварених на тесту и практичној вежби формирана је коначна ранг-листа ученика, а најуспешнијим су уручене дипломе и похвалнице Министарства просвете, науке и технолошког развоја, као и дипломе Српског хемијског друштва. На ранглистама које достављамо, наведени су пласмани ученика који су награђени.

Целокупна реализација такмичења је успешно изведена према свим планираним активностима.

Приложени су резултати такмичења:

- Коначна ранг-листа ученика 7. разреда у категорији Тест и практична вежба,
- Коначна ранг-листа ученика 8. разреда у категорији Тест и практична вежба и
- Коначна ранг-листа ученика 7. и 8. разреда у категорији Тест и истраживачки рад.

Нови Сад, 23. мај 2019.

Председник Републичке комисије
Доц. др Душица Родић

КОНАЧНА РАНГ-ЛИСТА УЧЕНИКА 7. РАЗРЕДА

КАТЕГОРИЈА: ТЕСТ И ПРАКТИЧНА ВЕЖБА

Р.Б.	Презиме и име ученика	Школа	Место	Презиме и име наставника	Тест	Вежба	Укупно	Н.Б.	Награда
1.	Церовина Никола	Драган Лукић	Нови Београд	Кнежевић Нина	68,0	30	98,0	100	I
2.	Гузијан Тамара	Сава Шумановић	Земун	Стевановић Небојша	66,0	30	96,0	97,96	I
2.	Рудко Максим	14. октобар	Барич	Новитовић Маријана	66,0	30	96,0	97,96	I
4.	Величковић Милица	Ђура Даничић	Вождовац	Стојисављевић Вера	65,0	30	95,0	96,94	I
5.	Лазаревић Лазар	Ваљевска гимназија	Ваљево	Милић Славица	64,5	30	94,5	96,43	I
6.	Јовичић Милица	Кадињача	Лозница	Шовић Милка	64,0	30	94,0	95,92	I
7.	Марјански Станислас	Вук Караџић	Крњево	Шкорић Снежана	62,0	30	92,0	93,88	I
8.	Рапаић Симон	Вук Караџић	Београд	Томић Драгана	61,5	30	91,5	93,37	I
9.	Ђорђевић Теодора	Радоје Домановић	Манојловце	Петровић Слађана	61,0	30	91,0	92,86	I
10.	Савић Павле	Нада Поповић	Крушевац	Савић Нада	59,5	30	89,5	91,33	I
10.	Брзић Валентина	Ђура Даничић	Вождовац	Стојисављевић Вера	59,5	30	89,5	91,33	I
12.	Трајковић Сандра	Никола Тесла	Раковица	Ботуњац Марина	58,5	30	88,5	90,31	I
13.	Крстић Милица	8. септембар	Пирот	Ненчић Валентина	58,0	30	88,0	89,80	II
13.	Михаиловић Љубица	Јован Јовановић Змај	Брус	Петровић Душанка	58,0	30	88,0	89,80	II
15.	Королија Лука	Никола Вукићевић	Сомбор	Зурковић Јелена	61,5	26	87,5	89,29	II
15.	Бабинцев Анђела	Бранко Радичевић	Косовска Митровица	Богдановић Зорица	57,5	30	87,5	89,29	II
17.	Ђорилић Милица	Кадињача	Лозница	Шовић Милка	61,0	26	87,0	88,78	II
18.	Ранђеловић Данило	Вук Караџић	Пожаревац	Петровић Срђан	64,0	22	86,0	87,76	II
18.	Симеуновић Огњен	IV краљевачки батаљон	Краљево	Керечки Светлана	62,0	24	86,0	87,76	II
18.	Миловић Димитрије	Франце Прешерн	Миљаковац	Николић Снежана	61,0	25	86,0	87,76	II
21.	Матовић Михајло	Вук Караџић	Неготин	Пејчић Мирко	57,5	28	85,5	87,24	II
22.	РадошевићАња	Вук Караџић	Београд	Томић Драгана	57,5	27	84,5	86,22	II
23.	Милорадовић Јана	Вук Караџић	Пожаревац	Петровић Срђан	59,5	24	83,5	85,20	II
24.	Миловић Маја	Кизур Иштван	Суботица	Живановић Даниела	59,5	18,5	78,0	79,59	III
25.	Јовановић Алекса	Михајло Пупин	Земун	Милинковић Ана	56,5				
26.	Адамовић Огњен	Ђура Јакшић	Кађ	Стевановић Наташа	56,0				
27.	Јованов Јован	Михајло Пупин	Идвор	Алавуковић Биљана	54,5				
27.	Радуловић Софија	IV краљевачки батаљон	Краљево	Керечки Светлана	54,5				
27.	Миловановић Милица	Драган Лукић	Нови Београд	Кнежевић Нина	54,5				
30.	Трајковић Богдан	Радоје Домановић	Врање	Стевановић Љиљана	54,0				
30.	Живојнов Наташа	Младост	Томашевац	Павлов Мађош Наташа	54,0				
30.	Ракић Огњен	Доситеј Обрадовић	Смедерево	Шљивић Драгана	54,0				
33.	Тимотијевић Николија Нина	Вук Караџић	Чачак	Рацковић Јасна	53,5				
34.	Митровић Наталија	Свети Сава	Баточина	Стаменковић Драгана	53,0				
35.	Тасић Софија	Прва основна школа	Ужице	Буквић Светлана	52,5				
35.	Савић Дуња	Јанко Веселиновић	Вождовац	Биочанин Гордана	52,5				
37.	Тасић Димитрије	Милутин и Драгиња Тодоровић	Крагујевац	Рајовић Снежана	52,0				
38.	Трифуновић Тара	Јован Микић	Суботица	Јовичић Александра	51,5				
38.	Венцзел Адриан	Васа Стајић	Нови Сад	Тошановић Станислава	51,5				
38.	Квашчев Дуња	Ратко Митровић	Нови Београд	Миловановић Бојана	51,5				
41.	Вуковић Новак	Бранко Радичевић	Нови Београд	Павловић Смиљана	51,0				
41.	Цветковић Марија	Лаза Костић	Нови Београд	Стијачић Александра	51,0				
43.	Станковић Сара	Бора Станковић	Вождовац	Јовановић Јована	50,5				
44.	Пауновић Алекса	Бранко Радичевић	Неготин	Карановић Слађана	49,5				
45.	Царевић Александар	Иво Андрић	Канарево брдо	Дробњаковић Јелена	49,0				
45.	Љубић Михајло	Свети Сава	Пожаревац	Станојевић Јелена	49,0				

47.	Блажић Нађа	Свети Сава	Кикинда	Станчић Лела	48,5
48.	Мирковић Милан	Ђура Јакшић	Каћ	Стевановић Наташа	48,0
49.	Ђорђевић Саша	Славко Златановић	Мирошевце	Ђорђевић Татјана	47,5
49.	Сторожук Зељковић Марија	Коста Трифковић	Нови Сад	Орловић Мирјана	47,5
51.	Јанковић Александра	Жарко Зрењанин	Нови Сад	Салатић Данијела	47,0
51.	Виденовић Андреј	Д. Т. Каплар	Књажевац	Алексић Марија	47,0
53.	Симић Миљана	Иван Гундулић	Нови Београд	Момчиловић Драгица	46,5
54.	Мацарац Урош	Јован Јовановић Змај	Обреновац	Глигорић Данијела	44,5
54.	Радаковић Драган	Симеон Араницки	Стара Пазова	Драгојевић Драгана	44,5
56.	Трајчевска Јања	Јован Стерија Поповић	Вршац	Разуменић Ивана	43,5
57.	Костић Лука	Николај Велимировић	Шабац	Митровић Душко	42,5
57.	Михајловић Уна	Бранко Радичевић	Врање	Станојевић Сунчица	42,5
59.	Којић Кристина	Јован Стерија Поповић	Нови Београд	Борковић Невенка	40,0
60.	Симић Марко	Урош Предић	Орловат	Павлов Мађош Наташа	39,0
60.	Савић Тамара	Бранко Радичевић	Нови Београд	Павловић Смиљана	39,0
62.	Перовић Елена	Станислав Сремчевић	Крагујевац	Милошевић Љиљана	38,0
63.	Костадиновић Огњен	Коста Трифковић	Нови Сад	Орловић Мирјана	37,5
64.	Мојсиловић Кристина	Ђура Јакшић	Ћуприја	Јовановић Оливера	36,5
65.	Несторовић Лука	Дринка Павловић	Куршумлија	Вукашиновић Мирјана	35,5
66.	Јездимировић Александра	Ђура Јакшић	Крагујевац	Сикимић Јелица	34,0
67.	Васић Андрија	Браћа Аксић	Липљан	Јаковљевић Весна	33,5
67.	Драгашевић Јана	Радоје Домановић	Крагујевац	Димитријевић Катарина	33,5
69.	Ђокић Ивана	Свети Сава	Јасеновик	Ристић Милош	30,5
70.	Илић Миона	Први мај – Трупале	Ниш	Станковић Татјана	26,0
71.	Митровић Николија	Вук Караџић	Дољевац	Китановић Братислав	22,0
72.	Митић Никола	Трајко Перић	Велико Ропотово	Јаћимовић Милош	21,5

КОНАЧНА РАНГ-ЛИСТА УЧЕНИКА 8. РАЗРЕДА

КАТЕГОРИЈА: ТЕСТ И ПРАКТИЧНА ВЕЖБА

Р.Б.	Презиме и име ученика	Школа	Место	Презиме и име наставника	Тест	Вежба	Укупно	Н.Б.	Награда
1.	Кежић Александар	Михајло Пупин	Ветерник	Михајлов Наташа	70,0	30,0	100,0	100,0	I
2.	Вуковић Дуња	Гимн. „Ј. Ј. Змај“	Нови Сад	Радовановић Дејан	67,0	30,0	97,0	97,0	I
3.	Ђедовић Дуња	Иван Милутиновић	Суботица	Блесић Марица	65,0	30,0	95,0	95,0	I
4.	Ђурђевић Иван	Ђура Јакшић	Ћуприја	Ђорђевић Анкица	64,5	30,0	94,5	94,5	I
5.	Војводић Јана	Ђура Јакшић	Кикинда	Станчић Лела	63,5	30,0	93,5	93,5	I
6.	МијаиловићАња	Прва краг. гимназија	Крагујевац	Симић Сања	66,0	26,0	92,0	92,0	I
7.	Бајчетић Софија	Карађорђе	Београд	Илић Јанковић Снежана	60,5	30,0	90,5	90,5	I
8.	Илић Марија	Моша Пијаде	Жагубица	Јовкић Никола	60,0	30,0	90,0	90,0	I
8.	Станојевић Никола	Вук Караџић	Србобран	Радованов Исидора	60,0	30,0	90,0	90,0	I
10.	Ђекић Душан	Филип Кљајић Фиђа	Београд	Милићевић Мирјана	55,5	30,0	85,5	85,5	II
11.	Цвијовић Нина	Емилија Остојић	Пожега	Боловић Зорица	58,5	26,0	84,5	84,5	II
12.	Драговић Вукан	Стеван Синђелић	Београд	Љубисављевић Вера	56,5	26,0	82,5	82,5	II
12.	Бојаџић Тарик	Рифат Бурџевић Тршко	Нови Пазар	Табаковић Рубина	56,5	26,0	82,5	82,5	II
14.	Ћурчић Стефан	Илија Бирчанин	Београд	Иванић-Дељанин Сања	55,5	26,0	81,5	81,5	II
14.	Алексић Александар	Васа Стајић	Нови Сад	Тошановић Станислава	55,5	26,0	81,5	81,5	II
16.	Јовановић Анђелија	Синиша Јањић	Власотинце	Калинић Милан	58,5	18,0	76,5	76,5	III

17.	Бисенић Милена	Старина Новак	Београд	Јоцић Светлана	58,0	18,0	76,0	76,0	III
18.	Живадиновић Андрија	Гимн. „С. Марковић“	Ниш	Атанасковић Наташа	56,5	16,0	72,5	72,5	III
18.	Станишић Матија	Доситеј Обрадовић	Зрењанин	Ерић Ибојка	56,5	16,0	72,5	72,5	III
20.	Ђурђевић Софија	Прва крагујевачка гимназија	Крагујевац	Симић Сања	56,0	16,0	72,0	72,0	III
21.	Јевтовић Филип	Душан Јерковић	Ужице	Арсовић Брана	61,0	10,0	71,0	71,0	III
21.	Радојчић Дарио	Николај Велимировић	Шабац	Митровић Душко	59,0	12,0	71,0	71,0	III
23.	Маринковић Стеван	Николај Велимировић	Шабац	Митровић Душко	55,0				
24.	Ћировић Симона	Радоје Домановић	Београд	Дамњановић Љубица	54,5				
24.	Кризманић Никола	Дринка Павловић	Београд	Хаџи Ђорђевић Јелена	54,5				
26.	Милошевић Јован	Јован Јовановић Змај	Обреновац	Глигорић Данијела	54,0				
27.	Ђурић Јован	Његош	Ниш	Митић Сунчица	53,5				
28.	Станковић Миа	Вук Караџић	Неготин	Пејчић Мирко	53,0				
28.	Џордески Милица	Јелена Ћетковић	Београд	Гецић Александра	53,0				
30.	Стокић Јанко	Емилија Остојић	Пожега	Боловић Зорица	52,0				
31.	Боровић Маја	Свети Сава	Чачак	Грбић Милица	51,0				
32.	Банковић Марија	Вук Караџић	Србобран	Радованов Исидора	50,5				
32.	Божин Тара	Петефи Шандор	Нови Сад	Родић-Рончевић Сања	50,5				
32.	Милић Ђорђе	Свети Сава	Београд	Павловић Даница	50,5				
35.	Станић Томислав	Јован Цвијић	Лозница	Митровић Мирослав	50,0				
36.	Ајзенбергер Леа	Светозар Марковић Тоза	Нови Сад	Радомировић Далиборка	49,0				
36.	Дудић Илија	Милан Муњас	Уб	Игњатовић Ана	49,0				
38.	Добријевић Уна	Жарко Зрењанин	Апатин	Деак Винка	48,5				
39.	Стојковић Немања	Милан Ђ. Милићевић	Београд	Ристић Дејан	48,0				
40.	Исаку Лена	Сретен Младеновић Мика	Палилула	Станковић Татјана	47,5				
41.	Илић Стефан	Свети Сава	Панчево	Живојнов Јованка	47,0				
41.	Машић Анђела	Мито Игумановић	Косјерић	Јоксимовић Љиљана	47,0				
41.	МилошевићАња	Математичка гимназија	Београд	Јоцић Светлана	47,0				
41.	Петровић Данка	Нада Матић	Ужице	Тасић Данка	47,0				
45.	Перовић Милош	Бранко Радичевић	Нови Београд	Павловић Смиљана	46,5				
46.	Михајловић Божидар	Мајка Југовића	Београд	Петровић Јелена	46,0				
46.	Паројчић Ђорђе	Математичка гимназија	Београд	Јоцић Светлана	46,0				
46.	Радељић Јован	Прва основна школа	Ужице	Савић Катарина	46,0				
46.	Крунић Марија	Јован Миодраговић	Београд	Шушњар Сања	46,0				
50.	Јокић Милутин	Бранко Радичевић	Панчево	Ратков Жебељан Данијела	45,5				
51.	Васић Мирјана	Филип Кљајић Фиђа	Београд	Милићевић Мирјана	44,5				
52.	Брајовић Лазар	Математичка гимназија	Београд	Јоцић Светлана	44,0				
52.	Миладиновић Александар	Рашка	Рашка	Јоксимовић Биљана	44,0				
54.	Јанковић Мина	Нада Матић	Ужице	Тасић Данка	42,0				
54.	Рајковић Милица	Франце Прешерн	Београд	Николић Снежана	42,0				
56.	Катанчевић Тихомир	Јован Јовановић Змај	Брус	Петровић Душанка	41,0				
57.	Дангубић Милица	Стевица Јовановић	Панчево	Савић Зоран	40,0				
58.	Јовановић Ана	Старина Новак	Београд	Јоцић Светлана	38,5				
59.	Симоновић Страхиња	9. октобар	Прокупље	Цонић Душица	37,0				
60.	Стевановић Сергеј	Краљ Петар Други	Београд	Павловић Даница	36,0				
61.	Башић Сава	Иво Лола Рибар	Скобаљ	Станојевић Ивана	34,0				
61.	Војводић Коста	Стевица Јовановић	Панчево	Савић Зоран	34,0				
63.	Ђорђевић Доротеа	Љуба Нешић	Зајечар	Раичевић Драгана	28,0				
64.	Марковић Лазар	Карађорђе	Рача	Николић Слађана	27,0				
65.	Стојановић Лазар	Миладин Митић	Лапље Село	Костић Биљана	20,5				
66.	Максимовић Растко	Десанка Максимовић	Косовска Каменица	Михајловић Стефан	17,0				

Напомене:

1. Три најбоље пласирана ученика (прво, друго и треће место) добијају **дипломе** потписане од стране надлежног министра.

2. Следећа три најбоље пласирана ученика (четврто, пето и шесто место) добијају **похвалнице** потписане од стране надлежног министра.

3. Српско хемијско друштво додељује дипломе ученицима који су освојили:

90,00-100 (нормираних) бодова: I награда

80,00-89,99 (нормираних) бодова: II награда

70,00-79,99 (нормираних) бодова: III награда

Нормирани бодови добијени су према формули: $N \times 100 / N_{max}$, где је N број бодова ученика, а Nmax број бодова првопласираног ученика.

Нови Сад, 19. мај 2019. године

Комисија:
1. Др Душица Родић
2. Др Мирјана Сегединац
3. Др Тамара Рончевић
4. Др Мирјана Радановић
5. Видак Раичевић

55. РЕПУБЛИЧКО ТАКМИЧЕЊЕ ИЗ ХЕМИЈЕ ЗА УЧЕНИКЕ ОСНОВНИХ ШКОЛА
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ, НОВИ САД

КОНАЧНА РАНГ-ЛИСТА УЧЕНИКА 7. И 8. РАЗРЕДА

КАТЕГОРИЈА: ТЕСТ И ИСТРАЖИВАЧКИ РАД

Р.Б.	Презиме и име ученика	Школа	Место	Презиме и име наставника	Тест	Рад	Укупно	Н.Б.	Награда
1.	Мошоринац Ђорђе	Радоје Домановић	Параћин	Аврамовић Данијела	57,0	18,0	75,0	100,0	I
	Павловић Миња	Коле Рашић	Ниш	Цветковић Љиљана	46,5				
	Вујић Димитрије	Милица Милошевић	Јагњило	Глишић Александра	41,5				
	Стојановић Адам	Бубањски хероји	Ниш	Митић Слађана	36,0				
	Николић Ђорђе	Ратко Вукићевић	Ниш	Томић Данијела	23,0				
	Богосављевић Анђелија	Бубањски хероји	Ниш	Митић Слађана	21,0				

Напомена: С обзиром да је према Правилнику такмичења услов за одбрану истраживачког рада освојено најмање 50 бодова на тесту знања, само један ученик је остварио пласман, и самим тим је једини који је освојио награду у овој такмичарској категорији.

Нови Сад, 18. мај 2019. године
Комисија:
1. Др Јасна Адамов
2. Др Марко Родић

ИЗВЕШТАЈ О РЕЗУЛТАТИМА СА 55. РЕПУБЛИЧКОГ ТАКМИЧЕЊА ИЗ ХЕМИЈЕ ЗА УЧЕНИКЕ СРЕДЊИХ ШКОЛА

Републичко такмичење из хемије за ученике средњих школа, у организацији Министарства просвете, науке и технолошког развоја и Српског хемијског друштва, одржано је на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду у периоду од 10. до 12. маја 2019. године.

На отварању такмичења, које је приређено 10. маја са почетком у 19 ч, у Великом амфитеатру Технолошко-металуршког факултета, присутним ученицима и наставницима обратили су се председник жирија такмичења др Душан Сладић испред Српског хемијског друштва, декан Технолошко-металуршког факултета

др Петар Ускоковић, и председник организационог одбора др Драгана Живојиновић. Након тога су студенти Технолошко-металуршког факултета извели неколико спектакуларних хемијских експеримената.

Реализацијом такмичења руководила је Републичка комисија у саставу:

1. др Душан Сладић
2. др Нико Радуловић
3. др Ирена Новаковић
4. др Александра Маргетић
5. др Александра Дапчевић
6. др Филип Бихеловић
7. др Јелена Мутић
8. др Ђенђи Ваштаг
9. Милош Пешић
10. Гордана Крстић
11. Видак Раичевић
12. Срђан Туфегџић

Први такмичарски дан (11. јун) је започео израдом теста у пет такмичарских категорија:

- Тест и експерименталне вежбе за ученике 1. разреда (53 ученика),
- Тест и експерименталне вежбе за ученике 2. разреда (50 ученика),
- Тест и експерименталне вежбе за ученике 3. и 4. разреда (49 ученика),
- Тест и самостални истраживачки рад за ученике 1. и 2. разреда (2 ученика),
- Тест и самостални истраживачки рад за ученике 3. и 4. разреда (4 ученика).

Док су ученици радили тест, за наставнике је одржана презентација Друге технолошке студије случаја „Tech case study 2019“, која ће се на јесен одржати на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду. Будуће такмичење су представили др Петар Ускоковић, декан Технолошко-металуршког факултета, и Владимир Смуђа, студент продекан Технолошко-металуршког факултета.

Након израде теста, комисија их је детаљно прегледала и саопштила прелиминарне резултате. На основу резултата теста, најуспешнији ученици су се пласирали на други део такмичења:

- Тест и експерименталне вежбе за ученике 1. разреда: 17 ученика,
- Тест и експерименталне вежбе за ученике 2. разреда: 18 ученика,
- Тест и експерименталне вежбе за ученике 3. и 4. разреда: 15 ученика,
- Тест и самостални истраживачки рад за ученике 1. и 2. разреда: 2 ученика,
- Тест и самостални истраживачки рад за ученике 3. и 4. разреда: 4 ученика.

Првог такмичарског дана одржана је одбрана самосталних истраживачких радова пред комисијом у саставу: др Филип Бихеловић, др Јелена Мутић и др Ђенђи Ваштаг. Експерименталне вежбе, у трајању од четири сата, одржане су другог такмичарског дана (12. јун).

На основу збирних резултата остварених на тесту и практичној вежби формирана је коначна ранг-листа ученика, а најуспешнијим су уручене дипломе и похвалнице Министарства просвете, науке и технолошког развоја и Српског хемијског друштва. На ранглистама које достављамо, наведени су пласмани ученика који су награђени.

Целокупна реализација такмичења је успешно изведена према свим планираним активностима.

Приложени су резултати такмичења:

- Коначна ранг листа у категорији Тест и експерименталне вежбе за ученике 1. разреда,
- Коначна ранг листа у категорији Тест и експерименталне вежбе за ученике 2. разреда,
- Коначна ранг листа у категорији Тест и експерименталне вежбе за ученике 3. и 4. разреда,
- Коначна ранг листа у категорији Тест и самостални истраживачки рад за ученике 1. и 2. разреда,
- Коначна ранг листа у категорији Тест и самостални истраживачки рад за ученике 3. и 4. разреда.

Београд, 13. мај 2019. У име Републичке комисије

Др Александра Дапчевић

ПРВИ РАЗРЕД, ТЕСТ И ЕКСПЕРИМЕНТАЛНЕ ВЕЖБЕ

КОРЕКЦИОНИ ФАКТОР 1.564

Ред. бр.	Име	Презиме	Разред	Школа	Место	Ментор или предметни професор	Поени					Награде
							Тест	Тест кориг.	Квалитативна анализа	Квантитативна анализа	Укупно	
1	Алекса	Ђорђевић	I	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Славица Драмићанин	44,75	70,0	15,0	14,0	99,0	I
2	Невена	Стојковић	I	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	43,50	68,0	14,5	6,0	88,5	II
3	Ђорђе	Петровић	I	Гимназија	Крушевац	Лидија Поповић Трипковић	38,50	60,2	15,0	10,0	85,2	III
4	Добрица	Јанковић	I	Гимназија Чачак	Чачак	Мирјана Јевтовић	39,50	61,8	7,5	8,0	77,3	похвалница
5	Горан	Кнежевић	I	Средња школа „Милоје Васић"	Велико Градиште	Весна Новковић	30,50	47,7	15,0	11,0	73,7	похвалница
6	Милица	Гојак	I	Прва крагујевачка гимназија	Крагујевац	Марина Станковић	35,50	55,5	15,0	0,0	70,5	похвалница
7	Димитрије	Глигоровски	I	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	28,50	44,6	15,0	10,0	69,58	
8	Тијана	Карић	I	ССШ „Милош Црњански"	Кикинда	Бранислава Дилбер Косић	25,00	39,1	15,0	11,0	65,11	

9	Никола	Терзић	I	I београдска гимназија	Београд	Славица Јелић	24,50	38,3	13,5	11,0	62,82
10	Урош	Топаловић	I	Ужичка гимназија	Ужице	Драгица Селаковић	27,50	43,0	15,0	4,0	62,02
11	Теодора	Пецарски	I	XIV београдска гимназија	Београд	Јелена Стојковић	25,00	39,1	14,0	8,0	61,11
12	Лука	Радаковић	I	Зрењанинска гимназија	Зрењанин	Зоран Узелац	23,00	36,0	15,0	10,0	60,98
13	Лука	Царевић	I	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Славица Драмићанин	26,00	40,7	13,5	5,0	59,17
14	Видан	Милошевић	I	Земунска гимназија	Београд	Гордана Стојиљковић	25,50	39,9	13,5	0,0	53,39
15	Никола	Спасић	I	Гимназија „Милош Савковић"	Аранђеловац	Славица Ћировић	24,50	38,3	0,0	14,0	52,32
16	Никола	Демијаненко	I	ЕТШ „Никола Тесла"	Панчево	Срђан Динић	22,50	35,2	7,0	7,0	49,20
17	Миона	Ковачевић	I	Гимназија	Варварин	Драгана Долић	22,00	34,4	7,5	0,0	41,91
18	Ана	Манојловић	I	Математичка гимназија	Београд	Аника Влајић	21,50	33,6			33,6
19	Лазар	Танасковић	I	Гимназија „Таковски устанак"	Горњи Милановац	Драгица Кнежевић	20,00	31,3			31,3
20	Анђела	Продановић	I	Ужичка гимназија	Ужице	Славица Вељовић	19,50	30,5			30,5
20	Ђорђе	Андрић	I	Гимназија Чачак	Чачак	Данка Вујичић	19,50	30,5			30,5
22	Јован	Рацков	I	Гимназија „Јован Јовановић Змај"	Нови Сад	Соња Ивковић Павловић	17,50	27,4			27,4
22	Петар	Поповић	I	Ужичка гимназија	Ужице	Славица Вељовић	17,50	27,4			27,4
24	Милица	Ивковић	I	XIII београдска гимназија	Београд	Оливера Јеленковић	17,00	26,6			26,6
24	Михајло	Петковић	I	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Маја Ђорђевић	17,00	26,6			26,6
26	Ђурђа	Јанковић	I	Прва крагујевачка гимназија	Крагујевац	Марина Станковић	16,00	25,0			25,0
27	Алекса	Живковић	I	I београдска гимназија	Београд	Катарина Митрић	15,00	23,5			23,5
27	Јована	Смиљанић	I	Ужичка гимназија	Ужице	Славица Вељовић	15,00	23,5			23,5
29	Анђела	Димитријевић	I	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	14,00	21,9			21,9
30	Бојан	Ристић	I	Медицинска школа „др Изабел Емсли Хатон"	Врање	Оливера Поповић	13,50	21,1			21,1
31	Марија	Петровић	I	Гимназија Чачак	Чачак	Мирјана Јевтовић	12,50	19,6			19,6
32	Лариса	Васовић	I	Савремена гимназија	Београд	Марко Пиљевић	12,00	18,8			18,8
33	Бјанка	Стојановић	I	Гимназија „Светозар Марковић"	Суботица	Радомир Матић	11,50	18,0			18,0
33	Ања	Добријевић	I	Гимназија „Никола Тесла"	Апатин	Радмила Ванић	11,50	18,0			18,0
35	Бојана	Милосављевић	I	Гимназија „Јован Јовановић Змај"	Нови Сад	Драгана Ћуић	10,50	16,4			16,4
36	Душан	Ђурђевић	I	Техничка школа	Жагубица	Никола Јовкић	10,00	15,6			15,6
37	Игњат	Јарамаз	I	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	9,00	14,1			14,1
38	Анђела	Голубовић	I	Гимназија „Бора Станковић"	Ниш	Љиљана Миладиновић	8,50	13,3			13,3
39	Марија	Маринковић	I	Медицинска школа „Др Андра Јовановић"	Шабац	Сандра Петровић	7,50	11,7			11,7
39	Теа	Савић	I	Гимназија	Косовска Митровица	Зорица Арсенијевић	7,50	11,7			11,7
41	Каролина	Живковић	I	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Наташа Атанасковић	7,00	10,9			10,9
42	Никола	Нешић	I	Пожаревачка гимназија	Пожаревац	Јован Стевановић	5,50	8,6			8,6
42	Сташа	Хорватић	I	Гимназија	Јагодина	Душица Ивановић	5,50	8,6			8,6
42	Милица	Ђенадић	I	Гимназија	Врњачка Бања	Биљана Марковић	5,50	8,6			8,6
45	Тодор	Шоштар	I	XIII београдска гимназија	Београд	Оливера Јеленковић	5,00	7,8			7,8
45	Марија	Радосављевић	I	Гимназија	Параћин	Биљана Стојановић	5,00	7,8			7,8
47	Богдан	Стаменковић	I	Гимназија	Лесковац	Јелена Ђорђевић	4,50	7,0			7,0
47	Теодора	Дикић	I	Гимназија	Лесковац	Јелена Ђорђевић	4,50	7,0			7,0
49	Теодора	Бурсаћ	I	Гимназија „Бранко Радичевић"	Стара Пазова	Вања Хаврилов	4,00	6,3			6,3
50	Марко	Томовић	I	Гимназија	Рашка	Јовица Павловић	3,00	4,7			4,7
51	Димитрије	Станковић	I	Гимназија Зајечар	Зајечар	Славица Бајовић	2,00	3,1			3,1
52	Стефана	Светозаревић	I	СШ „Бранислав Нушић"	Сокобања	Мимоза Ђорђевић	1,00	1,6			1,6
53	Невена	Недељковић	I	Гимназија	Косовска Митровица	Зорица Арсенијевић	0,00	0,0			0,0
53	Марија	Ивановић	I	Гимназија	Гњилане	Александар Маринковић	0,00	0,0			0,0

ДРУГИ РАЗРЕД, ТЕСТ И ЕКСПЕРИМЕНТАЛНЕ ВЕЖБЕ КОРЕКЦИОНИ ФАКТОР 1.250

Ред. бр.	Име	Презиме	Разред	Школа	Место	Ментор или предметни професор	Поени					Награде
							Тест	Тест кориг.	Квалитативна анализа	Квантитативна анализа	Укупно	
1	Василије	Пантелић	II	XIV београдска гимназија	Београд	Наташа Диздаревић	56,00	70,0	15,0	11,0	96,0	I
2	Јован	Марковић	II	Гимназија	Крушевац	Марица Грчак	50,00	62,5	15,0	9,0	86,5	II
3	Огњен	Алексић	II	IX београдска гимназија	Београд	Драгана Илић	39,50	49,4	15,0	7,0	71,4	III

4	Анђела	Ћирић	II	Гимназија	Смедерево	Весна Вучковић Мицић	33,00	41,3	15,0	12,0	68,3	похвалница
5	Никола	Милина	II	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	28,50	35,6	15,0	15,0	65,6	похвалница
6	Јован	Аризановић	II	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Славица Драмићанин	35,00	43,8	7,5	12,0	63,3	похвалница
7	Софија	Радишић	II	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	29,50	36,9	15,0	11,0	62,9	
8	Маша	Стаменковић	II	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	30,00	37,5	15,0	10,0	62,5	
9	Богдана	Колић	II	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	25,50	31,9	15,0	15,0	61,9	
10	Лазар	Савић	II	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	30,50	38,1	15,0	8,0	61,1	
11	Милош	Прокић	II	Прва крагујевачка гимназија	Крагујевац	Сања Симић	31,50	39,4	15,0	6,0	60,4	
12	Петар	Дамјановић	II	Ужичка гимназија	Ужице	Славица Вељовић	41,00	51,2	7,5	1,0	59,7	
13	Невена	Стојановић	II	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	32,00	40,0	12,5	6,0	58,5	
14	Ана	Костић	II	IX београдска гимназија	Београд	Марина Влаховић	27,50	34,4	15,0	8,0	57,4	
15	Бошко	Здравковић	II	Гимназија „Јован Јовановић Змај"	Нови Сад	Соња Ивковић Павловић	26,50	33,1	15,0	7,0	55,1	
16	Саво	Станојевић	II	Гимназија	Чачак	Данка Вујичић	25,50	31,9	11,0	11,0	53,9	
17	Маја	Крстић	II	I београдска гимназија	Београд	Славица Јелић	27,00	33,8	14,5	4,0	52,3	
18	Бранислав	Ћујић	II	Гимназија	Јагодина	Душица Ивановић	25,50	31,9	7,5	3,0	42,4	
19	Катарина	Стојановић	II	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	25,00	31,3			31,3	
20	Милица	Раковић	II	Гимназија	Краљево	Ана Дамјановић	24,00	30,0			30,0	
21	Петар	Ковачевић	II	Гимназија „Бора Станковић"	Ниш	Љиљана Миладиновић	23,50	29,4			29,4	
22	Николија	Цуцкић	II	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Александра Петровић	23,00	28,8			28,8	
23	Кристина	Јовић	II	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	22,50	28,1			28,1	
24	Тина	Ракић	II	IX београдска гимназија	Београд	Драгана Илић	22,00	27,5			27,5	
25	Немања	Савић	II	Ваљевска гимназија	Ваљево	Бранислав Јовановић	21,00	26,3			26,3	
26	Сања	Атанацковић	II	Гимназија „Вук Караџић"	Лозница	Нада Бакиш	19,00	23,8			23,8	
27	Илија	Милетић	II	XIII београдска гимназија	Београд	Слађана Делић	18,00	22,5			22,5	
27	Урош	Петковић	II	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	18,00	22,5			22,5	
29	Михајло	Ковачевић	II	I београдска гимназија	Београд	Славица Јелић	17,50	21,9			21,9	
30	Илија	Јевтовић	II	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Славица Драмићанин	17,00	21,3			21,3	
30	Иван	Варга	II	Гимназија „Исидора Секулић"	Нови Сад	Драгана Ристић	17,00	21,3			21,3	
32	Марија	Амановић	II	Паланачка гимназија	Смедеревска Паланка	Жељка Тишма	16,50	20,6			20,6	
32	Лука	Петрић	II	Средња техничка школа	Кладово	Иванка Радоњић	16,50	20,6			20,6	
34	Михајло	Митровић	II	Гимназија	Зајечар	Славица Бајовић	15,00	18,8			18,8	
35	Анђела	Јовкић	II	Пожаревачка гимназија	Пожаревац	Јован Стевановић	14,00	17,5			17,5	
36	Лена	Миловановић	II	Гимназија „Бора Станковић"	Ниш	Ивана Тонса	13,50	16,9			16,9	
36	Мила	Миловић	II	Гимназија „Светозар Марковић"	Суботица	Радомир Матић	13,50	16,9			16,9	
38	Владислав	Савић	II	Гимназија	Ивањица	Милена Васовић	12,00	15,0			15,0	
38	Павле	Гавриловић	II	Гимназија	Ивањица	Милена Васовић	12,00	15,0			15,0	
40	Михаило	Бубера Голеш	II	Гимназија „Вељко Петровић"	Сомбор	Ивана Вујошевић	11,50	14,4			14,4	
41	Михајло	Марковић	II	Средња школа	Брус	Драган Миљковић	10,50	13,1			13,1	
42	Дијана	Илић	II	Медицинска школа	Лесковац	Драгана Вучковић	9,00	11,3			11,3	
43	Ерсан	Смаиловић	II	Гимназија	Нови Пазар	Мелина Сагдати	8,50	10,6			10,6	
44	Мила	Ђопић	II	Гимназија „Исидора Секулић"	Нови Сад	Драгана Ристић	7,50	9,4			9,4	
44	Алекса	Букара	II	Гимназија	Чачак	Данка Вујичић	7,50	9,4			9,4	
46	Сара	Цинцовић	II	Гимназија	Прибој	Јелена Ћубић	5,00	6,3			6,3	
47	Петар	Ланговић	II	Пријепољска гимназија	Пријепоље	Миломан Дробњак	4,50	5,6			5,6	
47	Милош	Иветић	II	Гимназија „Душан Васиљев"	Кикинда	Наташа Игаз	4,50	5,6			5,6	
49	Александра	Стојаковић	II	Медицинска школа	Зрењанин	Јожеф Добо	1,50	1,9			1,9	
50	Ђорђе	Остојић	II	Пријепољска гимназија	Пријепоље	Миломан Дробњак	0,00	0,0			0,0	
50	Јована	Димитријевић	II	Медицинска школа	Ћуприја	Слађана Стајић	0,00	0,0			0,0	

ПРВИ И ДРУГИ РАЗРЕД, ТЕСТ И САМОСТАЛНИ ИСТРАЖИВАЧКИ РАД
КОРЕКЦИОНИ ФАКТОР 1.117 0.893

Ред. бр.	Име	Презиме	Разред	Школа	Место	Ментор или предметни професор	Поени					Награда
							Тест	Тест кориг.	Израда рада	Одбрана рада	Укупно	
1	Милица	Раковић	II	Гимназија	Краљево	Ана Дамјановић	24,0	21,4	25,0	25,0	71,4	I
2	Бошко	Танасковић	I	Гимназија	Чачак	Мирјана Јевтовић	18,0	20,1	20,0	20,0	60,1	II

ТРЕЋИ И ЧЕТВРТИ РАЗРЕД, ТЕСТ И ЕКСПЕРИМЕНТАЛНЕ ВЕЖБЕ

КОРЕКЦИОНИ ФАКТОР 1.451

Ред. бр.	Име	Презиме	Разред	Школа	Место	Ментор или предметни професор	Поени					Награде
							Тест	Тест кориг.	Квалитативна анализа	Квантитативна анализа	Укупно	
1	Марко	Беслаћ	IV	III београдска гимназија	Београд	Татјана Ђурић	45,50	66,0	15,0	15,0	96,0	I
2	Михаило	Мирковић	III	I београдска гимназија	Београд	Слободанка Пријић	45,00	65,3	15,0	14,0	94,3	II
3	Александра	Љубеновић	III	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	44,50	64,6	15,0	12,0	91,6	II
4	Игор	Топаловић	IV	Ужичка гимназија	Ужице	Славица Вељовић	47,25	68,5	15,0	8,0	91,5	II
5	Жарко	Ивковић	III	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Маја Ђорђевић	43,50	63,1	15,0	13,0	91,1	II
6	Душан	Трајковић	IV	XIII београдска гимназија	Београд	Оливера Јеленковић	48,25	70,0	7,5	11,0	88,5	II
7	Стефан	Божић	III	Гимназија „Јован Јовановић Змај"	Нови Сад	Дејан Радовановић	40,00	58,0	15,0	13,0	86,0	III
8	Филип	Колцић	III	Математичка гимназија	Београд	Аника Влајић	41,75	60,6	15,0	10,0	85,6	III
9	Михаило	Милошевић	III	Математичка гимназија	Београд	Ивана Вуковић	39,25	57,0	15,0	13,0	85,0	III
10	Богдана	Ђорђевић	IV	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Славица Драмићанин	37,75	54,8	15,0	14,0	83,8	III
11	Јелена	Ивковић	IV	XIII београдска гимназија	Београд	Оливера Јеленковић	34,75	50,4	15,0	14,0	79,4	
12	Стефан	Радојичић	III	Математичка гимназија	Београд	Аника Влајић	35,25	51,1	15,0	13,0	79,1	
13	Миона	Томић	IV	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	41,50	60,2	15,0	1,0	76,2	
14	Никола	Фишић	III	XIV београдска гимназија	Београд	Биљана Петровић	40,40	58,6	5,0	12,0	75,6	
15	Владан	Васић	III	Гимназија	Пирот	Бранкица Савић	41,00	59,5	7,5	8,0	75,0	
16	Андреј	Дедић	III	XIII београдска гимназија	Београд	Анита Стојчевски	31,75	46,1			46,1	
17	Јована	Стијепић	III	VI београдска гимназија	Београд	Владимир Тасић	31,50	45,7			45,7	
18	Биљана	Стошић	III	Гимназија	Лесковац	Јелена Ђорђевић	29,90	43,4			43,4	
19	Михајло	Ђурчић	IV	Гимназија	Велика Плана	Далиборка Кристић	29,75	43,2			43,2	
20	Милица	Урошевић	III	Прва крагујевачка гимназија	Крагујевац	Сања Симић	29,50	42,8			42,8	
21	Ангелина	Димитријевић	III	Гимназија „Бора Станковић"	Бор	Слободанка Игњатовић	29,25	42,4			42,4	
22	Иван	Борковић	IV	IX београдска гимназија	Београд	Бранка Кујовић	29,00	42,1			42,1	
22	Михајло	Бенцун	III	Медицинска школа „др Изабел Емсли Хатон"	Врање	Оливера Поповић	29,00	42,1			42,1	
24	Бранка	Крњаја	III	Математичка гимназија	Београд	Аника Влајић	28,50	41,3			41,3	
25	Даниела	Пап	III	Гимназија „Светозар Марковић"	Суботица	Ибоља Николић	28,30	41,1			41,1	
26	Никола	Остојић	III	Медицинска школа	Зрењанин	Чила Капор	27,50	39,9			39,9	
27	Димитрије	Глукчевић	III	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Славица Драмићанин	27,00	39,2			39,2	
28	Наташа	Негру	III	Гимназија „Исидора Секулић"	Нови Сад	Ивана Рашковић	25,90	37,6			37,6	
29	Катарина	Станојевић	IV	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	22,90	33,2			33,2	
30	Урош	Маринковић	III	Гимназија „Светозар Марковић"	Ниш	Слађана Јовић	22,50	32,6			32,6	
31	Богдан	Пантелић	IV	Ваљевска гимназија	Ваљево	Момир Станојевић	22,00	31,9			31,9	
32	Марко	Вучић	IV	Пожаревачка гимназија	Пожаревац	Јован Стевановић	20,50	29,7			29,7	
33	Петар	Стојковић	IV	Гимназија	Врњачка Бања	Биљана Марковић	19,50	28,3			28,3	
34	Стефан	Митровић	IV	III београдска гимназија	Београд	Татјана Ђурић	18,00	26,1			26,1	
34	Василије	Милановић	IV	Гимназија	Крушевац	Данијела Њежић	18,00	26,1			26,1	
36	Марија	Поповић	III	Ужичка гимназија	Ужице	Драгица Селаковић	17,50	25,4			25,4	
37	Лука	Миљић	III	V београдска гимназија	Београд	Аница Салом	16,00	23,2			23,2	
38	Алекса	Стојиљковић	IV	Гимназија	Пирот	Бранкица Савић	15,00	21,8			21,8	
39	Софија	Милосављевић	III	Техничка школа	Жагубица	Никола Јовкић	14,50	21,0			21,0	

40	Максим	Костадинов	III	Ужичка гимназија	Ужице	Драгица Селаковић	13,50	19,6			19,6
41	Марија	Павловић	IV	Гимназија „Исидора Секулић”	Нови Сад	Драгана Ристић	11,25	16,3			16,3
42	Душан	Миловановић	III	Пожаревачка гимназија	Пожаревац	Мирјана Живојиновић	11,00	16,0			16,0
42	Елена	Ђујин	III	Гимназија "Урош Предић"	Панчево	Александра Новићевић	11,00	16,0			16,0
44	Вук	Петровић	IV	Ваљевска гимназија	Ваљево	Бранислав Јовановић	10,75	15,6			15,6
45	Анастасија	Волчановска	IV	Гимназија	Јагодина	Душица Ивановић	7,50	10,9			10,9
46	Стефан	Петровић	III	Медицинска школа	Ћуприја	Слађана Стајић	7,00	10,2			10,2
47	Уна	Јаковљевић	IV	Гимназија „Светозар Марковић“	Суботица	Радомир Матић	6,00	8,7			8,7
48	Алекса	Новокмет	III	Прва крагујевачка гимназија	Крагујевац	Славица Ковачевић	5,00	7,3			7,3
49	Кристина	Милановић	III	Медицинска школа	Ужице	Љиљана Иваниш	1,50	2,2			2,2

ТРЕЋИ И ЧЕТВРТИ РАЗРЕД, ТЕСТ И САМОСТАЛНИ ИСТРАЖИВАЧКИ РАД

КОРЕКЦИОНИ ФАКТОР 1.036

Ред. бр.	Име	Презиме	Разред	Школа	Општина	Ментор или предметни професор	Поени					Награда
							Тест	Тест кориг.	Израда рада	Одбрана рада	Укупно	
1	Михајло	Мирковић	III	Прва београдска гимназија	Београд	Слободанка Пријић	45,0	46,6	25,0	25,0	96,6	I
2	Филип	Колцић	III	Математичка гимназија	Београд	Аника Влајић	41,8	43,2	25,0	25,0	93,2	II
3	Миона	Томић	IV	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	41,5	43,0	24,0	22,0	89,0	II
4	Катарина	Станојевић	IV	Гимназија	Лесковац	Предраг Стоиљковић	22,9	23,7	23,0	22,0	68,7	похвалница

ВЕСТИ ИЗ СХД

КРАТКИ ИЗВЕШТАЈ СА 7. РЕГИОНАЛНОГ СИМПОЗИЈУМА ЕЛЕКТРОХЕМИЈЕ ЗЕМАЉА ЈУГОИСТОЧНЕ ЕВРОПЕ – RSE-SEE-7

У периоду од 27. до 30. маја 2019. године одржан је 7. Регионални симпозијум електрохемије земаља југоисточне Европе (7th Regional Symposium on Electrochemistry of South-East Europe, RSE-SEE-7), у хотелу “Парк” у Сплиту, у Хрватској.

Иако је конференција примарно регионалног карактера, поред земаља из региона, учествовале су земље из целе Европе па и шире. Земље учеснице су биле Хрватска, Румунија, Бугарска, Северна Македонија, Грчка, Кипар, Црна Гора, Србија, Мађарска, Словачка, Чешка, Украјина, Аустрија, Албанија, Холандија, Босна и Херцеговина, Молдавија, Италија, Словенија, Француска, Немачка, Шпанија, Русија, Тајланд, Пољска, Португал, Аргентина, Кина, Нигерија, САД, Швајцарска, Белгија, Данска, Велика Британија, Јапан и Јужна Кореја.

Представник Српског хемијског друштва у Научном одбору конференције била је председница Српског хемијског друштва, проф. др Весна Мишковић-Станковић (Универзитет у Београду - Технолошко-металуршки факултет). Проф. др Јелена Бајат (Универзитет у Београду - Технолошко-металуршки факултет) је била члан Организационог одбора.

Као представници Србије, предавања по позиву (Keynote lectures) су одржали др Небојша Николић (Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију) на тему: “Formation of disperse deposits by electrolysis: morphology, structure and mechanism” и проф. др Игор Пашти (Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију) на тему: “Computationally driven development of novel electrocatalysts”

Конференција је била подељена у 6 тематских симпозијума из различитих области електрохемије, укључујући батерије и електрохемјске изворе енергије, сензоре, корозију и заштиту од корозије, биоелектрохемију и електрохемијско инжењерство. Осим тога у склопу конференције одржани су и студентски сателитски симпозијум, као и 8. Курт-Швабе симпозијум. На конференцији је укупно представљено 5 пленарних и 10 предавања по позиву, као и 68 усмених презентација. Осим тога, изложено је и 67 постерских саопштења. Србија је представљена кроз два предавања по позиву и 12 постерских презентација.

Весна Мишковић-Станковић