

Supramolekulske arhitekture halogenidnih koordinacijskih spojeva bakra (II) s aaminskim i laktamskim derivatima pirazina i pirimidina

Penić, Nikolina

Master's thesis / Diplomski rad

2018

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:241870>

Rights / Prava: [In copyright](#) / [Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-17**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI I KEMIJSKI ODSJEK

Nikolina Penić

Supramolekulske arhitekture
halogenidnih koordinacijskih
spojeva bakra(II) s aminskim i laktamskim
derivatima pirazina i pirimidina

Diplomski rad
Zagreb, 2018

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI I KEMIJSKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ
FIZIKE I KEMIJE

Nikolina Penić

Diplomski rad

predložen Fizičkom i Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog
fakulteta Sveučilišta u Zagrebu radi stjecanja akademskog stupnja magistre
edukacije fizike i kemije

Supramolekulske arhitekture halogenidnih
koordinacijskih spojeva bakra(II) s aminskim i
laktamskim derivatima pirazina i pirimidina

Voditelj diplomskog rada: doc. dr. sc. Marijana Đaković

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

4. _____

Zagreb, 2018.

Ovaj diplomski rad izrađen je na Prirodoslovno–matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu na Kemijskom i Fizičkom odsjeku, pod vodstvom doc. dr. sc. Marijane Đaković, neposrednim vodstvom mag. chem. Mladena Borovine i suvodstvom (komentorstvom) izv. prof. dr. sc. Damira Pajića. Metodički dio rada izrađen je pod vodstvom izv. prof. dr. sc. Draginje Mrvoš-Sermek. Istraživački dio ovog rada u potpunosti je financiran od Hrvatske zaklade za znanost, sa projekta „*Engineering crystalline materials using metal complexes and non-covalent interactions*“ (UIP-11-2013-1809), a dio koji se odnosi na istraživanje magnetskih svojstava sa projekta „*Multiferroic and magnetoelectric systems*“ (UIP-2014-09-8276).

„Veličine nema gdje nema i jednostavnosti, dobrote i istine“.

Lav Nikolajevič Tolstoj

Zahvaljujem se dragoj mentorici doc. dr. sc. Marijani Đaković na pruženoj pomoći, podršci, diskusijama i savjetima prilikom izrade ovog diplomskog rada. Ono na čemu se posebno iz dubine svoje duše zahvaljujem, jest na pruženom Vremenu i Strpljenju u meni nepoznatim količinama, a koji su mi kroz studij sve ove godine strašno nedostajali. Svojim Strpljenjem je pružila vrckavom Znanju da postane dokučivo i jednostavno, svojom Jednostavnošću je dala priliku šlampavom Iskustvu da traga za istinom, a svojom Veličinom je Znatiželji omogućila da nakon dugo, dugo vremena, radosno, sretno, bezgranično i neokovana Vremenom putuje po knjigama.

“...izvrsnost u počavanju se postiže tek onda kada napravimo sve što možemo, kako bi naši učenici postali sve ono što mogu”.

Carol Ann Tomlinson

Zahvaljujem se dragoj mentorici izv. prof. dr. sc. Draginji Mrvoš-Sermek na uloženom trudu, dobroj volji, vremenu i svoj pomoći prilikom izrade ovog diplomskog rada. Posebno se zahvaljujem na uvijek toplom Pogledu koji je uvijek slušao moje pomalo utopističke ideje, na velikoj Podršci i Potpori koje su mi pružene za sve moje neuobičajene satove i sva moja modeliranja, na pruženom Prijateljstvu koje mi je omogućilo da kemiju volim i predajem na svoj pomalo šašav način. I naposljetku, svojim Poučavanjem je dala privilegiju, mogućnost i slobodu da promijenim svijet, pa makar i samo na papiru,

„Learning is the only thing the mind never exhausts, never fears and never regrets.“

Leonardo da Vinci

Zahvaljujem se dragom mentoru izv. prof. dr. sc. Damiru Pajiću što mi je dao priliku, a ujedno i privilegiju da upoznam čudesni svijet kvantne fizike kao i na svakoj ispričanoj priči i trudu koji je uložio u objašnjavanje istoimenog. Zahvaljujem se na svim odgovorima na moja pitanja, savjetima, pomoći i uloženom vremenu prilikom izrade ovog diplomskog rada. Posebno se zahvaljujem na svim strpljivo provedenim diskusijama koje su mi kasnije uvijek omogućile pogled iz drugog kutka, što je učenje učinilo još zabavnijim i veselijim.

„The greatest gift you can give someone is your time...”

Kao neposrednom voditelju, zahvaljujem se mag. chem. Mladenu Borovini na ukazanom trudu, na svom znanju kojeg mi je beskompromisno prenio, na velikoj pomoći i svim diskusijama, na smijehu i svim nezaboravnim izjavama prilikom izrade ovog diplomskog rada.

Kao prijatelju, hvala ti na potpori, što si vjerovao u mene, na svim našim filozofskim razgovorima koji su trajali do sitnih sati i na nebrojenim dogodovštinama koje su me uvijek razveseljavale i nasmijavale. Hvala ti na tim sitnicama, jer su moj život učinile još bogatijim i veselijim.

*„Feeling gratitude and not expressing it is
like wrapping a present and not giving it“
William Arthur Ward*

Hvala Sudbini što je na moj studentski put i općenito na moj životni put postavila mnoge posebne ljude koji su utjecali na moj profesionalni i osobni rast i razvoj, a svojim su čudima omogućili da taj put bude sretniji, veseliji i u konačnici prebrodiv. Stoga se mogu samo ponizno zahvaliti na svemu što sam od svih vas naučila vodeći se mišlju:

*“Valja cijeniti svaku i najsitniju žrtvu, svaku najmanju pobjedu
i u neznatnim stvarima. Mnogo malih, sitnih pobjeda stvara jednu veliku,
kao što opeka stvara veliku zgradu.”
Marija Jurić Zagorka*

Prof. Mirku Planiniću,

Hvala Vam što ste na predavanjima otvarali šampanjac pokazujuću adijabatski proces, što ste riskirali život sa kuglom, što ste nas vodili na Safari gdje ste kosim hitcem gađali majmuna i što smo morali odgovarati tada „ah, onim napornim“ karticama. Hvala Vam za svaku ispričanu Priču jer su upravo one razlog zbog kojeg sam zavoljela fiziku, počela pričati priče i koristiti kartice kako bih motivirala druge, onako kako ste Vi svojim predavanjima motivirali mene.

Prof. Ani Sušac,

Hvala Vam na pruženom znanju, savjetima, uvijek pruženom Osmijehu i Potpori u teškim trenucima mog studija..

Prof. Planinki Pećini,

Hvala Vam na strogoći, pravednosti, strpljenju, pruženom znanju, svim pitanjima „Dobro, ali zašto?“ i na svoj potpori koju ste mi pružili kroz studij. Posebno se zahvaljujem što ste me svojim stavom i principima naučili poniznosti pred znanjem i zahvalnosti prema učenju čime sam spoznala kako razmišljati, propitkivati i kako je zapravo najvažnije znati ono što ne znaš jer upravo spoznaja vlastitog neznanja dovodi do mogućnosti učenja.

Ekipi u referadi,

Hvala Leu što me je naučio boriti se sa studomatom i što me je upoznao sa strpljenjem općenito prema kompjuterima. Hvala Marku na toploj riječi, uvijek spremnosti za pomoći (pogotovo u kritičnim situacijama) i što me je naučio boriti se sa svim mogućim i nemogućim pravilnicima. Hvala Ireni na svakoj čašici razgovora, na prijateljskoj „špotanciji“ i što me je naučila boriti se sa svim pravilima besmislene mi papirologije.

Ekipi u podrumu

Hvala gospođi Moniki što je uvijek bila spremna otvoriti vrata u ranijim jutarnjim satima. Hvala gospođi Slavici na svim smiješnim i vrcavim čašicama razgovora koje su mi uvijek popravile dan. Hvala gospođi Snježani na skuhanim jutarnjim kavama i na svoj pruženoj pomoći kada su bila kaotična vremena u knjižnici. Možda naizgled malim, ali meni velikim trenutcima svojim primjerom skromno ste me naučile kako je vrlo lako otvoriti vrata, kako je vrlo lako nekome razveseliti dan i nasmijati ga, kako je vrlo lako nekome pomoći, odnosno kako je zapravo vrlo lako biti nekome jedno čudo u danu.

Teti Ljubici,

Hvala Vam na pomoći u labosu, strpljenju, na pruženom znanju i savjetima. Hvala Vam što ste me svojim primjerom naučili da budem organiziranija, pedantnija i učinkovitija u eksperimentalnom radu u labosu što je uvelike utjecalo na moj daljnji profesionalni rast i razvoj.

Teti Bibi,

Hvala Vam što ste na mojoj prvoj godini spašavali moje vježbe, što ste mi pokazali da Liebigovo hladilo može i „dihati“, što ste me strpljivo i pažljivo poučavali svim mogućim osnovama koje su nepobitan temelj za daljnji kvalitetan i profesionalan rad u labosu. Kroz sve ove godine studija hvala Vam na svim pruženim savjetima, na svim veselim čašicama razgovora u Calcutti, na pruženoj brizi, na pitanjima „Malička, kad ćemo?“, jer ste me upravo kroz te malene trenutke naučili da treba veselo i radosno koračati naprijed i samo naprijed.

Teti Ireni,

Hvala Vam na potpori, uvijek pruženom osmijehu, spremnosti za pomoć u bilo kojem trenutku, čašicama razgovora o koječemu i uvijek spremnoj šalici kave tokom mojih zadnjih godina studija. Hvala Vam na posuđenim ravnalima, digitronima, bojicama i na trudu koji ste uvijek uložili kada mi je nešto trebalo. Hvala Vam na svim savjetima, razgovorima o vlastitom iskustvu oko praktičnog rada i svom pruženom znanju. Hvala Vam što ste me strpljivo naučili pripremati otopine, kristalizirati, bušiti čepove, postaviti kojekakve staklene instalacije i kako doskočiti bilo kakvom nastalom problemu u labosu. Također koristim priliku da Vam se ispričavam za sve potrgano, razbijeno, proliveno, pa čak i otopljeno jer upravo su me te greške učinile boljim budućim znanstvenikom i profesorom.

Gogi,

Hvala ti na svim veselim zajedničkim provedenim trenutcima. Posebno ti se zahvaljujem što si mi dala privilegiju da budem sudionik projekta „Petak“ kojim si me naučila važnu životnu lekciju da se „svi naši snovi mogu ostvariti – ukoliko imamo hrabrost da ih slijedimo“.

Gospođi Mirjani,

Hvala Vam na svoj potpori, razumijevanju, strpljenju, pomoći i rješavanju svih mogućih i nemogućih problema koji su se našli na mom studenstskom putu. Ono na čemu Vam se posebno zahvaljujem što ste me podučili da je "naša najveća slabost odustajanje, a najsigurniji put da se dođe do uspjeha je pokušati bar još jednom."

Tomici,

Hvala ti na svakoj čašici razgovora, na svim zabavnim pričama i dogodovštinama koje su me uvijek nasmijavale, na svakoj kavici, na svim posuđenim digitronima, ravnalima i uvijek spremnosti za pomoć. Posebno se zahvaljujem na podršci, potpori i na mogućnosti ostanka u f-25 što je uvelike utjecalo na moje studentske dane, na čemu ti se beskonačno zahvaljujem.

Prijateljima,

Hvala Mariji na potpori i svim čašicama razgovora, Anđi što je uvijek spremno trpila moju čangrizavost, Silviji na svim smiješnim kavama i motivacijskim govorancijama. Hvala kolegama iz labosa III kao i svima ostalima na strpljenju, doživljenim pustolovinama, podršci, potpori i svim veselim trenucima koje ste mi donijeli.

Heleni Luketić-Buyers

Podsjetila si me da među običnim šeširima postoje i zmijske koje su progutale slona i dala privilegiju da vidim najiskreniji i najveći osmijeh, a mogu ti se samo zahvaliti što si me podsjetila kako se je utrkivati s kartonskim kutijama, igrati „Lovice“, kako letjeti na parkiralištu, kako nacrtati „Čoveka“, kako je vrlo lako reći „Nema veze...“, kako je smiješno mahati tramvajima i kako se vrlo lako može onako iskreno, prijateljski i od srca nasmijati. Stoga, svaki uloženi trenutak, svaku misao i svako ulovljeno Slovo metodičkog dijela ovog diplomskog rada posvećujem Tebi, kao i „Viteza Čoveka“.

Prof. Suzani Ajhner-Starčević,

Hvala Vam na pruženoj ljubavi, potpori i podršci kroz sve ove godine i svim razgovorima koji su me tjerali naprijed. Od svega, posebno Vam se želim zahvaliti što sam imala tu privilegiju gledajući Vas, spoznati da „Učitelj ne predaje ono što želi, ne predaje ono što zna, Učitelj predaje ono što jest.“

Karlu, Luki, Ines i Reb

Hvala vam na svojoj radosti i veselju koje ste unijeli u moj život.

I na posljednjem, ali najvažnijem mjestu hvala mojim roditeljima, Mami i Tati koji su sve ove godine bili uz mene, na pruženoj ljubavi, strpljenju, podršci i potpori bez kojih ova pustolovina nikako ne bi bila ostvariva.

Sadržaj:

SAŽETAK	IX
ABSTRACT	X
1. UVOD	1
2. LITERATURNI PREGLED	3
2.1. SUPRAMOLEKULSKA KEMIJA	4
2.1.1. Međumolekulske interakcije	5
2.1.2. Vodikova veza	7
2.1.3. Motivi vodikovih veza u kristalnom pakiranju	9
2.1.4. Supramolekulski sinton amida	10
2.2. KRISTALOGRAFSKA BAZA PODATAKA, CSD	11
2.2.1. Pretraga baze strukturnih podataka, Cambridge Structural Database (CSD)	12
2.2.2. Pretraga baze strukturnih podataka prema supramolekulskom motivu povezivanja u metalo- organskim sustavima	16
2.2.3. Pretraga baze strukturnih podataka prema motivu povezivanja za analogne spojeve odabranih cikličkih amida, 2-NH ₂ py i 2-pyn	17
2.2.4. Pretraga baze strukturnih podataka za koordinacijske spojeve bakra(II) s halogenidnim ionima kao premosnim ligandima	18
2.3. FIZIKA MATERIJALA I MAGNETSKA SVOJSTVA TVARI	21
2.3.1. Magnetska međudjelovanja i niskodimenzionalni spinski sustavi	22
2.3.2. Dijamagnetizam	23
2.3.3. Paramagnetizam	24
2.3.4. Feromagnetizam i antiferomagnetizam	26
3. EKSPERIMENTALNI DIO	27
3.1. MATERIJALI I METODE	28
3.2. SINTEZA SPOJEVA	30
3.2.1. Sintaza spoja [CuCl ₂ (4-pym) ₂] _n (1)	30
3.2.2. Sintaza spoja [CuBr ₂ (4-pym) ₂] _n (2)	30
3.2.3. Sintaza spoja [CuCl ₂ (2-NH ₂ pz) ₂] _n (3)	31
3.2.4. Sintaza spoja [CuCl ₂ (2-pyz) ₂] _n (4)	31
3.3. PRIPRAVA MONOKRISTALA	32
3.3.1. Priprava monokristala spoja [CuCl ₂ (4-pym) ₂] _n (1)	32
3.3.2. Priprava monokristala spoja [CuBr ₂ (4-pym) ₂] _n (2)	34
3.3.3. Priprava monokristala spoja [CuCl ₂ (2-NH ₂ pz) ₂] _n (3)	36
3.3.4. Priprava monokristala spoja [CuCl ₂ (2-pyz) ₂] _n (4)	38
3.3.5. Priprava monokristala spoja [CuBr(2-pyz)] _n (5)	39

4. REZULTATI I RASPRAVA	40
4.1. ANALIZA KRISTALOGRAFSKIH PODATAKA	41
4.1.1. <i>Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1).....</i>	<i>41</i>
4.1.2. <i>Kristalna struktura spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)</i>	<i>44</i>
4.1.3. <i>Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3).....</i>	<i>47</i>
4.1.4. <i>Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (4)</i>	<i>50</i>
4.1.5. <i>Kristalna struktura spoja $[\text{CuBr}(2\text{-pyz})]_n$ (5)</i>	<i>53</i>
4.2. ANALIZA MAGNETSKIH SVOJSTAVA SPOJEVA	55
4.2.1. <i>Mjerenja magnetizacije spojeva $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2).....</i>	<i>55</i>
4.2.2. <i>Analiza i rasprava magnetskih mjerenja spojeva $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)</i>	<i>56</i>
4.3. DIFRAKTOGRAMI PRAHA BAKROVIH(II) KOORDINACIJSKIH SPOJEVA.....	63
4.4. TERMOGRAVIMETRIJSKA ANALIZA (TGA).....	64
4.5. DIFERENCIJALNA SKENIRAJUĆA KALORIMETRIJA (DSC).....	65
5. ZAKLJUČAK	66
6. POPIS OZNAKA, KRATICA I SIMBOLA	68
7. POPIS LITERATURE	70
8. PRILOZI	73
8.1. KRISTALOGRAFSKE TABLICE	74
8.2. DIFRAKTOGRAMI PRAHA	79
8.3. TERMOGRAVIMETRIJSKA ANALIZA.....	82
8.4. DIFERENCIJALNA SKENIRAJUĆA KALORIMETRIJA	84

METODIČKI DIO	86
VALENCIJA – TEMELJNI KEMIJSKI POJAM	86
1. UVOD	87
2. NASTAVNI PLAN I PROGRAM	89
3. POVIJEST POJMA VALENCIJA	91
3.1. POVIJEST POJMA VALENCIJA U HRVATSKIM UDŽBENICIMA	92
3.2. POVIJEST METODOLOGIJE POUČAVANJA POJMA VALENCIJA U HRVATSKIM UDŽBENICIMA	95
4. METODOLOGIJA ISTRAŽIVANJA	100
4.1. OČEKIVANE STUDENTSKE POTEŠKOĆE	101
4.2. BLOOMOVA TAKSONOMIJA ZNANJA	103
4.3. UZORAK ISPITANIKA	105
4.4. KRITERIJI OBRADE PODATAKA	106
4.5. KONSTRUKCIJA I OBRADA TESTA	107
4.5.1. Konstrukcija testa na temelju Bloomove taksonomije	107
4.5.2. Obrada testa na temelju očekivanih poteškoća	109
4.5.3. Prvi zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa	111
4.5.4. Drugi zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima	112
4.5.5. Treći zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima	113
4.5.6. Četvrti zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama	114
4.5.7. Peti zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima	115
4.5.8. Šesti zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u ionskim spojevima	116
4.5.9. Sedmi zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa	117
5. REZULTATI I RASPRAVA	118
5.1. VALENCIJA ATOMA NEKOG KEMIJSKOG ELEMENTA	119
5.2. VALENCIJA ATOMA NEKOG KEMIJSKOG ELEMENTA U KOVALENTNIM SPOJEVIMA	122
5.2.1. Valencija atoma nekog kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima	130
5.2.2. Valencija atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama	132
5.3. VALENCIJA ATOMA NEKOG KEMIJSKOG ELEMENTA U KOORDINACIJSKIM SPOJEVIMA	134
5.4. VALENCIJA ATOMA NEKOG KEMIJSKOG ELEMENTA U IONSKIM SPOJEVIMA	138
5.5. VALENCIJA ATOMA NEKOG KEMIJSKOG ELEMENTA	142
6. DISKUSIJA	143
7. HUMANA ŠKOLA KEMIJE	145

7.1. HUMANA ŠKOLA	146
7.2. GARDNEROVA TEORIJA VIŠESTRUKIH INTELIGENCIJA	147
7.3. POSEBNE ODGOJNO-OBRAZOVNE POTREBE	148
7.4. KRITIKA DRUŠTVU, ŠKOLI, NASTAVNICIMA, STAVU PREMA POUČAVANJU I PRIJEKO POTREBNA HUMANIZACIJA ŠKOLE	149
7.4.1. <i>Pitanja koja se postavljaju</i>	149
7.4.2. <i>Škola zahtijeva promjene</i>	150
7.4.3. <i>Nastavnik kao sredstvo za postizanje utopije humane škole</i>	151
7.5. PRIJEDLOG NASTAVNOG SATA	153
7.5.1. <i>Prijedlog sata prema istraživački usmjerenoj nastavi</i>	154
7.5.2. <i>Prijedlog sata prema Gardnerovoj teoriji višestrukih inteligencija</i>	155
7.5.3. <i>Prijedlog sata prilagođen učenicima s teškoćama i darovitim učenicima</i>	158
7.6. „VITEZ ČOVEK“	159
7.6.1. <i>„Vitez Čovek“ i Nastavni plan i program za osnovnu školu</i>	160
7.6.2. <i>„Vitez Čovek“ i Nastavni plan i program za srednje škole</i>	161
7.6.3. <i>„Vitez Čovek“ kao didaktičko pomagalo za slijepe i slabovidne učenike</i>	161
8. ZAKLJUČAK	163
9. POPIS LITERATURE	165
10. PRILOZI	168
10.1. BLOMOOVA TAKSONOMIJA	169
10.2. METODOLOGIJA ISTRAŽIVANJA	172
10.3. HUMANA ŠKOLA KEMIJE	176



Sveučilište u Zagrebu
Prirodoslovno-matematički fakultet
Kemijski odsjek

Diplomski rad

SAŽETAK

Supramolekulske arhitekture halogenidnih koordinacijskih spojeva bakra(II) s aminskim i laktamskim derivatima pirazina i pirimidona

Penić Nikolina

Zavod za opću i anorgansku kemiju
Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu
Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb, Hrvatska

Ovaj diplomski rad sastoji se od dvije cjeline: istraživačkog i metodičkog dijela.

U istraživačkom dijelu rada priređen je niz koordinacijskih polimera bakra(I) i bakra(II) s pirimidin-4-onom (4-pym), pirazin-2-onom (2-pyz) i 2-aminopirazinom(2-NH₂pz) te kloridnim i bromidnim protuionima kao ligandima. Kristalne strukture spojeva [CuCl₂(4-pym)₂]_n, [CuBr₂(4-pym)₂]_n, [CuCl₂(2-NH₂pz)₂]_n, [CuCl₂(2-pyz)₂]_n, [CuBr(2-pyz)]_n određene su rendgenskom strukturnom analizom. Spojevi su okarakterizirani metodom rendgenske difrakcije u polikristalnom uzorku, termogravimetrijskom analizom, diferencijalnom skenirajućom kalorimetrijom te su izmjerena i magnetska svojstva bakrovih(II) spojeva. Ustanovljeno je da je supramolekulski motiv lanca C(4) koji je općenito opažen u kristalnim strukturama amida održiv i u metalo-organskoj sredini neovisno o organskom ligandu, oksidacijskom stanju te koordinaciji bakra. Uočen je utjecaj protuiona na magnetsko ponašanje spojeva. U metodičkom dijelu rada pod naslovom „Valencija-temeljni kemijski pojam“, provedeno je preliminarno istraživanje studentskih poteškoća vezanih za pojam valencija u studentskoj populaciji različitih godina studija. Studentska pogrešna shvaćanja pojma valencije atoma kemijskog elementa najčešće su vezane uz broj veza koje atom ostvaruje ili uz broj svih valentnih elektrona. U sklopu prijedloga nastavnog sata dizajniran je višenamjenski trodimenzionalni periodni sustav elemenata za slijepe i slabovidne učenike „Vitez Čovek“.

(183 stranice, 76 slika, 20 tablica, 65 literaturnih navoda, izvornik na hrvatskom jeziku)

Rad je pohranjen u Središnjim knjižnicama za fiziku i kemiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Horvatovac 102a, 10 000 Zagreb, Hrvatska

Ključne riječi: koordinacijski spojevi bakra(II), amidi, supramolekulski motivi lanca, derivati pirazina i pirimidona valencija, Bloomova taksonomija, Gardnerova teorija višestrukih inteligencija

Mentori: doc. dr. sc. Marijana Đaković, doc., dr. sc. Draginja Mrvoš-Sermek, izv. prof.,
dr. sc. Damir Pajić, izv. prof.

Ocjenitelji: doc. dr. sc. Marijana Đaković
izv. prof. dr. sc. Draginja Mrvoš-Sermek
izv. prof. dr. sc. Damir Pajić
doc. dr. sc. Maja Planinić

Zamjena: izv. prof. dr. sc. Željka Soldin
izv. prof. dr. sc. Ivan Kokanović

Datum diplomskog ispita: 13. srpnja 2018.



University of Zagreb
Faculty of Science
Department of Chemistry

Diploma Thesis

ABSTRACT

Supramolecular architectures of copper(II) halide complexes with amine and lactame derivatives of pyrazine and pyrimidine

Penić Nikolina

This Diploma thesis consists of two parts: the research part and the methodical part.

In the research part, a series of coordination polymers of copper(I) and (II) with pyrazine and pyrimidine derivatives and various counterions (chloride, bromide) were prepared: $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$, $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$, $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$, $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$, $[\text{CuBr}(2\text{-pyz})]_n$. The crystal structures were determined by single crystal X-ray analysis. The complexes were studied by infrared spectroscopy, PXRD methods, thermal analysis and differential scanning calorimetry. All the obtained derivatives exhibit hydrogen bonds between ligand molecules and form supramolecular chain motifs. It has been shown that the desired supramolecular synthons, the catemeric C(4) chains, can be transferred from organic to metal-organic systems regardless of the ligand, oxidation state or the coordination geometries of the copper ions. Furthermore, the influence of a counterion on magnetic behaviour is also observed.

In the methodological part of the Thesis entitled „*Valence-basic chemical concept*“, the research on student understanding of *valence* is described. Many students' answers suggested a belief that valence is equal to number of all valence electrons and to number of bonds regardless of the year of the study. Within suggested one hour lesson, the didactic-methodological multipurpose three-dimensional periodic system of elements “Vitez Čovek” for blind and visually impaired students was designed.

(183 pages, 76 figures, 20 tables, 65 references, original in Croatian)

Thesis deposited in the Central Chemical Library of the Department of Chemistry and in the Central Library for Physics of the Department of Physics, Faculty of Science, University of Zagreb, Horvatovac 102a, Zagreb, Croatia

Keywords: copper(II) complexes, amides, supramolecular chain motif, pyrazine and pyrimidine derivatives, valence, Bloom's taxonomy, Gardner's theory of multiple intelligences

Mentors: Dr. Marijana Đaković, Asst. Prof., Dr. Draginja Mrvoš-Sermek, Assoc. Prof., Dr. Damir Pajić, Assoc. Prof.

Reviewers: Dr. Marijana Đaković, Asst. Prof.
Dr. Draginja Mrvoš-Sermek, Assoc. Prof.
Dr. Damir Pajić, Assoc. Prof.
Dr. Maja Planinić, Asst. Prof.

Substitute: Dr. Željka Soldin, Assoc. Prof., Dr. Ivan Kokanović, Assoc. Prof.

Date of exam: 13th July 2018

Međumolekulske interakcije, iako slabije od kovalentnih veza, imaju veliki značaj u kristalnom pakiranju i općenito utječu na svojstva spojeva te kao takve igraju vrlo važnu ulogu u kristalnom inženjerstvu. Kristalno inženjerstvo znanstveno je područje u kojem su međumolekulske interakcije središte proučavanja, a čiji je cilj razumjeti i kontrolirati uređenje međumolekulskih interakcija u kristalnoj strukturi u svrhu pripreme novih spojeva željenih, točno određenih fizikalnih i kemijskih svojstava. Vodikove veze jedne su od najbolje istraženih međumolekulskih interakcija te su kao takve vrlo dragocjen i neizbježan alat za dizajn i pripravu novih molekulskih kristala određenih topologija.^{1,2,3,4}

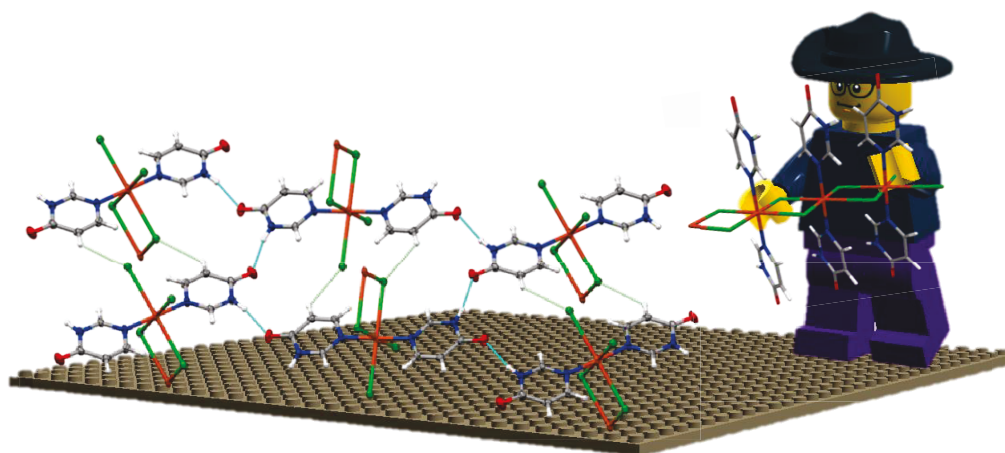
Vodeći se time, cilj ovog diplomskog rada je sintetizirati i okarakterizirati niz novih bakrovih(II) halogenidnih spojeva s ligandima 2-aminopirazinom (2-NH₂pz), pirazin-2-onom (2-pyz) i pirimidin-4-onom (4-pym) u svrhu proučavanja vodikovih interakcija i njihovog utjecaja na kristalnu strukturu priređenih spojeva. Budući da se kristalno inženjerstvo temelji na korištenju međumolekulskih interakcija u svrhu usmjeravanja kristalnog pakiranja gdje se u isto vrijeme ostvaruju željena fizikalna i kemijska svojstva, dizajn gore navedenih spojeva temeljio se je na dosadašnjim znanjima o vodikovim vezama u kontekstu kristalnog pakiranja. Vodeći se činjenicom da su vodikove veze do sada više istražene u organskim nego u metalo-organskim sustavima, prvi specifični cilj ovog diplomskog rada je pokušati „prenijeti“ supramolekulski motiv vodikovih veza iz organskog u metalo-organski sustav, tj. istražiti postojanost određenog supramolekulskog motiva u metalo-organskoj sredini. Drugi specifični cilj ovog diplomskog rada je proučavanje magnetskih svojstava priređenih spojeva kao i proučavanje utjecaja liganada na magnetska svojstva priređenih koordinacijskih spojeva.

Pretpostavka je da će priređeni spojevi biti polimerni s bakrovim(II) kationima premoštenim halogenidnim anionima te da će imati paramagnetska svojstva. Također, pretpostavlja se da će polimerni lanci međusobno biti povezani vodikovim vezama pri čemu će se ostvariti supramolekulski motivi lanca ili supramolekulski motivi prstena koji su karakteristični za laktamske i njima analogne sustave u organskoj sredini. Spojevi će biti priređeni otopinskom sintezom i metodom tekućinske difuzije, a njihove kristalne strukture biti će određene metodom rendgenske difrakcije u jediničnom kristalu. Priređeni spojevi također će biti okarakterizirani termogravimetrijskom analizom (TGA) i diferencijalnom skenirajućom kalorimetrijom (DSC). Priređenim spojevima bit će određena i magnetska svojstva, a mjerenja će biti provedena SQUID magnetometrom.

2. LITERATURNI PREGLED

2.1. Supramolekulska kemija

Supramolekulska kemija multidisciplinarno je područje koje obuhvaća tradicionalnu organsku i anorgansku kemiju (sinteza prekursora), računalno modeliranje (razumijevanje kompleksnosti supramolekulskih sustava), nanotehnologiju, fizikalnu kemiju (razumijevanje svojstava supramolekulskih sustava) i biokemiju. Kao „kemija iznad molekule“ razvila se je krajem 1960-ih godina, iako su primjeri supramolekulskih sustava uočeni i mnogo ranije, već početkom 19. stoljeća (Sir Humphrey Davy, 1810., kloridni hidrat; $\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}^1$). Za razliku od „klasične“ kemije u čijem su središtu proučavanja atom i kovalentna veza, središte proučavanja supramolekulske kemije su međumolekulske interakcije i supramolekulski agregati čija je gradivna jedinica molekula (ili molekulska vrsta). Kristalno inženjerstvo, dio supramolekulske kemije koji se bavi čvrstim stanjem, znanstveno je područje poznato i pod nazivom „legoTM kemija“ (slika 1). U tom konceptu molekule imaju ulogu lego kockica, molekulskih gradbenih blokova, koji su međusobno povezani međumolekulskim interakcijama i tako tvore kristalnu strukturu. Međumolekulske interakcije kojima se povezuju molekularni gradbeni blokovi uglavnom uključuju vodikove veze, $\pi - \pi$ interakcije, halogene interakcije i van der Waalsove interakcije.^{1,5,6,7}



Slika 1. Supramolekulska kemija čvrstog stanja ili LegoTM kemija

2.1.1. Međumolekulske interakcije

Periodičnost ponavljanja strukturnog motiva temeljna je karakteristika svake kristalne strukture. U molekulskom kristalu sadržaj asimetrične jedinice definira strukturni motiv koji se dalje periodički ponavlja kroz kristal; to može biti jedna molekula ili više molekula odnosno molekulskih vrsta koje se dalje međusobno povezuju jakim ili slabim međumolekulskim interakcijama. Iako slabije od kovalentnih veza, jake međumolekulske interakcije igraju važnu ulogu u izgradnji strukture molekulskih kristala, a odlikuju ih tri važne karakteristike: jakost, prostorna usmjerenost i dalekodosežnost.¹

1. Jakost međumolekulskih interakcija

Većina međumolekulskih interakcija nižih je energija ($1 - 15 \text{ kcal mol}^{-1}$) od većine kovalentnih veza ($75 - 125 \text{ kcal mol}^{-1}$). Zanimljivu iznimku čine najjača vodikova veza i najslabija kovalentna veza gdje najjača vodikova veza $\text{F}-\text{H}\cdots\text{F}$ ima energiju približno 50 kcal mol^{-1} , dok najslabija kovalentna veza $\text{C}-\text{I}$ ima vrijednost energije oko 30 kcal mol^{-1} . Međumolekulske interakcije koje su od važnosti u kontekstu kristalnog pakiranja poput vodikovih i halogenskih veza imaju energije vrijednosti $1,0 - 20 \text{ kcal mol}^{-1}$. Vrijednosti energija međumolekulskih interakcija prikazane su u tablici 1.¹

Tablica 1. Vrijednosti energija međumolekulskih interakcija

Međumolekulske interakcije	E / kcal mol ⁻¹
van der Waalsove interakcije	0,5 – 2,0
vodikove veze (vrlo jake)	> 20
vodikove veze (jake)	4 – 20
vodikove veze (slabe)	1,0 – 4,0
halogene veze	1,0 – 20

2. *Usmjerenost međumolekulskih interakcija*

Drugo važno svojstvo međumolekulskih interakcija je upravo njihova usmjerenost, svojstvo koje ima vrlo važnu ulogu u kristalnom inženjerstvu pri dizajniranju ciljanih supramolekulskih arhitektura u svrhu dobivanja novih materijala željenih svojstava. Nadalje, međumolekulske interakcije mogu biti izotropne ili anizotropne od kojih su izotropne (neusmjeravajuće) interakcije odgovorne za gusto pakiranje ($C\cdots C$, $C\cdots H$ i $H\cdots H$ interakcije). Za razliku od izotropnih interakcija, anizotropne interakcije su usmjeravajuće jer imaju posebnu distribuciju elektronske gustoće oko donornih i/ili akceptornih atoma. Od najvažnijih anizotropnih interakcija su vodikove veze te su kao takve vrlo moćan i neizbježan alat u dizajniranju supramolekulskih arhitekutra.¹

3. *Dalekodosežnost međumolekulskih interakcija*

Treća karakteristika jakih međumolekulskih interakcija je njihova ovisnost o udaljenosti, odnosno njihova dalekodosežnost. Većina neusmjeravajućih (izotropnih), slabih međumolekulskih interakcija kratkog je dometa te opada o udaljenosti kao r^{-6} , dok su jake međumolekulske interakcije većim dijelom elektrostatske prirode te opadaju o udaljenosti kao r^{-2} (Coulombova sila). Upravo ovakva ovisnost jakih međumolekulskih interakcija o udaljenosti relevantna je u procesima koji prethode kristalizaciji, tj. kod molekuskog prepoznavanja i nukleacije. Jedne od jakih, međumolekulskih interakcija koje danas imaju vodeću ulogu u kristalnom inženjerstvu su vodikove i halogenske interakcije.

Nadalje, može se postaviti pitanje kako u nekim sustavima međumolekulske interakcije kratkog dometa (r^{-6}) imaju tako veliku ulogu u kristalnom pakiranju. Odgovor je vrlo jednostavan i leži u njihovoj brojnosti. Naime, velik broj slabih međumolekulskih interakcija (međumolekulske interakcije kratkog dometa, r^{-6}) ima znatan utjecaj na kristalno pakiranje te kao takve često postaju važnije od manjeg broja jakih interakcija, a sama pojava je poznata kao Gulliverov efekt.¹

Kako bi se mogli pripremiti novi kristalni materijali željenih svojstava, potrebno je duboko razumijevanje međumolekulskih interakcija jer su i slabe i jake međumolekulske interakcije od vrlo velike važnosti u samom dizajniranju molekulkih kristalnih struktura te općenito možemo reći da je kristalna struktura kompromis između izotropnih i anizotropnih međumolekulskih interakcija.¹

2.1.2. Vodikova veza

Vodikova veza uglavnom je elektrostatske interakcije u kojoj je vodikov atom, vezan na elektronegativniji atom, privučen drugim elektronegativim atomom susjedne molekule, iona ili funkcionalne skupine iste molekule. Iako mnogo slabija od kovalentne veze, vodikova veza pripada skupini jačih međumolekulskih interakcija. Tipična vodikova veza može se opisati kao interakcija između donora X–H i akceptora Y–Z te se u tom slučaju vodikova veza može predložiti kao X–H...Y–Z. Vodikov atom na taj način premošćuje dva atoma te se iz tog razloga vodikova veza često povijesno nazivala i vodikovim mostom. Zbog svoje učestalosti (biološki sustavi, materijali) i važne uloge u ostvarivanju kristalne strukture, vodikova veza je najvažnija i do sada najviše istražena međumolekulska interakcija. Prema duljini i jakosti, vodikove veze možemo podijeliti na slabe, jake i vrlo jake vodikove veze (tablica 2).^{1,8,9}

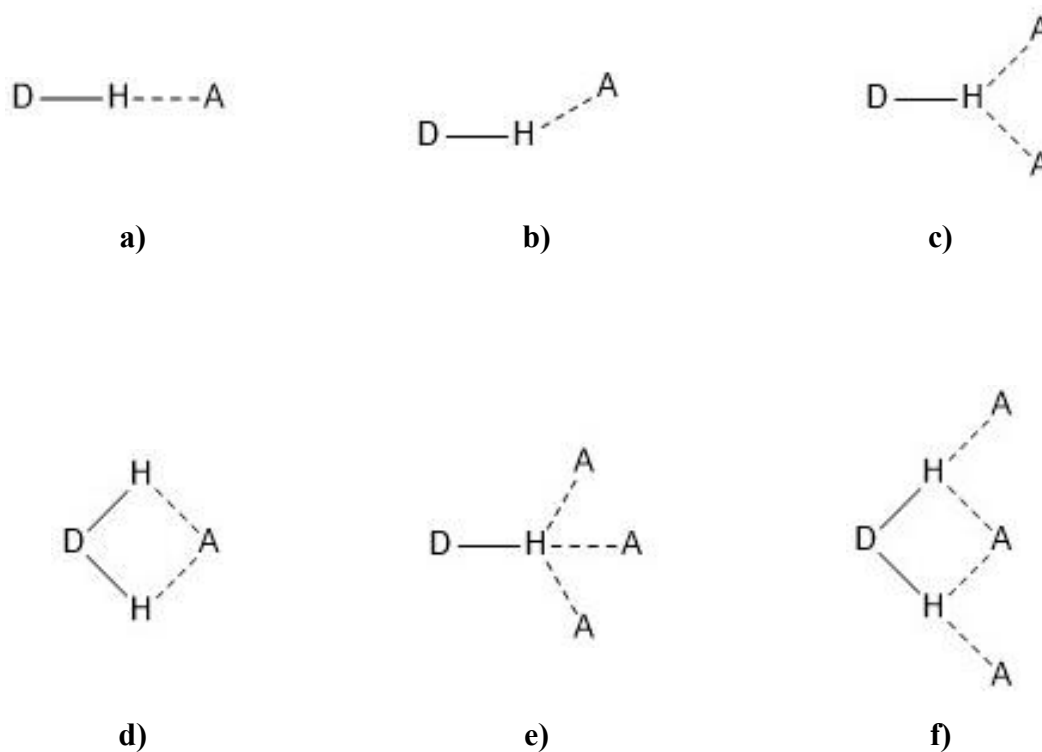
Tablica 2. Svojstva vodikovih veza ^{1,9}

v o d i k o v a v e z a			
karakter interakcije	Slaba	jaka	vrlo jaka
	elektrostatska	većim dijelom elektrostatske prirode	djelomično kovalentnog karaktera
primjeri	C–H...O	O–H...O–H O–H...N–H N–H...O=C N–H...O–H N–H...N–H	N–H ⁺ ...O [–] FH ₂ ⁺ ...F [–]
<i>E</i> /kJmol ^{–1}	< 12	16 – 60	60 – 120
<i>d</i> (H...Y)/Å	2,2 – 3,2	1,5 – 2,2	1,2 – 1,5
<i>d</i> (X...Y)/Å	3,2 – 4,0	2,5 – 3,2	2,2 – 2,5
∠(X–H...Y)/°	90 – 150	130 – 180	175 – 180

Vrlo jake vodikove veze po jakosti su slične kovalentnim vezama te je vodikov atom gotovo u središtu između atoma donora i akceptora. Nadalje, vrlo jake vodikove veze nastaju između jakih kiselina i dobrih akceptora vodikove veze. Srednje jake vodikove veze ostvaruju se između neutralnih skupina donora i akceptora, a karakteristične su kao interakcije koje se ostvaruju kod spojeva s karboksilnom i amidnom funkcionalnom skupinom. Za razliku od vrlo

jakih vodikovih veza, jake vodikove veze odstupaju od linearnosti te su blago savinute geometrije.^{1,9}

Slabe vodikove veze imaju veliku ulogu u samoj stabilizaciji strukture te su od velikog značaja u kristalnom pakiranju zbog svoje brojnosti. One su vrlo savinute geometrije, a uključuju netradicionalne donore i akceptore (π sustave aromatskih prstena, C–H skupine). Prosječan kut (svih) vodikovih veza iznosi 165° , a uzrok takvog odstupanja od linearnosti je ne samo u jakosti već i u račvanju vodikovih veza. Do račvanja uglavnom dolazi zbog različitog broja donora i akceptora te težnje svih donora i akceptora za međusobnim povezivanjem. Stoga, vodikove veze osim prema jakosti možemo podijeliti i prema njihovoj geometriji (slika 2).^{1,4,9}



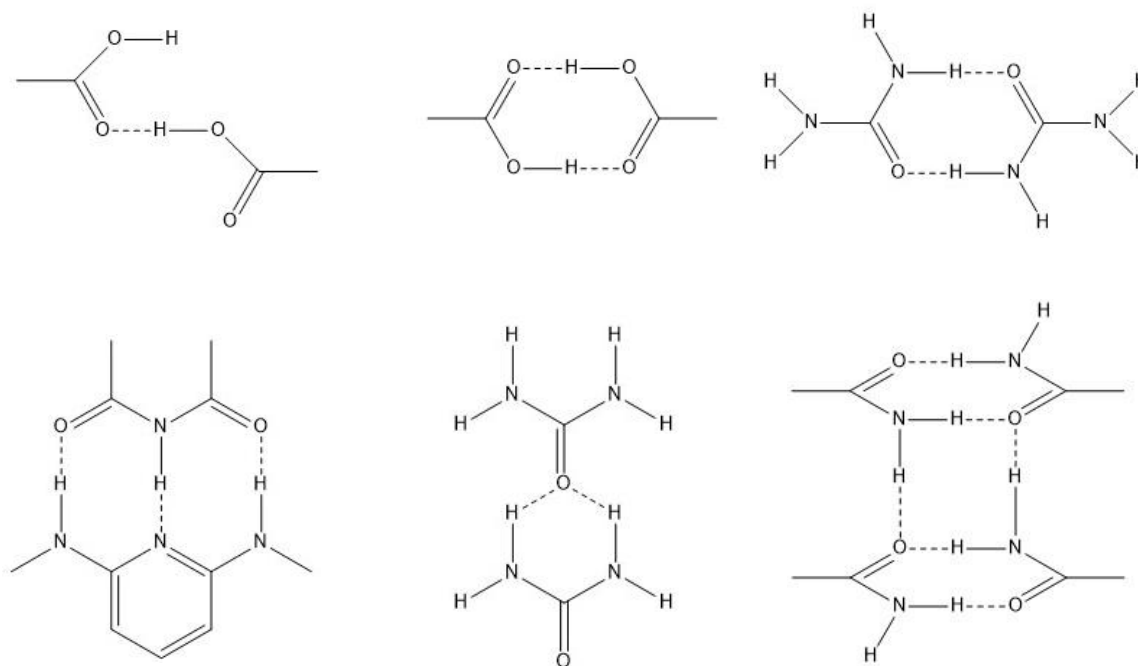
Slika 2. Geometrije vodikovih veza; linearna (a), pod kutom (b), bifurkacija donora (c), bifurkacija akceptora (d), trifurkirana (e), bifurkirana s tri akceptorska centra (f)⁴

Vodikove veze mogu biti jednostavne (ukoliko uključuju jednog donora i jednog akceptora), ali mogu biti i složene te se tada radi o bifurkiranim (tro centričnim) ili trifurkiranim (četvero centričnim) vodikovim vezama. Do račvanja vodikovih veza dolazi zbog različitog broja donorskih i akceptorskih atoma, a takve bifurkirane i trifurkirane složene vodikove veze mogu se naći u većini organskih struktura gdje je suvišak atoma akceptora čest slučaj.^{1,9}

2.1.3. Motivi vodikovih veza u kristalnom pakiranju

Iako su u fokusu kristalnog inženjerstva i molekuskog prepoznavanja različiti procesi, za oba znanstvena područja vodikove veze jedan su od najvažnijih alata te imaju važnu ulogu u kreiranju supramolekulskih agregata i u čvrstom stanju i u otopini. Način na koji se molekule međusobno prepoznaju i povezuju ključ je razumijevanja bioloških procesa kao i ostalih područja znanosti o materijalima.

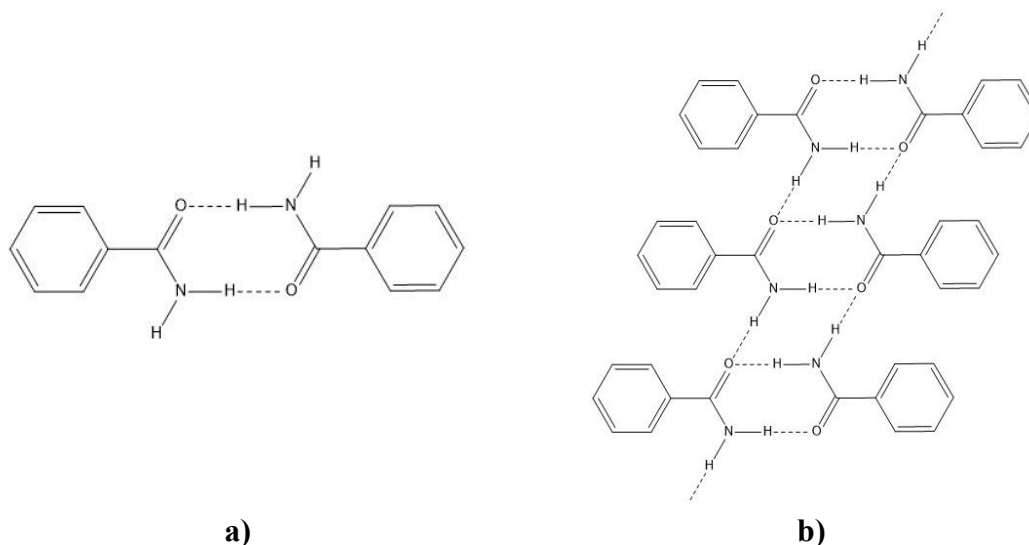
Kako bi se opisalo povezivanje molekulskih vrsta u kristalnom se inženjerstvu često koristi pojam supramolekulski sinton ili supramolekulski motiv. Iako povijesno vezan samo za organsku kemiju (Corey, 1967.), Guatam Desiraju (1995.) je pojam „sinton“ prenio na supramolekulske sustave te ga je definirao kao strukturnu jedinicu supramolekule u kojoj između atoma donora/akceptora funkcionalnih skupina međumolekulske interakcije imaju određenu geometriju pritom čineći uzorak koji se periodički ponavlja u kristalnoj strukturi.¹⁰ Učestali sintoni u kristalnim strukturama sastoje se od nekoliko (u većini slučajeva dvije) funkcionalnih skupina koje se međusobno povezuju jakim i usmjerujućim vodikovim vezama (slika 3)¹.



Slika 3. Supramolekulski sintoni često prisutni u kristalnim strukturama

2.1.4. Supramolekulski sinton amida

Strukturna kemija amida je zbog učestalosti amidne skupine u biološkim sustavima, ali i prirode ostvarivanja vodikovih veza vrlo dobro izučavana u supramolekulskoj kemiji. Amidi su spojevi koji sadrže $-\text{CONH}_2$ funkcionalnu skupinu i čiji su atomi vrlo dobri donori i akceptori vodikove veze. Kao takva, amidna skupina u organskim sustavima vrlo često tvori dva supramolekulska sintona, motiv prstena $R_2^2(8)$ i motiv ljestvi $R_4^2(8)^{11,12}$ kao što je prikazano na slici 4.^{13, 14, 15}



Slika 4. a) homomerni dimerni amidni motiv, $R_2^2(8)$

b) motiv ljestvi $[C(4)R_2^2(8)]$

Motiv prstena (slika 4a) tvore dvije $\text{N-H}\cdots\text{O}$ vodikove interakcije ostvarene između vodikovog atoma jedne i karbonilnog kisikovog atoma druge amidne skupine, koje pri tome mogu biti dio iste ili dvaju susjednih molekula. Motiv ljestvi (slika 4b) nastaje kao rezultat dodatnog povezivanja dvaju prstenastih amidnih motiva dodatnom $\text{N-H}\cdots\text{O}$ vodikovom vezom koja uključuje vodikov atom $-\text{NH}_2$ skupine i nepodjeljeni elektronski par karbonilnog kisikovog atoma koji ne sudjeluju u ostvarivanju dimernih motiva. Navedeni motivi više su proučavani u organskim nego u metalo-organskim sustavima, a na pitanje može li se supramolekulski motiv iz organskog sustava prenijeti u metalo-organski sustav, odnosno mogu li se i metalo-organski sustavi povezivati uz ostvarivanje istih supramolekulskih sintona kao što je to kod malih organskih molekula (i ako mogu, s kojom učestalošću) odgovor će dati pretraga kristalografske baze podataka, *Cambridge Structural database*, CSD,^{13,14,15} i istraživanja provedena u okviru ovog rada.

2.2. Kristalografska baza podataka, CSD

CSD baza (*Cambridge Structural Database*)¹⁶ je repozitorij, odnosno baza kristalografskih podataka organskih i metalo-organskih spojeva, a osnovana je 1965. godine. Sama baza uključuje bibliografske podatke, nazive spojeva, referentne kodove struktura tzv. „*refcode*“, parametre jediničnih ćelija, eksperimentalne podatke (podatke difrakcijskih eksperimenata), koordinate atoma te sve strukturne podatke koje je moguće izvesti iz položajnih parametara. CSD baza osim što daje cjelovitu sliku molekulske i kristalne strukture, ona je vrlo dragocjen alat u statističkoj analizi međumolekulskih interakcija i ostvarenih supramolekulskih motiva što ju čini nepresušnim izvorom novih znanstvenih činjenica.

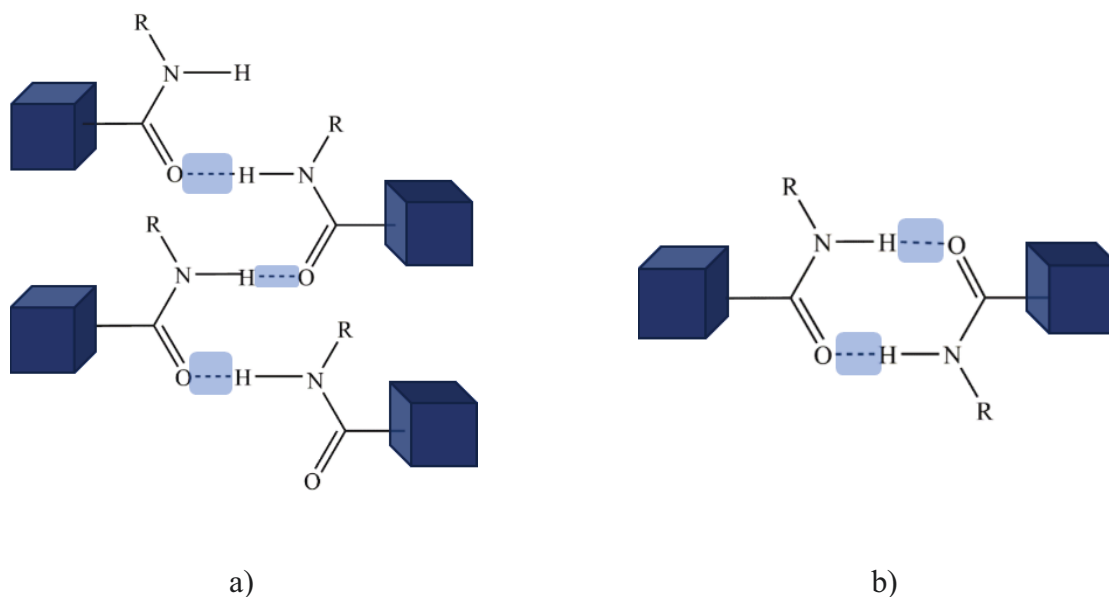
Prema zadnjoj statistici (tablica 3), u siječnju 2017. godine CSD baza sadržavala je 869 295 kristalnih struktura od čega je zabilježeno 374 246 struktura organskih molekula. Za potrebe ovog diplomskog rada, baza *Cambridge Structural Database* 5.38 pretraživana je programom *ConQuest* 1.21.¹⁷

Tablica 3. Statistika CSD baze, 5. siječanj, 2017.

	broj struktura	%CSD
ukupan broj struktura	869 295	100
broj različitih spojeva	795 368	-
broj literaturnih izvora	1 705	-
organske strukture	374 246	43,1
prisutnost prijelaznog metala	425 881	49,0
prisutnost Li–Fr ili Be–Ra	42 398	4,9
prisutnost alkalijskih i zemnoalkalijskih metala	90 308	10,4
broj struktura s određenim 3D koordinata	820 543	94,4
polimorfne strukture	26 223	3,0

2.2.1. Pretraga baze strukturnih podataka, Cambridge Structural Database (CSD)

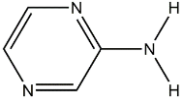
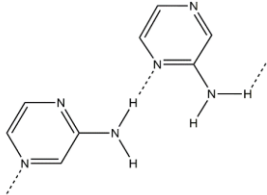
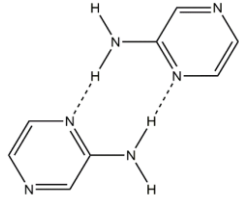
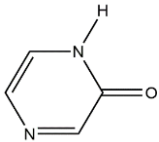
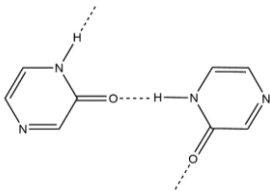
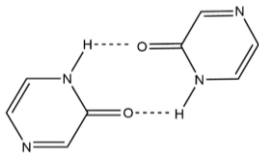
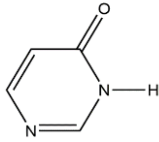
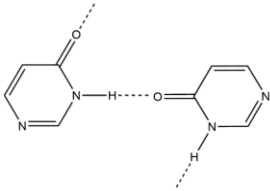
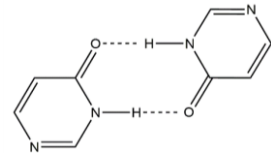
Spojevi pirazin-2-on (2-pyz) i pirimidin-4-on (4-pym) pripadaju skupini cikličkih amida, odnosno laktama te je za očekivati da će se u krutom stanju njihove molekule međusobno povezivati vodikovim vezama koje uključuju amidne funkcionalne skupine pritom tvoreći supramolekulske motive općenito opažene u kristalnim strukturama amida, motiv lanca ili motiv prstena (slika 4).



Slika 5. Pretraga baze prema strukturnom motivu lanca **(a)** i motivu prstena **(b)**

Analogan način povezivanja očekuje se i za spoj 2-aminopirazin (2-NH₂pz) koji u svojoj molekularnoj strukturi ima sličan raspored donornih i akceptornih atoma vodikove veze kao i dva prethodno opisana ciklička laktama, 2-pyz i 4-pym. Očekivani supramolekulski motivi, motivi prstena i motivi lanca prikazani su u tablici 4, a pretraga baze provedena je samo za laktamske sustave.

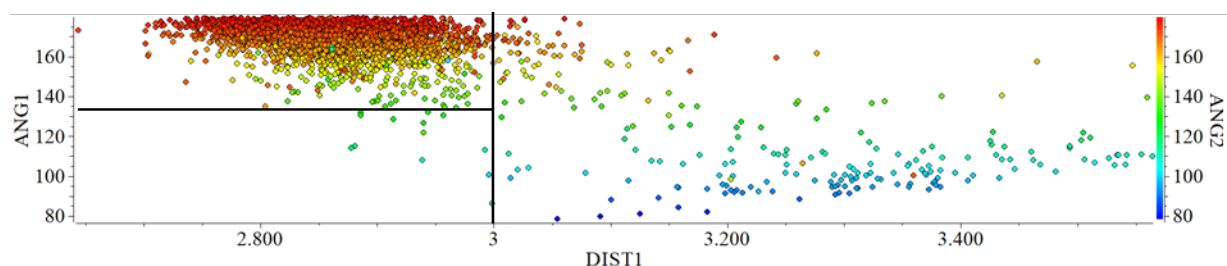
Tablica 4. Mogući supramolekulski motivi ostvareni kod povezivanja laktama 2-pyz i 4-pym vodikovim vezama. Analogan način povezivanja očekuje se i kod 2-NH₂pz

LAKTAMI	MOTIV LANCA	MOTIV PRSTENA
a) 2-aminopirazin (2-NH₂pz)		
		
b) pirazin-2-on (2-pyz)		
		
c) pirimidin-4-on (4-pym)		
		

Pretraga baze strukturnih podataka provedena je u svrhu pronalaska organskih i metalo-organskih spojeva koji sadrže laktamsku funkcionalnu skupinu te koji su stoga u mogućnosti ostvariti tipične amidne motive. Pretraga baze provedena je pod uvjetom da su atomi ugljika i dušika dio cikličke strukture te da atomi kisika (kod 2-pyz i 4-pym) nisu dalje kovalentno vezani. Pretraga baze također je provedena i u svrhu izučavanja geometrijskih parametara vodikovih veza (tj. duljine i kuta vodikove veze te njihove međusobne ovisnosti) u strukturama cikličkih laktama. U prvom koraku pretrage uzete su u obzir sve vodikove veze čija je udaljenost manja ili jednaka sumi van der Waalsovih radijusa nevodikovih atoma te pritom nisu postavljena nikakva ograničenja na kut interakcije. Podatci dobiveni ovom pretragom analizirani su programom Mercury 3.9¹⁸ te je uočen trend prostorne usmjerenosti svih vodikovih veza čije su udaljenosti vodikovog atoma i atoma akceptora kraće od sume van der Waalsovih radijusa (slika 5). Isto tako, analizom struktura čiji su kutevi D–H...A manji od 130° pokazalo se da se ne radi o željenom motivu.

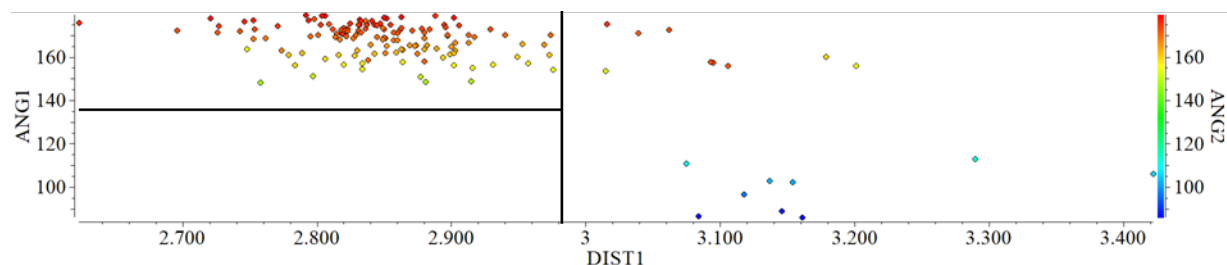
S obzirom na ovaj rezultat, daljnja istraživanja i analize podataka ograničene su samo na one strukture čije su nevezne interakcije $H\cdots A$ manje od sume van der Waalsovih radijusa atoma u interakciji te kut $D-H\cdots A$ veći od 130° . Ovakvi kriteriji također su u skladu i s literaturnim vrijednostima koje opisuju jake vodikove veze kao one interakcije čija je duljina ($3\text{\AA}$) kraća od sume van der Waalsovih radijusa nevodikovih atoma te kod kojih je kut $D-H\cdots A$ veći od 130° .

Nadalje, važno je napomenuti da strukturni motivi prstena ne moraju nužno biti simetrični, odnosno vodikove veze koje grade takav motiv ne moraju se ostvarivati pod istim kutem ili biti jednake duljine. Međutim, u daljnjoj analizi podataka nije provedena distinkcija simetričnih i asimetričnih prstenastih motiva.



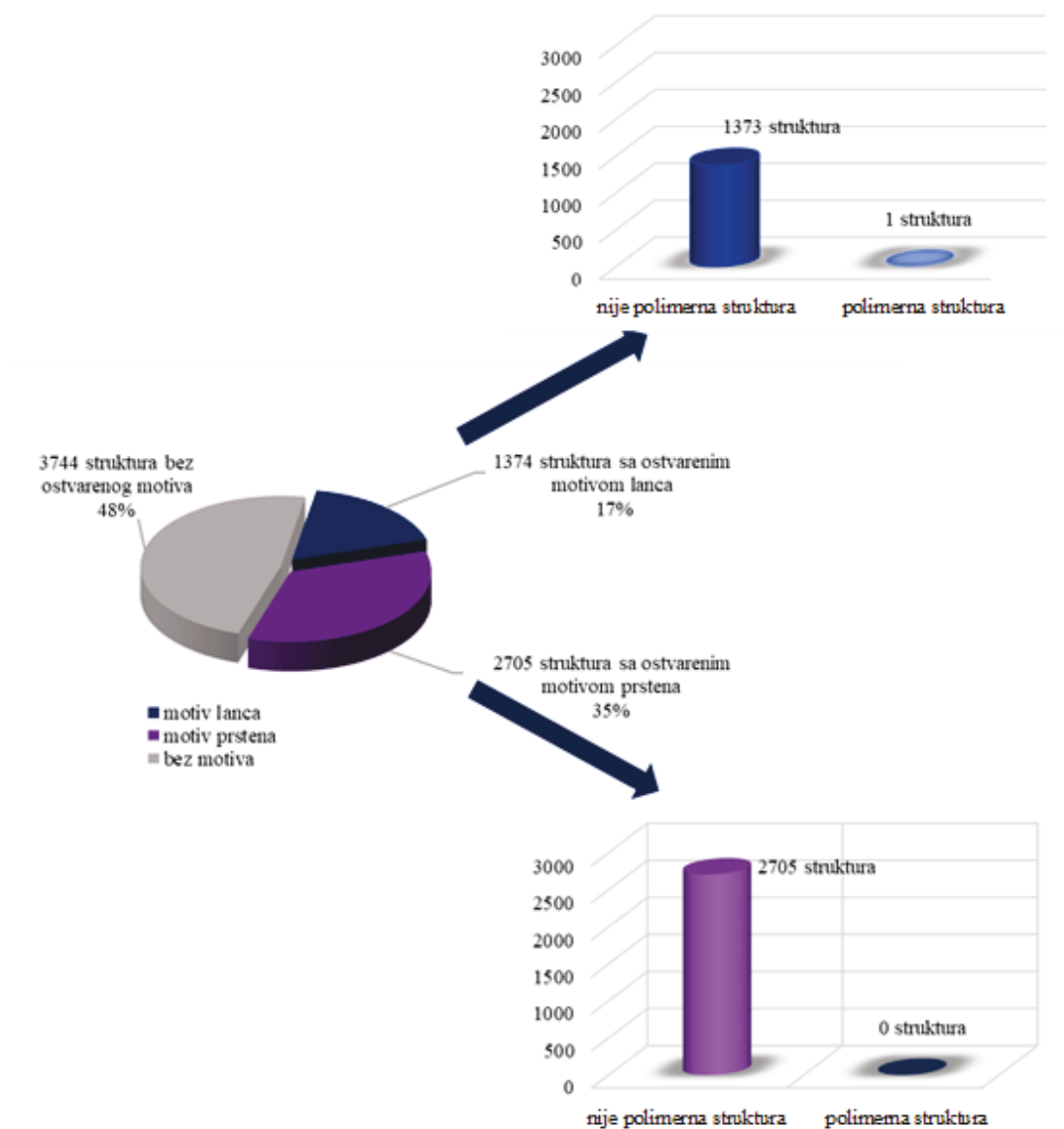
Slika 6. Grafički prikaz ovisnosti kuta $D-H\cdots A$ o udaljenosti $H\cdots A$ za vodikove veze koje ostvaruju motiv prstena. Vertikalna crta predstavlja sumu vdW radijusa, dok horizontalna crta predstavlja ograničenje kuta interakcije na 130°

Ovakva pretraga baze prema strukturnom motivu prstena načinjena je i za metalo-organske sustave. Iako je pronađeno gotovo dvadeset puta manje struktura, grafički prikaz raspodjele dobivenih podataka za metalo-organske sustave također ukazuje na prostornu ovisnost vodikove interakcije čija je udaljenost dušika i kisika koji sudjeluju u ostvarivanju vodikove interakcije manja od sume njihovih van der Waalsovih radijusa (slika 6).



Slika 7. Grafički prikaz ovisnosti kuta $D-H\cdots A$ o udaljenosti ($H\cdots A$) za vodikove veze koje ostvaruju motiv prstena u metalo-organskim sustavima. Vertikalna crta predstavlja sumu vdW radijusa, dok horizontalna crta predstavlja ograničenje kuta interakcije na 130°

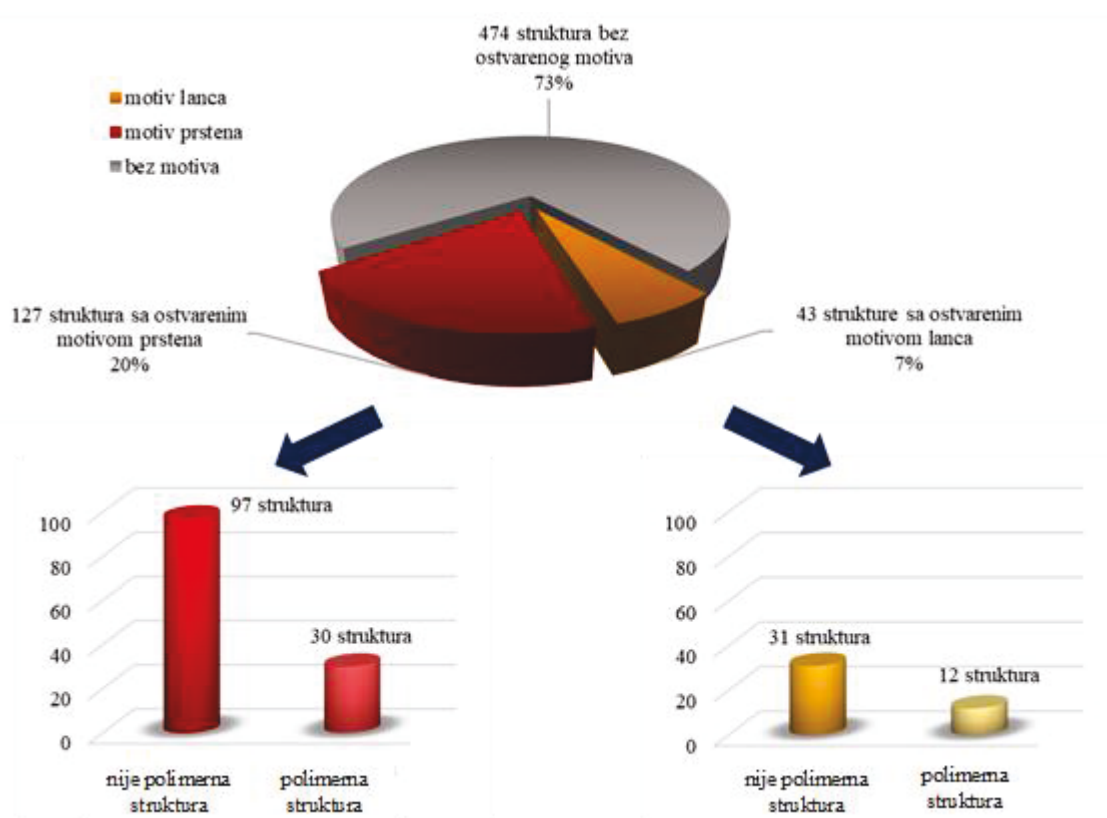
Ovakvom pretragom baze (uz ograničenje kuta i sume van der Waalsovih radijusa), od 7823 čisto organskih struktura koje sadrže amidnu funkcionalnu skupinu, u 1374 (17 %) spojeva ostvaruje se motiv lanca, a u njih 2705 (35 %) se ostvaruje motiv prstena. Nadalje, motiv lanca ostvaren je samo u jednoj polimernoj strukturi, dok se motiv prstena ne ostvaruje niti u jednoj polimernoj strukturi. Na slici 7 prikazana je analiza rezultata pretrage CSD baze za organske sustave koje sadrže laktamsku funkcionalnu skupinu.



Slika 8. Prikaz raspodjele organskih struktura na supramolekulske motive koje ostvaruju. Motiv lanca ostvaren je u 17 %, a motiv prstena u 35 % organskih sustava

2.2.2. Pretraga baze strukturnih podataka prema supramolekulskom motivu povezivanja u metalo-organskim sustavima

Budući da je cilj ovog rada istražiti mogu li se metalo-organski spojevi povezivati u kristalnom stanju uz ostvarivanje istih supramolekulskih motiva kao i male organske molekule, pretraživanjem baze željelo se istražiti u kolikom postotku se ciljani supramolekulski motivi (motiv lanca, $C(4)$, i motiv prstena, $R_2^2(8)$) ostvaruju u metalo-organskim sustavima. Pretraga je načinjena pod sličnim ograničenjima kao i za organske sustave. Ustanovljeno je da je od 644 metalo-organskih struktura koje sadrže laktamsku funkcionalnu skupinu njih 189 polimernih. Od polaznih 644 metalo-organskih spojeva u samo 7 % slučajeva ostvaruje se motiv lanca (od toga je 12 polimernih spojeva), dok se u 20 % struktura ostvaruje motiv prstena (od toga je 30 polimernih spojeva). Na niže navedenoj slici (slika 8) prikazana je raspodjela pretraženih podataka za metalo-organske spojeve koji sadrže laktamsku funkcionalnu skupinu.

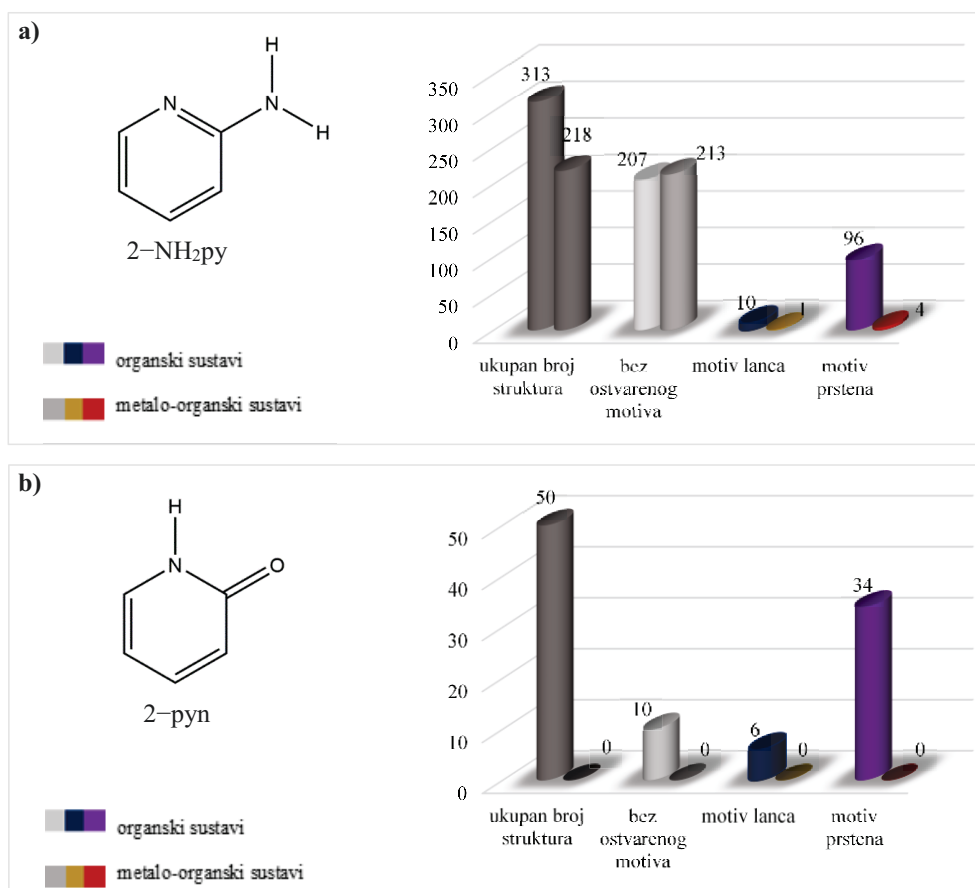


Slika 9. Prikaz raspodjele metalo-organskih struktura na supramolekulske motive koje ostvaruju. Motiv lanca ostvaren je u 7 %, a motiv prstena u 20 % metalo-organskih sustava

2.2.3. Pretraga baze strukturnih podataka prema motivu povezivanja za analogne spojeve odabranih cikličkih amida, 2-NH₂py i 2-pyn

Kako bi rezultati pretrage CSD baze bili što vjerodostojniji provedena je daljnja pretraga baze za analognu klasu spojeva koja ne sadrži heterociklički dušikov atom u *m*-položaju u odnosu na amino ili karbonilnu skupinu (slika 9). Naime, ligandi odabrani za ovo istraživanje (2-NH₂pz, 2-pyz, 4-pym) koordiniraju se preko tog dodatnog dušikovog atoma (smještenog u *m*-položaju u odnosu na amino ili karbonilnu skupinu) na središnji atom metala te taj dušikov atom stoga ne sudjeluje u ostvarivanju međumolekulskih interakcija. Imajući to u vidu, za samu pretragu baze odabrani su analogni spojevi, piridin-2-amin (2-NH₂py) i piridin-2-on (2-pyn).

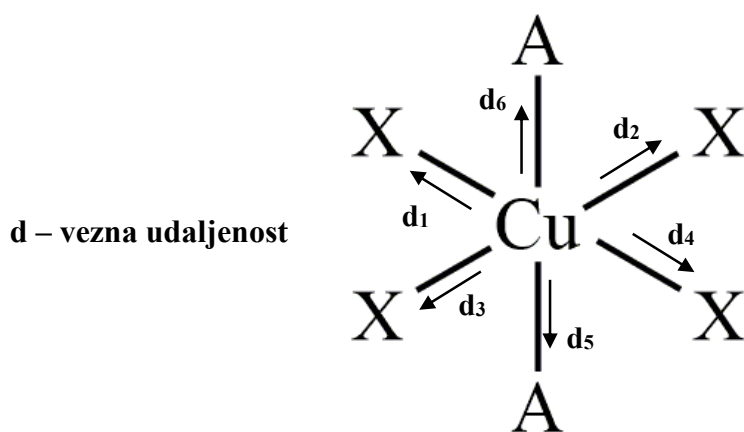
Svrha ovakve pretrage je istražiti učestalost s kojom male organske molekule koje oponašaju ligande odabrane za ovo istraživanje ostvaruju supramolekulske motive lanca ili prstena te pri tome isključiti mogućnot ostvarivanja drugih vodikovih veza.



Slika 10. Prikaz raspodjele organskih i metalo-organskih struktura na supramolekulske motive koje ostvaruju ovisno o ligandima piridin-2-aminu (a) i piridin-2-onu (b)

2.2.4. Pretraga baze strukturnih podataka za koordinacijske spojeve bakra(II) s halogenidnim ionima kao premosnim ligandima

Budući da su za ovo istraživanje od interesa i magnetska svojstva priređenih bakrovih(II) spojeva provedena je pretraga strukturnih podataka pohranjenih u CSD bazi za polimerne koordinacijske spojeve bakra(II) s halogenidnim ionima kao premosnim ligandima. Ograničavanjem parametara pretrage uvjetovano je da bakrov atom ima oktaedarsku koordinaciju u kojoj je vezan sa četiri halogenidna iona (X) i dva heteroatoma (A). Prema literaturnim podacima u 1D polimernim strukturama bakra(II), bakrov(II) kation uglavnom ima oktaedarsku koordinaciju.¹⁹ Vezne udaljenosti Cu–X definirane su kao vezne udaljenosti 1, 2, 3 i 4, a vezne udaljenosti Cu–A kao vezne udaljenosti 5 i 6 (slika 11). Pronađeno je 135 kristalnih struktura od kojih svega 25 struktura nije polimerno.

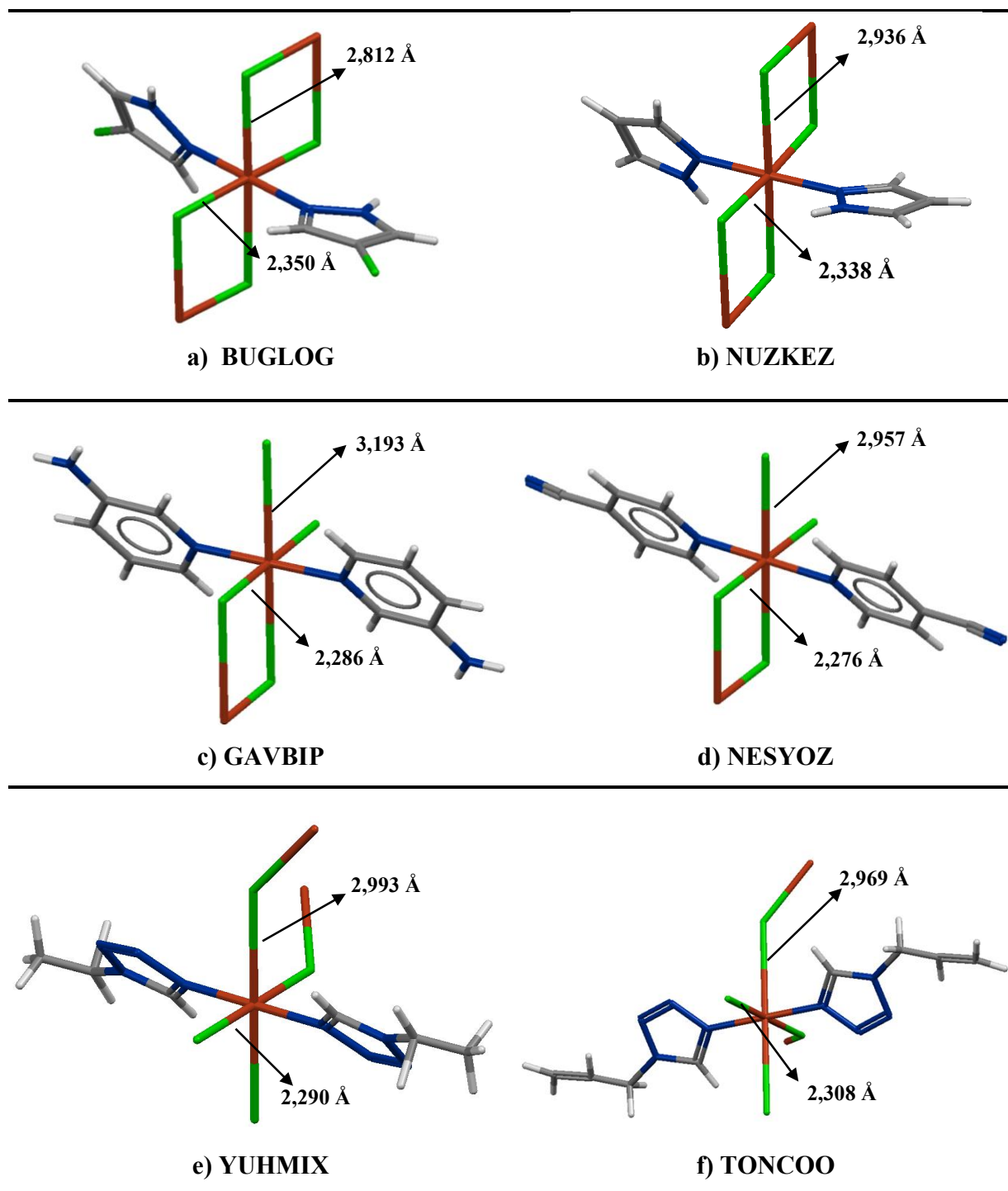


Slika 11. Model koordinacijskog spoja Cu(II) korišten za pretragu baze za oktaedarske halogenidne spojeve bakra(II)

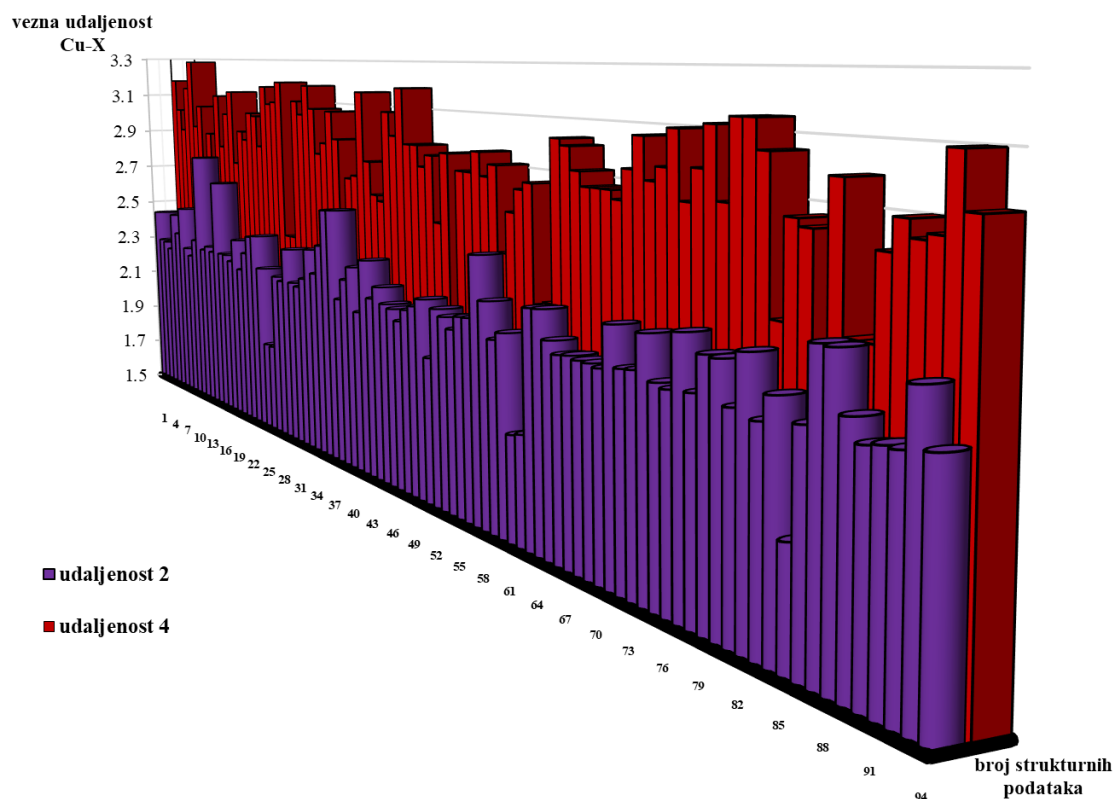
Prema literaturnim podacima kod bakrovih(II) spojeva oktaedarske koordinacije Jahn-Tellerov efekt je vrlo izražen. Stoga je za očekivati da će i bakrovi(II) spojevi s ligandima 2-aminopirazinom (2-NH₂pz), pirazin-2-onom (2-pyz) i pirimidin-4-onom (4-pym) također pokazivati Jahn-Tellerov efekt. Vodeći se time, detaljnijom analizom strukturnih podataka polimernih bakrovih(II) koordinacijskih spojeva uočeno je da se Jahn-Tellerov efekt učestalije ostvaruje preko veznih udaljenosti bakra i halogenidnih atoma (94 strukture, 85,5 %) od Jahn-Tellerovog efekta koji je ostvaren preko veznih udaljenosti bakra i heteroatoma (14,5 %). U bazi

su pronađeni brojni kloridni koordinacijski spojevi bakra(II) kod kojih je Jahn-Tellerov efekt ostvaren preko Cu–X veznih udaljenosti, a samo se neki od primjera nalaze u tablici 5.

Tablica 5. Jahn-Tellerov efekt kod koordinacijskih spojeva bakra(II) s kloridnim anionom kao prenosnim ligandom



Analizom strukturnih podataka u kojima je Jahn-Tellerov efekt ostvaren preko halogenidnih atoma uočeno je da se vrijednosti vezne udaljenosti 4 u prosjeku kreću između 2,9 i 3,3 Å dok se vrijednosti vezne udaljenosti 2 u prosjeku kreću između 2,3 i 2,6 Å. Ovaj podatak potvrđuje činjenicu da je oktaedarska koordinacija oko bakrovih(II) kationa deformirana te da ima oblik izduženog oktaedra. Važno je napomenuti da je prilikom ovakve pretrage vezna udaljenost 1 definirana kao najkraća, dok je vezna udaljenost 4 definirana kao najdulja vezna udaljenost. Raspodjela vrijednosti veznih udaljenosti 2 i 4 ukazuje na prisutnost Jahn-Tellerovog efekta u polimernim koordinacijskim spojevima bakrovih(II) halogenida (slika 12).



Slika 12. Statistička raspodjela vrijednosti veznih udaljenosti 2 i 4

2.3. Fizika materijala i magnetska svojstva tvari

Danas poznatija kao znanost o materijalima (eng. *materials science*), fizika materijala je multidisciplinarno područje koje obuhvaća znanstvena područja fizike, kemije, matematike i inženjerstva, a čiji je cilj dizajnirati i ispitati svojstva i ponašanja u primjeni novih materijala čvrstog stanja. Zbog eksponencijskog rasta i razvoja novih tehnologija, dostignuća i znanja te posebno razvitkom kvantne mehanike, molekulski magnetizam i fenomeni (npr. visokotemperaturna supravodljivost) direktno vezani uz magnetska svojstva materijala su postali jednim od vrućih znanstvenih područja fizike materijala. Molekulski magnetizam proučava utjecaj kristalnog pakiranja na magnetska svojstva samog materijala, a čiji je cilj istražiti kako i na koji način geometrija molekule, vezne udaljenosti, kutevi veza i međumolekulske interakcije utječu na magnetska svojstva kristalnog materijala i razumjeti njihovu koreliranost.

Kako bismo bili u mogućnosti dizajnirati materijale željenih svojstava potrebno je razumjeti mikroskopske interakcije koje utječu na fizikalna svojstva tih materijala. Sa gledišta molekulskog magnetizma te mikroskopske interakcije se ostvaruju između magnetnih iona u kristalnoj rešetci. Budući da mjesta na kojima se nalaze magnetski ioni u kristalnoj rešetci, kao i njihovo ligandno okruženje određuju koje su interakcije među tim ionima dominantne, potrebno je razumjeti dva bitna parametra sustava; simetriju kristalne rešetke na kojoj se nalaze atomi i vrijednost ukupne kutne količine gibanja (eng. *total angular momentum*) magnetskog iona. Dominantnost interakcija određuje vrstu magnetskog uređenja kao i dimenzionalnost magnetske rešetke (koja ne mora nužno biti jednaka kristalnoj), a do danas za mnoge materijale pitanje dominantnosti interakcija još je ostalo neriješeno.

Ovisno o ponašanju materijala, vrste magnetskih odziva mogu biti dijamagnetske, paramagnetske, antiferomagnetske, feromagnetske i ferimagnetske. Dijamagnetski odziv se javlja kod svih materijala i vrlo je slab jer je često zasjenjen većim doprinosima. Paramagnetski odziv se javlja kod materijala sa nesparenim elektronima čije nasumično orijentirane spinove moguće je usmjeriti magnetnim poljem. Feromagnetski, antiferomagnetski i ferimagnetski odzivi su karakteristika faznih prijelaza koji se javljaju ispod kritične temperature T_C .^{8, 20, 21, 22,}

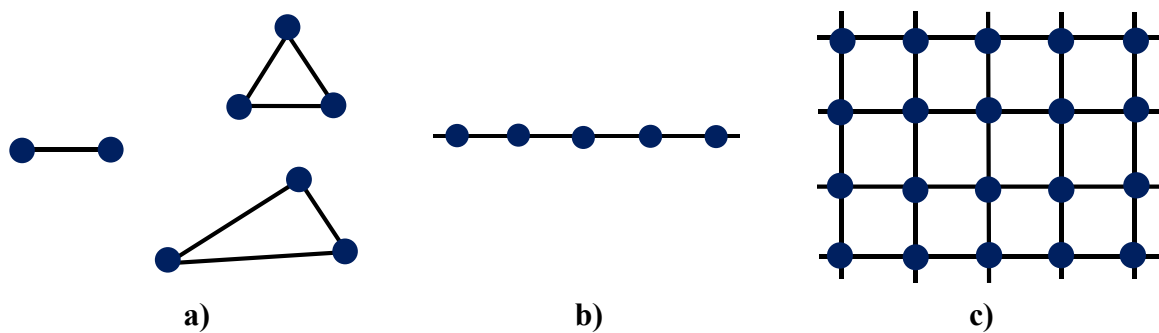
23, 24

2.3.1. Magnetska međudjelovanja i niskodimenzionalni spinski sustavi

U spojevima prijelaznih metala koji imaju nepopunjenu d ili f elektronsku ljusku javlja se magnetsko ponašanje materijala, a za magnetski uređena stanja odgovorne su izotropne ili anizotropne interakcije među magnetskim momentima. Izotropna interakcija među magnetskim momentima može se opisati Heisenbergovim hamiltonijanom

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.1)$$

gdje suma ide po svim spinovima na rešetci, J_{ij} je kvantnomehanička energija izmjene (koja je za sustave sa spinom $S = 1/2$ u dobroj aproksimaciji izotropna), a $\mathbf{S}_i$ i $\mathbf{S}_j$ su spinovi na mjestima i i j na rešetci. Zbog kratkodosežnosti sile suma uobičajeno ide samo po najbližim susjedima što je u dobroj aproksimaciji ostvareno za većinu spojeva Cu^{2+} oksida najproučavanijim materijalima u fizici materijala zbog svojih bogatih faznih prijelaza. Ukoliko se interakcija elektrona susjednih magnetskih iona odvija bez posrednika odnosno direktno, tada se takva interakcija izmjene naziva direktnom izmjenom, a ukoliko se međudjelovanje izmjene odvija neizravno preko posrednika (ligandnih iona koji okružuju magnetski ion), tada se takva interakcija naziva superizmjena (eng. *superexchange*). Nadalje, dominantne interakcije među spinovima definiraju dimenzionalnost magnetske rešetke, a ukoliko je dimenzionalnost magnetske rešetke $D < 3$ radi se o niskodimenzionalnim sustavima (slika 13).^{20, 21, 22, 23, 24, 25}

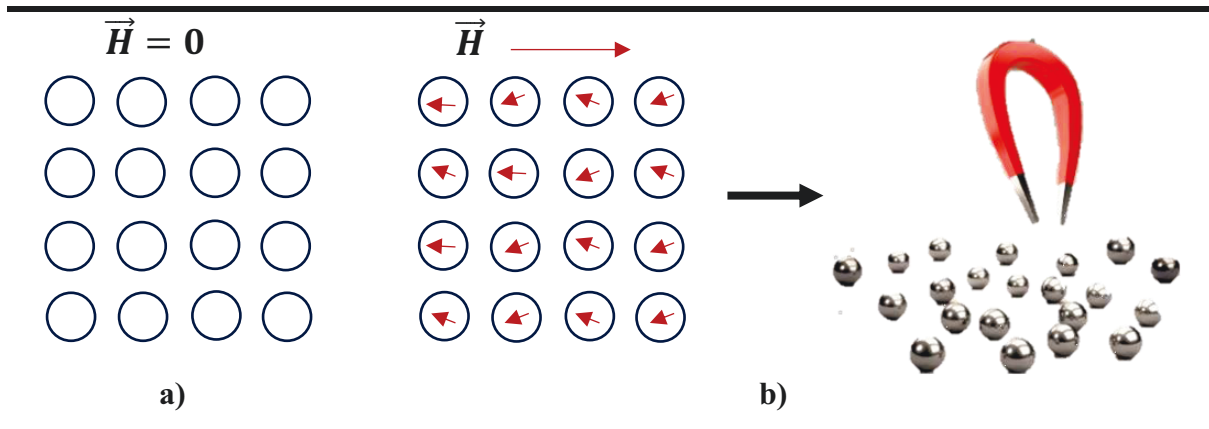


Slika 13. Shematski prikaz dimenzionalnosti magnetskih rešetki gdje kružići označavaju magnetske ione

- a) spinski dimer i trimer, 0D
- b) spinski lanac, 1D
- c) rešetka, 2D

2.3.2. Dijamagnetizam

Sva magnetska svojstva materijala su isključivo kvantno mehaničke pojave što dokazuje Bohr van Leeuwenov teorem prema kojem je magnetski moment klasičnoga sustava čak i pod utjecajem vanjskog magnetskog polja uvijek jednak nuli. Upravo takav rezultat ukazuje na činjenicu da sve tvari, atomi, pokazuju svojstvo dijamagnetizma, pa čak i one kod kojih su elektronske ljuske popunjene. Ovaj efekt se pojavljuje kao odgovor (promjena orbitalnog gibanja elektrona) na utjecaj vanjskog magnetnog polja. Klasično opisano, uključivanjem vanjskog magnetnog polja, u materijalu će se inducirati magnetni dipolni momenti elektrona usmjereni u suprotnom smjeru od djelovanja polja kako bi se poništio uzrok promjene, a ovakva pojava nije ništa drugo nego Lentzovo pravilo (slika 14).



Slika 14. a) dijamagnetsko ponašanje bez prisustva vanjskog magnetskog polja
b) dijamagnetsko ponašanje u prisustvu vanjskog magnetskog polja

Dijamagnetski doprinos je najčešće zasjenjen nekim drugim doprinosima (paramagnetizam) te ima vrlo mali utjecaj na ukupni magnetski moment. Klasični i kvantni račun daju isti izraz za dijamagnetsku susceptibilnost:

$$\chi_d = - \frac{1}{6} \frac{NZe^2 \mu_0}{m} \langle r^2 \rangle_{avg} \quad (2.2)$$

gdje je N —broj atoma po jedinici volumena, Z broj elektrona, e naboj elektrona, m masa elektrona, μ_0 permeabilnost vakuuma i $\langle r^2 \rangle_{avg}$ srednji kvadratni radijus. Iako ne ovisi direktno o temperaturi, u članu $\langle r^2 \rangle_{avg}$ postoji mala temperaturna ovisnost koja se najčešće zanemaruje, a sam iznos dijamagnetske susceptibilnosti je uvijek negativan.^{8,21,22,23}

2.3.3. Paramagnetizam

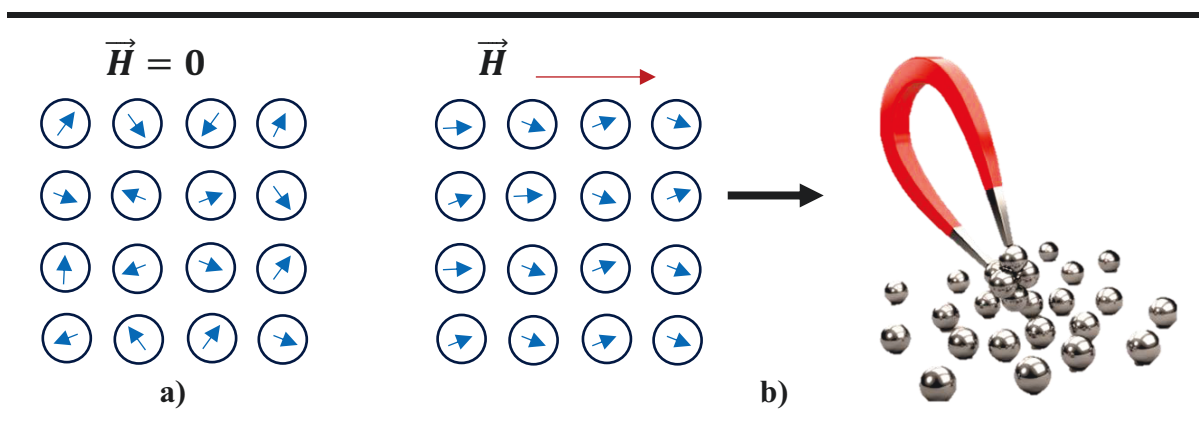
Za razliku od dijamagnetizma koji je u suštini svojstvo svakog materijala, pojava paramagnetizma se javlja samo u materijalima koji imaju nesparene elektrone odnosno gdje je ukupna kutna količina gibanja različita od nule ($\vec{J} \neq 0$). Ukupna kutna količina gibanja vezanih elektrona u atomu jednaka je zbroju orbitalne $\vec{L}$ (eng. *orbital angular momentum*) i spinske $\vec{S}$ (eng. *spin angular momentum*) kutne količine gibanja:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (2.3)$$

Kada je ukupna kutna količina gibanja, atom posljedično ima permanentni dipolni magnetski moment koji je dan izrazom:

$$\vec{\mu}_m = -g \cdot \mu_B \cdot \vec{J} \quad (2.4)$$

gdje je g Landeov faktor, $\mu_B = \frac{\hbar e}{2m} = 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T}$ Bohrov magneton, a $\vec{J}$ ukupna kutna količina gibanja. Budući da su u odsustvu vanjskog magnetskog polja magnetski momenti pojedinih atoma usmjereni nasumično (zahvaljujući utjecaju topline i slabim međudjelovanjima magnetskih momenata), magnetizacija sustava takvih atoma približno je jednaka nuli. Nadalje, primjenom vanjskog magnetnog polja energija magnetskog momenta se mijenja ($E = -\vec{\mu}_m \cdot \vec{B}$) te se magnetski momenti orijentiraju u smjeru djelovanja vanjskog magnetskog polja, gdje pritom ukupni magnetski moment ovisi o njegovoj jačini (slika 15).^{8, 21, 22, 23}

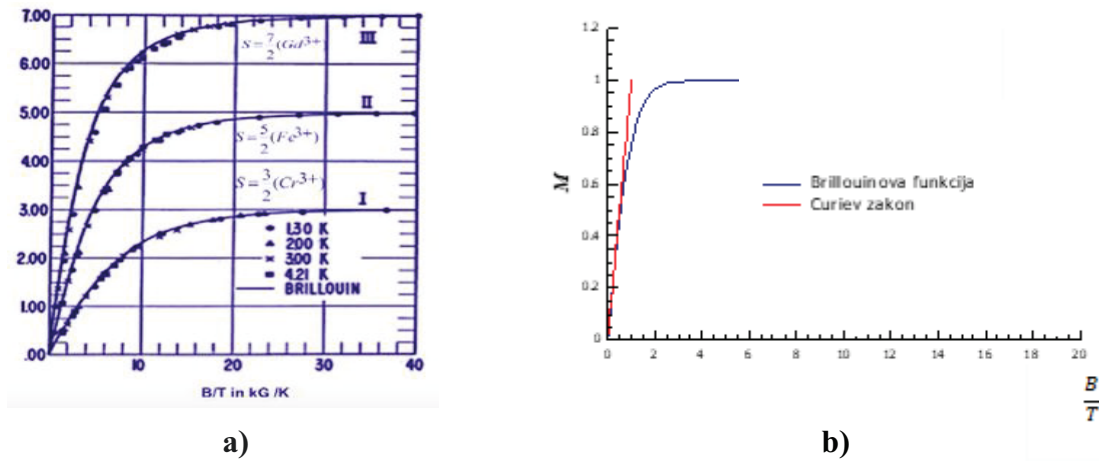


Slika 15. a) paramagnetsko ponašanje bez prisustva vanjskog magnetskog polja
b) paramagnetsko ponašanje u prisustvu vanjskog magnetskog polja

Za razliku od dijamagnetskih materijala, paramagnetski materijali pokazuju temperaturnu ovisnost koja se opisuje Langevinovom teorijom. Ukoliko se uzme u obzir da su magnetski dipolni momenti kvantizirani i mogu zauzimati samo određene orijentacije te da se usmjeravanju magnetskih momenata suprotstavlja termička energija, dobiva se da ukupna magnetizacija ($\vec{M} = N \cdot \langle \vec{\mu}_m \rangle$) sustava ovisi o omjeru jakosti magnetskog polja B i temperature T , a dana je sljedećim izrazom:

$$M = N \cdot g \mu_B J B_J \left(\frac{g \mu_B B}{k_B T} \right) \quad (2.5)$$

gdje je $B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J}x\right)$ Brillouinova funkcija (slika 16a).



Slika 16. a) Magnetizacija M u ovisnosti o $\frac{B}{T}$ za sustave $J = \frac{3}{2}$, $J = \frac{5}{2}$ i $J = \frac{7}{2}$
b) Brillouinova funkcija i Curiev zakon

Za velike vrijednosti magnetskog momenta atoma, odnosno u graničnom slučaju kada $J \rightarrow \infty$ Brillouinova funkcija prelazi u Langevinovu funkciju (slika 16b), odnosno razvijanjem Brillouinove funkcije u red i zadržavajući se na prvom članu dobiva se izraz za paramagnetsku susceptibilnost:

$$\chi = \frac{\mu_0 N g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3 k_B T} = \frac{\mu_0 N \mu_{eff}^2}{3 k_B T} = \frac{C}{T} \quad (2.6)$$

gdje je k_B Boltzmannova konstanta, T temperatura, μ_{eff} efektivni magnetni moment ($\mu_{eff} = g \sqrt{J(J+1)} \mu_B$), a $C = \frac{\mu_0 N g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3 k_B}$ je Curieva konstanta. Izraz 2.6 se još naziva i Curievim zakonom koji je izveden sa gledišta klasične mehanike u kojem magnetski dipolni momenti mogu poprimiti sve moguće orijentacije u prostoru.^{21, 22, 23}

2.3.4. Feromagnetizam i antiferomagnetizam

Feromagnetski i antiferomagnetski su materijali koji imaju spontano magnetsko uređenje u odsustvu magnetskog polja za razliku od dijamagnetskih i paramagnetskih materijala kod kojih do usmjeravanja magnetskih momenata dolazi samo uslijed djelovanja vanjskog magnetskog polja. Prvo fizikalno objašnjenje za pojavu spontanog magnetskog uređenja dao je Weiss 1907. godine postuliravši postojanje magnetskog molekulskog polja $\vec{B}_{MF}$. Osnovna pretpostavka modela je da svi okolni momenti stvaraju tzv. molekulsko polje čija je jakost proporcionalna magnetizaciji i zbog kojeg se magnetski momenti usmjeravaju u istom smjeru bez primjene vanjskog polja. Molekulsko Weissovo polje na i -tom položaju se definira kao:

$$\mathcal{H}_{MF} = -\frac{2}{g\mu_B} \sum_j J_{i,j} S_j = \lambda M \quad (2.7)$$

gdje je $J_{i,j}$ interakcija izmjene između spinova na mjestima i i j u magnetskoj rešetci, λ konstanta molekulskog magnetskog polja. Feromagnetsko uređenje nastaje u slučaju $J_{i,j} > 0$ dok antiferomagnetsko uređenje nastaje za slučaj $J_{i,j} < 0$ gdje je usprkos uređenju magnetskih momenata magnetizacija jednaka nuli (jer su spinovi antiparaleno orijentirani). Kako termička energija narušava uređenost magnetskih momenata tako se povećanjem temperature magnetizacija materijala smanjuje (kod feromagneta) ili povećava (kod antiferomagneta) sve do kritične temperature gdje spontano magnetsko uređenje nestaje. Tako pri Neelovoj temperaturi termička energija nadvladava i narušava antiferomagnetsko uređenje, dok se feromagnetsko uređenje narušava na Curievoj temperaturi, a na većim temperaturama od Curieve materijal se ponaša kao paramagnetik. Uzimajući u obzir Weissovo molekulsko polje može se izvesti i izraz za ovisnost magnetske susceptibilnosti o temperaturi koji se još naziva i Curie-Weissov zakon:

$$\chi = \frac{C}{T - \theta} \quad (2.8)$$

gdje je θ temperatura koja je povezana sa iznosom efektivne interakcije među magnetskim momentima izražen u Kelvinima. Za paramagnete kod kojih nema interakcije među momentima vrijedi Curiev zakon, $\theta = 0$, dok u slučaju feromagnetskog uređenja vrijedi $\theta > 0$ i antiferomagnetskog $\theta < 0$. Iako je Weissov model u početku pretpostavljao klasična magnetska polja, on je i danas primjenjiv ukoliko se kao podrijetlo molekulskog polja uzme kvantno mehaničko magnetsko međudjelovanje izmjene.^{21, 22, 23}

3. EKSPERIMENTALNI DIO

3.1. Materijali i Metode

Za pripravu koordinacijskih spojeva korištene su bez pročišćavanja sljedeće kemikalije:

- bakrov(II) klorid dihidrat, $\text{CuCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (Scharlau)
- bakrov(II) bromid, CuBr_2 (Scharlau)
- pirimidin-4-on, 4-pym (Scharlau)
- 2-aminopirazin, 2- NH_2pz (Scharlau)
- pirazin-2-on, 2-pyz (Scharlau)
- etanol, 96 %

CHN analiza priređenih koordinacijskih spojeva provedena je na Perkin-Elmer 2400 serije II CHN analizatoru, u Laboratoriju za analitičku kemiju, Instituta Ruđer Bošković.

Termička istraživanja obavljena su razlikovnim pretražnim kalorimetrom Mettler-Toledo DSC823 u dinamičkoj struji dušika u rasponu od 25 do 500 °C, brzinom zagrijavanja 10 °C min⁻¹ uz protok plina od 180 cm³ min⁻¹. Uzorci su prije pokusa smrvljeni u sitan prah na staklenoj pločici i uneseni u aluminijski nosač s poklopcem na kojem se probuše rupe. Također, termička istraživanja obavljena su termogravimetrijskim analizatorom MettlerToledo TGA/SDTA 850^e u dinamičkoj struji dušika u rasponu od 25 do 600 °C, brzinom zagrijavanja 10 °C min⁻¹ uz protok plina od 20 cm³ min⁻¹. Uzorci su uneseni u standardni aluminijski nosač s poklopcem. Za prikupljanje i obradu korišten je program STAR^e Software 9.01.13²⁶.

Difraktogrami svih praškastih uzoraka snimljeni su na rentgenskom difraktometru PHILIPS PW 1840. Za upravljanje difraktometrom i samo prikupljanje podataka korišten je programski paket Philips X'Pert Data Collector 1.3^e. Prije pokusa uzorak je smrvljen u sitan prah te je kao takav nanesen na nosač uzorka.

Prilikom izrade ovog rada intenziteti difrakcijskih maksimuma za priređene koordinacijske spojeve prikupljeni su pomoću difraktometra Oxford Diffraction Xcalibur pri temperaturi od 296 K uz korištenje molibdenskog zračenja MoK_α ($\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$). Za prikupljanje podataka korišten je programski paket CrysAlisPro.²⁷ Metodom difrakcije rendgenskog zračenja u jediničnom kristalu određene su molekulske i kristalne strukture spojevima **1**, **2**, **3**, **4**, a za njihovo rješavanje i utočnjavanje korišteni su programi *SHELXT*²⁸ i *SHELXL*²⁹. Za analizu i vizualizaciju riješene kristalne strukture korišteni su programi Mercury¹⁸ i Diamond³⁰.

Magnetna mjerenja svih praškastih uzoraka provedena su na MPMS5 magnetometru (Magnetic Property Measurement System) na Fizičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Laboratoriju za istraživanje magnetskih i električnih pojava. Prije početka mjerenja uzorak je smrvljen u sitan prah i stavljen unutar ampule u plastičnu slamku koja se pričvrsti na nosač. Magnetna svojstva materijala su istraživana u istosmjernom magnetnom polju (DC) te je promatrana temperaturna ovisnost magnetizacije i ovisnost magnetizacije o magnetskom polju. Za prikaz i analizu mjerenih podataka korišten je programski paket QtiPlot 0.9.8.9³¹.

3.2. SINTEZA SPOJEVA

3.2.1. *Sinteza spoja $[CuCl_2(4-pym)_2]_n$ (1)*

Pripremi se vodena otopina bakrova(II) klorida dihidrata (53,3 mg; 0,3125 mmol; 2,5 mL) i etanolna otopina pirimidin-4-ona (60,2 mg; 0,625 mmol; 2,5 mL). Priređene otopine se pomiješaju te trenutno dolazi do nastanka homogenog svjetloplavog praškastog produkta. Produkt se izolira filtracijom uz sniženi tlak, ispere malim obrocima hladne vode i suši na zraku. Iskorištenje reakcije iznosi: 78 %.

Elementna analiza računata za $C_8H_8CuN_2O_2Cl_2$ (**1**): C, 32,2; H, 2,7; N, 9,4, a nađeno je: C, 31,2; H, 2,5; N, 9,1. Difraktogram praha izoliranog spoja odgovara difraktogramu računatom na temelju određene kristalne strukture spoja metodom difrakcije rendgenskih zraka u monokristalnom uzorku (vidjeti: slika P1).

3.2.2. *Sinteza spoja $[CuBr_2(4-pym)_2]_n$ (2)*

Pripremi se vodena otopina bakrova(II) bromida (69,7 mg; 0,3125 mmol; 5 mL) i etanolna otopina pirimidin-4-ona (60,0 mg; 0,625 mmol; 5 mL). Priređene otopine se pomiješaju te trenutno dolazi do nastanka homogenog maslinastozelenog praškastog produkta. Produkt se izolira filtracijom uz sniženi tlak, ispere malim obrocima hladne vode i suši na zraku. Iskorištenje reakcije iznosi: 76 %.

Elementna analiza računata za molekulsku formulu spoja $C_8H_8CuN_2O_2Br_2$ (**2**): C, 24,8; H, 2,1; N, 7,2, a nađeno je: C, 24,0; H, 1,9; N, 6,9. Difraktogram praha izoliranog spoja odgovara difraktogramu računatom na temelju određene kristalne strukture spoja metodom difrakcije rendgenskih zraka u monokristalnom uzorku (vidjeti: slika P2).

3.2.3. *Sinteza spoja $[CuCl_2(2-NH_2pz)_2]_n$ (3)*

Pripremi se vodena otopina bakrova(II) klorida dihidrata (21,3 mg; 0,125 mmol; 2 mL) i etanolna otopina 2-aminopirazina (24,1 mg; 0,25 mmol; 2 mL). Priređene otopine se pomiješaju te trenutno dolazi do nastanka homogenog zelenog praškastog produkta. Produkt se izolira filtracijom uz sniženi tlak, ispere malim obrocima hladne vode i suši na zraku. Iskorištenje reakcije iznosi: 54 %.

Elementna analiza računata za molekulsku formulu spoja $C_4H_5CuN_3Cl_2$ (**3**): C, 21,0; H, 2,2; N, 18,3, a nađeno je: C, 20,3; H, 2,0; N, 17,7. Difraktogram praha izoliranog spoja odgovara difraktogramu računatom na temelju određene kristalne strukture spoja metodom difrakcije rendgenskih zraka u monokristalnom uzorku (vidjeti: slika P4).

3.2.4. *Sinteza spoja $[CuCl_2(2-pyz)_2]_n$ (4)*

Pripremi se vodena otopina bakrova(II) klorida dihidrata (53,2 mg; 0,3125 mmol; 0,5 mL) i etanolna otopina pirazin-2-ona (60,1 mg; 0,625 mmol; 1 mL). Priređene otopine se pomiješaju te trenutno dolazi do nastanka homogenog zelenog praškastog produkta. Produkt se izolira filtracijom uz sniženi tlak, isprere malim obrocima hladne vode i suši na zraku. Iskorištenje reakcije iznosi: 52 %.

Elementna analiza računata za molekulsku formulu spoja $C_8H_8CuN_4O_2Cl_2$ (**4**): C, 29,4; H, 2,5; N, 17,1, a nađeno je: C, 28,5; H, 2,3; N, 16,6. Difraktogram praha izoliranog spoja odgovara difraktogramu računatom na temelju određene kristalne strukture spoja metodom difrakcije rendgenskih zraka u monokristalnom uzorku (vidjeti: slika P5).

3.3. Priprava monokristala

3.3.1. Priprava monokristala spoja $[CuCl_2(4-pym)_2]_n$ (1)

a) Metoda tekućinske difuzije

Pripreme se polazne otopine: vodena otopina bakrova(II) klorida ($CuCl_2 \cdot 2H_2O$: 106,5 mg, 0,625 mmol, u 10,0 mL)* i etanolna otopina pirimidin-4-ona (4-pym: 120,1 mg, 1.25 mmol, u 10,0 mL)**.

Postupkom nadslojavanja priredi se niz kristalizacijskih pokusa različitih koncentracija nadslojenih otopina. Nadslojavanje i priprava različitih koncentracija provodi se na način da se u polaznu vodenu otopinu bakrova(II) klorida (V_o) doda određeni volumen čistog otapala (V_1 , tablica 6) te se tako priređena otopina prvo nadsloji s međuslojem etanola (1,0 mL) te zatim s polaznom etanolnom otopinom pirimidin-4-ona (V_o') u koju se također dodaje određeni volumen čistog otapala (V_1' , tablica 6). Međusloj etanola služi za usporavanje miješanje dvaju nadslojenih otopina, vodene otopine bakrova(II) klorida i etanolne otopine pirimidin-4-ona.

Priređene nadslojene otopine ostavljene su stajati na sobnoj temperaturi, uz omogućenu sporu evaporaciju. Nakon nekoliko tjedana u svim kristalizacijskim eksperimentima dobiveni su plavi igličasti kristali pogodni za rendgensku strukturnu analizu u jediničnom kristalu (slika 17a).

Tablica 6. Dodani volumeni čistih otapala u polazne otopine reaktanata

pokus	1	2	3	4	5	6	7	8
Volumen / mL								
$V_o (CuCl_2 \cdot 2H_2O)^*$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1 (H_2O)$	0,5	0,5	1,0	1,0	1,5	1,5	2,0	2,0
EtOH (međusloj)	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_o' (4-pym)^{**}$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1' (EtOH)$	0,5	2,0	1,0	1,5	1,0	1,5	0,5	2,0
ishod	u svim kristalizacijskim pokusima nastali su svijetloplavi igličasti kristalići							

pripremanje polaznih otopina * i ** opisane su u prvom paragrafu teksta

b) Otopinska sinteza

Priredi se vodena otopina vodena otopina bakrova(II) klorida dihidrata ($\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$: 21,3 mg, 0,125 mmol, u 3 mL) i etanolna otopina pirimidon-4-ona (4-pym, 24,0 mg, 0,25 mmol, u 3 mL). Bistra otopina se ostavi stajati na sobnoj temperaturi, a samo nakon nekoliko dana nastaju kristalići svjetloplave boje pogodni za rendgensku strukturnu analizu u jediničnom kristalu (slika 17b).



Slika 17. Svjetloplavi kristali spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) dobiveni metodom tekućinske difuzije (a) i otopinskom sintezom (b)

3.3.2. Priprava monokristala spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)

a) Metoda tekućinske difuzije

Pripreme se polazne otopine: vodena otopina bakrova(II) bromida (CuBr_2 : 139,5 mg, 0,625 mmol, u 10 mL)* i etanolna otopina pirimidin-4-ona (4-pym: 120,1 mg, 1,25 mmol, u 10 mL)**.

Postupkom nadslojavanja priredi se niz kristalizacijskih pokusa različitih koncentracija nadslojenih otopina. Nadslojavanje i priprava različitih koncentracija provodi se na način da se u polaznu vodenu otopinu bakrova(II) bromida (V_o) doda određeni volumen čistog otapala (V_1 , tablica 7) te se tako priređena otopina prvo nadsloji s međuslojem etanola (1,0 mL) te zatim s polaznom etanolnom otopinom pirimidin-4-ona (V_o') u koju se također dodaje određeni volumen čistog otapala (V_1' , tablica 7). Međusloj etanola služi za usporavanje miješanje dvaju nadslojenih otopina, vodene otopine bakrova(II) bromida i etanolne otopine pirimidin-4-ona.

Priređene nadslojene otopine ostavljene su stajati na sobnoj temperaturi, uz omogućenu sporu evaporaciju. Nakon nekoliko tjedana u svim kristalizacijskim eksperimentima dobiveni su zeleni igličasti kristali pogodni za rendgensku strukturnu analizu u jediničnom kristalu (slika 18a).

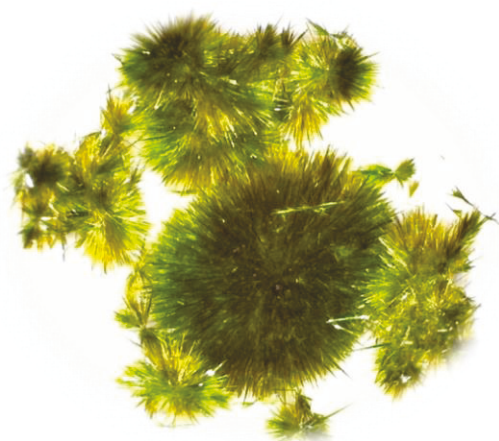
Tablica 7. Dodani volumeni čistih otapala u polazne otopine reaktanata

pokus	1	2	3	4	5	6	7	8
Volumen / mL								
$V_o(\text{CuBr}_2)^*$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1(\text{H}_2\text{O})$	0,5	0,5	1,0	1,0	1,5	1,5	2,0	2,0
EtOH (međusloj)	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_o'(4\text{-pym})^{**}$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1'(\text{EtOH})$	0,5	2,0	1,0	1,5	1,0	1,5	0,5	2,0
ishod	u svim kristalizacijskim pokusima nastali su zeleni igličasti kristalići							

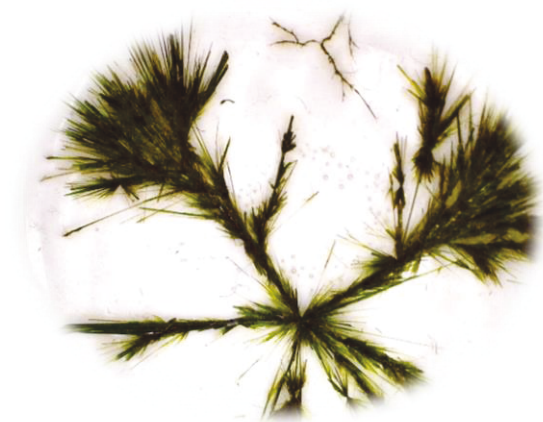
pripremanje polaznih otopina * i ** opisane su u prvom paragrafu teksta

b) Otopinska sinteza

Pripremi se polazna vodena otopina bakrova(II) bromida (27,9 mg; 0,125 mmol; 2 mL) i polazna etanolna otopina 4-hidroksipirimidona (24,1 mg; 0,25 mmol; 2 mL). Dobivenoj smjesi se doda 2,5 mL vode uz miješanje staklenim štapićem. Bistra otopina se ostavi stajati na sobnoj temperaturi, a samo nakon nekoliko dana nastaju kristalići zelene boje pogodni za rendgensku strukturnu analizu u jediničnom kristalu (slika 18b).



a)



b)

Slika 18. Zeleni igličasti kristali jediničnog kristala $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) dobiveni metodom tekućinske difuzije (a) i otopinskom sintezom (b)

3.3.3. Priprava monokristala spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3)

a) Metoda tekućinske difuzije

Pripreme se polazne otopine: vodena otopina bakrova(II) klorida dihidrata ($\text{CuCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$: 106,5 mg, 0,625 mmol, u 10 mL)* i etanolna otopina 2-aminopirazina (2-NH₂pz: 118,8 mg, 1,25 mmol, u 10 mL)**.

Postupkom nadslojavanja priredi se niz kristalizacijskih pokusa različitih koncentracija nadslojenih otopina. Nadslojavanje i priprava različitih koncentracija provodi se na način da se u polaznu vodenu otopinu bakrova(II) klorida (V_o) doda određeni volumen čistog otapala (V_1 , tablica 8) te se tako priređena otopina prvo nadsloji s međuslojem etanola (1,0 mL) te zatim s polaznom etanolnom otopinom 2-aminopirazina (V_o') u koju se također dodaje određeni volumen čistog otapala (V_1' , tablica 8). Međusloj etanola služi za usporavanje miješanje dvaju nadslojenih otopina, vodene otopine bakrova(II) klorida i etanolne otopine 2-aminopirazina.

Priređene nadslojene otopine ostavljene su stajati na sobnoj temperaturi, uz omogućenu sporu evaporaciju. Nakon nekoliko tjedana u svim kristalizacijskim eksperimentima dobivena je heterogena smjesa (zelenih i smeđih produkata). Prilikom nadslojavanja polaznih otopina dolazi do redukcije bakra(II) u bakar(I) što odgovara smeđim kristalima koji su isključeni iz istraživanja jer nisu od interesa zbog magnetskih svojstava. Na stjenkama epruveta mogu se uočiti maleni zeleni kristali od kojih nisu svi bili adekvatni za određivanje kristalne strukture metodom difrakcije rendgenskog zračenja u jediničnom kristalu.

Tablica 8. Dodani volumeni čistih otapala u polazne otopine reaktanata

pokus	1	2	3	4	5	6	7	8
Volumen / mL								
$V_o (\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O})^*$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1 (\text{H}_2\text{O})$	0,5	0,5	1,0	1,0	1,5	1,5	2,0	2,0
EtOH (međusloj)	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_o' (2\text{-NH}_2\text{pz})^{**}$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1' (\text{EtOH})$	0,5	2,0	1,0	1,5	1,0	1,5	0,5	2,0
ishod	u svim kristalizacijskim pokusima nastaje heterogena smjesa smeđih i zelenih kristalića							

pripremanje polaznih otopina * i ** opisane su u prvom paragrafu teksta

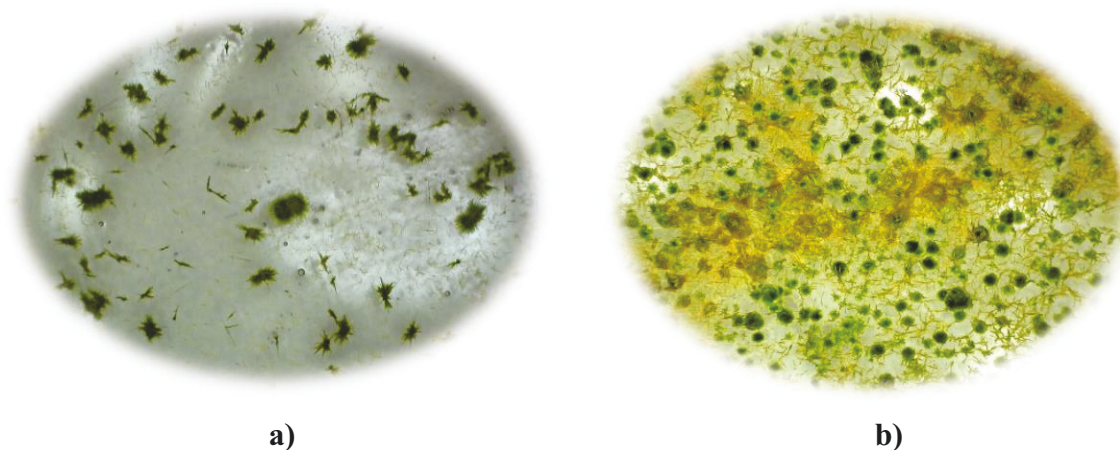
b) Otopinska sinteza

Otopinskom sintezom priređeno je nekoliko kristalizacijskih pokusa u svrhu optimiziranja sintetskog puta za pripravu homogenog kristaliničnog produkta spoja **3**. Prilikom pokusa korišteni su različita otapala i različite koncentracije otopina reaktanata od kojih su samo neke vrijednosti prikazane u tablici 9.

Tablica 9. Korištena otapala za pripravu homogenog kristaliničnog produkta spoja **3**

Broj pokusa	$\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ $n = 0,3125 \text{ mmol}$	$2\text{-NH}_2\text{pz}$ $n = 0,625 \text{ mmol}$	Ishod pokusa
dodani volumeni čistih otapala V($\text{H}_2\text{O}/\text{EtOH}$)			
1	+ 1,0 mL H_2O	+ 1,0 mL EtOH	zeleni igličasti kristali
2	+ 1,0 mL H_2O	+ 2,0 mL EtOH	heterogena smjesa
3	+ 1,0 mL H_2O	+ 4,0 mL EtOH	heterogena smjesa
4	+ 1,0 mL H_2O	+ 8,0 mL EtOH	heterogena smjesa

Priređene otopine se profiltriraju te se matičnice ostave stajati na sobnoj temperaturi. Samo u slučaju pokusa br. 1 (tablica 9; slika 19a) nastaje homogeni kristalni produkt, dok u ostalim kristalizacijskim pokusima nastaju zeleni kristalići i smeđi prah kao što je prikazano na slici 19b.



Slika 19. Homogeni (a) i heterogeni (b) kristalni produkt spoja **3**

3.3.4. Priprava monokristala spoja $[CuCl_2(2-pyz)_2]_n$ (4)

a) Metoda tekućinske difuzije

Pripreme se polazne otopine: vodena otopina bakrova(II) klorida dihidrata ($CuCl_2 \cdot H_2O$: 213,1 mg, 1,25 mmol, u 10 mL)* i etanolna otopina pirazin-2-ona (2-pyz: 24,05 mg, 0,25 mmol, u 1,5, 2,0, 2,5 mL i 3,0 mL)**.

Postupkom nadslojavanja priredi se niz kristalizacijskih pokusa različitih koncentracija nadslojenih otopina. Nadslojavanje i priprava različitih koncentracija provodi se na način da se u polaznu vodenu otopinu bakrova(II) klorida (V_o) doda određeni volumen čistog otapala (V_1 , tablica 10) te se tako priređena otopina prvo nadsloji s međuslojem etanola (1,0 mL) te zatim s polaznom etanolnom otopinom pirazin-2-onom (V_o') u koju se također dodaje određeni volumen čistog otapala (V_1' , tablica 10). Međusloj etanola služi za usporavanje miješanje dvaju nadslojenih otopina, vodene otopine bakrova(II) klorida i etanolne otopine pirazin-2-ona.

Priređene nadslojene otopine ostavljene su stajati na sobnoj temperaturi, uz omogućenu sporu evaporaciju. Nakon nekoliko tjedana u svim kristalizacijskim eksperimentima dobivena je heterogena smjesa (zelenih i smeđih produkata). Prilikom nadslojavanja polaznih otopina dolazi do redukcije bakra(II) u bakar(I) koji su isključeni iz istraživanja jer nisu od interesa zbog magnetskih svojstava. Na stijenkama epruveta mogu se uočiti i maleni zeleni kristali od kojih također nisu bili svi adekvatni za određivanje kristalne strukture metodom difrakcije rendgenskog zračenja u jediničnom kristalu.

Tablica 10. Dodani volumeni čistih otapala u polazne otopine reaktanata

pokus	1	2	3	4	5	6	7	8
Volumen / mL								
$V_o (CuCl_2 \cdot 2H_2O)^*$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1 (H_2O)$	0,5	0,5	1,0	1,0	1,5	1,5	2,0	2,0
EtOH (međusloj)	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_o' (2-pyz)^{**}$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1' (EtOH)$	0,5	2,0	1,0	1,5	1,0	1,5	0,5	2,0
ishod	u svim kristalizacijskim pokusima nastaje heterogena smjesa smeđih i zelenih kristalića							

pripremanje polaznih otopina * i ** opisane su u prvom paragrafu teksta

3.3.5. Priprava monokristala spoja $[CuBr(2-pyz)]_n$ (5)

b) Metoda tekućinske difuzije

Pripreme se polazne otopine: vodena otopina bakrova(II) bromida ($CuBr_2$: 139,5 mg, 0,625 mmol, u 10 mL)* i etanolna otopina pirazin-2-ona (2-pyz: 24,05 mg, 0,25 mmol, u 1,5, 2,0, 2,5 mL i 3,0 mL)**.

Postupkom nadslojavanja priredi se niz kristalizacijskih pokusa različitih koncentracija nadslojenih otopina. Nadslojavanje i priprava različitih koncentracija provodi se na način da se u polaznu vodenu otopinu bakrova(II) bromida (V_o) doda određeni volumen čistog otapala (V_1 , tablica 11) te se tako priređena otopina prvo nadsloji s međuslojem etanola (1,0 mL) te zatim s polaznom etanolnom otopinom pirazin-2-ona (V_o') u koju se također dodaje određeni volumen čistog otapala (V_1' , tablica 11). Međusloj etanola služi za usporavanje miješanje dvaju nadslojenih otopina, vodene otopine bakrova(II) bromida i etanolne otopine pirazin-2-ona.

Priređene nadslojene otopine ostavljene su stajati na sobnoj temperaturi, uz omogućenu sporu evaporaciju. Nakon nekoliko tjedana u svim kristalizacijskim eksperimentima dobivena je heterogena smjesa (zelenih i smeđih produkata). Prilikom nadslojavanja polaznih otopina dolazi do redukcije bakra(II) u bakar(I) što odgovara smeđim kristalima od kojih je samo nekolicina adekvatna za određivanje kristalne strukture metodom difrakcije rendgenskog zračenja u jediničnom kristalu dok nastali zeleni kristalići nisu bili adekvatni za određivanje kristalne strukture metodom difrakcije rendgenskog zračenja u jediničnom kristalu.

Tablica 11. Dodani volumeni čistih otapala u polazne otopine reaktanata

pokus	1	2	3	4	5	6	7	8
Volumen / mL								
$V_o (CuBr_2)^*$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1 (H_2O)$	0,5	0,5	1,0	1,0	1,5	1,5	2,0	2,0
EtOH (međusloj)	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_o'(2-pyz)^{**}$	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
$V_1'(EtOH)$	0,5	2,0	1,0	1,5	1,0	1,5	0,5	2,0
ishod	u svim kristalizacijskim pokusima nastaje heterogena smjesa smeđih i zelenih kristalića							

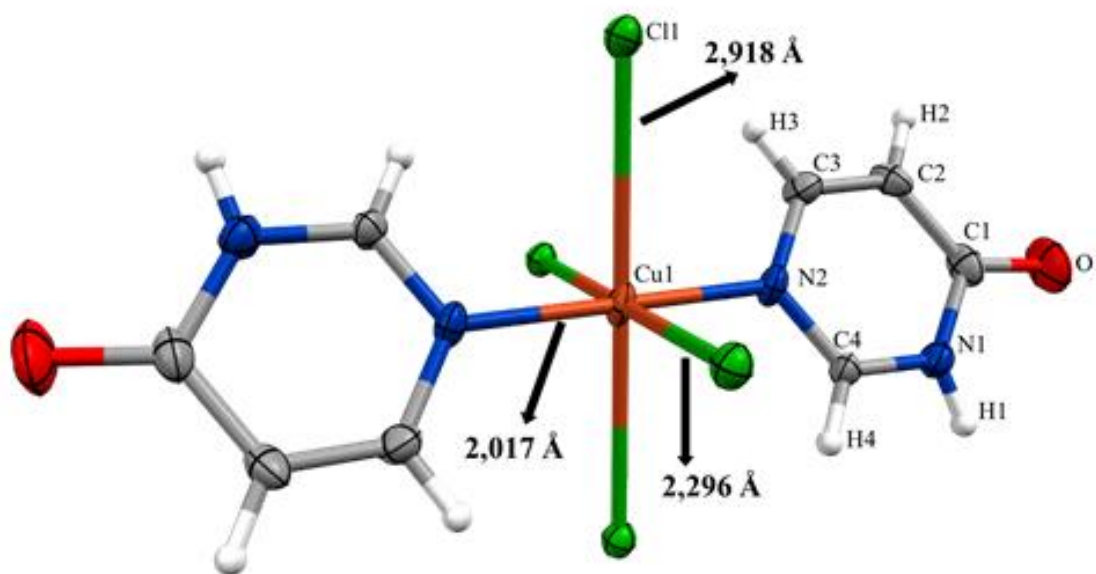
pripremanje polaznih otopina * i ** opisane su u prvom paragrafu teksta

4. REZULTATI I RASPRAVA

4.1. Analiza kristalografskih podataka

4.1.1. Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**)

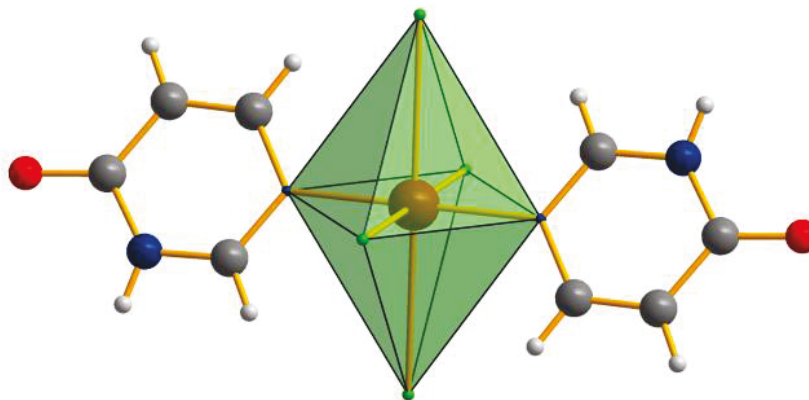
Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) određena je metodom difrakcije rendgenskog zračenja u jediničnom kristalu. Spoj **1** kristalizira u monoklinskom sustavu u prostornoj grupi $P2_1/n$. Kristalografski podaci (tablica P1), kao i popis odabranih veznih udaljenosti i kutova (tablica P3a) navedeni su u prilogu.



Slika 20. ORTEP prikaz monomerne jedinice spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) s numeriranim atomima i odabranim veznim udaljenostima. Elipsoidi nevodikovih atoma odgovaraju 30 % vjerojatnosti nalaženja elektronske gustoće.

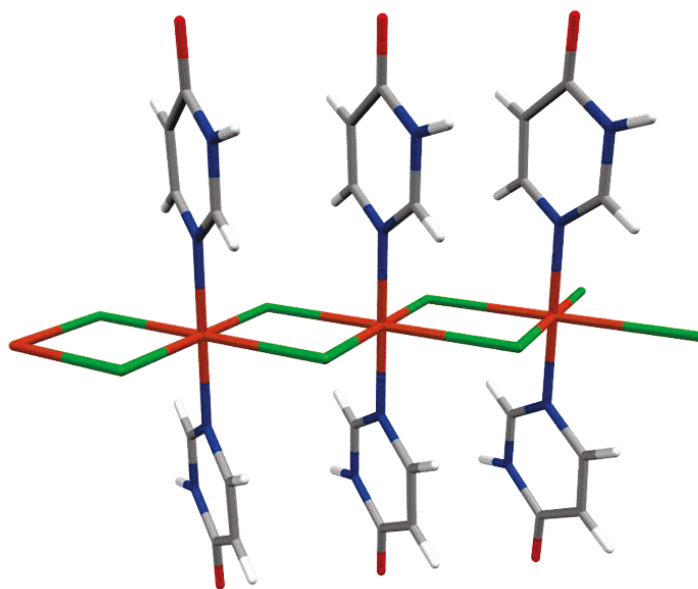
Oktaedarska koordinacija bakrovih(II) kationa monomerne jedinice spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) prikazana je na slici 20. Bakrovi(II) kationi koordinirani su s dva kloridna aniona u aksijalnim položajima te s dva pirimidinska dušikova atoma iz dvije molekule liganda, pirimidin-4-ona, i dva kloridna aniona u ekvatorijalnoj ravnini. Oktaedarska koordinacija oko bakrovih(II) kationa u spoju **1** je izdužena u aksijalnom položaju. Iskrivljena geometrija spoja ukazuje na izraženi Jahn-Tellerov efekt (slika 21) koji se ostvaruje preko veznih udaljenosti bakra i halogenidnih atoma. Vezna udaljenost Cu–Cl u aksijalnom položaju iznosi 2,918 Å, dok

su vezne udaljenosti u ekvatorijalnoj ravnini bakrova(II) kationa sa susjednim mu atomima nešto kraće (Cu–Cl vezna udaljenost iznosi 2,296 Å, a Cu–N vezna udaljenost iznosi 2,017 Å).

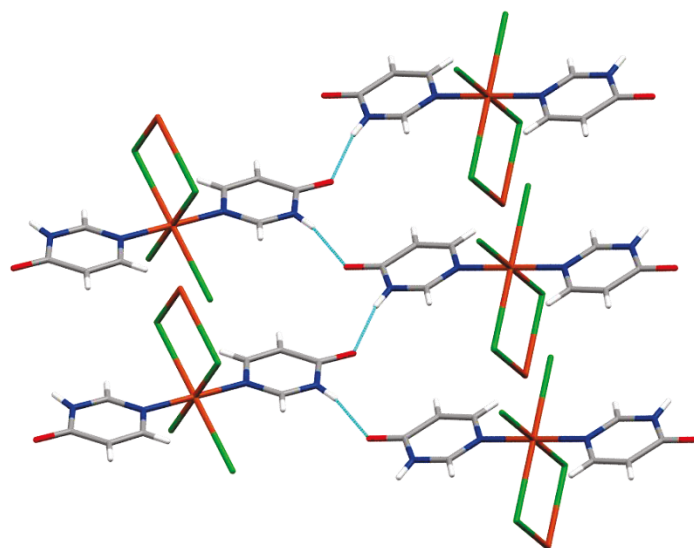


Slika 21. Deformirana oktaedarska geometrija zbog prisutnosti Jahn-Tellerovog efekta

U spoju $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) susjedni bakrovi(II) kationi su premošteni preko aniona klorida te tako povezani stvaraju polimerni jednodimenzijski lanac (slika 22).



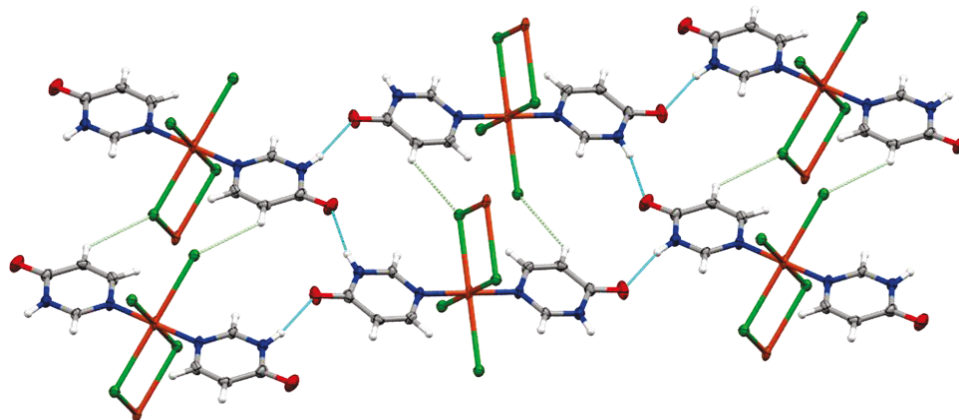
Slika 22. Jednodimenzijski polimerni lanac koordinacijskog spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**)



Slika 23. Prikaz supramolekulskog povezivanja dvaju susjednih polimernih lanaca. Povezivanje se ostvaruje preko N–H···O interakcija koje se može opisati *graf-set* notacijom kao C(4)

Susjedni polimerni lanci međusobno se povezuju jakim N–H···O vodikovim vezama između laktamskih skupina molekula liganda. Na takav način dolazi do ostvarivanja lančastog supramolekulskog motiva koji se može opisati *graf-set* notacijom kao C(4) što je prikazano na slici 23. Kao posljedica povezivanja paralelnih lanaca također preko N–H···O vodikovih veza uočen je i sekundarni motiv prstena *graf-set* notacije $R^4_4(28)$.

Dodatna stabilizacija kristalne strukture ostvarena je preko slabijih C–H···Cl međumolekulskih interakcija između kloridnog aniona i pirimidonskog prstena susjednih polimernih lanaca (slika 24). Popis vodikovih veza s pripadajućom geometrijom, kao i popis pripadajućih operatora simetrije na akceptorski atom (tablica P6) navedeni su u prilogu.

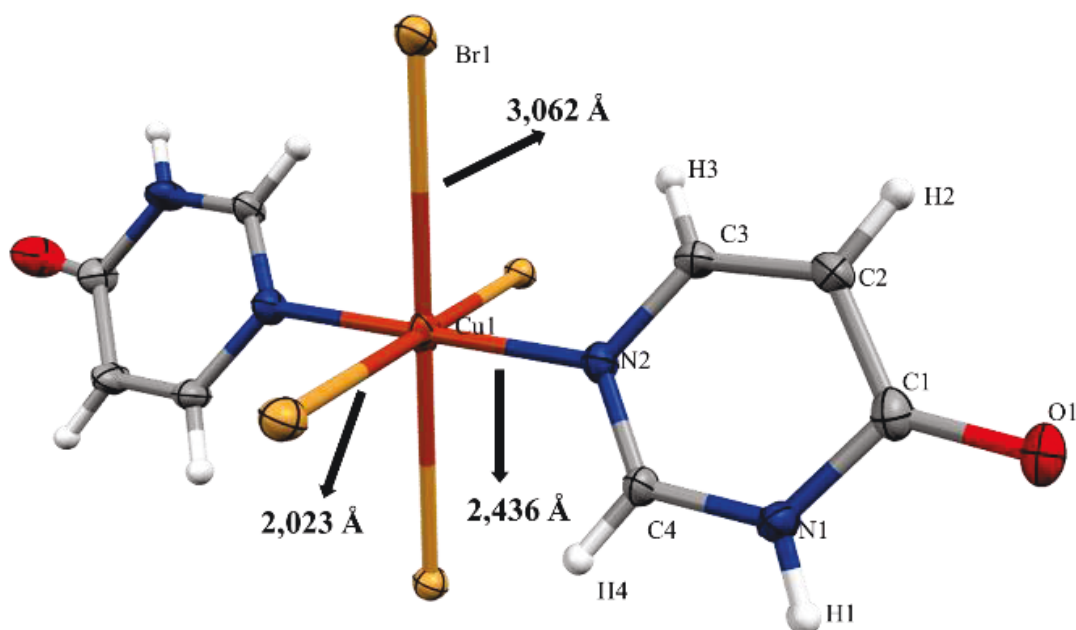


Slika 24. Stabilizacija polimernih lanaca preko slabijih C–H···Cl interakcija

4.1.2. Kristalna struktura spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)

Metodom rendgenske difrakcije u jediničnom kristalu određena je kristalna struktura spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2). Spoj 2 kristalizira u monoklinskom sustavu u prostornoj grupi $P2_1/n$. Kristalografski podaci (tablica P1), kao i popis odabranih veznih udaljenosti i kutova (tablica P3b) navedeni su u prilogu.

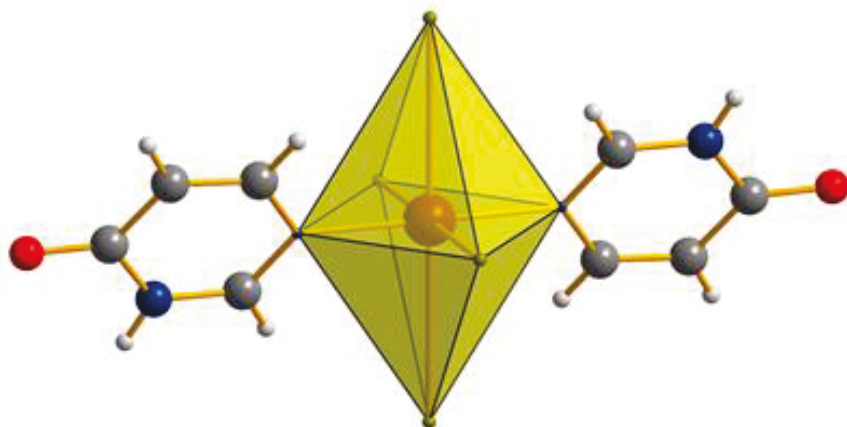
U spoju 2 bakrovi(II) kationi imaju oktaedarsku koordinaciju. Bakrovi(II) kationi koordinirani su s dva bromidna aniona u aksijalnim položajima te s dva pirimidinska dušikova atoma iz dvije iz dvije molekule liganda, pirimidin-4-ona, i dva bromidna aniona u ekvatorijalnoj ravnini (slika 25).



Slika 25. ORTEP prikaz monomerne jedinice spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2) s numeriranim atomima i odabranim veznim udaljenostima. Elipsoidi nevodikovih atoma odgovaraju 30 % vjerojatnosti nalaženja elektronske gustoće.

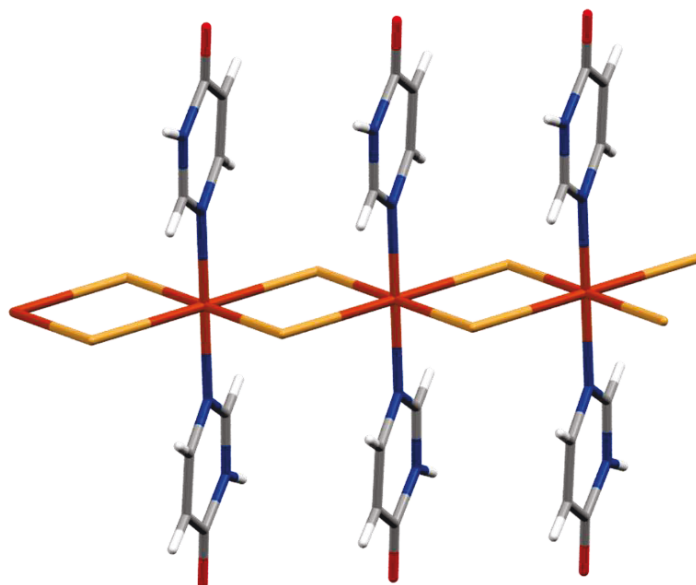
Kao i kod spoja 1, oktaedarska geometrija spoja 2 je također deformirana te kao takva pokazuje prisutnost Jahn-Tellerovog efekta (slika 26) koji se kao i u spoju 1 ostvaruje preko veznih udaljenosti bakra i halogenidnih atoma.

Vezna udaljenost Cu–Br u aksijalnom položaju iznosi 3,062 Å, dok su vezne udaljenosti u ekvatorijalnoj ravni bakrova(II) kationa sa susjednim mu atomima nešto kraće (Cu–Br vezna udaljenost iznosi 2,023 Å, dok Cu–N vezna udaljenost iznosi 2,436 Å). U odnosu na spoj **1**, spoj **2** ima izduženiju oktaedarsku geometriju.

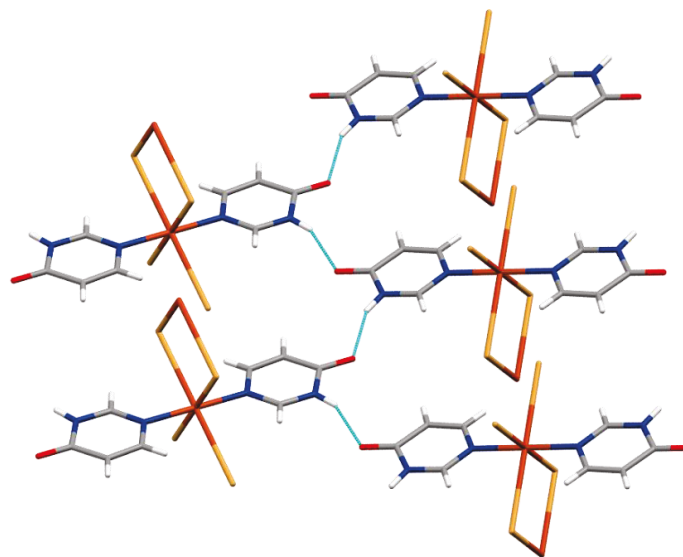


Slika 26. Izdužena oktaedarska geometrija spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**)

U spoju $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) susjedni bakrovi(II) kationi su premošteni preko aniona bromida te tako povezani stvaraju polimerni jednodimenzijski lanac (slika 27).



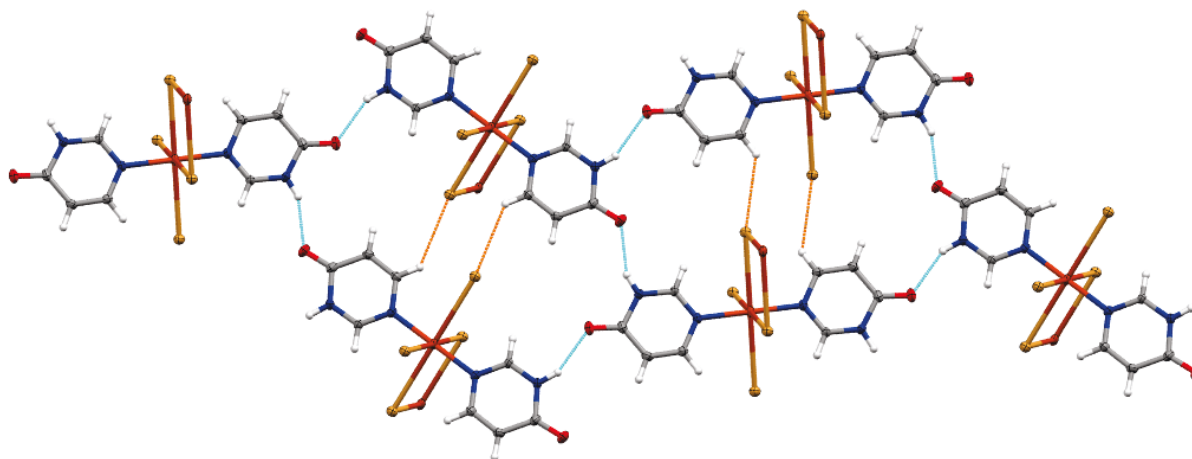
Slika 27. Jednodimenzijski polimerni lanac koordinacijskog spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**)



Slika 28. Prikaz supramolekulskog povazivanja dvaju susjednih polimernih lanaca. Povezivanje se ostvaruje preko N–H···O interakcija koje se može opisati *graf-set* notacijom kao C(4)

U spoju **2** susjedni polimerni lanci međusobno ostvaruju interakcije preko jakih N–H···O vodikovih veza između laktamskih skupina dvaju molekula liganda pritom tvoreći primarni lančasti motiv C(4) što je prikazano na slici 28. Kao posljedica povezivanja paralelnih lanaca također preko N–H···O vodikovih veza uočen je i sekundarni motiv prstena kao i u spoju **1** *graf-set* notacije $R^4_4(28)$.

Dodatna stabilizacija kristalne strukture ostvarena je preko slabijih C–H···Br međumolekulskih interakcija između laktamske skupine i kloridnog aniona susjednih polimernih lanaca (slika 29). Popis vodikovih veza s pripadajućom geometrijom, kao i popis pripadajućih operatora simetrije na akceptorski atom (tablica P7) navedeni su u prilogu.

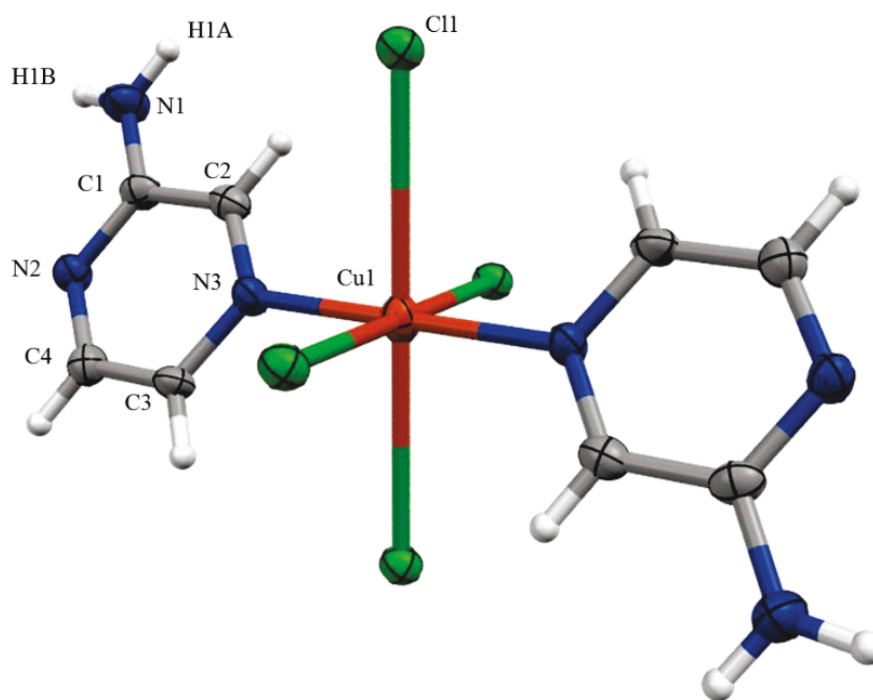


Slika 29. Stabilizacija polimernih lanaca preko C–H···Br interakcija

4.1.3. Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3)

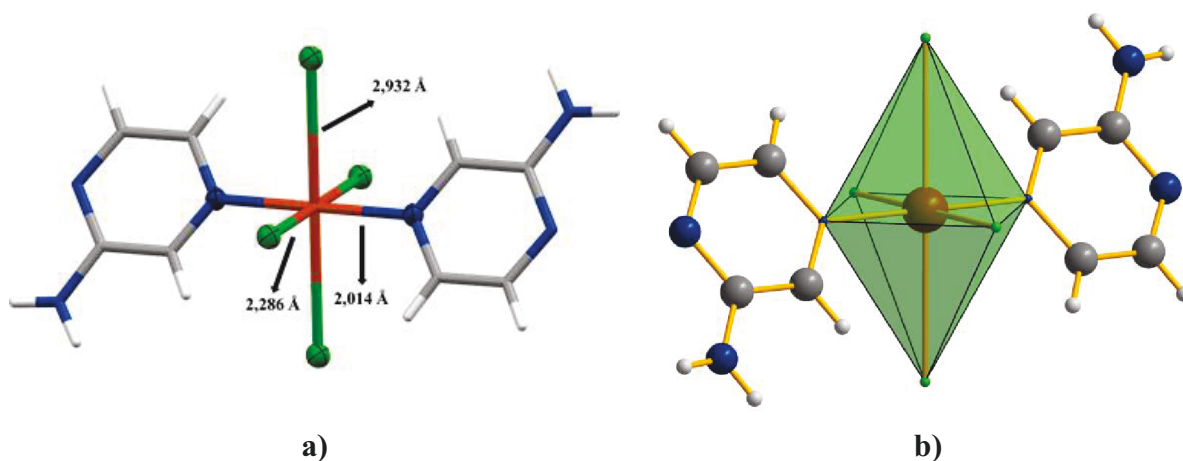
Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3) određena je metodom rendgenske difrakcije u jediničnom kristalu. Spoj 3 kristalizira u monoklinskom sustavu u prostornoj grupi $P2_1/n$. Kristalografski podaci (tablica P2), kao i popis odabranih veznih udaljenosti i kuteva (tablica P4a) navedeni su u prilogu.

Na slici 30 prikazana je monomerna jedinica spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3) u kojoj su bakrovi(II) kationi oktaedarski koordinirani s dva kloridna aniona u aksijalnim položajima te s dva piridinska dušikova atoma iz dviju molekula liganda, 2-aminopirazina, i dva kloridna aniona u ekvatorijalnoj ravnini.



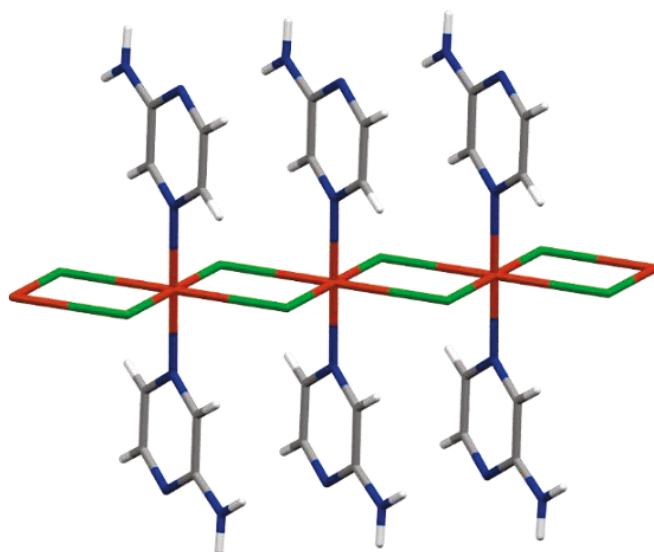
Slika 30. Ortep prikaz monomerne jedinice spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3) s numeriranim atomima. Elipsoidi nevodikovih atoma odgovaraju 30 % vjerojatnosti nalaženja elektronske gustoće.

U kristalnoj strukturi spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3) izdužena oktaedarska koordinacija (slika 31b) oko bakrovih (II) kationa ukazuje na izraženi Jahn-Tellerov efekt koji se ostvaruje preko veznih udaljenosti bakra i halogenidnih atoma. Vezna udaljenost Cu–Cl u aksijalnom položaju iznosi 2,932 Å, dok su vezne udaljenosti u ekvatorijalnoj ravnini bakrova(II) kationa sa susjednim mu atomima nešto kraće (Cu–Cl vezna udaljenost iznosi 2,286 Å, a Cu–N vezna udaljenost iznosi 2,014 Å (slika 31a).



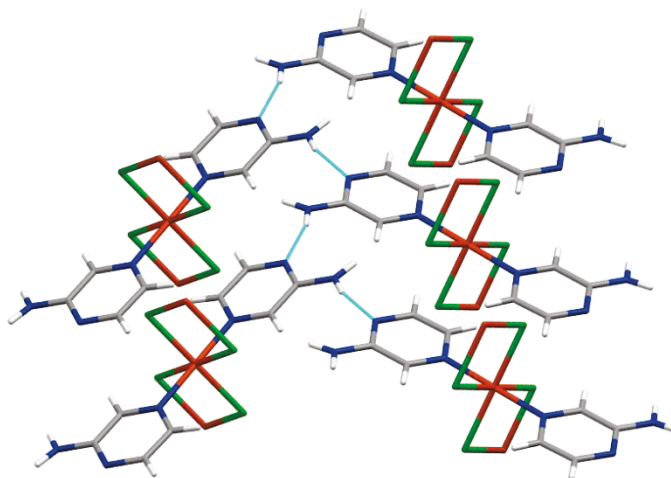
Slika 31. a) Odabrane vezne udaljenosti u strukturi spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (**3**)
b) Pripadajući koordinacijski poliedar spoja **3**

Spoj $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ je polimeran. Susjedni bakrovi(II) kationi su premošteni preko dvaju aniona klorida te tako povezani stvaraju jednodimenzijski polimerni lanac (slika 32).



Slika 32. Jednodimenzijski polimerni lanac spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (**3**)

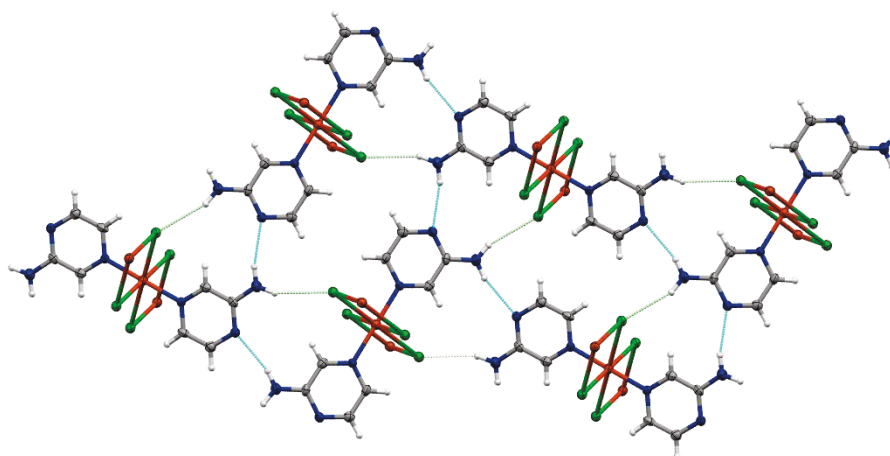
U spoju **3** uočeno je da se polimerni lanci međusobno povezuju preko N–H···N interakcija tvoreći pritom primarni supramolekulski lančasti motiv koji se može opisati *graf-set* notacijom kao C(4) (slika 33). Ovakva vodikova veza se ostvaruje između amino skupine i nekoordiniranog pirazinskog dušikovog atoma dvaju molekula liganda.



Slika 33. Ostvarivanje primarnog interakcijskog lančastog motiva *graf-set* notacije C(4) preko N–H···N interakcija

Kao posljedica povezivanja paralelnih lanaca također preko N–H···N vodikovih veza uočen je i sekundarni motiv prstena kao i u spojevima **1** i **2** *graf-set* notacije $R^4_4(28)$.

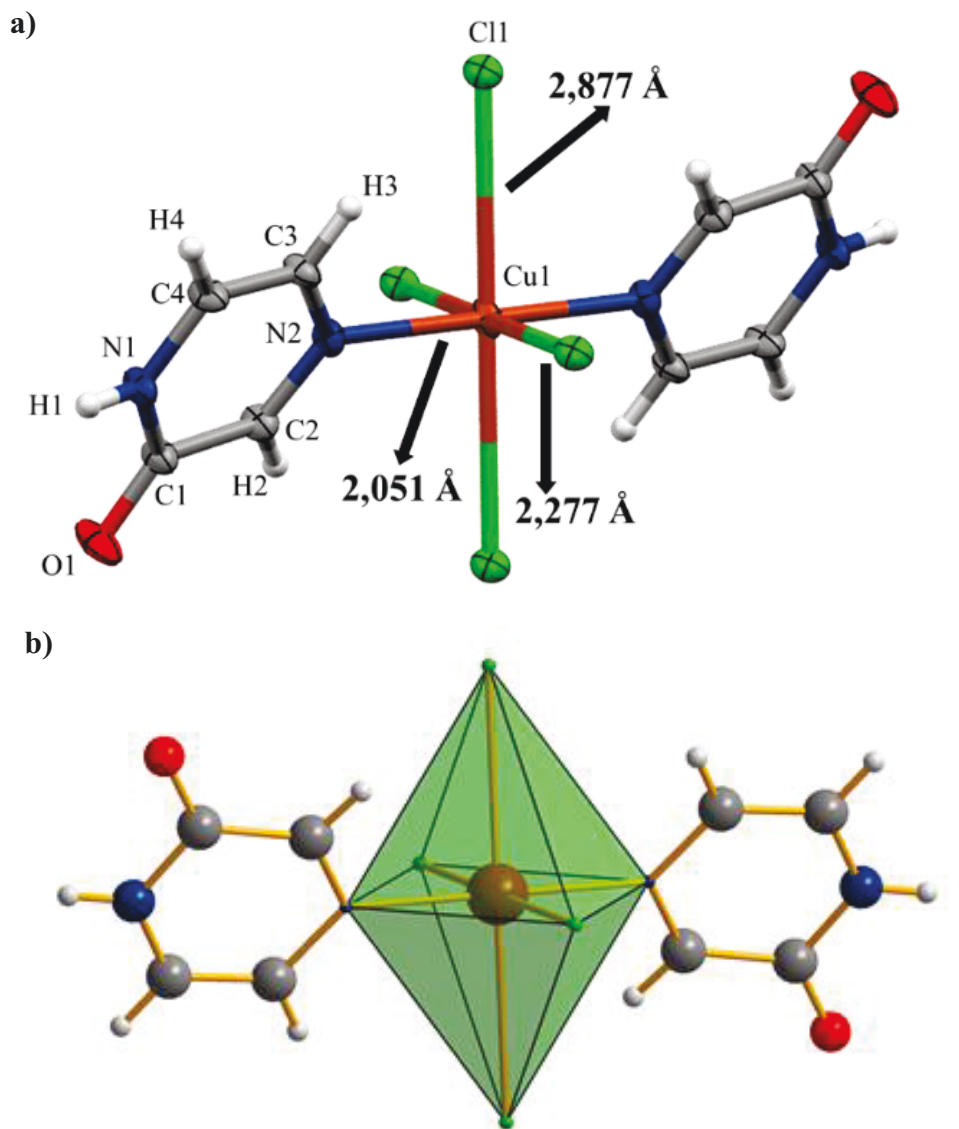
Drugi vodikov atom iz amino skupine sudjeluje u vodikovoj vezi s kloridnim anionom pritom ostvarujući međumolekulsku interakciju (slika 34) koja pridonosi dodatnoj stabilizaciji strukture. Popis vodikovih veza, njihova geometrija kao i operatori simetrije na akceptorski atom navedeni su u prilogu (tablica P8).



Slika 34. Ostvarivanje sekundarnog interakcijskog motiva prstena preko N–H···N interakcija i dodatna stabilizacija preko N–H···Cl interakcija

4.1.4. Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (4)

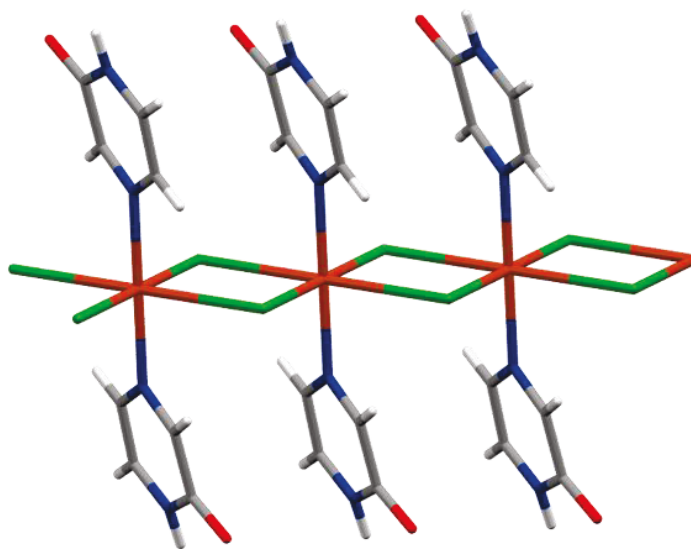
Kristalna struktura spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (4) određena je metodom rendgenske difrakcije u jediničnom kristalu. Spoj 4 kristalizira u monoklinskom sustavu u prostornoj grupi $P2_1/c$. Kristalografski podaci (tablica P2), kao i popis odabranih veznih udaljenosti i kuteva (tablica P4b) navedeni su u prilogu.



Slika 35. a) ORTEP prikaz monomerne jedinice spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (4) s numeriranim atomima i odabranim veznim udaljenostima. Elipsoidi nevodikovih atoma odgovaraju 30 % vjerojatnosti nalaženja elektronske gustoće.
b) Deformirana oktaedarska geometrija koja prikazuje izduženost veza prema aksijalnim atomima zbog Jahn-Tellerovog efekta

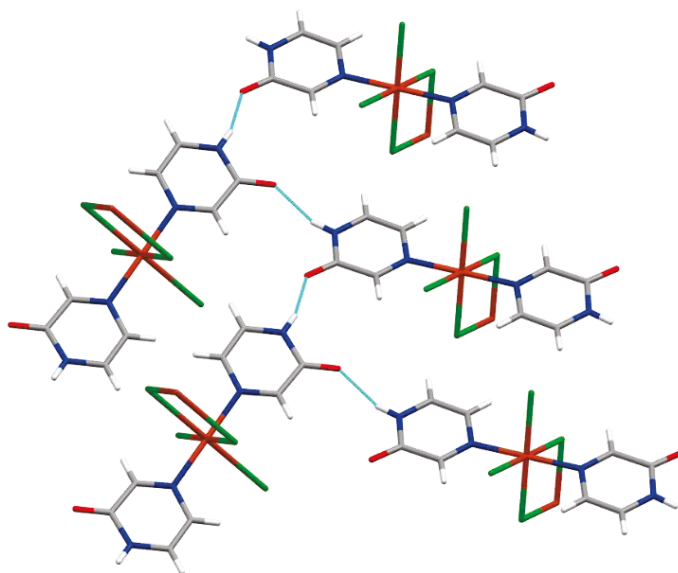
Na slici 35a je prikazana monomerna jedinica spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (**4**) u kojoj su bakrovi(II) kationi oktaedarski koordinirani s dva kloridna aniona u aksijalnim položajima te s dva pirazinska dušikova atoma iz dvije molekule liganda, pirazin-2-ona, i dva kloridna aniona u ekvatorijalnoj ravnini. U kristalnoj strukturi spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (**4**) vezna udaljenost Cu–Cl u aksijalnom položaju iznosi 2,877 Å, dok su vezne udaljenosti u ekvatorijalnoj ravnini bakrova(II) kationa sa susjednim mu atomima nešto kraće (Cu–Cl vezna udaljenost iznosi 2,277 Å, a Cu–N vezna udaljenost iznosi 2,051 Å). Oktaedarska geometrija spoja **4** je izdužena u aksijalnom položaju te kao takva ukazuje na izraženi Jahn-Tellerov efekt (Slika 35b)

Susjedni bakrovi(II) kationi spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ su premošteni preko dvaju aniona klorida te tako povezani stvaraju jednodimenzijski polimerni lanac (slika 36).



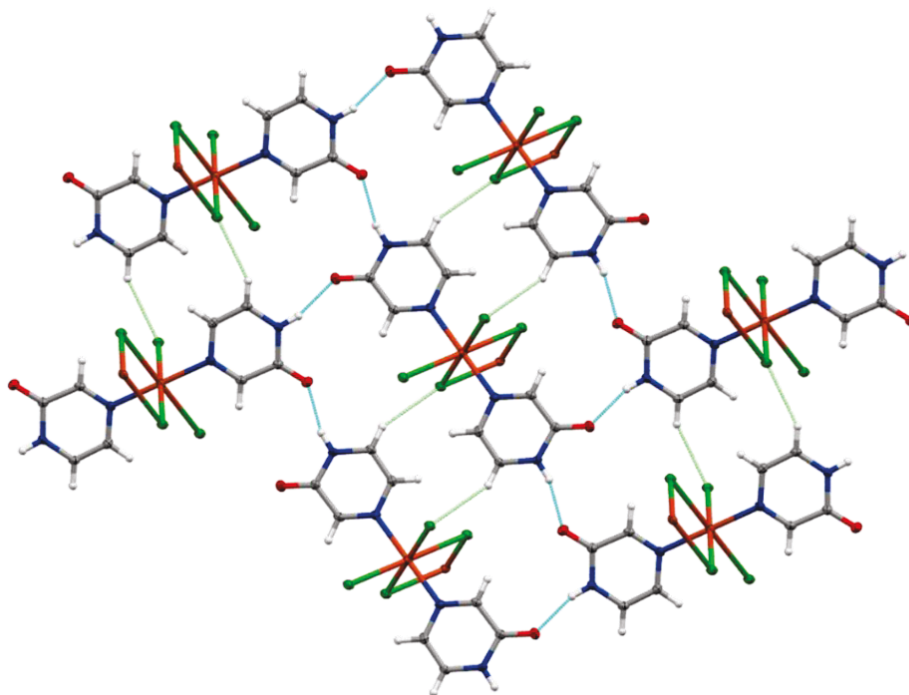
Slika 36. Jednodimenzijski polimerni lanac spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (**4**)

Susjedni polimerni lancu međusobno se povezuju jakim N–H⋯O vodikovim vezama između laktamskih skupina molekula liganda te tako nastaje supramolekulski lančasti motiv *graf-set* notacije $C(4)$ (slika 37). Kao posljedica povezivanja paralelnih lanaca također preko N–H⋯O vodikovih veza uočen je i sekundarni motiv prstena kao i u spojevima 1, 2, 3 i 4 *graf-set* notacije $R^4_4(28)$.



Slika 37. Ostvarivanje primarnog interakcijskog motiva lanca *graf-set* notacije $C(4)$ preko $N-H\cdots O$ interakcija

Kristalna struktura je dodatno stabilizirana slabijim $C-H\cdots Cl$ međumolekulskim interakcijama između kloridnog aniona i pirazinonskog prstena susjednih polimernih lanaca (slika 38). U prilogu je naveden popis vodikovih veza s pripadajućom geometrijom kao i popis pripadajućih operatora simetrije na akceptorski atom (tablica P9).

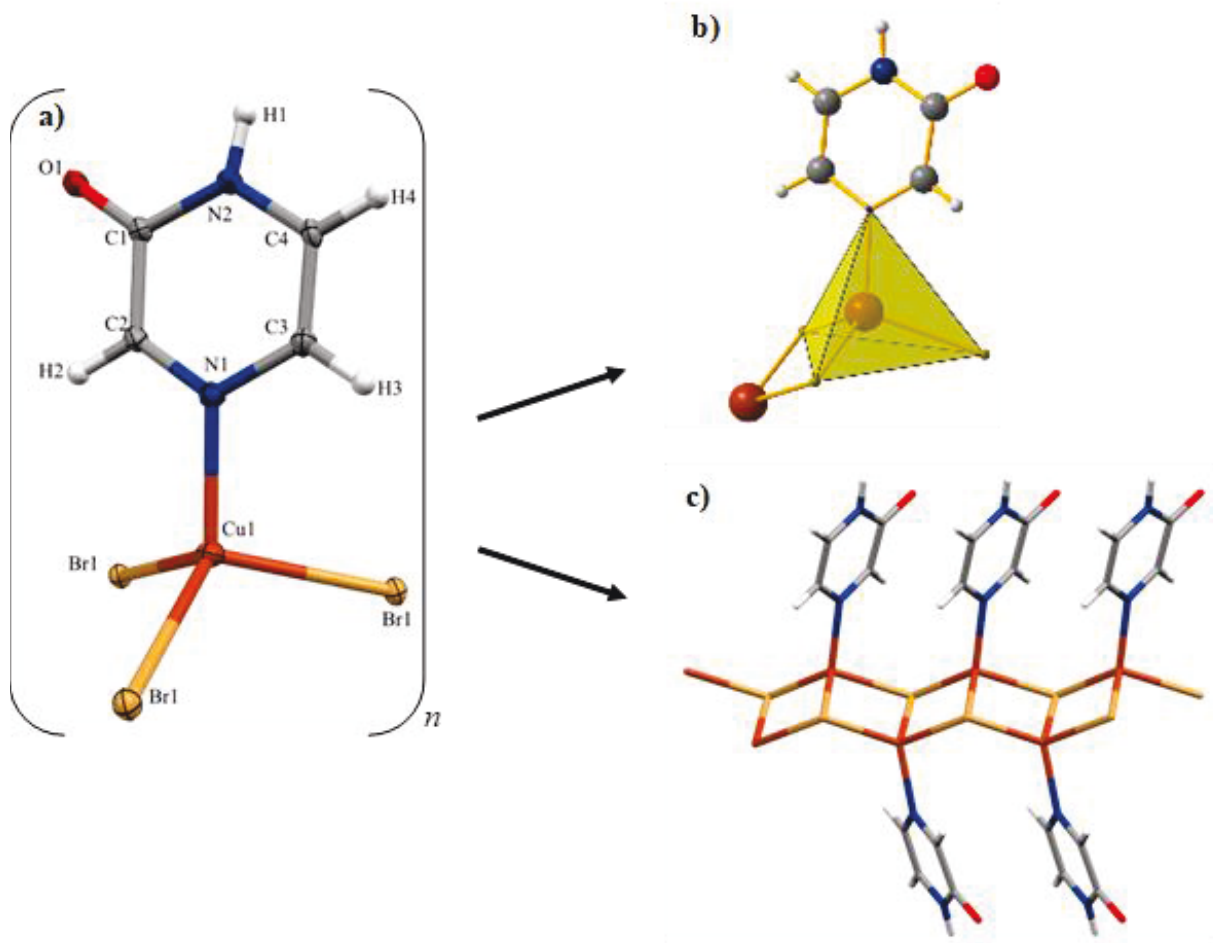


Slika 38. Stabilizacija polimernih lanaca preko slabih $C-H\cdots Cl$ interakcija

4.1.5. Kristalna struktura spoja $[\text{CuBr}(2\text{-pyz})]_n$ (5)

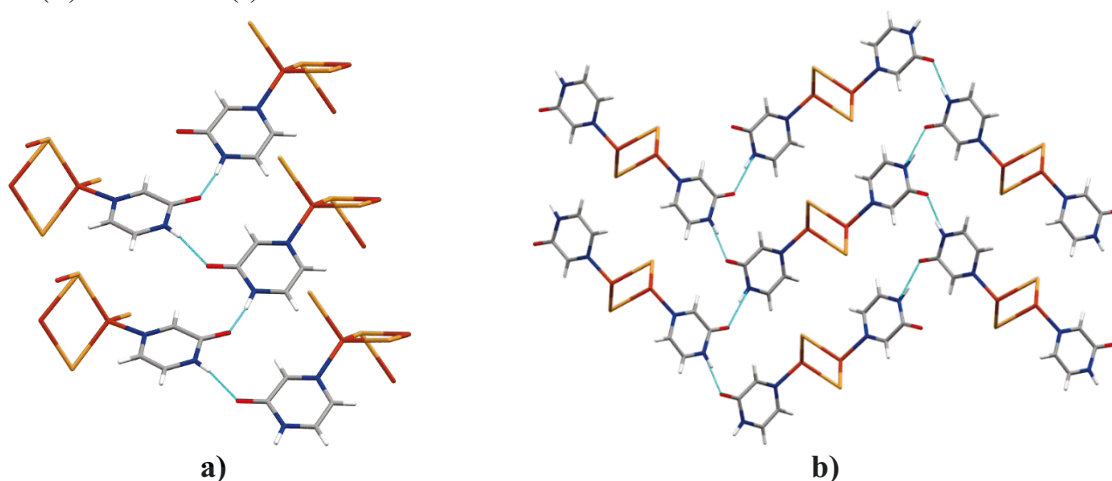
Metodom rendgenske difrakcije u jediničnom kristalu određena je kristalna struktura spoja $[\text{CuBr}(2\text{-pyz})]_n$ (5). Za razliku od spoja 4, spoj 5 kristalizira u rompskom sustavu u prostornoj grupi $P2_12_12_1$. Kristalografski podaci (tablica P2), kao i popis odabranih veznih udaljenosti i kutova (tablica P5) navedeni su u prilogu.

Bakrovi(I) kationi tetraedarski su koordinirani s jednom molekulom liganda pirazin-2-ona i tri bromidna aniona (slika 39a, 39b). Susjedni bakrovi(I) kationi su premošteni preko dvaju aniona bromida te tako povezani stvaraju jednodimenzijski polimerni lanac oblika ljestvi što je prikazano na slici 39c.



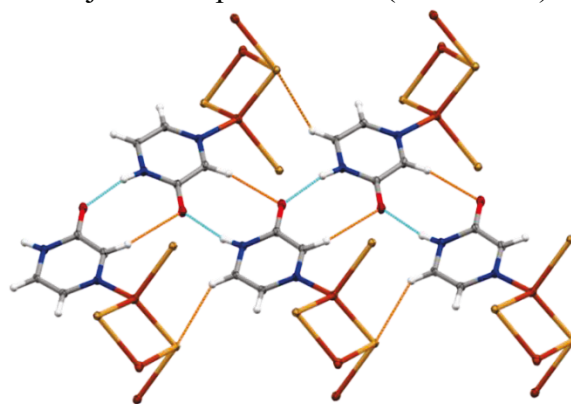
Slika 39. a) ORTEP prikaz monomerne jedinice spoja $[\text{CuBr}(2\text{-pyz})]_n$ (5) s numeriranim atomima. Elipsoidi nevodikovih atoma odgovaraju 30 % vjerojatnosti nalaženja elektronske gustoće
 b) Tetraedarska koordinacija spoja 5
 c) Jednodimenzijski polimerni lanac spoja $[\text{CuBr}(2\text{-pyz})]_n$ (5)

Susjedni polimerni lanci međusobno se povezuju jakim $N-H\cdots O$ vodikovim vezama ostvarenim između laktamskih skupina molekula liganda pritom tvoreći supramolekulski lančasti motiv *graf-set* notacije $C(4)$ (slika 40a). Kao posljedica povezivanja paralelnih lanaca također preko $N-H\cdots O$ vodikovih veza uočen je i sekundarni motiv prstena *graf-set* notacije $R^4_4(28)$ (slika 40b). Iako spojevi bakra(I) nisu od interesa za ovo istraživanje, sa pogleda kristalnog inženjerstva ovaj rezultat je izuzetno važan jer ukazuje na činjenicu da se supramolekulski motiv može „prenijeti“ iz organskih u metalo-organske sustave ne samo bakra(II) već i bakra(I).



Slika 40. a) Ostvarivanje primarnog interakcijskog motiva lanca *graf-set* notacije $C(4)$
b) Ostvarivanje sekundarnog interakcijskog motiva prstena

Polimerni lanci su dodatno stabilizirani slabijim $C-H\cdots Br$ i $C-H\cdots O$ međumolekulskim interakcijama između kloridnog aniona i pirazinonskog prstena susjednih polimernih lanaca (slika 41). U prilogu su navedeni popis vodikovih veza s pripadajućom geometrijom kao i popis pripadajućih operatora simetrije na akceptorski atom (tablica P10).



Slika 41. Stabilizacija polimernih lanaca preko slabijih $C-H\cdots Br$ i $C-H\cdots O$ interakcija

4.2. Analiza magnetskih svojstava spojeva

4.2.1. Mjerenja magnetizacije spojeva $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)

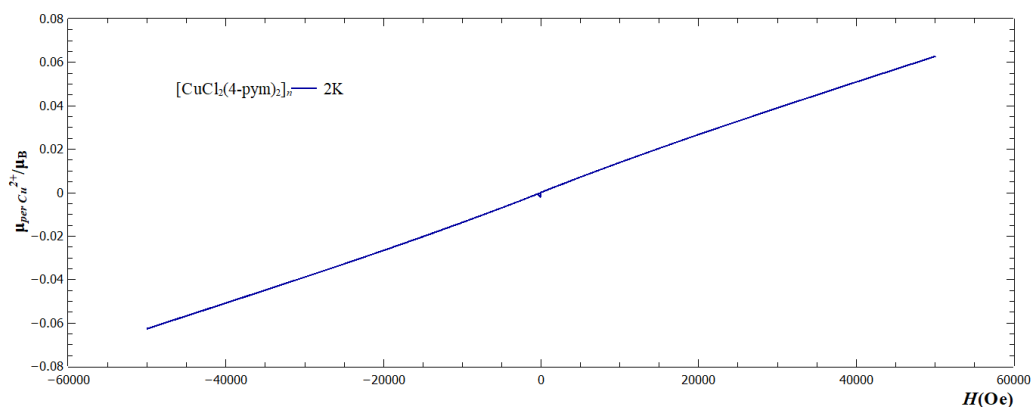
Za spojeve $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2) izmjerena je temperaturna ovisnost magnetizacije pri različitim istosmjernim magnetskim poljima (10, 100, 1000 i 10000 Oe). Također su izmjerene FC (Field Cooled) i ZFC krivulje (Zero Field Cooled). FC su krivulje izmjerene sa uključenim magnetskim poljem prilikom hlađenja i grijanja. Za razliku od njih, ZFC su krivulje izmjerene nakon što je uzorak ohlađen bez polja i potom je uključeno magnetsko polje i mjereno prilikom grijanja. Mjerena je ovisnost magnetizacije o primijenjenom magnetskom polju na različitim temperaturama, pri 5, 10, 20 i 50 K za spoj $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ i pri 10, 20, 30, 50 i 100 K za spoj $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$. Za oba spoja su mjerene histereze na 2 i 5 K. Popis mjerenja naveden je u tablici 12.

Tablica 12. Popis mjerenja magnetskih svojstava spojeva 1 i 2

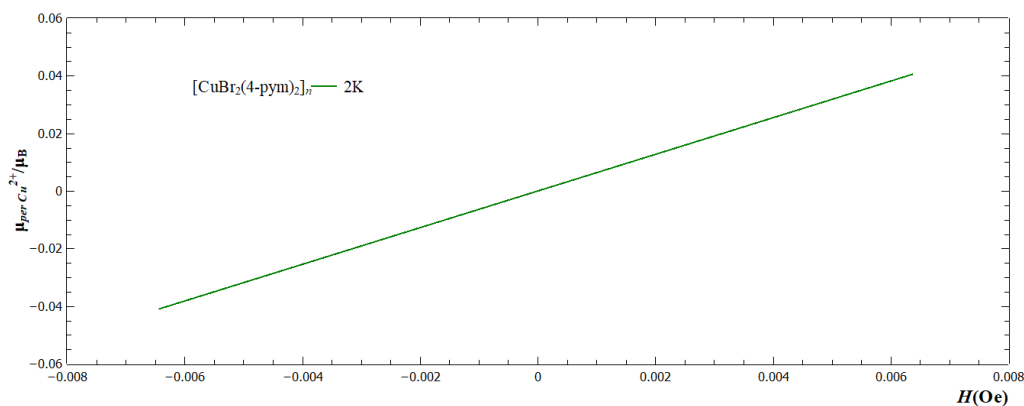
BROJ MJERENJA	$[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1)	$[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)
1.	ZFC, 1000 Oe	FC, 10000 Oe
2.	ZFC i FC, 100 Oe	FC, 1000 Oe
3.	hist, 2K	ZFC i FC, 100 Oe
4.	hist, 5K	hist, 5K
5.	10K	10K
6.	20K	20K
7.	50K	30K
8.	ZFC, 10000 Oe	50K
9.	FC, 1000 Oe	100K
10.	ZFC i FC, 10 Oe	2K
11.		ZFC, 1000 Oe
12.		ZFC i FC, 100 Oe

4.2.2. Analiza i rasprava magnetskih mjerenja spojeva $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)

Za spojeve $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2) mjerena je ovisnost magnetizacije o primjenjenom magnetskom polju pri temperaturama od 2 i 5 K (slika 42). Uočeno je da navedena ovisnost kod oba spoja pokazuje linearno ponašanje što omogućava primjenu teorijskih modela u kojima se magnetska susceptibilnost može definirati kao $\chi_m = \frac{\partial M}{\partial B}$. Također, uočena je mala magnetizacija, a histereze nema što ukazuje na antiiferomagnetski tip uređenja kod oba spoja na niskoj temperaturi. Uočena linearnost svih izmjerenih $M(H)$ do relativno jakih polja omogućava korištenje susceptibilnosti kao dobro definirane fizičke veličine pri svim poljima na kojima je mjerena i modelirana ovisnost $M(T)$. (Slika 42)



a)



b)

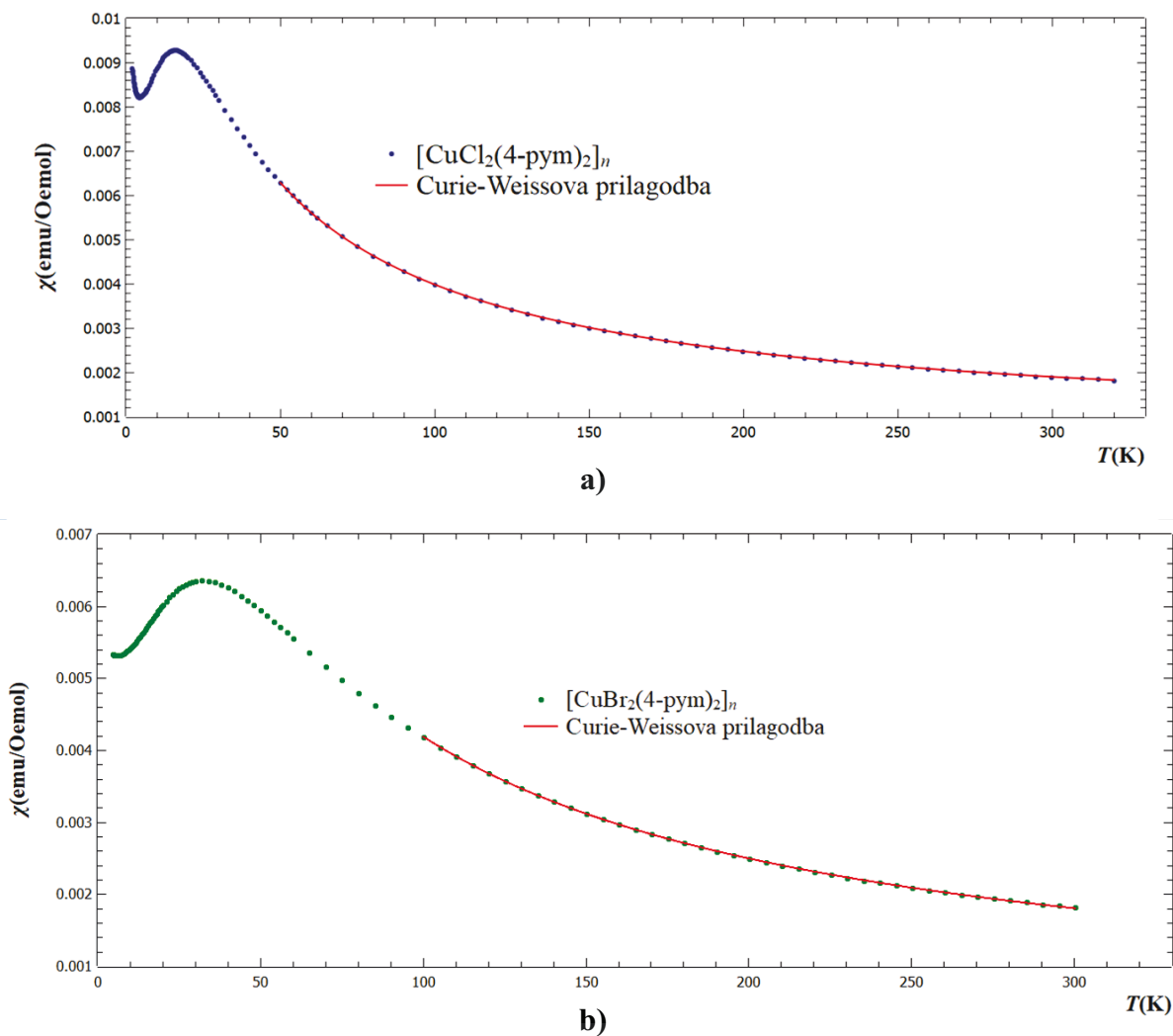
Slika 42. a) Ovisnost $\mu_{\text{per Cu}^{2+}}/\mu_B$ o primjenjenom magnetskom polju pri 2 K za spoj 1

b) Ovisnost $\mu_{\text{per Cu}^{2+}}/\mu_B$ o primjenjenom magnetskom polju pri 2 K za spoj 2

Kod obrade podataka i prilikom proučavanja magnetske susceptibilnosti oba spoja prvotno je korišten Curie-Weissov zakon kojim se je analiziralo paramagnetsko stanje. Prilagodbom na eksperimentalne podatke moguće je dobiti iznos Curieve konstante C i Weissove temperature θ koja prenosi informaciju o tipu vezanja spinova. Prilikom obrade podataka Curie-Weissov zakon je modificiran:

$$\chi = \frac{C}{T-\theta} + \chi_D \quad (2.9)$$

gdje je χ_D dijamagnetski doprinos atoma u spoju u koji je ujedno uključena i konstanta magnetizacije pozadine (slika 43).



Slika 43. a) Curie-Weissova prilagodba za spoj 1
b) Curie-Weissova prilagodba za spoj 2

Prilikom obrade podataka uočeno je da su Weissove temperature negativne za oba spoja, što ukazuje na činjenicu da je $J < 0$, odnosno da spojevi $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) pokazuju antiferomagnetsko ponašanje, tj. antiferomagnetska međudjelovanja superizmjene spinova s okolnim spinovima. Curie-Weissovom prilagodbom, također su dobivene i odgovarajuće Curieove konstante C koje odgovaraju spinu $S = 1/2$ po Cu^{2+} ionu uz g faktore koji su uobičajeni za Cu^{2+} ione u oktaedarskom okruženju, a podatci za oba spoja su navedeni u tablici 13.

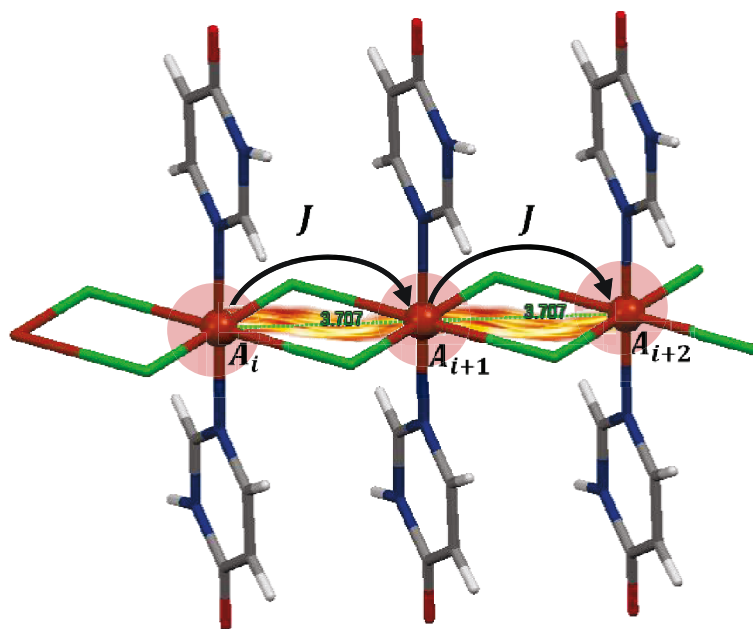
Tablica 13. Parametri dobiveni Curie-Weissovom prilagodbom za spojeve **1** i **2**

spoj	parametri dobiveni Curie-Weissovom prilagodbom			
	$C / \frac{\text{emuK}}{\text{molOe}}$	g	θ/K	$\chi_D / \frac{\text{emu}}{\text{molOe}}$
$[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1)	$0,41 \pm 0,03$	$2,120 \pm 0,003$	$-24,3 \pm 0,2$	$(594 \pm 5) \cdot 10^{-5}$
$[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)	$0,55 \pm 0,01$	$2,44 \pm 0,01$	$-38,5 \pm 0,9$	$(157 \pm 1) \cdot 10^{-5}$

Curie-Weissova prilagodba na eksperimentalne podatke pri visokim temperaturama (100-300K) vrlo dobro opisuje paramagnetsko ponašanje. Kako se približavamo temperaturnom maksimumu međudjelovanje spinova postaje sve jače te nadvladava paramagnetsko ponašanje što je uzrok činjenice da Curie-Weissova prilagodba nije pogodan model za opisivanje područja niskih temperatura. Budući da se Curie-Weissovom prilagodbom ne može opisati cjelokupno magnetsko ponašanje spojeva **1** i **2**, ponašanje magnetske susceptibilnosti u ovisnosti o temperaturi potrebno je objasniti nekim drugim teorijskim modelom.

Kako su spojevi $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) jednodimenzijski polimerni lanci, za pretpostaviti je da bi se magnetsko ponašanje spojeva **1** i **2** moglo opisati kao 1D magnetski lanac, a kako Weissove temperature oba spoja ($\theta < 0$) ukazuju na antiferomagnetska međudjelovanja superizmjene, za očekivati je da će spojevi $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) pokazivati ponašanje antiferomagnetskog spinskog lanca.

U spojevima $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) susjedni bakrovi(II) kationi su premošteni preko dvaju aniona klorida/bromida. Tako povezani stvaraju jednodimenzijski lanac gdje su pritom bakrovi(II) ioni jednako međusobno udaljeni (Cu–Cu vezne udaljenosti za spoj **1**; 3,707 Å, Cu–Cu vezne udaljenosti za spoj **2**; 3,863 Å) i imaju po jedan nespareni elektron. Stoga pretpostavljamo da imaju spin $S = 1/2$. Gore navedene činjenice opisuju najjednostavniji slučaj magnetskog lanca koji se ostvaruje međudjelovanjem energije superizmjene jednako udaljenih bakrovih(II) iona sa spinovima $S_{\text{Cu}} = 1/2$ (slika 44).²⁵



Slika 44. 1D magnetski lanac spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**)

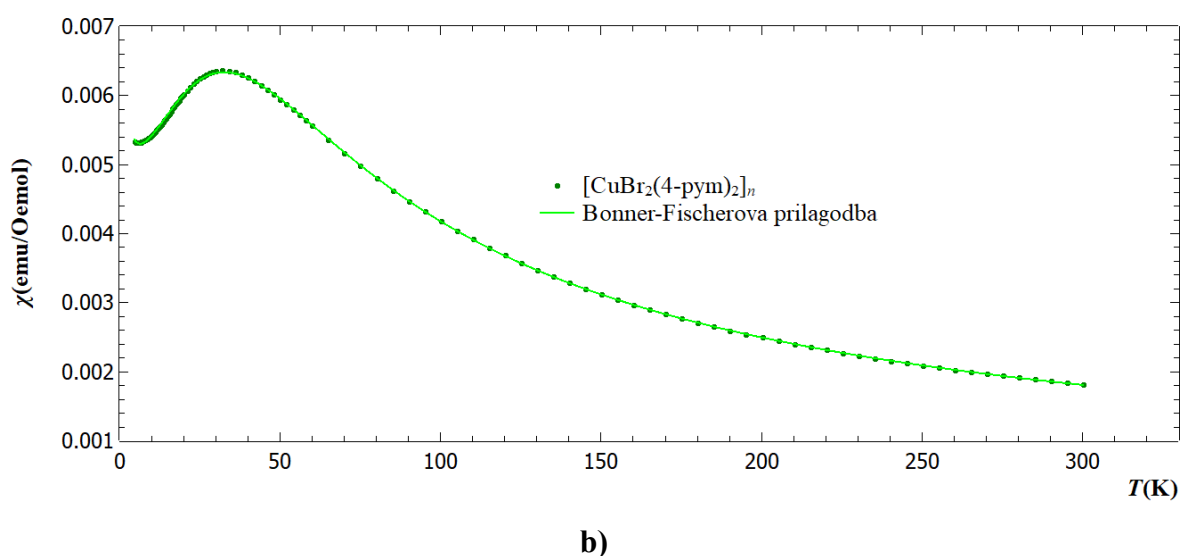
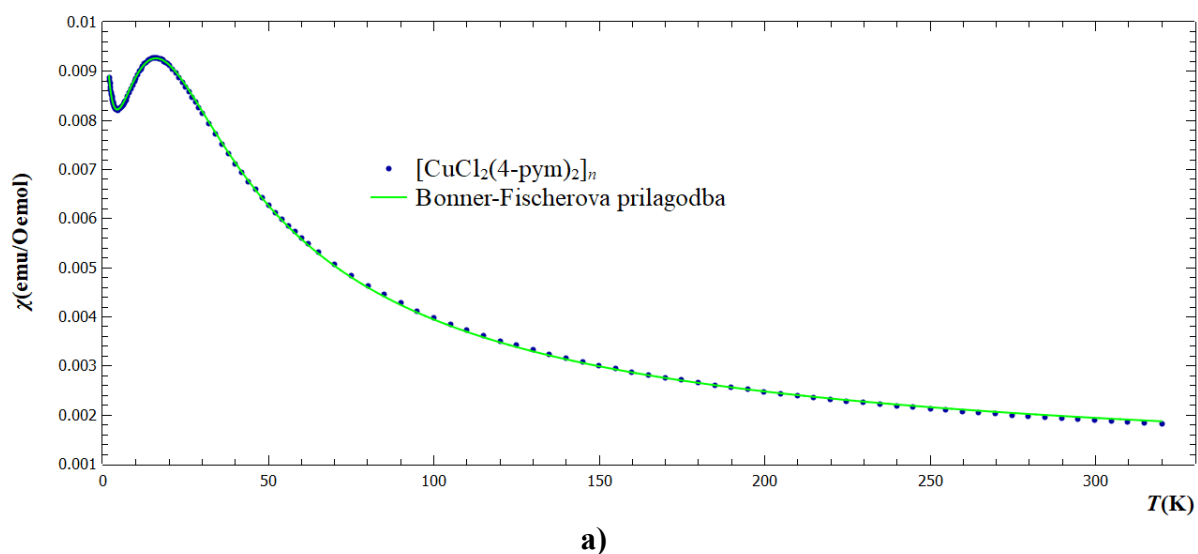
Izotropna interakcija između najbližih susjednih iona bakra(II) se može opisati Heisenbergovim hamiltonijanom (2.1) te sukladno tomu za opisivanje magnetskih svojstava spojeva **1** i **2** korišten je Bonner-Fischerov teorijski model²⁵ u kojem je izraz za magnetsku susceptibilnost sljedeći:

$$\chi_{B-F} = \frac{Ng^2\beta^2}{k_B T} \cdot \frac{0,25 + 0,074975\frac{J}{T} + 0,075235\left(\frac{J}{T}\right)^2}{1,0 + 0,9931\frac{J}{T} + 0,172135\left(\frac{J}{T}\right)^2 + 0,757825\left(\frac{J}{T}\right)^3} \quad (2.10)$$

Prilagodba Bonner-Fischerovog modela na eksperimentalne podatke uključuje dijamagnetski doprinos i doprinos paramagnetskih nečistoća, a prilikom analize podataka magnetske susceptibilnosti $\chi(T)$ korišten je izraz:

$$\chi = \rho \cdot \frac{C}{T} + (1 - \rho)\chi_{B-F} + \chi_D \quad (2.11)$$

gdje je ρ udio paramagnetskih nečistoća koje dolaze od nekoordiniranih bakrovih(II) atoma u kristalnoj strukturi, a χ_D je dijamagnetski doprinos atoma u spoju u koji je ujedno uključena i konstanta magnetizacije pozadine (slika 45). Kao rezultat prilagodbe dopunjenog Bonner-Fischerovog teorijskog modela ustanovljeno je da oba spoja pokazuju ponašanje 1D antiferomagnetskog spinskog lanca (slika 45a i 45b).



Slika 45. a) Bonner-Fischerova prilagodba za spoj 1
b) Bonner-Fischerova prilagodba za spoj 2

U rezultatima temperaturne ovisnosti magnetizacije za oba spoja (slika 45) uočena je prisutnost maksimuma („brijega“) koji je karakterističan za antiferomagnete. Temperatura maksimuma se može očitati sa slike, a za spoj **1** ona iznosi 18 K, dok za spoj **2** ona iznosi 33 K. Nagli pad susceptibilnosti ispod maksimuma je uzrokovan antiparalelnom orijentacijom spinova, a dio krivulje daleko ispod maksimuma na čijem dijelu je magnetska susceptibilnost opet u porastu odgovara prisustvu paramagnetskih nečistoća.

Prilikom modeliranja Bonner-Fischerove prilagodbe uočeno je da je doprinos paramagnetskih nečistoća malen kod oba spoja (1,01 % i 0,64 %) što ukazuje na visoku čistoću sintetiziranih spojeva. Nadalje, iako su g faktori pouzdano dobiveni modeliranjem, oni ponešto odudaraju od vrijednosti koje su uobičajene za Cu^{2+} ione u oktaedarskom okruženju zbog nepreciznosti mjerenja mase i apsolutne kalibracije magnetometra. Također, uočeno je da je energija superizmjene (J) bakrovih(II) iona jača kod spoja **2**, a podatci za oba spoja dobiveni Bonner-Fischerovom prilagodbom navedeni su u tablici 14.

Tablica 14. Parametri dobiveni Bonner-Fischerovom prilagodbom za spojeve **1** i **2**

spoj	parametri dobiveni Bonner-Fischerovom prilagodbom			
	ρ (%)	g	J	$\chi_D / \frac{\text{emu}}{\text{molOe}}$
$[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1)	$1,01 \pm 0,07$	$1,987 \pm 0,002$	$26,05 \pm 0,08$	$(134 \pm 4) \cdot 10^{-5}$
$[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)	$0,645 \pm 0,005$	$2,382 \pm 0,002$	$51,59 \pm 0,06$	$(213 \pm 5) \cdot 10^{-5}$

Za razliku od Curie-Weissove prilagodbe na eksperimentalne podatke koja je opisivala samo paramagnetsko ponašanje, Bonner-Fischerova prilagodba (slika 45) u potpunosti opisuje cjelokupno magnetsko ponašanje spojeva $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**). Razlika u Weissovim temperaturama u korelaciji je s vrijednostima energije superizmjene bakrovih(II) iona u spojevima $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**). Veća Weissova temperatura spoja **2** odgovara većoj vrijednosti energije superizmjene kod spoja **2**.

Pretpostavlja se da u spojevima unutar serije s istim ligandom na različito magnetsko ponašanje utječe vrsta protuiona klora/broma preko kojih su premošteni susjedni bakrovi kationi. Tako su u strukturi spoja **1** vezne udaljenosti (Cu–X, Cu···X, Cu–Cu) kraće nego u strukturi spoja **2** što čini magnetne centre bakra bliže jedni drugima u spoju **1**. Nadalje, u strukturi spoja **1** kut $\angle(\text{Cu–X}\cdots\text{Cu})$ je veći, a kut $\angle(\text{X–Cu}\cdots\text{X})$ manji s obzirom na istoimene kuteve u spoju **2**, što ukazuje na činjenicu da su nasuprotni halogenidni ioni preko kojih su premošteni ioni bakra manje udaljeni u spoju **1** nego u spoju **2**. Odabrane vezne udaljenosti i kutevi prikazani su u tablici 13. Usprkos što su magnetni centri bakra bliži jedni drugima u spoju **1**, iz slike 45 se može uočiti da je antiferomagnetsko međudjelovanje superizmjene unutar spinskog spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) nešto jače od spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**), a pretpostavlja se da je uzrok tome manja elektron odvlačeća moć bromidnog protuiona. Budući da je kloridni ion elektronegativniji te sukladno tome i više odvlači elektronsku gustoću na sebe, na metalnim centrima elektronska gustoća je osiromašena te je na taj način ostvarivanje antiferomagnetskog međudjelovanja spina bakrovih(II) iona s ostalim spinovima slabije što se očituje u činjenici da je $|J_1| < |J_2|$. Za potpunije razumijevanje ove pojave trebalo bi obaviti i detaljne kvantnomehaničke izračune koji izlaze van okvira ovog rada.

Tablica 15. a) Vezne udaljenosti u strukturi spoja **1**
b) Vezne udaljenosti u strukturi spoja **2**

spoj $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1)		spoj $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)	
$d(\text{Cu–X})/\text{\AA}$	2,296	$d(\text{Cu–X})/\text{\AA}$	2,436
$d(\text{Cu}\cdots\text{X})/\text{\AA}$	2,918	$d(\text{Cu}\cdots\text{X})/\text{\AA}$	3,062
$d(\text{Cu–Cu})/\text{\AA}$	3,707	$d(\text{Cu–Cu})/\text{\AA}$	3,863
$d(\text{X}\cdots\text{X})/\text{\AA}$	3,719	$d(\text{X}\cdots\text{X})/\text{\AA}$	3,962
$\angle(\text{Cu–X}\cdots\text{Cu})/^\circ$	89,91	$\angle(\text{Cu–X}\cdots\text{Cu})/^\circ$	88,52
$\angle(\text{X–Cu}\cdots\text{X})/^\circ$	90,19	$\angle(\text{X–Cu}\cdots\text{X})/^\circ$	91,48
a)		b)	

4.3. Difraktogrami praha bakrovih(II) koordinacijskih spojeva

Za potvrdu čistoće i homogenosti pripremljenih uzoraka korištena je difrakcija rendgenskog zračenja u polikristalnom uzorku. Na temelju uspoređenih eksperimentalnih i računatih difraktograma praha možemo zaključiti odgovara li struktura spoja određena metodom difrakcije rendgenskog zračenja u jediničnom kristalu strukturi cijelog uzorka.

Snimljeni su difraktogrami svih polikristalnih uzoraka bakrovih(II) koordinacijskih spojeva priređenih sintezom u otopini te su uspoređeni s računatim difraktogramima. Za spojeve $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) priređene otopinskom sintezom snimljeni difraktogrami praha dobro se slažu s računatima (slike P1 i P2). Osim toga, analiza difraktograma praha $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) sugerira izostrukturnost navedenih spojeva unutar serije s istim ligandom (slika P3). Iz serije s ligandom 2-aminoprazinom snimljen je difraktogram praha za spoj $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (**3**) priređen otopinskom sintezom te se dobro slaže s difraktogramom praha računatim na temelju određene strukture navedenog spoja (slika P4), dok drugi spojevi iz iste serije nisu dobiveni. U seriji s ligandom pirazin-2-onom snimljeni difraktogram praha za spoj $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (**4**) priređen sintezom iz otopine dobro se slaže s računatim difraktogramom praha (slika P5). Difraktogram praha spoja $[\text{CuBr}(2\text{-pyz})]_n$ (**5**) (slika P6) nije uspoređen s računatim difraktogramom s obzirom da navedeni spoj nije od interesa za ovo istraživanje te stoga njegov sintetski postupak nije optimiziran u svrhu pripreve spoja zadovoljavajuće homogenosti i čistoće.

4.4. Termogravimetrijska analiza (TGA)

Za analizu stabilnosti pripremljenih spojeva korištena je termogravimetrijska analiza (TGA). Na temelju gubitka mase spoja pri određenim temperaturama te usporedbom postotka opaženog gubitka mase s masenim udjelima kemijskih vrsta u spoju možemo pretpostaviti najvjerojatnije vrste koje nastaju raspadom spoja. Termogravimetrijske krivulje svih priređenih spojeva pokazuju da se njihov raspad odvija u jednom koraku.

Termogram spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**1**) pokazuje da se spoj raspada endotermno u jednom koraku (232,45 °C) u kojem dolazi do gubitka 40,81% ukupne mase spoja (slika P7). Prema usporedbi eksperimentalne vrijednosti (40,81 %) i računatog masenog udjela (40,27 %) za pretpostaviti je da u ovom koraku dolazi do gubitka jednog atoma klora i jedne molekule liganda pirimidin-4-ona. Ostatak mase (59,19 %) nakon raspada odgovara masi bakrova(I) klorida i jedne molekule liganda pirimidin-4-ona.

Termogram spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (**2**) pokazuje da se spoj počinje raspadati pri temperaturi od 183,63 °C. Termogram spoja **2** pokazuje kontinuirani raspad spoja te se na temelju podataka ne može ništa reći o gubitku ukupne mase spoja (slika P8).

Termogram spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (**3**) pokazuje da se spoj raspada u jednom koraku (265,46 °C) u kojem dolazi do gubitka 59,26 % ukupne mase spoja (slika P9). Prema usporedbi eksperimentalne vrijednosti (59,26%) i računatog masenog udjela (58,59 %) za pretpostaviti je da u ovom koraku dolazi do gubitka dvije molekule liganda 2-aminopirazina. Ostatak mase (40,74%) nakon raspada odgovara masi bakrova(II) klorida.

Termogram spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (**4**) pokazuje da se spoj počinje raspadati pri temperaturi od 224,46 °C. Termogram spoja **4** pokazuje kontinuirani raspad spoja te se na temelju podataka ne može ništa reći o gubitku ukupne mase spoja (slika P8).

4.5. Diferencijalna skenirajuća kalorimetrija (DSC)

U svrhu potvrde čistoće priređenih spojeva korištena je diferencijalna skenirajuća kalorimetrija (DSC). U tablici 12 je prikazana analiza podataka, a uočena je ovisnost smanjenja stabilnosti spoja o Cu–N veznoj udaljenosti. Tako je Cu–N udaljenost u spoju 3 najkraća te je time i najstabilniji. Nadalje, posebno gledajući seriju priređenih spojeva s ligandom pirimidon-4-onom uočeno je povećanje stabilnosti kod bakrovog(II) spoja s klorom. U regiji raspada spojeva, DSC krivulja svih priređenih spojeva, uočen je jedan endoterman signal.

Tablica 16. Temperature raspada priređenih spojeva

spoj	vezna udaljenost Cu–N	temperatura raspada
[CuCl ₂ (4-pym) ₂] _n (1)	2,017 Å	232,45 °C
[CuBr ₂ (4-pym) ₂] _n (2)	2,436 Å	183,63 °C
[CuCl ₂ (2-NH ₂ pz) ₂] _n (3)	2,014 Å	265,46 °C
[CuCl ₂ (2-pyz) ₂] _n (4)	2,051 Å	224,46 °C

5. ZAKLJUČAK

Priredeno je pet novih koordinacijskih spojeva bakra(I) i bakra(II) s derivatima pirazina (pirazin-2-on, 2-pyz) i pirimidina (pirimidin-4-on, 4-pym i 2-aminopirazin, 2-NH₂pz) te kloridnim i bromidnim anionima kao protuionima: [CuCl₂(4-pym)₂]_n (**1**), [CuBr₂(4-pym)₂]_n (**2**), [CuCl₂(2-NH₂pz)₂]_n (**3**), [CuCl₂(2-pyz)₂]_n (**4**) i [CuBr(2-pyz)]_n (**5**). Svim priređenim spojevima određena je kristalna struktura te je ustanovljena oktaedarska koordinacija bakra(II) (**1–4**) i tetraedarska koordinacija bakra(I) (**5**). Spojevi bakra(II) imaju izduženu oktaedarsku koordinaciju koja ukazuje na prisutnost Jahn-Tellerovog efekta ostvarenog preko veznih udaljenosti bakrovih(II) kationa i halogenidnih aniona. Neovisno o oksidacijskom stanju i koordinaciji bakra, u svim priređenim spojevima susjedni bakrovi kationi premošteni su preko aniona klora, odnosno broma te tako povezani stvaraju jednodimenzijske polimerne lanace. Susjedni polimerni lanci međusobno se povezuju jakim N–H···O vodikovim vezama (**1**, **2**, **4** i **5**) između laktamskih skupina molekula liganda odnosno jakim N–H···N interakcijama (**3**) koje se ostvaruju između amino skupine nekoordiniranog pirazinskog dušikovog atoma dviju molekula liganda. Također neovisno o oksidacijskom stanju i koordinaciji bakra, u svim priređenim spojevima ostvaren je primarni supramolekulski lančasti motiv koji se može opisati *graf-set* notacijom C(4). Ustanovljeno je da je supramolekulski motiv lanca C(4) koji je općenito opažen u kristalnim strukturama amida održiv i u metalo-organskoj sredini neovisno o vrsti liganda, oksidacijskom stanju i koordinaciji bakra.

Ovisnost magnetizacije o primjenjenom magnetskom polju pri temperaturama od 2 i 5 K kod oba spoja pokazuje linearno ponašanje što omogućava primjenu teorijskih modela u kojima se magnetska susceptibilnost može definirati kao $\chi_m = \frac{\partial M}{\partial B}$. Curie-Weissova prilagodba na eksperimentalne podatke priređenih spojeva [CuCl₂(4-pym)₂]_n (**1**) i [CuBr₂(4-pym)₂]_n (**2**) dobro opisuje samo paramagnetsko stanje, dok Bonner-Fischerova prilagodba opisuje cjelokupno magnetsko ponašanje antiferomagnetskog spinskog lanca. Antiferomagnetsko međudjelovanje superizmjene bakrovih(II) iona je nešto jače kod spoja **2**, a pretpostavlja se da je uzrok tome manja elektron odvlačeća moć bromidnog protuiona u usporedbi s kloridnim protuionom.

**6. POPIS OZNAKA,
KRATICA I SIMBOLA**

4-pym	pirimidin-4-on
2-pyz	pirazin-2-on
2-NH ₂ pz	2-aminopirazin
1	spoj [CuCl ₂ (4-pym) ₂] _n
2	spoj [CuBr ₂ (4-pym) ₂] _n
3	spoj [CuCl ₂ (2-NH ₂ pz) ₂] _n
4	spoj [CuCl ₂ (2-pyz) ₂] _n
5	spoj [CuBr(2-pyz)] _n
EtOH	etanol
H ₂ O	voda
CuCl ₂ ·2H ₂ O	bakrov(II) klorid dihidrat
CuBr ₂	bakrov(II) bromid
SQUID	eng. <i>superconducting quantum interference device</i>
TGA	termogravimetrijska analiza
DSC	diferencijalna skenirajuća kalorimetrija
vdW	van der Waals

7. POPIS LITERATURE

1. R. G. Desiraju, J.J. Vittall, A. Ramanan, *Crystal Engineering: A Textbook*, World Scientific Publishing Company, Inc., Hackensack, New Jersey, **2011**.
2. a) J. M. Lehn, *Angew Chem Int Ed Engl* **1988**, 27, 89
b) J. M. Lehn, *Angew Chem Int Ed Engl* **1990**, 29, 130
3. R. G. Desiraju, *Crystal Engineering: The Design of Organic Solids*, Elsevier, Amsterdam, **1989**.
4. Christer B. Aakeröy and Kenneth R. Seddon, *Chem. Soc. Rev.* **1993**, 22, 397 – 407
5. K. Ariga, T. Kunitake, *Supramolecular chemistry – Fundamentals and Application*, Springer
6. H. Dodziuk, *Introduction to Supramolecular Chemistry*, Kluwer Academic Publishers
7. Jean–Mari Lehn, *Supramolecular chemistry; Concepts and Perspectives*, **1995**.
8. D. Grdenić, *Molekule i kristali*, Školska knjiga, Zagreb, **2005**.
9. J. W. Steed, J. L. Atwood, *Supramolecular Chemistry*, John Wiley and Sons, Wiltshire, UK, **2009**.
10. G. R. Desiraju, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1995**, 34, 2311-2327
11. M. C. Etter, *Acc. Chem. Res* **1990**, 23, 120
12. J. Bernstein, R. E. Davis, L. Shimoni, N.-L. Chang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1995**, 34, 1555-1573
13. G. A. Jeffrey and W. Saenger, *Hydrogen Bonding in Biological Structures*, Springer–Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, **1991**.
14. (a) L. Leiserowitz and A. T. Hagler, *Proc. Soc. R. London, Ser. A* **1983**, 388, 133
(b) S. S. Kuduva, D. Bläser, R. Boese and G. R. Desiraju, *J. Org. Chem.* **2001**, 66, 1621
15. Christer B. Aakeröy, Benjamin M. T. Scott and John Desper, *New J. Chem.* **2007**, 31, 2044-2051
16. C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot and S. C. Ward, *Acta Cryst.* **2016**, B72, 171-179
17. I. J. Bruno, J. C. Cole, P. R. Edgington, M. Kessler, C. F. Macrae, P. McCabe, J. Pearson and R. Taylor, *Acta Cryst.* **2002**, B58, 389-397.
18. C. F. Macrae, I. J. Bruno, J. A. Chisholm, P. R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, L. Rodriguez-Monge, R. Taylor, J. van de Streek and P. A. Wood, *J. Appl. Cryst.* **2008**, 41, 466-470

19. S. G. Wilkinson, R. D. Gillard, J. A. McCleverty, *Comprehensive coordination chemistry; The synthesis, Reactions and Applications of Coordination Compounds*, Pergamon Press, Vol. 5., **1987**.
20. M. Herak, *Utjecaj ligandnog okruženja i dimenzionalnosti kristalne rešetke na magnetsku anizotropiju iona 3d prijelaznih metala*, disertacija, Zagreb, **2009**.
21. M. Ali Omar, *Elementary Solid State Physics; Principles and Applications*, Pearson, **1999**.
22. Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, *Solid state physics*, Saunders College Publishing, Horcourt Brace College Publishers, **1976**.
23. C. Kittel, *Uvod u fiziku čvrstog stanja*, Savremena administracija, Beograd, **1970**.
24. S. N. Herringer, A. J. Longendyke, M. M. Turnbull, C. P. Landee, J. L. Wikaira, G. B. Jameson, S. G. Telfer, *Dalton Trans.* **2010**, 39, 2785-2797
25. O. Kahn, *Molecular magnetism*, Wiley-VCH, **1992**.
26. STARe Software v.9.01., MettlerToledo GmbH, **2006**.
27. Oxford Diffraction, Xcalibur CCD System, CrysAlis, Version 171.31, Oxford Diffraction Ltd., **2004**.
28. G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr.* **2015**, A71, 3-8 (SHELXT)
29. G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr.* **2008**, A64, 112-122 (SHELXL)
30. <http://www.crystalimpact.com/diamond>
31. <https://www.qtiplot.com> (24. srpnja 2017.)

8. PRILOZI

8.1. Kristalografske tablice

Tablica P1. Kristalografski podaci za spojeve 1 i 2

spoj	[CuCl ₂ (4-pym) ₂] _n (1)	[CuBr ₂ (4-pym) ₂] _n (2)
molekulska formula	C ₈ H ₈ CuCl ₂ N ₂ O ₂	C ₈ H ₈ CuBr ₂ N ₂ O ₂
relativna molekulska masa	298,60	387,52
prostorna grupa	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>
kristalni sustav	monoklinski	monoklinski
<i>a</i> / Å	3,7072(5)	3,8635(3)
<i>b</i> / Å	21,773(2)	21,9252(13)
<i>c</i> / Å	7,0557(7)	7,1064(4)
<i>α</i> / °	90	90
<i>β</i> / °	93,499(10)	92,855(6)
<i>γ</i> / °	90	90
<i>V</i> / Å ³	568,46(11)	601,22(7)
<i>Z</i>	2	2
<i>R</i> ; <i>wR</i>	0,0802; 0,1915	0,0402; 0,0832

Tablica P2. Kristalografski podaci za spojeve 3, 4 i 5

spoj	[CuCl ₂ (2-NH ₂ pz) ₂] _n (3)	[CuCl ₂ (2-pyz) ₂] _n (4)	[CuBr(2-pyz)] _n (5)
molekulska formula	C ₄ H ₅ CuCl ₂ N ₃	C ₈ H ₈ CuCl ₂ N ₄ O ₂	C ₄ H ₄ CuBr ₂ N ₂ O
relativna molekulska masa	229,55	326,62	319,45
prostorna grupa	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	<i>P</i> 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
kristalni sustav	monoklinski	monoklinski	rompski
<i>a</i> / Å	3,7480(6)	3,7372(7)	3,93712(13)
<i>b</i> / Å	18,727(3)	7,6877(8)	7,4374(3)
<i>c</i> / Å	8,3309(9)	19,716(2)	21,4624(9)
<i>α</i> / °	90	90	90
<i>β</i> / °	92,334(12)	94,822(15)	90
<i>γ</i> / °	90	90	90
<i>V</i> / Å ³	584,25(15)	564,44(13)	628,46(4)
<i>Z</i>	4	2	8
<i>R</i> ; <i>wR</i>	0,0688; 0,1109	0,0409; 0,0830	0,0203; 0,0598

Tablica P3. a) Vezne udaljenosti u strukturi spoja 1

b) Vezne udaljenosti u strukturi spoja 2

spoj [CuCl ₂ (4-pym) ₂] _n (1)	
kemijska veza	<i>d</i> / Å
Cu1–N2	2,017(6)
Cu1–Cl1	2,2962(19)
N2–C4	1,320(9)
N2–C3	1,380(11)
N1–C4	1,330(10)
N1–C1	1,374(12)
N1–H1	0,86(2)
O1–C1	1,252(10)

a)

spoj [CuBr ₂ (4-pym) ₂] _n (2)	
kemijska veza	<i>d</i> / Å
Cu1–N2	2,023(3)
Cu1–Br1	2,4360(4)
N2–C4	1,303(5)
N2–C3	1,386(5)
N1–C4	1,334(5)
N1–C1	1,392(6)
N1–H1	0,85(2)
O1–C1	1,227(6)

b)

Tablica P4. a) Vezne udaljenosti u strukturi spoja 3

b) Vezne udaljenosti u strukturi spoja 4

spoj [CuCl ₂ (2-NH ₂ pz) ₂] _n (3)	
kemijska veza	<i>d</i> / Å
Cu1–N3	2,015(6)
Cu1–Cl1	2,286(2)
N3–C2	1,316(9)
N3–C3	1,359(8)
N2–C4	1,321(9)
N2–C1	1,341(9)
N1–C1	1,334(10)
N1–H1A	0,87(2)
N1–H1B	0,86(2)

a)

spoj [CuCl ₂ (2-pyz) ₂] _n (4)	
kemijska veza	<i>d</i> / Å
Cu1–N2	2,051(2)
Cu1–Cl1	2,2773(8)
N2–C2	1,300(4)
N2–C3	1,372(4)
O1–C1	1,237(4)
N1–C4	1,353(4)
N1–C1	1,355(4)
N1–H1	0,826(18)

b)

Tablica P5. Vezne udaljenosti u strukturi spoja 5

spoj [CuBr(2-pyz)] _n (5)			
kemijska veza	<i>d</i> / Å	kemijska veza	<i>d</i> / Å
Cu1–Br1	2,4259(6)	N2–C2	1,315(5)
Cu1–Br1	2,5270(6)	N2–C3	1,367(5)
Cu1–Br1	2,5557(7)	O1–C1	1,251(5)
Cu1–N2	2,021(3)	N1–H1	0,88(2)
Cu1–Cu1	2,9241(7)		

Tablica P6. Geometrija vodikovih veza u kristalnoj strukturi spoja 1

spoj [CuCl ₂ (4-pym) ₂] _n (1)					
Vodikova interakcija	<i>d</i> (D–H)/Å	<i>d</i> (H···A)/Å	<i>d</i> (D···A)/Å	∠(D–H···A)/°	Simetrija na A
C3–H3···Cl1	0,93	2,95	3,590(8)	126,8	<i>x</i> , <i>y</i> , <i>z</i> + 1
C2–H2···Cl1	0,93	2,87	3,543(9)	130,0	<i>x</i> , <i>y</i> , <i>z</i> + 1
N1–H1···O1	0,86(2)	1,96(3)	2,807(10)	167(10)	<i>x</i> + $\frac{1}{2}$, <i>–y</i> + $\frac{1}{2}$, <i>z</i> – $\frac{1}{2}$

Tablica P7. Geometrija vodikovih veza u kristalnoj strukturi spoja 2

spoj [CuBr ₂ (4-pym) ₂] _n (2)					
Vodikova interakcija	<i>d</i> (D–H)/Å	<i>d</i> (H···A)/Å	<i>d</i> (D···A)/Å	∠(D–H···A)/°	Simetrija na A
C3–H3···Br1	0,93	2,94	3,649(4)	134,0	<i>–x</i> + 1, <i>–y</i> + 1, <i>–z</i>
C2–H2···Br1	0,93	3,13	3,734(5)	124,6	<i>–x</i> + 1, <i>–y</i> + 1, <i>–z</i>
N1–H1···O1	0,85(2)	2,00(3)	2,791(5)	154(5)	<i>x</i> – $\frac{1}{2}$, <i>–y</i> + $\frac{3}{2}$, <i>z</i> + $\frac{1}{2}$

Tablica P8. Geometrija vodikovih veza u kristalnoj strukturi spoja 3

spoj [CuCl ₂ (2-NH ₂ pz) ₂] _n (3)					
Vodikova interakcija	<i>d</i> (D–H)/Å	<i>d</i> (H···A)/Å	<i>d</i> (D···A)/Å	∠(D–H···A)/°	Simetrija na A
C4–H4···Cl1	0,93	2,85	3,783(9)	179,3	$-x + 1, -y + 1, -z + 2$
N1–H1A···N2	0,87(2)	2,23(3)	3,070(10)	164(8)	$x + \frac{1}{2}, -y + \frac{1}{2}, z - \frac{1}{2}$
N1–H1B···Cl1	0,86(2)	2,57(4)	3,388(9)	157(8)	$-x + \frac{3}{2}, y - \frac{1}{2}, -z + \frac{3}{2}$

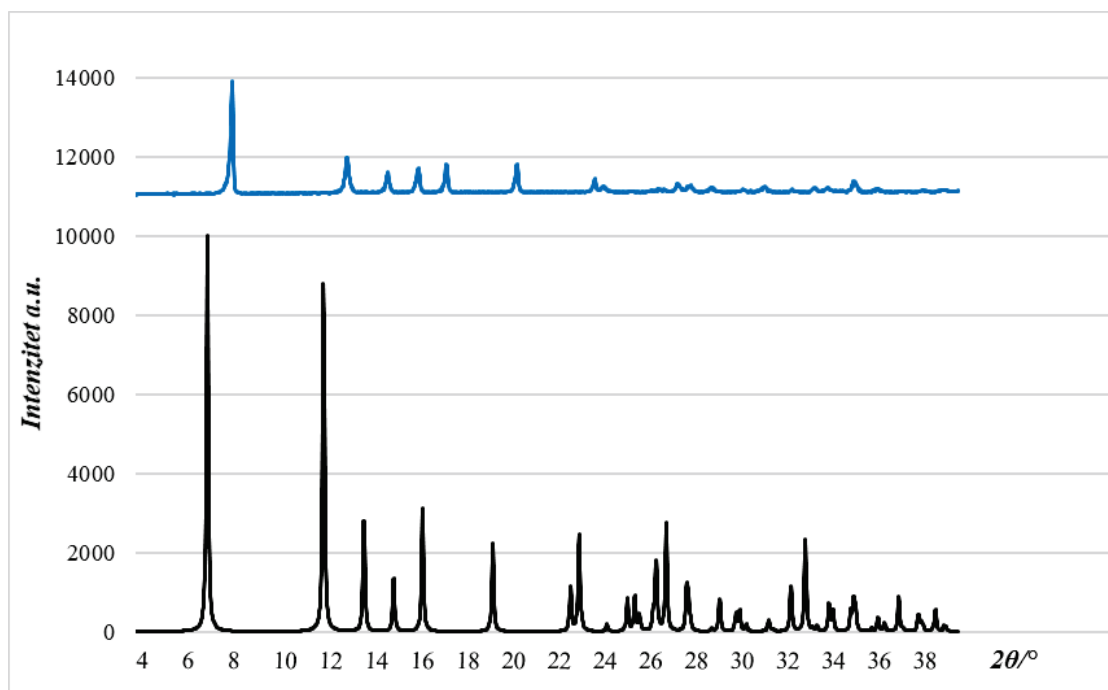
Tablica P9. Geometrija vodikovih veza u kristalnoj strukturi spoja 4

spoj [CuCl ₂ (2-pyz) ₂] _n (4)					
Vodikova interakcija	<i>d</i> (D–H)/Å	<i>d</i> (H···A)/Å	<i>d</i> (D···A)/Å	∠(D–H···A)/°	Simetrija na A
C4–H4···Cl1	0,93	2,64	3,483(3)	151,0	$x, y + 1, z$
N1–H1···O1	0,826(18)	1,91(2)	2,706(3)	162(4)	$-x + \frac{3}{2}, y + \frac{1}{2}, -z + \frac{1}{2}$

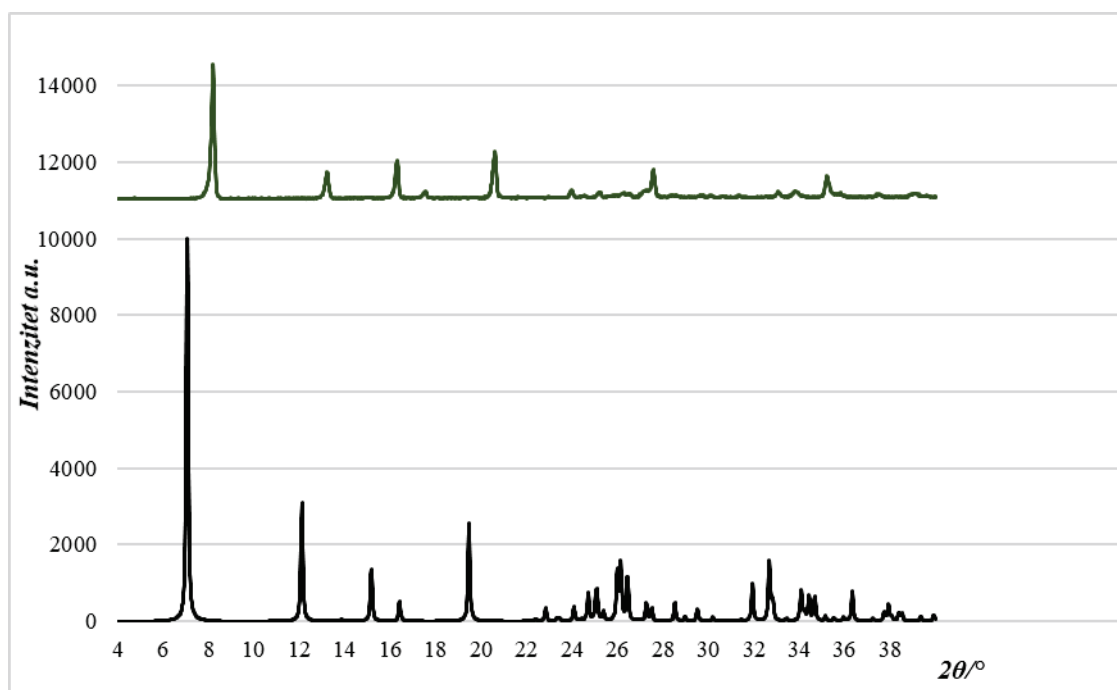
Tablica P10. Geometrija vodikovih veza u kristalnoj strukturi spoja 5

spoj [CuBr(2-pyz)] _n (5)					
Vodikova interakcija	<i>d</i> (D–H)/Å	<i>d</i> (H···A)/Å	<i>d</i> (D···A)/Å	∠(D–H···A)/°	Simetrija na A
C3–H3···Br1	0,93	3,14	3,647(4)	116,4	$x - \frac{1}{2}, -y + \frac{1}{2}, -z$
C2–H2···O1	0,93	2,66	3,520(5)	154,6	$-x - 1, y - \frac{1}{2}, -z + \frac{1}{2}$
C4–H4···Br1	0,93	2,92	3,667(4)	138,3	$x, y + 1, z$
N1–H1···O1	0,88(2)	1,88(3)	2,717(4)	158(4)	$-x - 1, y + \frac{1}{2}, -z + \frac{1}{2}$

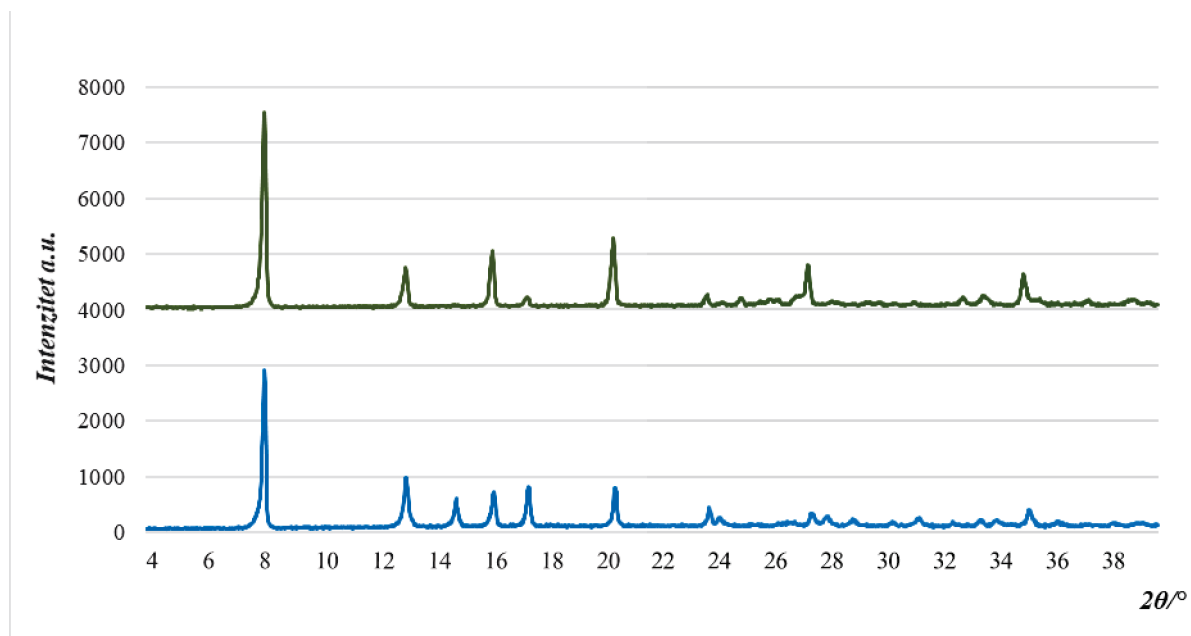
8.2. Difraktogrami praha



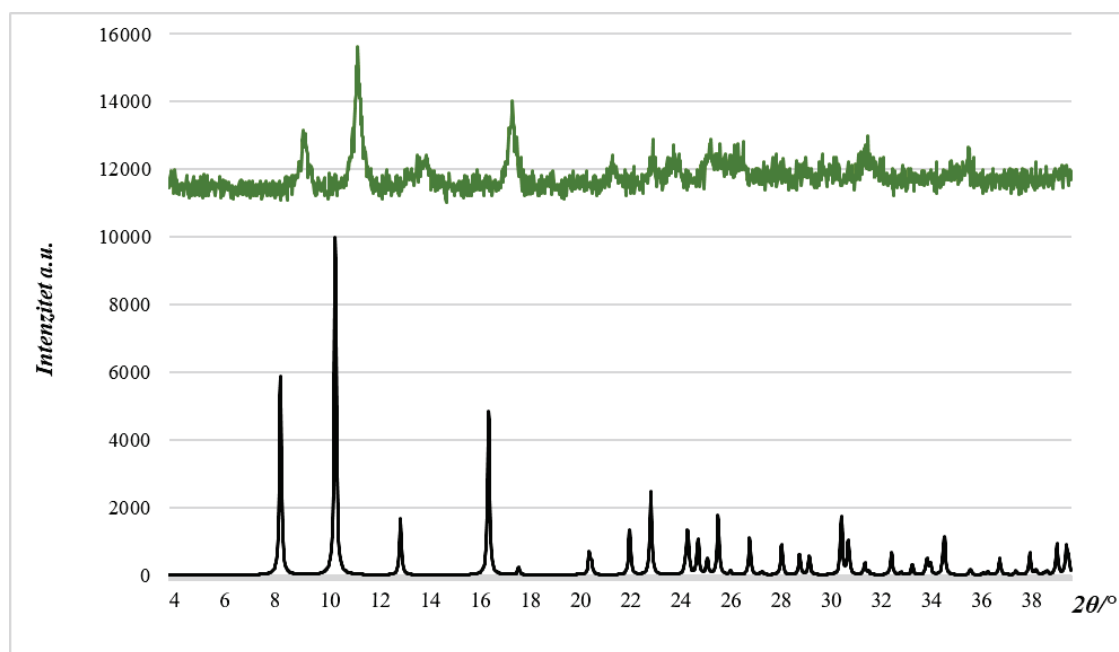
Slika P1. Uspoređeni difraktogrami praha spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1) - računati (crni) i eksperimentalni (polikristalni produkt priređen otopinskom sintezom, plavi)



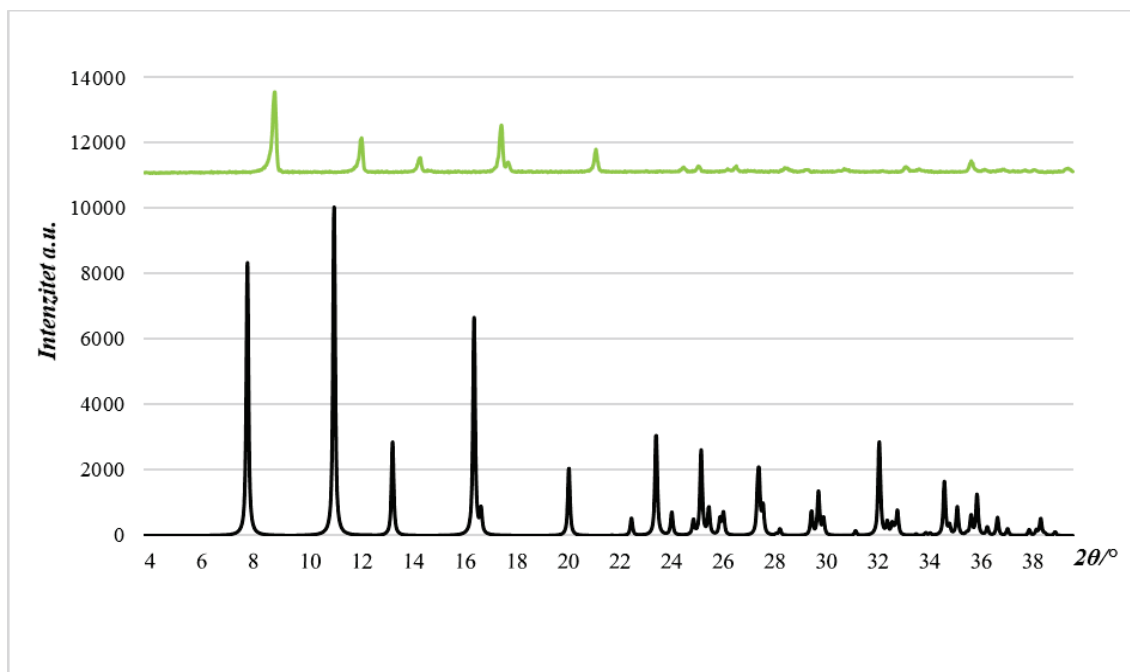
Slika P2. Uspoređeni difraktogrami praha spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2) - računati (crni) i eksperimentalni (polikristalni produkt priređen otopinskom sintezom, zeleni)



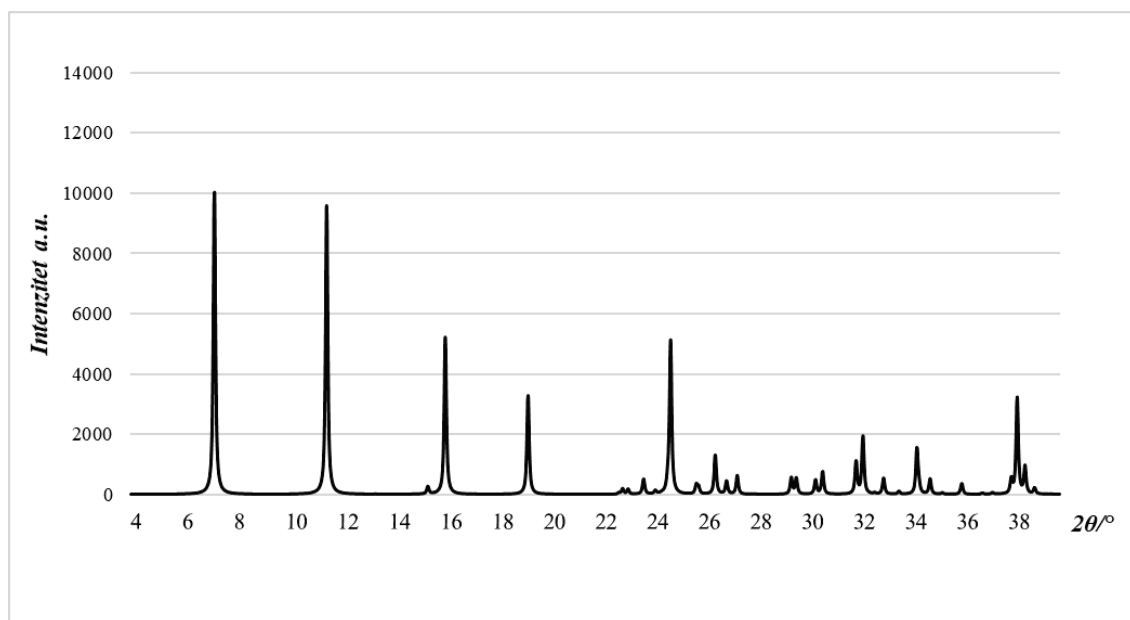
Slika P3. Uspoređeni difraktogrami praha spojeva $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1) i $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)



Slika P4. Uspoređeni difraktogrami praha spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3) - računati (crni) i eksperimentalni (polikristalni produkt priređen otopinskom sintezom, zeleni)

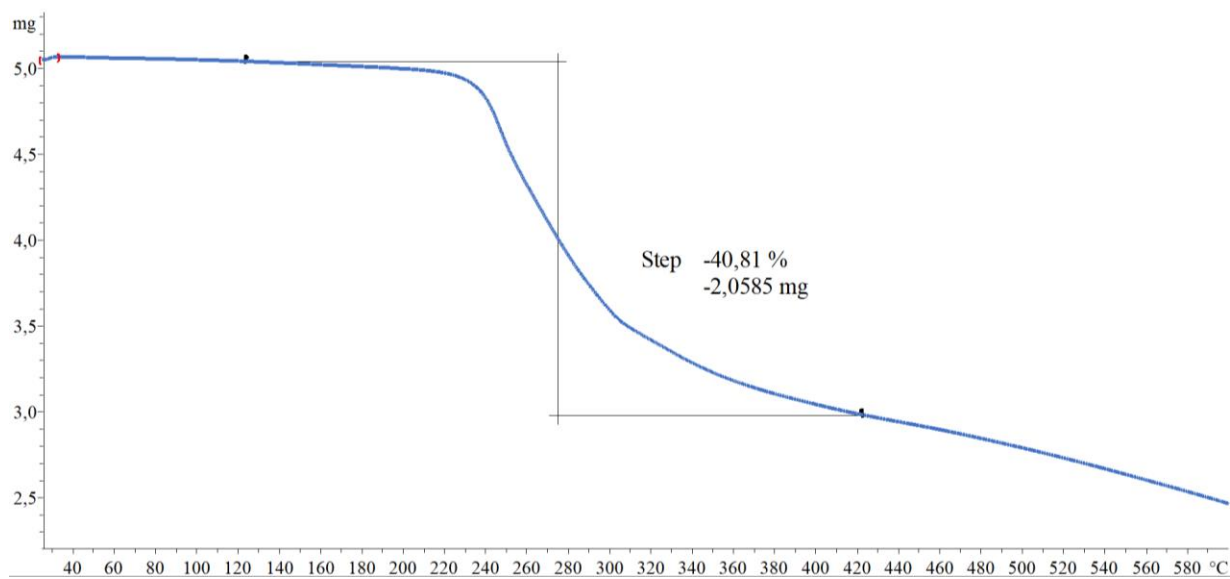


Slika P5. Uspoređeni difraktogrami praha spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (4) - računati (crni) i eksperimentalni (polikristalni produkt priređen otopinskom sintezom, zeleni)

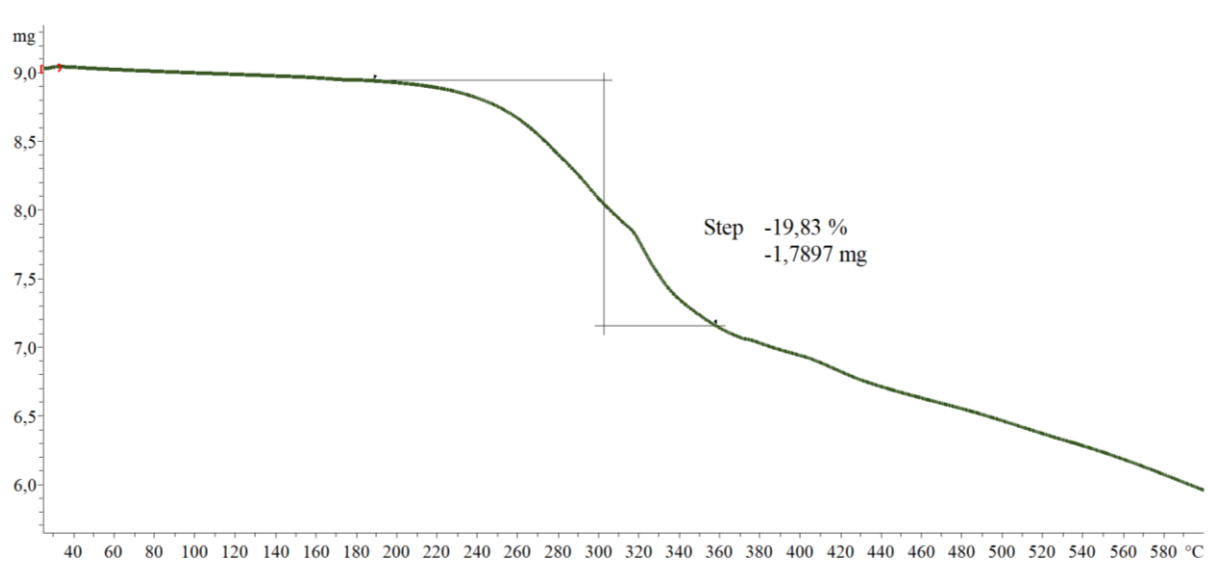


Slika P6. Difraktogram spoja $[\text{CuBr}(2\text{-pyz})]_n$ (5) - računati

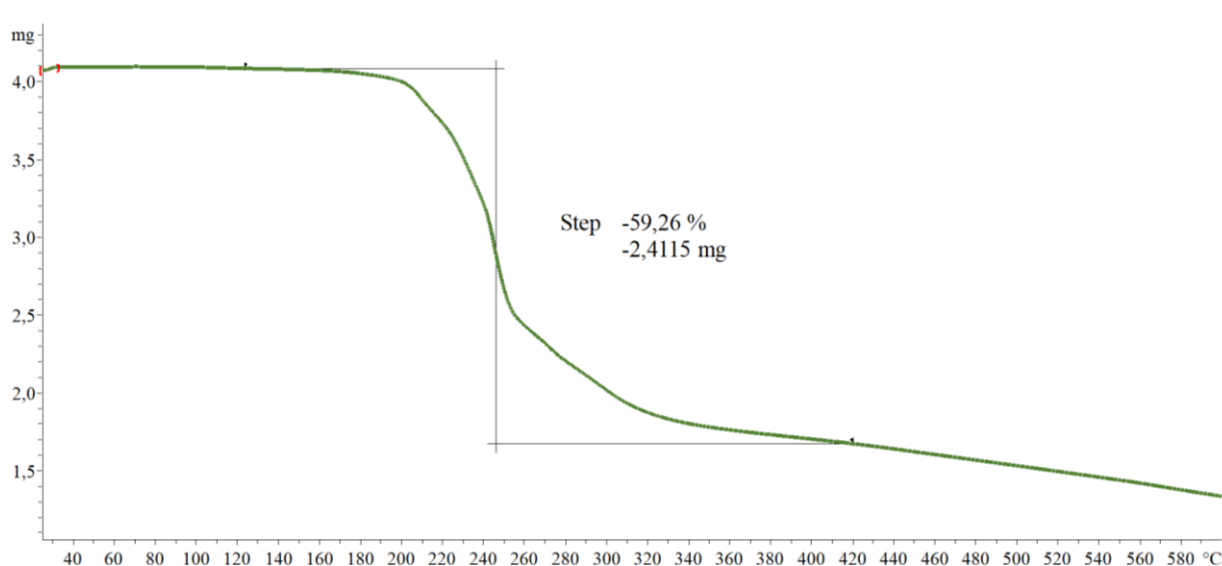
8.3. Termogravimetrijska analiza



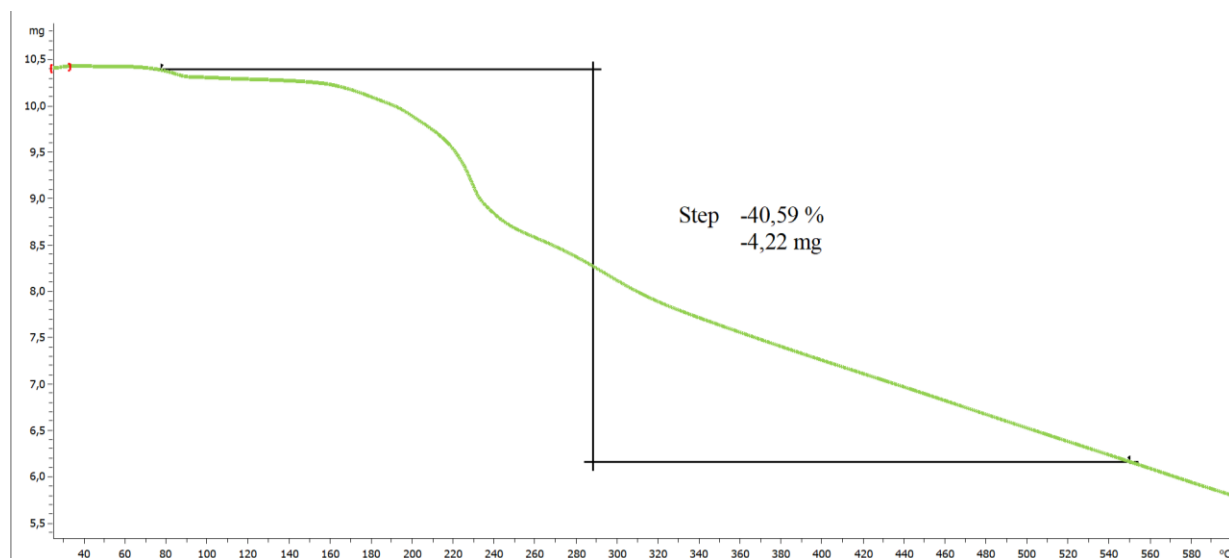
Slika P7. Termogravimetrijska krivulja spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1)



Slika P8. Termogravimetrijska krivulja spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)

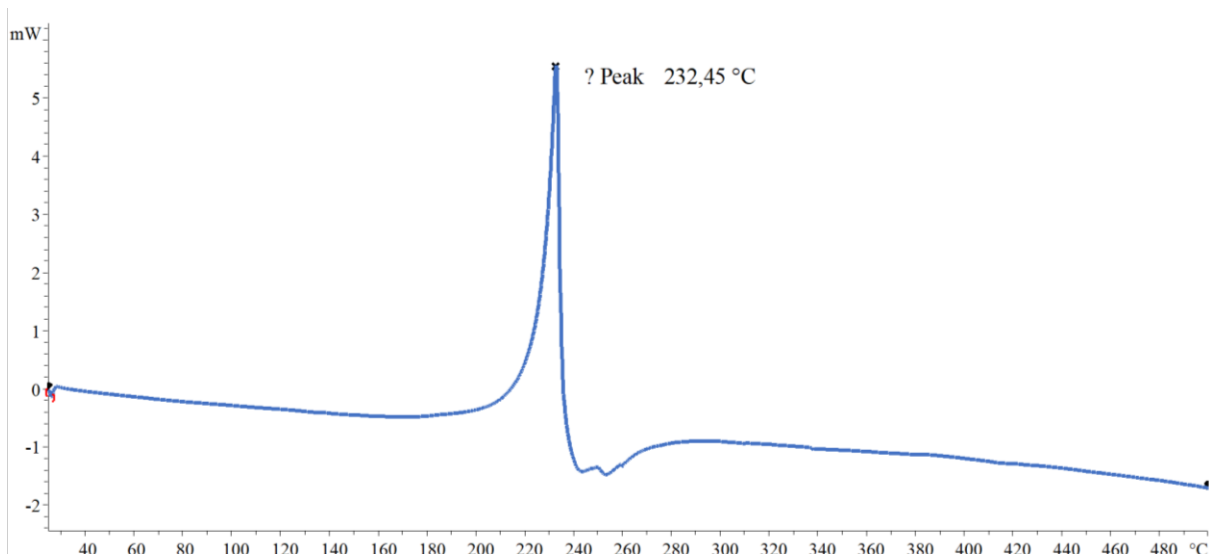


Slika P9. Termogravimetrijska krivulja spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3)

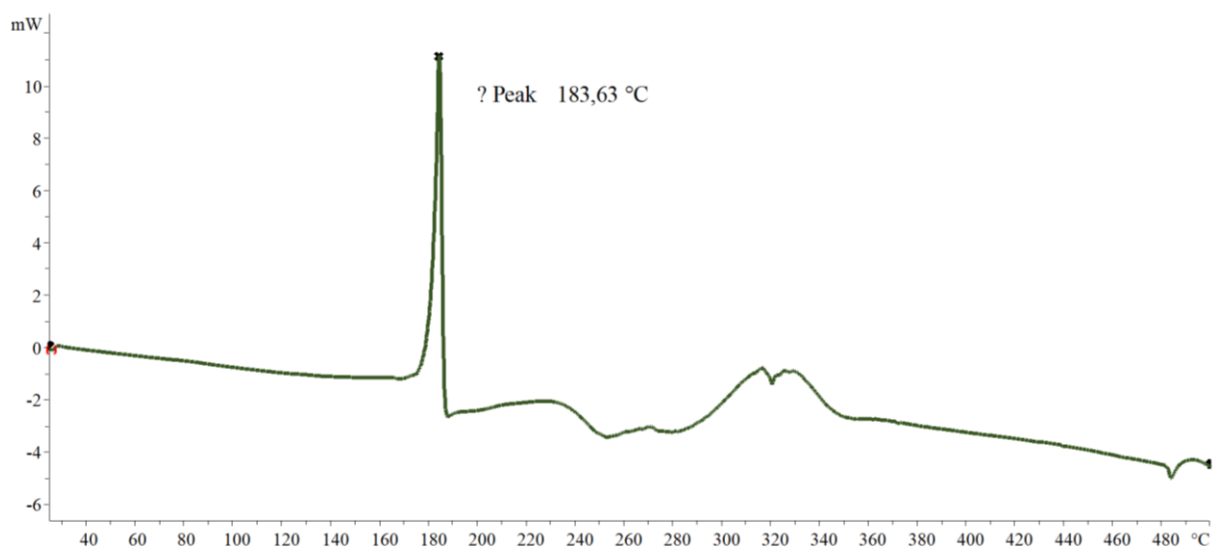


Slika P10. Termogravimetrijska krivulja spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (4)

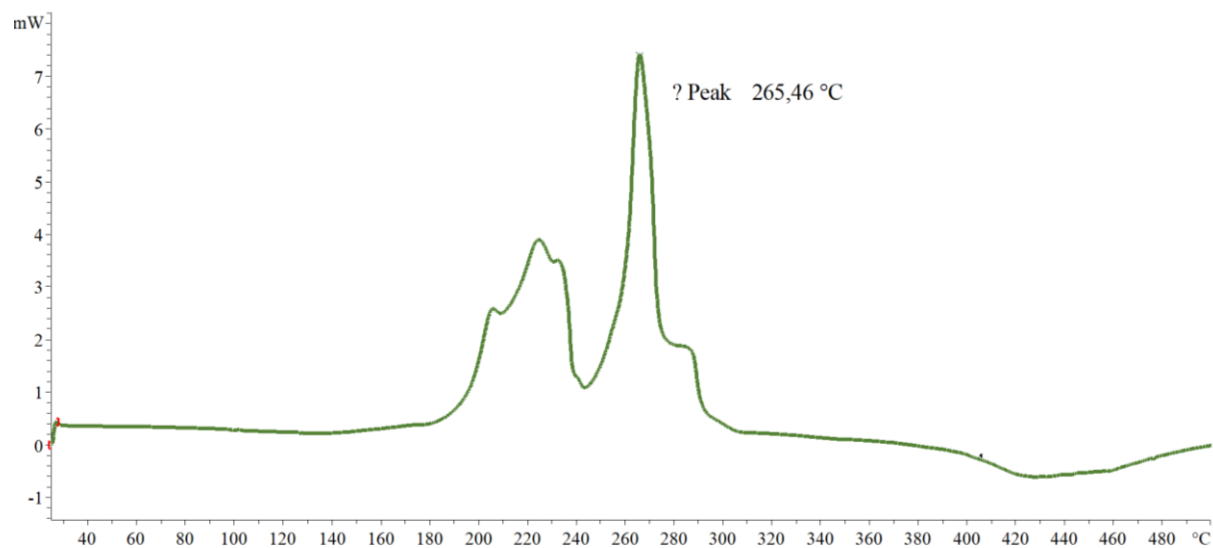
8.4. Diferencijalna skenirajuća kalorimetrija



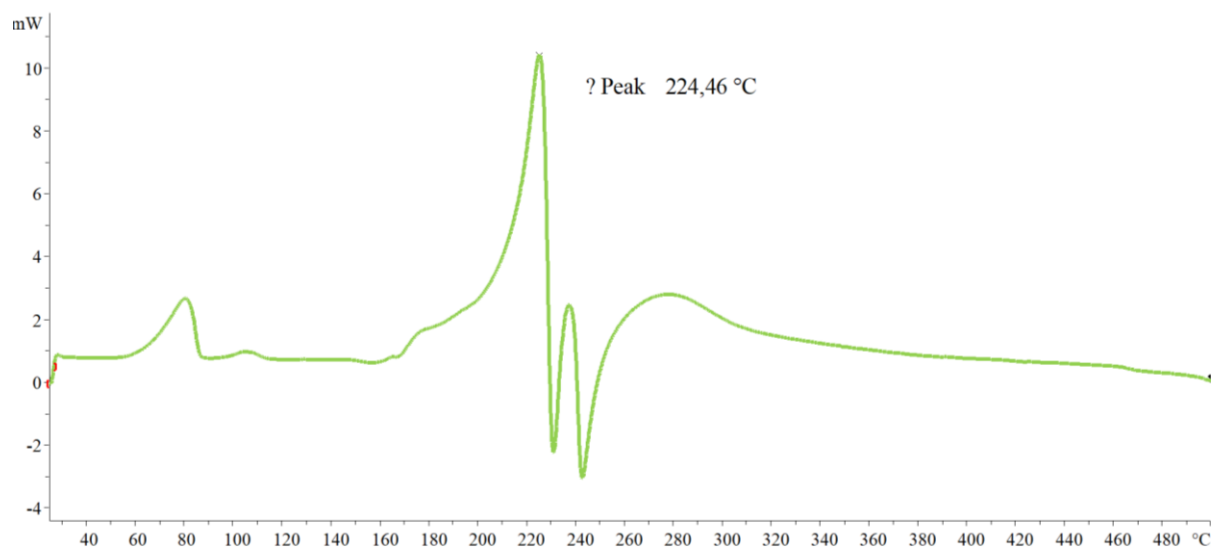
Slika P11. DSC krivulja spoja $[\text{CuCl}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (1)



Slika P12. DSC krivulja spoja $[\text{CuBr}_2(4\text{-pym})_2]_n$ (2)



Slika P13. DSC krivulja spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-NH}_2\text{pz})_2]_n$ (3)



Slika P14. DSC krivulja spoja $[\text{CuCl}_2(2\text{-pyz})_2]_n$ (4)

METODIČKI DIO

Valencija – temeljni kemijski pojam

1. UVOD

“Od svih koncepata u modernoj kemiji, koncept valencija je jedan od najtemeljnijih” je navod profesora Colina Russella s kojim bi se i danas mnogi kemičari ili povjesničari znanosti složili. Međutim, iako temeljan, povijest tog pojma je izuzetno složena jer usprkos raznim studijima s različitim pogledima na valenciju, teško se može kronološki govoriti o razvoju koncepta valencije kao cjeline. Iako je povijest pojma valencija literaturno bogata, ta povijest je osim površnih uvodnih “povijesnih” poglavlja koji se javljaju u standardnim monografijama o valenciji, samo u rijetkim knjigama revidirana kronološki. Osim nedostataka kronološkog razvoja pojma valencija, još dan danas na pitanje tko je otkrio valenciju ne može se izravno odgovoriti. Budući da je razvoj pojma valencija trajao cijelo jedno stoljeće, ideja o sposobnosti vezanja atoma kemijskih elementa s točno određenim brojem atoma nekog drugog elementa kroz povijest se protezala kroz razne teorije (dualističku, radikalnu, susptitucijsku), a predstavljala je glavni problem znanosti 19. i 20. stoljeća. Taj problem je bio sve samo ne jednostavan, jer je sa sobom povlačio druge temeljne pojmove, kao što su zakon o volumnom omjeru, zakon o očuvanju mase i vrste kemijskog vezivanja. Upravo zbog dugog razvoja pojma valencija, nedostatka kronologije i svoje kompleksnosti, pojam valencija pripada jednoj od najvećih i višegodišnjih kontroverzi u povijesti kemije.^{1, 2}

Prvi cilj ovog dijela diplomskog rada je proučiti povijest valencije i napraviti literaturni pregled udžbenika iz kemije za sedmi razred osnovne škole u svrhu proučavanja utjecaja znanstvenog izražavanja i metodologije poučavanja na razvoj studentskih poteškoća vezanih uz pojam valencija. Vodeći se time, drugi cilj je bio ispitati (prema prethodno istraženim literaturnim podacima) i analizirati očekivana pogrešna shvaćanja kod studenata Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu posebno za kovalentne, ionske i koordinacijske spojeve. Treći cilj rada je na temelju dobivenih rezultata dati prijedlog za unaprjeđenje nastavne prakse u osnovnoj školi pri poučavanju pojma valencija temeljen na strategiji učenja otkrivanjem uključujući Gardnerovu teoriju višestrukih inteligencija i Bloomovu taksonomiju s ciljem prilagodbe djeci s posebnim obrazovnim potrebama vodeći se idejom humane škole pedagoga Hartmuta von Hentiga, a predloženo je i didaktičko pomagalo „Vitez Čovek“.

Specifični cilj ovog rada je bio generalizirati i naposljetku predložiti definiciju pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa u početnom poučavanju koji bi bio primjenjiv na ionske i kovalentne spojeve, a na višoj razini poučavanja i dalje znanstveno konzistentan čime bi se omogućilo točnije znanstveno izražavanje u nastavi kemije.

2. NASTAVNI PLAN I PROGRAM

Pregled nastavnih programa kemije i fizike prema službenom *Nastavnom planu i programu za osnovnu i srednju školu* napravljen je u svrhu stjecanja uvida u zastupljenost nastavnih koncepata povezanih s valencijom atoma kemijskog elementa u nastavi. Prema osnovnoškolskom nastavnom programu kemije, pojam valencija se obrađuje u sedmom razredu u sklopu nastavne cjeline *Građa tvari*.

Nadalje, iako se u osnovnoškolskom nastavnom programu fizike i gimnazijskim nastavnim programima fizike i kemije nigdje ne spominje pojam „*Valencija*“, u svima njima su izneseni određeni nastavni koncepti koji su nužni za tumačenje građe tvari jer uvjetuju izgradnju koncepta valencije atoma kemijskog elementa. Tako se u sklopu *Nastavnog plana i programa za osnovnu školu* fizike u sklopu nastavne teme *Građa tvari* obrađuje koncept strukture tvari (samo da su tvari građene od atoma i molekula), a samo u izbornom sadržaju se obrađuje građa atoma. Istodobno u nastavi kemije, prema *Nastavnom planu i programu za osnovnu školu* u sedmom razredu obrađuju se koncepti (atom, subatomske čestice, kemijski element, periodni sustav elemenata, atomski i maseni broj, ion, formulska jedinka, naboj aniona i kationa) koji uvjetuju izgradnju koncepta valencije atoma kemijskog elementa. Prema nastavnom planu i programu kemije za gimnazije u prvom razredu obrađuju se nastavne cjeline *Atomi, molekule i kristali*, unutar koje se obrađuju teme *Građa atoma, Elektronski omotač atoma, Periodni sustav elemenata, Kemijske veze i Unutarnja građa kristala*.

Koncepti koji uvjetuju izgradnju koncepta valencije atoma kemijskog elementa, a obrađuju se u sklopu gore navedenih tema u prvom razredu gimnazije s tim da se pojam valencije nigdje ne spominje jesu: elementarne čestice, građa atoma, spektri i strukture elektronskog omotača, Bohrov model atoma (ljuske, podljuske, orbitale i spin elektrona), redoslijed popunjavanja orbitala, elektronske konfiguracije, periodičnost svojstava elemenata (radijus atoma, energija ionizacije, afinitet prema elektronu, elektronegativnost), kovalentna veza (podijeljeni i nepodijeljeni elektronski par, strukturna formula), elektronegativnost i kovalentna veza.

Prema nastavnom planu i programu fizike za gimnazije u 4. razredu poučava se povijesni razvoj atoma (inačica A i B).

3. POVIJEST POJMA VALENCIJA

3.1. Povijest pojma valencija u hrvatskim udžbenicima

Povijesni pregled pojma valencija u udžbenicima za osnovnu školu načinjen je u svrhu proučavanja znanstvenog izražavanja u povijesti nastave kemije i njegovog utjecaja na razvoj učeničkih poteškoća vezanih za ovaj pojam. Ukupno je pregledan 21 udžbenik za sedmi razred osnovne škole, od kojih je najstariji bio onaj iz 1939. godine. Prilikom pretrage literature uočene su različite interpretacije valencije kroz povijest, a definicije pojma valencija kroz povijest su sljedeće:

40-te godine 20. stoljeća

- a) *„Sposobnost atoma pojedinih elemenata da se mogu jedinili s jednim ili više atoma vodika zovemo hemijskom valencijom. Te valencije prikazujemo u strukturnim formulama malim crticama: ...“³*
- b) *„Sposobnost atoma počela, da se mogu spajati s određenim brojem atoma nekog drugog počela, zove se valencija. Nije poznat spoj, u kojem bi atom vodika vezao dva ili više atoma drugog počela, pa se prema tome uzima, da vodik ima jedinicu sposobnosti za vezanje drugih atoma.“⁴*
- c) *„Stvaranje oksida raznovrsnog sastava specijalan je slučaj, u kome se očituje svojstvo atoma, koje se naziva valencijom. Valencija se pokazuje u tome, što atomi jednoga elementa mogu vezati u spojevima samo određeni broj atoma drugih elemenata. Za razne atome su i ti brojevi različiti... Valencija elemenata je broj, koji pokazuje, koliko atoma vodika (ili drugog jednovalentnog elementa) može u spoju vezati jedan atom danog elementa. Valencija elementa, koju smo našli u njegovim spojevima s jednovalentnim elementima, ispoljava se i u njegovim spojevima s drugim elementima. Elementi s istom valencijom spajaju se – jedan atom s jednim atomom.“⁵*

50-te godine 20. stoljeća

- d) *„Sposobnost atoma pojedinih elemenata, da se mogu spajati ili zamjenjivati s jednim ili više atoma vodika zovemo njegovom valencijom.“⁶*
- e) *„Broj, koji pokazuje, koliko se puta nalazi ekvivalentna težina nekog elementa u njegovoj atomskoj težini, odnosno, koji pokazuje, s koliko se atoma vodika može spojiti atom nekog*

elementa, ili s koliko se vodikovih atoma može zamijeniti atom dotičnog elementa, zove se valencija. “⁷

- f) „...Bilo bi teško pisati formule, kad bismo išli opisanim putem. Međutim, ima pravila, koja to olakšavaju, pa ćemo se s njima upoznati. Iz formule: H_2O , NH_3 , i CH_4 vidimo, da atom kisika može vezati 2 atoma vodika, atom dušika 3 i atom ugljika 4 atoma vodika. Zato kažemo, da je kisik dvovalentan, dušik trovalentan i ugljik četverovalentan, a valencije im označujemo crticama...”⁸

60-te godine 20. stoljeća

- g) „...Kemijske bi formule bilo teško sastavljati, kad bismo to činili na opisani način. Ali ima pravila, koja to olakšavaju. Zato će biti korisno, da i ti ta pravila upoznaš. Iz formula: H_2O , NH_3 , i CH_4 vidiš, da atom kisika može vezati 2 atoma vodika, atom dušika 3 i atom ugljika 4 atoma vodika. Zato kažemo, da je kisik dvovalentan, dušik trovalentan i ugljik četverovalentan, a valencije im označujemo crticama... Neki elementi imaju samo po jednu valenciju, a neki dvije ili više...”⁹
- h) „Sposobnost atoma nekog elementa da može vezati određen broj atoma vodika nazivamo valencija tog elementa.”¹⁰
- i) „Sposobnost atoma pojedinih elemenata da grade molekule kemijskih spojeva nije bezgranična. Ona ovisi o tome s koliko se atoma vodika može pojedini atom spojiti, odnosno koliko vodikovih atoma može u nekom spoju zamijeniti. Tu sposobnost atoma nazivamo njegovom valencijom.... Valencija je jednaka broju slobodnih pozitivnih ili negativnih električnih naboja iona elemenata, odnosno broju elektronskih parova preko kojih se atom nekog elementa veže s drugim atomima. Valencija se redovno označuje rimskim brojem uz simbol elementa ili crticom.”¹¹

70-te godine 20. stoljeća

- j) „Svojstvo atoma nekog elementa da može vezati određen broj atoma vodika nazivamo valencija tog elementa.”¹²
- k) „Takvo svojstvo atoma nekog elementa koje se sastoji u mogućnosti vezanja određenog broja atoma vodika nazivamo valencija elementa... Valencije su jednih elemenata pozitivne, drugih negativne, a nekih pozitivne i negativne.”¹³

- l) „Sposobnost atoma pojedinih elemenata da grade molekule kemijskih spojeva nije bezgranična. Ona ovisi o tome s koliko se atoma vodika može pojedini atom spojiti, odnosno koliko vodikovih atoma može u nekom spoju zamijeniti. Tu sposobnost atoma nazivamo njegovom valencijom.... Valencija je jednaka broju slobodnih pozitivnih ili negativnih električnih naboja iona elemenata, odnosno broju elektronskih parova preko kojih se atom nekog elementa veže s drugim atomima. Valencija se redovno označuje rimskim brojem uz simbol elementa ili crticom.“¹⁴
- m) „Takvo svojstvo atoma nekog elementa koje se sastoji u mogućnosti vezanja određenog broja atoma vodika nazivamo valencija elementa... Neki imaju dvije ili više valencija... Valencije su jednih elemenata pozitivne, drugih negativne, a nekih pozitivne i negativne. Općenito možemo reći da su najčešće valencije metala pozitivne, a nemetala negativne...“¹⁵,
16, 17, 18

80-te godine 20. stoljeća

- n) „Svojstvo atoma nekog elementa da se spaja s točno određenim brojem atoma nekog drugog elementa naziva se njegovom valencijom, odnosno valencijom elementa.“¹⁹

Udžbenici u sadašnjoj primijeni u nastavi kemije

- o) „Svojstvo atoma nekog elementa da se spaja s točno određenim brojem atoma nekog drugog elementa naziva se njegovom valencijom, odnosno valencijom elementa.“²⁰
- p) „Svojstvo, tj. sposobnost atoma nekog elementa da se spaja s točno određenim brojem atoma drugog elementa naziva se valencijom.“²¹
- q) „Atomi različitih elemenata razlikuju se po građi, stoga imaju i različita svojstva. Jedno od njih je sposobnost vezanja s točno određenim brojem atoma drugih elemenata i nazivamo je valencija. (lat. Valere - vrijediti).“²²
- r) „Sposobnost atoma nekog elementa da se veže s određenim brojem atoma nekoga jednovalentnog elementa nazivamo njegovom valencijom.“²³
- s) „Sposobnost atoma nekoga elementa da se veže s određenim brojem atoma nekoga drugoga elementa nazivamo valencija. Zbroj valencija svih atoma jednoga elementa mora biti jednak zbroju valencija svih atoma drugoga elementa.“²⁴

3.2. Povijest metodologije poučavanja pojma valencija u hrvatskim udžbenicima

Među ostalima, pojmovi kao što su „broj veza“, „broj okruženih atoma“, „valencija“, „oksidacijski broj“ često se pojavljuju u udžbenicima kemije za osnovnu i srednju školu. Međutim, prema literaturnim podacima ti pojmovi se učestalo poistovjećuju što dovodi do pogrešne interpretacije odnosno zaključka o samoj valenciji atoma nekog kemijskog elementa.

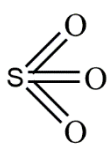
Stoga, osim što je napravljen povijesni pregled definicija pojma valencija u udžbenicima za osnovnu školu, literaturnim pregledom istražena je i povijest metodologije poučavanja pojma valencija. Takva pretraga načinjena je u svrhu revidiranja znanstvenog izražavanja u metodologiji poučavanja te u kolikoj je mjeri to izražavanje u nastavi odgovorno i koliko je utjecalo na stvaranje pogrešnih zaključaka o valenciji atoma nekog elementa. Literaturnim pregledom uočena je prisutnost različitih pristupa u metodologiji poučavanja pojma valencija atoma kemijskog elementa što je sukladno prethodno navedenim definicijama, u kojima se s različitih aspekata znanstveno izražava (definira) pojam valencije u udžbenicima kroz povijest te koliko se je znanstveno izražavanje u udžbenicima mijenjalo sukladno razvoju novih spoznaja kroz godine.

Definicija valencije prema vodikovom atomu

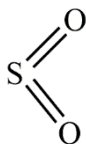
U najstarijem udžbeniku³, onom iz 1939. godine, valencija je definirana kao „*Sposobnost atoma pojedinih elemenata da se mogu jediniti s jednim ili više atoma vodonika*“. Ovakva definicija pojma valencija protezala se je kroz povijest udžbenika^{3, 5, 6, 10-18} u raznim varijacijama, a mjesto nalazi i u današnjim udžbenicima²². Na temelju toga možemo uvidjeti da se znanstveno izražavanje iz 1939. godine zadržalo sve do danas, suvremenog doba kvantne mehanike. Rezultat toga je da metodologija poučavanja ne prati znanstvena dostignuća te se na taj način podvrgava minimalizmu koji odgovara metodologiji poučavanja još iz daleke 1939. godine.

Definicija valencije i broj veza

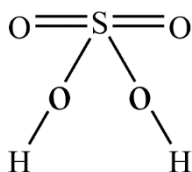
Također u udžbeniku³, onom iz 1939. godine, valencija je poistovjećena s valentnim crticama („Te valencije prikazujemo u strukturnim formulama malim crticama:...“), a pri poučavanju su za primjere uzeti spojevi HCl, H₂O, NH₃, CH₄, SO₂, SO₃ i O₃ u kojima se valencija atoma kemijskog elementa podudara s valentnim crticama. Također je uočeno da su dani primjeri kovalentnih spojeva s višestrukim vezama na kojima se je ispitivao pojam valencija. Pretragom literature³⁻²⁴ uočeno je da se je shematski prikaz primjera kovalentnih spojeva sa višestrukim vezama na kojima se je objašnjavala valencija mijenjao kroz povijest metodologije poučavanja, a na slici 1 su prikazani primjeri molekula.



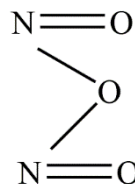
a)



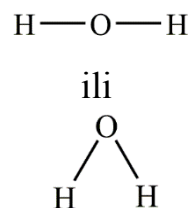
b)



c)



d)



e)

Slika 1. Shematski prikazi spojeva s višestrukim vezama u metodologiji poučavanja valencije

- a) Molekula SO₃ shematski prikazana u udžbeniku¹⁰ iz 1939. godine
- b) Molekula SO₂ shematski prikazana u udžbeniku¹⁰ iz 1939. godine
- c) Molekula H₂SO₄ shematski prikazana u udžbeniku¹⁹ iz 1971. godine
- d) Molekula N₂O₃ shematski prikazana u udžbeniku¹⁶ iz 1961. godine
- e) Molekula H₂O shematski prikazana u udžbeniku¹⁰ iz 1939. godine

U današnjim udžbenicima koji se primjenjuju, valencija atoma kemijskog elementa se poučava na kovalentnim spojevima koji su većinom osim kemijskom formulom prikazani i valentnim crticama. Usprkos činjenici da se je *VSEPR* metoda razvijala 60-ih godina prošlog stoljeća, samo u jednom²⁰ od udžbenika koji se danas koriste pronađeni su kovalentni spojevi shematski prikazani poštujući *VSEPR* metodu.

Definicija valencije i broj atoma

40-ih i 50-ih godina prošlog stoljeća valencija atoma poučavala se je kao sposobnost odnosno kao mogućnost spajanja s točno određenim brojem atoma drugog elementa.^{4, 5} Iako se je ovakav pristup u poučavanju valencije vrlo malo protezao kroz povijest udžbenika¹⁰ („*Ako se spoj sastoji od dva elementa koji imaju jednaku valenciju, onda je u molekuli spojen jedan atom jednoga s jednim atomom drugoga*“), ovakva metodologija poučavanja definicije valencije je u današnjim udžbenicima najzastupljenija. Uočeno je da se u znanstvenom izražavanju valencija atoma poistovjećuje sa spajanjem odnosno vezivanjem s točno određenim brojem atoma drugog elementa^{20, 21, 22, 23, 24} te da tom definicijom nije dovoljno naglašen Proustov zakon masenih omjera.

Definicija valencije kao pravilo

Na kraju 50-ih i početkom 60-ih godina prošlog stoljeća u nastavi kemije pojam valencija se poučavao kao jedno od pravila koja nam omogućavaju „sastavljanje“ kemijskih formula. Također, u ovom periodu u znanstvenom izražavanju uočena je interpretacija pojma valencije u smislu da elementi mogu imati jednu valenciju, a neki dvije ili više.^{8, 9}

Definicija valencije i oksidacijski broj

Krajem 60-tih godina prvi put se u metodologiji poučavanja valencije spominje u kontekstu pozitivnih ili negativnih električnih naboja naboja iona elemenata i broju elektronskih parova preko kojih se atom nekog elementa veže s drugim atomima.^{11, 14} Ovakva metodologija je imala velik utjecaj na znanstveno izražavanje u poučavanju valencije koje je obilježilo cijelo jedno desetljeće. Uočeno je da se kroz 70-te godine valencija atoma kemijskog elementa poučavala na način da može biti pozitivna i negativna. U tom periodu također je učeno poučavanje da je zbroj umnožaka indeksa i valencije atoma jednog elementa i umnoška indeksa i valencije atoma drugog elementa jednak nuli.^{13, 15, 16, 17, 18} Takvo pravilo u metodologiji poučavanja valencije omogućavalo je sastavljanje empirijskih formula. Prilikom literaturnog pregleda udžbenika koji se trenutno koriste u nastavi kemije, čak u dva udžbenika se spominje pravilo da zbroj valencija svih atoma jednoga elementa mora biti jednak zbroju valencija svih atoma drugoga elementa.^{21, 24}

3. POVIJEST POJMA VALENCIJA

Tablica 1. „Pravila koja omogućuju sastavljanje empirijskih formula“^{13, 15, 16, 17, 18}

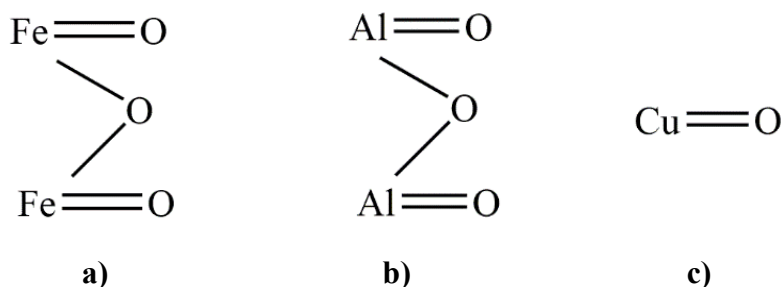
primjeri korišteni u metodologiji poučavanja	poučavana pravila u nastavi kemije
$\overset{+1}{\text{H}}\overset{-1}{\text{Cl}}$	$1 \cdot (+1) + 1 \cdot (-1) = 0$
$\overset{+1}{\text{H}_2}\overset{-2}{\text{O}}$	$2 \cdot (+1) + 1 \cdot (-2) = 0$
$\overset{-3}{\text{N}}\overset{+1}{\text{H}_3}$	$1 \cdot (-3) + 3 \cdot (+1) = 0$
$\overset{+4}{\text{N}}\overset{-2}{\text{O}_2}$	$1 \cdot (+4) + 2 \cdot (-2) = 0$
$\overset{+1}{\text{Na}}\overset{-1}{\text{Cl}}$	$1 \cdot (+1) + 1 \cdot (-1) = 0$

Poučavanje pojma valencija na primjerima kovalentnih spojeva

U udžbeniku¹⁰, onom iz 1939. godine, valencija je poučavana samo na primjerima kovalentnih spojeva HCl, H₂O, NH₃, CH₄, SO₂, SO₃ i O₃. Tijekom povijesti kovalentni spojevi su često prikazivani shematskim prikazom međutim u udžbenicima 60-tih godina uočeno je da se valencija nekog elementa prikazuje valentnom crticom.^{9,10,12} Krajem 60-tih godina i početkom 70-tih godina u udžbenicima je uočen je opis elektronske konfiguracije atoma kemijskih elemenata u čijem se kontekstu spominju elektroni vanjskih ljusaka atoma.^{11, 14} U 70-tim godinama primjeri kovalentnih spojeva u udžbenicima su za razliku od ranije prikazivani samo kemijskim formulama, a poučavanje se temeljilo prema vezanju određenog broja atoma vodika. U tom periodu također je uočeno i poučavanje da je zbroj umnožaka indeksa i valencije jednog elementa i umnožak indeksa i valencije drugoga elementa jednak nuli na primjerima kovalentnih spojeva HCl, H₂O, NH₃, NO₂.^{13, 15, 16, 17, 18} U današnjim udžbenicima valencija atoma kemijskog elementa se većim dijelom poučava na kovalentnim spojevima HCl, H₂O, NH₃ i CH₄.^{20, 21, 22, 23, 24}

Poučavanje pojma valencija na primjerima ionskih spojeva

Kao primjeri na kojima se poučava valencija atoma kemijskog elementa, ionski spojevi su prvi puta pojavljuju u udžbeniku⁵ iz 1947. U tom udžbeniku se poučava o elementima u kojima jedan atom u spoju ne može vezati više od jednog atoma drugog elementa te su to takozvani jednovalentni elementi dok npr. atomi trovalentnih elemenata vežu u spojevima tri atoma jednovalentnih elemenata (NaH, KH, NaCl, AlCl₃, CrCl₃, NNa₃). Ionski spojevi u tom udžbeniku su prikazani samo kemijskim formulama. U udžbeniku⁶ iz 1951. godine broj primjera ionskih spojeva na kojima se poučava valencija je smanjen, a formulska jedinka ionskog spoja osim što se prikazuje kemijskom formulom prikazuje se i valentnim crticama. Poučavanje valencije atoma u ionskom spoju na temelju prikaza valentnih crtica obilježilo je metodologiju poučavanja 60-tih godina prošlog stoljeća.^{9, 10}



Slika 2. Shematski prikazi formulskih jedinki ionskih spojeva s višestrukim vezama u metodologiji poučavanja valencije

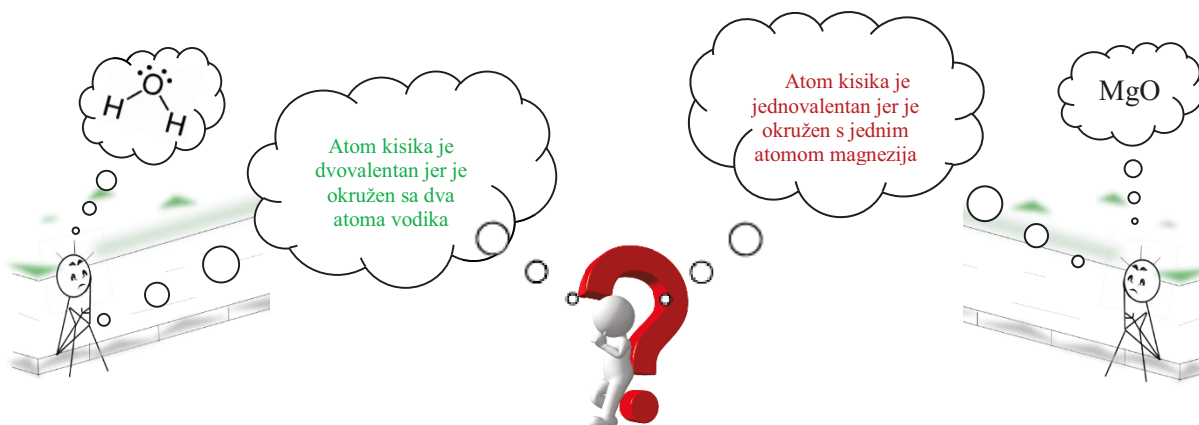
- a) Ionski spoj Fe₂O₃ shematski prikazan u udžbeniku¹³ iz 1951. godine
- b) Ionski spoj Al₂O₃ shematski prikazan u udžbenicima^{16, 17} iz 1961. i 1967. godine
- c) Ionski spoj CuO shematski prikazan u udžbenicima^{16, 17, 19} iz 1961., 1967. i 1971. godine

U 70-tim godinama primjeri ionskih spojeva na kojima se je poučavala valencija atoma kemijskog elementa pisani su samo u obliku kemijskih formula, a valencija elementa se određivala prema zbroju umnožaka indeksa i valencija atoma (koje mogu biti i pozitivne i negativne) na primjerima aluminijeva(III) oksida, natrijeva oksida, kalcijeva karbonata. U današnjim udžbenicima koji se trenutno koriste u poučavanju, primjeri ionskih spojeva kojima se objašnjava valencija atoma elementa uopće nisu ujednačeni kao i broj primjera. Tako u nekim udžbenicima postoji čitav niz primjera, dok se u drugim udžbenicima nalazi samo npr. po jedan primjer.

4. METODOLOGIJA ISTRAŽIVANJA

4.1. Očekivane studentske poteškoće

Literaturnim pregledom povijesti metodologije poučavanja pojma valencija u osnovnim školama je vrlo naglašena neujednačenost definicija pojma valencije atoma kemijskog elementa koja je prisutna i u današnjim udžbenicima. Ukoliko bi se pogledale sve definicije pojma valencija prisutne u udžbenicima koji se trenutno koriste u poučavanju, pretpostavka je da bi čitatelj ostao smeten raznim interpretacijama valencije atoma kemijskog elementa.



Slika 3. Jedna od očekivanih studentskih poteškoća

Je li valencija atoma nekog kemijskog elementa svojstvo poput njegova radijusa, energije ionizacije i afiniteta prema elektronu ili je to sposobnost atoma da „čini“ nešto? Je li valencija možda ipak samo neki broj koji nema dublje fizikalno značenje? Ovisi li valencija atoma kemijskog elementa o broju atoma kojima je taj atom okružen ili o svim svojim valentnim elektronima? Može li se valencija kemijskog elementa definirati kao broj veza ili kao primanje ili predaja elektrona? Postoji li definicija valencije koja bi bila primjenjiva na ionske i kovalentne spojeve? Kroz sva gore navedena pitanja, korelacije i sinonime na temelju proučenih literaturnih podataka mogla bi se očekivati pogrešna shvaćanja vezana uz razumijevanje pojma valencija.

Na temelju literaturnih podataka i *Nastavnog plana i programa* od strane istraživača (studenta) i nastavnika (mentora) pretpostavljeni su mogući krivi zaključci (pogrešna shvaćanja) o pojmu valencija, a koje bi čitatelj mogao donijeti na temelju čitanja udžbeničke literature. Očekivana pogrešna shvaćanja koja nisu literaturno potkrijepljena, temeljila su se na

očekivanim obrazovnim ishodima prema gimnazijskom *Nastavnom planu i programu* kemije. Pretpostavljena pogrešna shvaćanja iz obje opisane skupine su sljedeća:

- I) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju atoma koji okružuju taj atom u kemijskom spoju.“*^{4, 5, 10, 20-24}
- II) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju kemijskih veza („valentnih crtica“) koji taj atom ostvaruje.“*³
- III) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju primljenih ili otpuštenih elektrona da postigne elektronsku konfiguraciju atoma plemenitih plinova.“*
- IV) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa povezana je s periodom periodnog sustava u kojoj se element nalazi.“*
- V) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa povezana je sa skupinom periodnog sustava u kojoj se element nalazi.“*
- VI) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je apsolutnoj vrijednosti nabojnog broja.“*^{13, 15, 16, 17, 18}
- VII) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju valentnih elektrona koje taj atom posjeduje.“*²⁵
- VIII) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju mogućih ostvarenih veza istoimenog atoma s atomom vodika.“*^{3, 5, 6, 10-18}
- IX) *„Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju elektrona koje je atom primio ili otpustio.“*

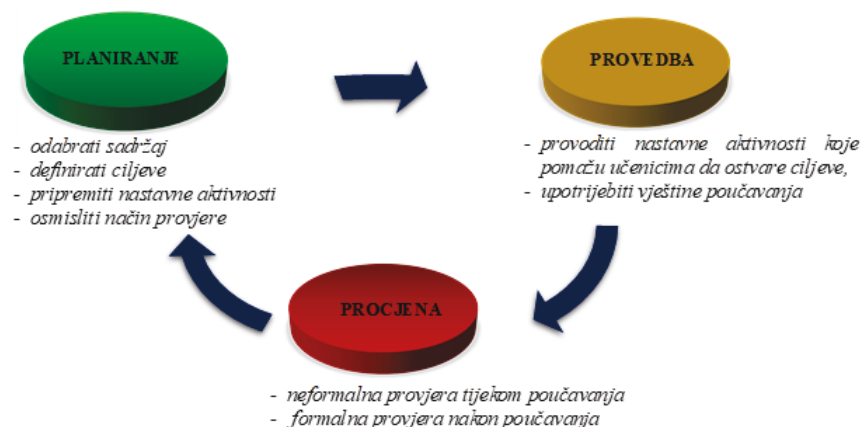
4.2. Bloomova taksonomija znanja

Kako bi se nastavnicima olakšalo planiranje i povezivanje nastavnih sadržaja s poželjnim ishodima učenja, razrađene su taksonomije ciljeva za pojedina područja učenja. Bloomova taksonomija je jedna od najprihvaćenijih klasifikacija znanja, a predložena je od strane američkog psihologa Benjamina Samuela Bloom-a 1956. godine. Bloom i suradnici su naime analizirali intelektualna ponašanja uz pomoć kojih su učenici stjecali akademska znanja, a cilj njihovog istraživanja je bio sistematizirati kategorije ponašanja koje se koriste tijekom učenja kako bi nastavnicima pomogla u planiranju i procjeni obrazovnih ishoda učenja. Ova taksonomija opisuje ciljeve (ishode) učenja u terminima kognitivnih procesa i dimenzija znanja. Prema Bloom-u postoje tri osnovna područja razvoja pojedinca:

1. **KOGNITIVNO PODRUČJE** – znanje i razumijevanje, intelektualne sposobnosti
2. **PSIHOMOTORIČKO PODRUČJE** – vještine, motoričke sposobnosti
3. **AFEKTIVNO PODRUČJE** – emocije, stavovi, mišljenja, interesi i uvjerenja

Bloomova taksonomija je jedna od najkorištenijih klasifikacija znanja koja je godinama doradivana i znanstveno provjeravana. U početku je Bloomova taksonomija bila usmjerena samo na kognitivno područje, a tek kasnije je definirano afektivno i psihomotoričko područje. Obrazovni ciljevi unutar svakog područja su razvrstani u kategorije prema razini znanja koje su hijerarhijski poredani od najjednostavnijih do najsloženijih na temelju njihove težine. Ciljeve je moguće operacionalizirati i u psihomotoričkom području koje podrazumijeva razvijanje motoričkih sposobnosti. Afektivni razvitak učenika podrazumijeva stjecanje određenih interesa i mišljenja kao i usvajanje stavova i uvjerenja.²⁶

Kvalitetna i učinkovita nastava bi trebala imati tri faze učinkovitog poučavanja: planiranje, provedbu i procjenu (slika 4).



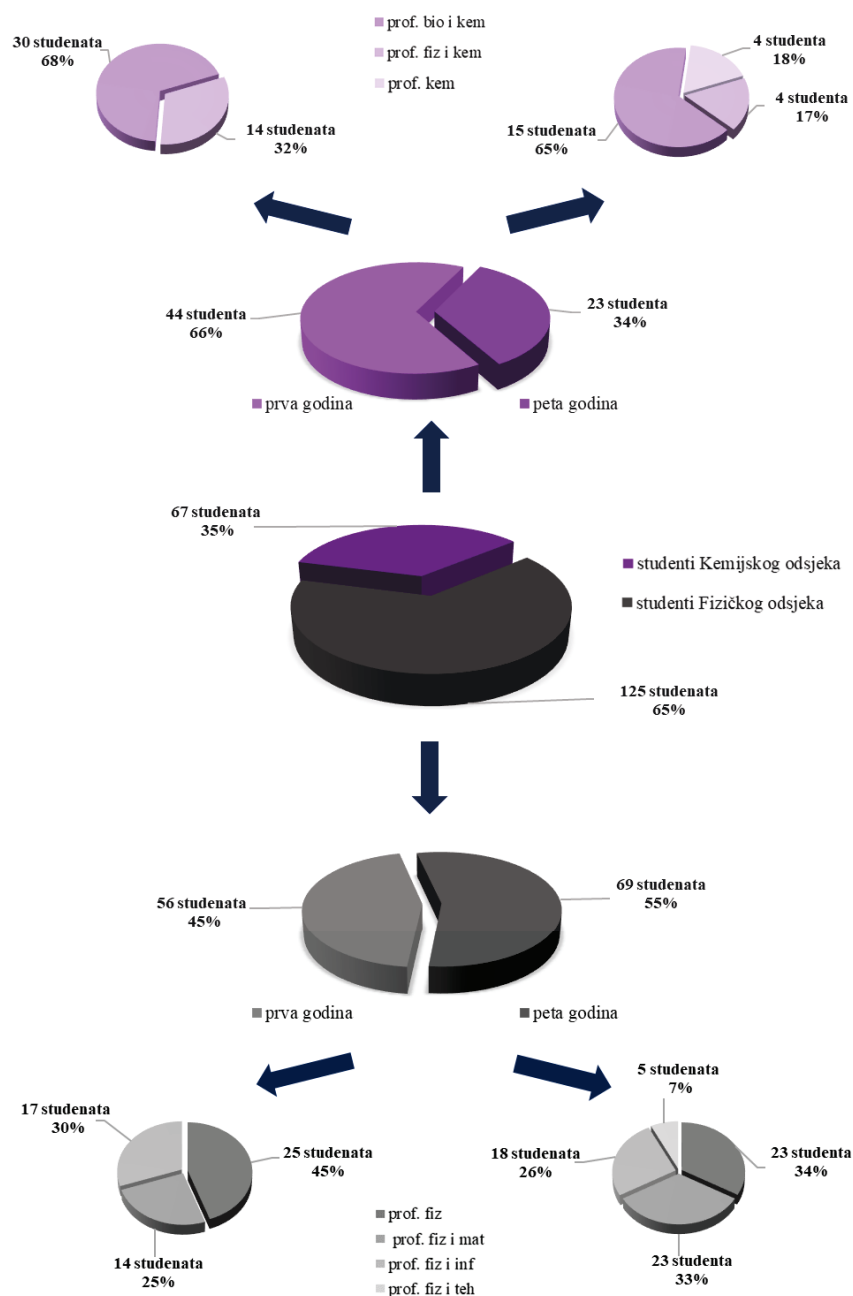
Slika 4. Tri faze učinkovitog poučavanja: planiranje, provedba i procjena

„Što je važno da učenici nauče i zašto?“, „Što točno želimo da učenici znaju ili mogu učiniti?“, „Kako pomoći učenicima da postignu ciljne obrazovne ishode“ i naposljetku „Kako procijeniti na kojoj kognitivnoj razini se nalazi učenik?“ su samo neka od pitanja na koja je prvotno možda teško odgovoriti. Međutim, Bloomova taksonomija je zamišljena kao vodič kako kvalitetno i učinkovito planirati, provesti i procijeniti odabrane obrazovne ishode. Pri planiranju, provedbi i procjeni obrazovnih ishoda važno je da su učenička postignuća eksplicitno usmjerena samo na učenike i njihova očekivana znanja, vještine i sposobnosti te vrijednosti i stavove koje je potrebno steći prilikom poučavanja. Budući da su obrazovni ishodi kreirani na temelju aktivnosti učenika, uvijek se iskazuju aktivnim glagolima (prepoznati, opisati, analizirati, usporediti, razvrstati, interpretirati, primijeniti itd.).

Bloomova taksonomija je revidirana 2001. godine od strane dva autora, Andersona i Kratwohla. Naime, umjesto imenica kojima se opisivala dimenzija kognitivnih procesa predloženi su glagoli kako bi se radnja učenja dovoljno naglasila kao proces. Nadalje, zamijenjene su dvije najviše razine znanja, prema Andersonu stvaranje predstavlja najvišu razinu. U tablicama koje slijede navedene su razine postignuća na kognitivnom, psihomotoričkom i afektivnom području poučavanja. Svako područje obuhvaća ciljeve za pojedinu razinu, a opisani su kao ciljevi (ishodi) učenja. Ujedno, u tablici su navedeni glagoli kojima se opisuje očekivana izvedba na pojedinoj razini na svim područjima (kognitivno, psihomotoričko, afektivno). Metodologija konstrukcije i analize ispitnih čestica provedenog testa tijekom istraživanja u ovom dijelu diplomskom radu, kao i prijedlog nastavnog sata je vođena hijerarhijskim razinama pojedinih područja i glagolima koji opisuju očekivanu izvedbu koje su navedene u tablicama u prilogu (Tablice P1, P2 i P3).

4.3. Uzorak ispitanika

Istraživanje je provedeno 2016. godine na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu na uzorku od 192 studenata, 100 studenata prve i 92 studenata pete godine svih nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka (integrirani preddiplomski i diplomski sveučilišni studij; nastavnički smjerovi; fizika, fizika i informatika, fizika i matematika, fizika i tehnika, fizika i kemija, biologija i kemija, kemija).



Slika 5. Shema udjela broja ispitanika prema vrstama nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka na uzorku od 192 studenata.

4.4. Kriteriji obrade podataka

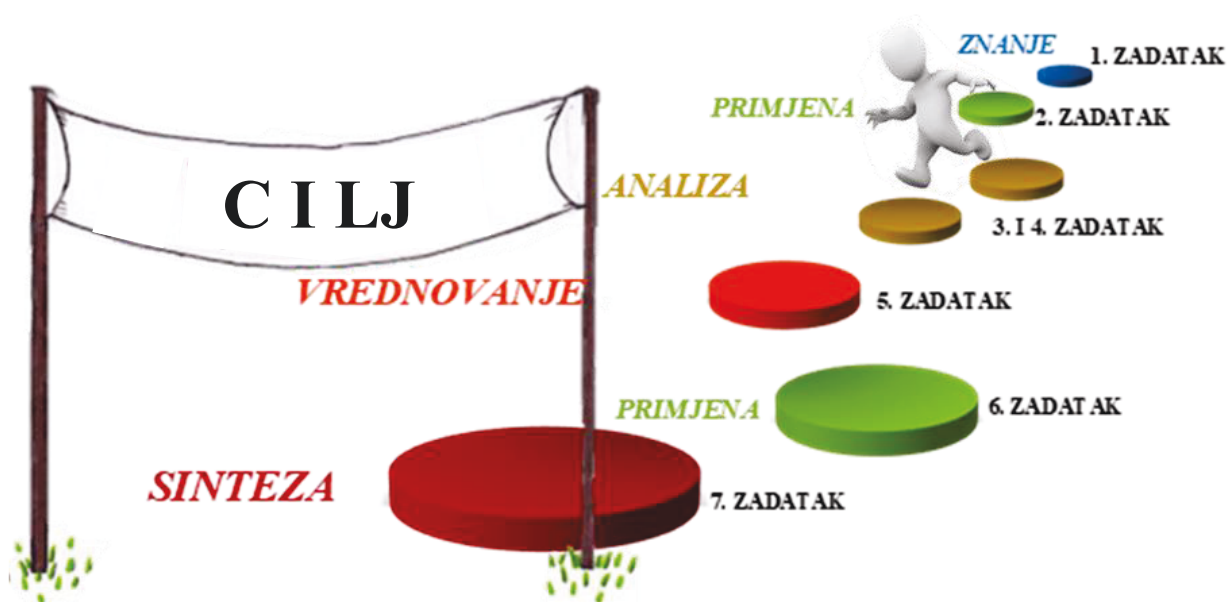
Budući da je ispitivanjem dobivena velika količina podataka, osmišljen je ključ „statističke analize“ na temelju kvalitativne obrade podataka, koji je vrednovan od strane istraživača (studenta) i nastavnika (mentora) kako bi se došlo do jednog od ciljeva ovog rada, uočiti i analizirati studentske poteškoće vezane uz usvojenost pojma valencija atoma kemijskog elementa i pogrešna shvaćanja za kovalentne, ionske i koordinacijske spojeve. Analiza rezultata napravljena je prema razvijenim kriterijima koji bi trebali omogućiti objektivnu i znanstveno konzistentnu obradu podataka kako bi se nakon njihove obrade mogli donijeti valjani zaključci. Prilikom obrade podataka odgovori u dvodjelnim zadacima koji nisu imali objašnjenje izuzeti su iz obrade (makar je odgovoreno na preostala pitanja), a samo ukoliko su u zadatku sve valencije bile određene točno odgovor se smatrao točnim.

Svi testovi su ispravljani ručno, a za prikupljanje, obradu i analizu podataka korišteni su programski paket QtiPlot 0.9.8.9.²⁷ i Microsoft Office Excel²⁸.

4.5. Konstrukcija i obrada testa

4.5.1. Konstrukcija testa na temelju Bloomove taksonomije

Test je konstruiran na temelju Bloomove taksonomije prema hijerarhijskim razinama kognitivnih domena znanja. Test je imao ukupno sedam zadataka (tablica P4) koji su kreirani prema dimenzijama kognitivnih procesa, od lakših prema težim: pamćenje, razumijevanje, primjenjivanje, analiziranje i evaluiranje (slika 6).



Slika 6. Zadatci testa i pripadajuće kognitivne domene znanja

Većina pitanja u zadatcima testa zahtijeva dodatna obrazloženja (dvodijelna pitanja zatvorenog i otvorenog tipa) koja uključuju pitanje zatvorenog i otvorenog tipa.

Nadalje, zadatci koji se nalaze u testu ispituju obrazovne ishode kojima se želi provjeriti usvojenost pojma valencija atoma nekog kemijskog elementa. Stoga, sama konstrukcija zadataka za ovo istraživanje temeljena je na obrazovnim ishodima koje bi učenici trebali usvojiti kroz nastavu kemije u osnovnoj i srednjoj školi. Obrazovni ishodi kojima bi se ispitala konceptualna usvojenost valencije odabrani su na temelju Bloomove taksonomije. Vodeći se specifičnim ciljem ovog rada test je također konstruiran i prema razradi postignuća (ishoda) i njihovoj razini posebno za kovalentne, ionske i koordinacijske spojeve.

Tablica 2. Popis zadataka i vrsta pripadajućih pitanja u testu o pojmu valencija

zadatak	pitanje	otvoreni tip	zatvoreni tip	vrste spojeva za koje se ispituju obrazovni ishodi
1		✓		valencija atoma nekog kemijskog elementa (općenito)
2	i) ii)	✓	✓	kovalentni spojevi
3	i) ii)		✓ ✓	nabijeni kovalentni spojevi
4	i) ii)	✓	✓	kovalentni spojevi s višestrukim vezama
5	i) ii)	✓	✓	koordinacijski spojevi
6	i) ii)	✓		ionski spojevi
7			✓	valencija atoma nekog kemijskog elementa (općenito)

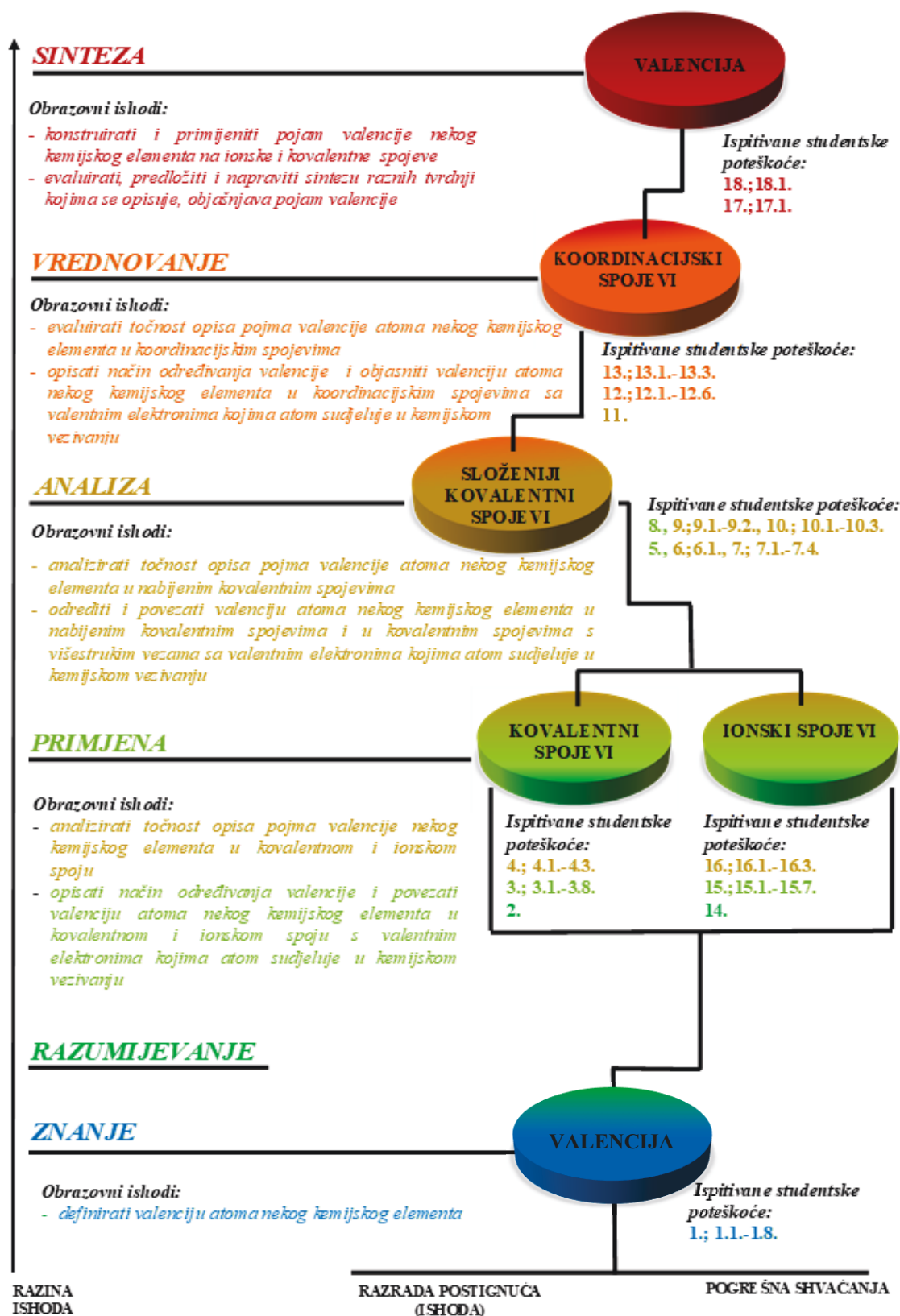
4.5.2. Obrada testa na temelju očekivanih poteškoća

Obrada testa na temelju literaturnih podataka je ključ „statističke analize“ velike količine dobivenih podataka. Budući da test sadržava zadatke koji provjeravaju usvojenost obrazovnih ishoda, logičan je slijed misli da je neusvojenost obrazovnih ishoda posljedica postojanja studentskih poteškoća. Odgovori studenata na otvorena pitanja svih zadataka testa su svrstani u opisne tvrdnje od kojih neke odgovaraju očekivanim krivim zaključcima o pojmu valencija.

U okviru specifičnog cilja ovog rada, u skladu s odabranim obrazovnim ishodima posebno su se ispitivala pogrešna shvaćanja za kovalentne, ionske i koordinacijske spojeve na temelju literaturnih podataka.

Vodeći se time, drugi, treći i četvrti zadatak ispituju obrazovne ishode (i korelirana pogrešna shvaćanja) vezane samo za kovalentne spojeve. Petim zadatkom se ispituju obrazovni ishodi vezani za koordinacijske spojeve, a šestim zadatkom za ionske spojeve. Obrazovni ishodi su označeni brojevima 1., 2., 3., dok su ispitivana pogrešna shvaćanja, npr. samo za obrazovni ishod 1., označena brojevima 1.1., 1.2, 1.3 svrstana po zadacima posebno za kovalentne, koordinacijske i ionske spojeve. Na slici 7 shematski je prikazan plan kojim se vodilo pri konstrukciji testa.

U skupini kovalentnih spojeva valencija atoma se ispitivala na primjerima molekula BH_3 , CH_4 , NH_3 , H_2O , HCl , $[\text{BH}_4]^-$, $[\text{NH}_4]^+$, H_3NBH_3 , $[\text{H}_3\text{O}]^+$, C_2H_4 , C_2H_2 , H_2O_2 i SO_3 napisanih kemijskom formulom i prikazanih strukturnim prikazom. U konstrukciji testa, navedene molekule su izabrane na temelju literaturnih podataka i gimnazijskog *Nastavnog plana i programa*. U skupini koordinacijskih spojeva valencija atoma kemijskog elementa se ispitivala na primjerima $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ i $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$, a u skupini ionskih spojeva na primjerima formulskih jedinki NaCl , WCl_6 , CaO i Nb_2O_5 .



Slika 7. Plan konstrukcije testa prema Bloomovoj taksonomiji i prema literaturnim podacima posebno za kovalentne, ionske i koordinacijske spojeve.

4.5.3. Prvi zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa

Obrazovni ishodi i ispitivana pogrešna shvaćanja:

1. definirati pojam *valencija* atoma nekog kemijskog elementa i objasniti ga svojim riječima
 - 1.1. definiranje i poistovječivanje pojma valencije atoma kemijskog elementa s brojem drugih atoma koji okružuju taj atom (I)
 - 1.2. definiranje i poistovječivanje pojma valencije atoma kemijskog elementa na temelju broja veza („valentnih crtica“) koje taj atom ostvaruje (II)
 - 1.3. definiranje valencije kao broja koji ukazuje koliko elektrona atom može primiti ili otpustiti da bi se postigla elektronska konfiguracija atoma najbližeg plemenitog plina (III)
 - 1.4. definiranje pojma valencije atoma kemijskog elementa na temelju periode periodnog sustava elemenata u kojoj se taj atom nalazi (IV)
 - 1.5. definiranje pojma valencije atoma kemijskog elementa na temelju skupine periodnog sustava elemenata u kojoj se taj atom nalazi (V)
 - 1.6. definiranje pojma valencije atoma kemijskog elementa na temelju apsolutne vrijednosti nabojnog broja (VI)
 - 1.7. definiranje i poistovječivanje pojma valencije atoma kemijskog elementa sa svim valentnim elektronima koje taj atom posjeduje (VII)
 - 1.8. definiranje i poistovječivanje valencije kemijskog elementa s primanjem ili predajom elektrona (IX)

1. Definirajte svojim riječima pojam *valencija* atoma nekog kemijskog elementa.

Slika 8. Prvi zadatak testa

4.5.4. Drugi zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima

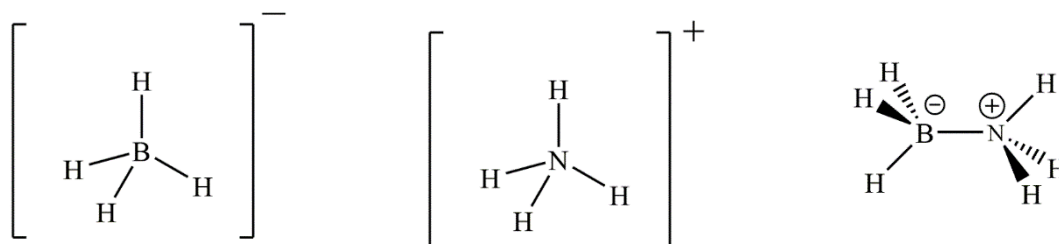
Obrazovni ishodi i ispitivana pogrešna shvaćanja:

2. odrediti valenciju pojedinog atoma kemijskog elementa u molekuli kovalentnog spoja na temelju napisane kemijske formule i strukturnog prikaza
3. opisati način određivanja valencije i povezati valenciju atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnom spoju s valentnim elektronima kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju
 - 3.1. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju “brojanjem okolnih atoma” na temelju napisane kemijske i prikazane strukturne formule
 - 3.2. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju “brojanjem veza” na temelju prikazane strukturne i napisane kemijske formule
 - 3.3. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju brojanjem otpuštenih ili primljenih elektrona kako bi se postigla elektronska konfiguracija atoma najbližeg plemenitog plina na temelju napisane kemijske i prikazane strukturne formule
 - 3.4. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju prema skupinama periodnog sustava elemenata na temelju napisane kemijske i prikazane strukturne formule
 - 3.5. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju prema apsolutnoj vrijednosti nabojnog broja na temelju napisane kemijske i prikazane strukturne formule
 - 3.6. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju “brojanjem svih valentnih elektrona” na temelju napisane kemijske i prikazane strukturne formule
 - 3.7. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju prema broju mogućih ostvarenih veza istoimenog atoma s atomom vodika
 - 3.8. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju na temelju moguće predaje ili primanja elektrona kako bi se mogla ostvariti kemijska veza
4. analizirati točnost opisa pojma valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju
 - 4.1. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju s brojem svih valentnih elektrona u atomu
 - 4.2. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju s brojem periode periodnog sustava elemenata u kojoj se atom nalazi
 - 4.3. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju s brojem atoma drugih elemenata s kojima je atom vezan

4.5.5. Treći zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima

Obrazovni ishodi i ispitivana pogrešna shvaćanja:

5. razlučiti valenciju atoma kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima na temelju napisane kemijske formule i strukturnog prikaza jedinke
6. odrediti i povezati valenciju atoma nekog kemijskog elementa u nabijenom kovalentnom spoju s valentnim elektronima kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju
- 6.1. određivanje valencije atoma kemijskog elementa na temelju broja ostvarenih veza, odnosno brojem okruženih atoma u nabijenom kovalentnom spoju
7. analizirati točnost opisa pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima
- 7.1. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa s brojem vezanih atoma drugog kemijskog elementa u nabijenom kovalentnom spoju
- 7.2. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa s brojem atoma u molekuli
- 7.3. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa sa svim valentnim elektronima u nabijenom kovalentnom spoju
- 7.4. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa s apsolutnom vrijednosti nabojnog broja u nabijenom kovalentnom spoju

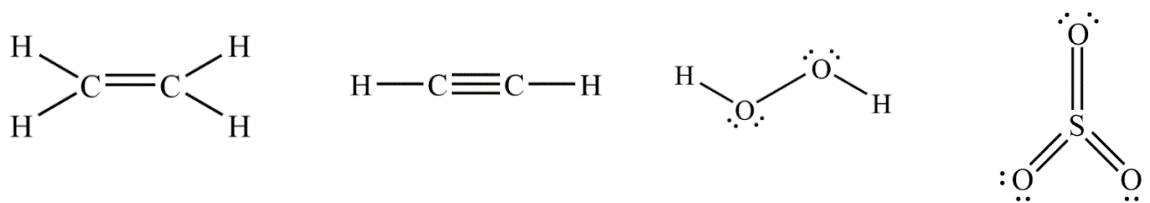


Slika 9. Zadani spojevi u trećem zadatku testa

4.5.6. Četvrti zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama

Obrazovni ishodi i ispitivana pogrešna shvaćanja:

8. razlučiti valenciju atoma kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama na temelju napisane kemijske formule i strukturnog prikaza
9. odrediti i povezati valenciju atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama s valentnim elektronima kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju
 - 9.1. određivanje valencije atoma kemijskog elementa na temelju broja vezanih atoma istovrsnog ili drugog kemijskog elementa koji okružuju atom u kovalentnom spoju s višestrukim vezama
 - 9.2. određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju s višestrukim vezama brojanjem svih valentnih elektrona atoma
10. analizirati točnost opisa pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama
 - 10.1. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa s brojem vezanih atoma istovrsnog ili različitog kemijskog elementa koji okružuju atom u kovalentnom spoju s višestrukim vezama
 - 10.2. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa sa svim valentnim elektronima u kovalentnom spoju s višestrukim vezama
 - 10.3. poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa s brojem tih atoma u kovalentnom spoju s višestrukim vezama



Slika 10. Zadani spojevi u četvrtom zadatku testa

4.5.7. Peti zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima

Obrazovni ishodi i ispitivana pogrešna shvaćanja:

- 11.** odrediti valenciju pojedinog atoma kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima samo na temelju strukturnog prikaza
- 12.** opisati način određivanja valencije i objasniti valenciju atoma nekog kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima s valentnim elektronima kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju
 - 12.1.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju “brojanjem okolnih atoma” na temelju strukturnog prikaza kemijske jedinice
 - 12.2.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju “brojanjem veza” na temelju strukturnog prikaza
 - 12.3.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju brojanjem otpuštenih ili primljenih elektrona kako bi se postigla elektronska konfiguracija najbližeg plemenitog plina na temelju strukturnog prikaza formule
 - 12.4.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju prema apsolutnoj vrijednosti nabojnog broja na temelju strukturnog prikaza
 - 12.5.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskom “brojanjem svih valentnih elektrona” na temelju strukturnog prikaza
 - 12.6.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju na temelju moguće predaje ili primanja elektrona kako bi se mogla ostvariti kemijska veza
- 13.** evaluirati točnost opisa pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima
 - 13.1.** poistovjećivanje valencije atoma pojedinog elementa u koordinacijskom spoju s brojem svih valentnih elektrona u atomu
 - 13.2.** poistovjećivanje valencije atoma pojedinog elementa u koordinacijskom spoju s brojem vezanih atoma drugog kemijskog elementa.
 - 13.3.** poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima s brojem atoma u molekuli

4.5.8. Šesti zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa u ionskim spojevima

Obrazovni ishodi i ispitivana pogrešna shvaćanja:

- 14.** odrediti valenciju pojedinog atoma kemijskog elementa u ionskom spoju na temelju napisane kemijske formule
- 15.** opisati način određivanja valencije i povezati valenciju atoma nekog kemijskog elementa u ionskom spoju s valentnim elektronima kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju
 - 15.1.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju “brojanjem okolnih atoma” na temelju napisane kemijske formule
 - 15.2.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju “brojanjem veza” na temelju napisane kemijske formule
 - 15.3.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju brojanjem otpuštenih ili primljenih elektrona kako bi se postigla elektronska konfiguracija atoma najbližeg plemenitog plina na temelju napisane kemijske formule
 - 15.4.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju prema skupinama periodnog sustava elemenata na temelju napisane kemijske formule
 - 15.5.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju prema apsolutnoj vrijednosti nabojnog broja na temelju napisane kemijske formule
 - 15.6.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju “brojanjem svih valentnih elektrona” na temelju napisane kemijske formule
 - 15.7.** određivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju temeljeno na mogućem primanju ili predaji elektrona kako bi se mogla ostvariti kemijska veza na temelju napisane kemijske formule
- 16.** analizirati točnost opisa pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa u ionskom spoju
 - 16.1.** poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju s brojem vezanih atoma istovrsnog ili drugog kemijskog elementa
 - 16.2.** poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju s brojem svih valentnih elektrona u atomu
 - 16.3.** poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju s brojem atoma u formulskoj jedinki

4.5.9. Sedmi zadatak – Valencija atoma nekog kemijskog elementa

Obrazovni ishodi i ispitivana pogrešna shvaćanja:

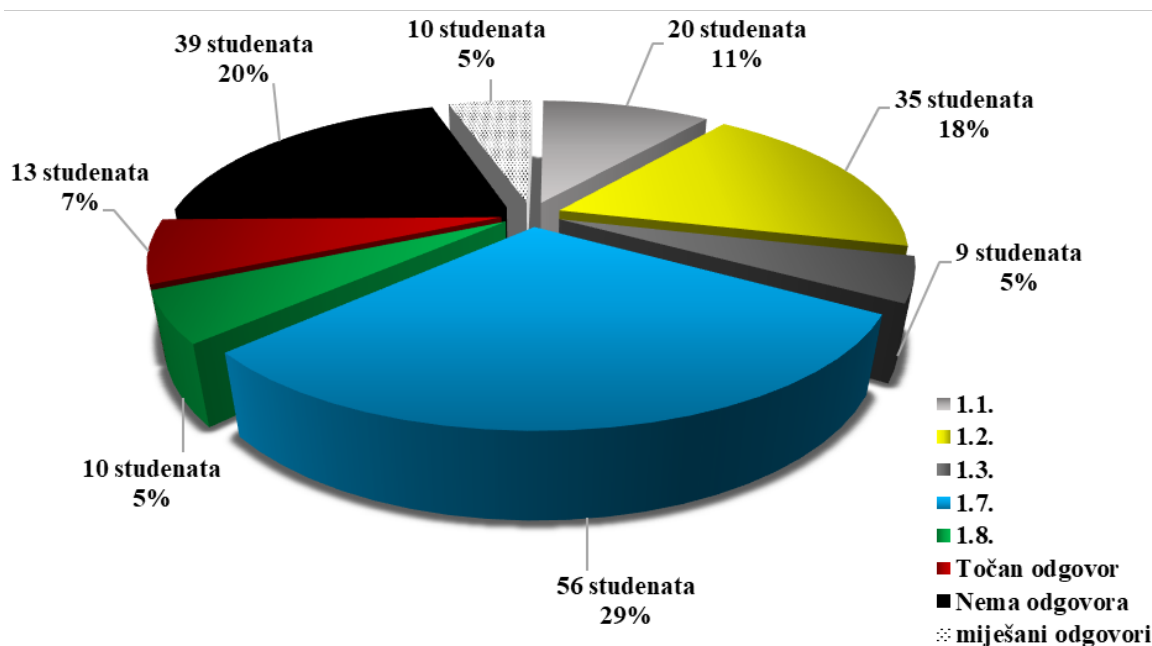
- 17.** evaluirati, predložiti i napraviti sintezu raznih tvrdnji kojima se opisuje, objašnjava pojam valencije
 - 17.1.** netočna, nedosljedna evaluacija i vrednovanje točnosti raznih tvrdnji kojima se opisuje, objašnjava pojam valencije na temelju naučenih znanja, pogrešnih shvaćanja
- 18.** konstruirati i primijeniti pojam valencije nekog kemijskog elementa na ionske i kovalentne spojeve
 - 18.1.** nemogućnost generalizacije i primjene pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa na ionske i kovalentne spojeve

Važno je napomenuti da je pojam valencija izuzetno složen, a za čije dublje, konceptualno razumijevanje zasigurno su prethodno potrebna znanja o orbitalama, kvantnoj mehanici, valentnim elektronima, energiji ionizacije, veznim i neveznim elektronskim parovima, prirodi kemijske veze i naposljetku kojim mehanizmom će ta kemijska veza nastati. Znanje kvantne fizike i kvantne kemije je prijekopotrebno kako bi se ovaj pojam istinski razumio. Stoga, moramo se svi složiti da objasniti takav pojam u osnovnoj školi za nastavnika predstavlja izuzetan izazov. Upravo ovaj zadatak služi kao odgovor na pitanje *Postoji li uistinu ikakv suvisao način da se toliko sadržajan pojam valencije objasni na nižoj razini, a da i dalje ostane znanstveno konzistentan?* Nadalje, ovaj zadatak služi kao temelj buduće diskusije o izražavanju u nastavi prilikom obrađivanja nastavne cjeline *Građa atoma*, nastavne jedinice *Valencije i kemijske formule* u sedmom razredu osnovne škole.

5. REZULTATI I RASPRAVA

5.1. Valencija atoma nekog kemijskog elementa

Riješenost prvog zadatka iznosi 79,7 %, a na temelju odgovora dobiven je uvid u studentska razmišljanja o definiciji pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa što je prikazano na slici 11. Ovim pitanjem od pretpostavljenih studentskih poteškoća uočene su **studentske poteškoće 1.1., 1.2., 1.3., 1.7. i 1.8.** Od 192 studenata, 20 studenata (10 %) povezuje valenciju atoma nekog kemijskog elementa s brojem atoma koji okružuju taj atom, 35 studenata (18 %) povezuje valenciju atoma s ostvarenim kemijskim vezama, dok 9 studenata (5 %) povezuje valenciju atoma s brojem primljenih ili otpuštenih elektrona kako bi se postigla elektronska konfiguracija atoma plemenitih plinova. Najveći broj studenata, njih 56 (29 %) pokazuje studentsku poteškoću poimanja valencije sa svim valentnim elektronima, a raspodjela odgovora na prvi zadatak svih studenata nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka prikazana je na slici 11.



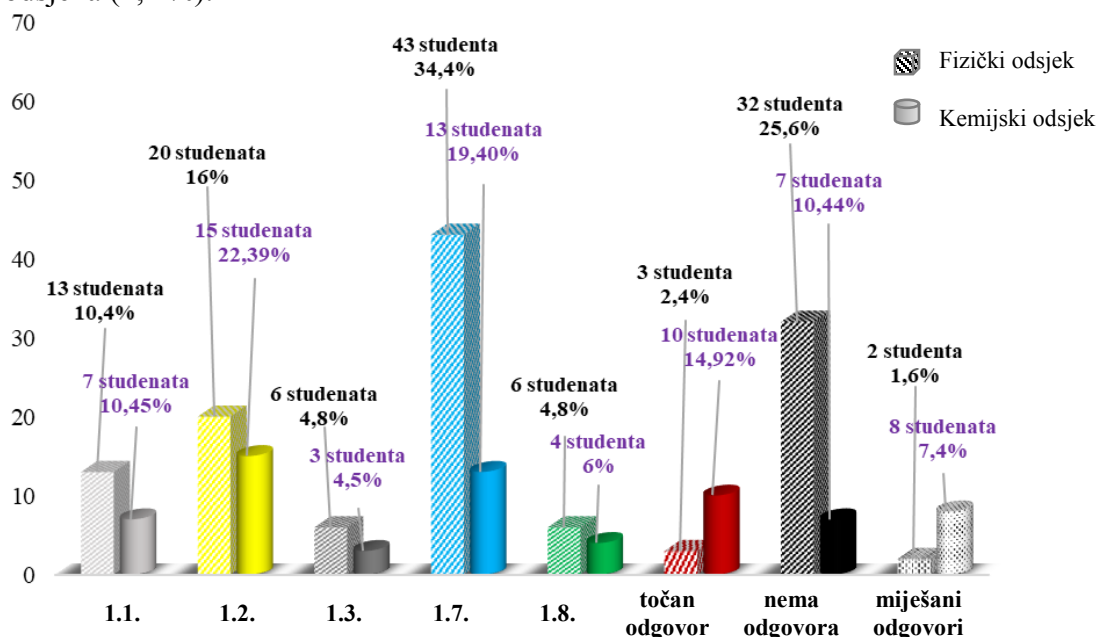
Slika 11. Raspodjela uočenih studentskih poteškoća svih nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka

Prilikom obrade podataka očekivane **poteškoće 1.7.**, u prvom zadatku uočena je i studentska poteškoća nepoznavanja terminologije vezane uz valentne, vezne/nevezne i slobodne elektrone gdje se prilikom objašnjenja ta tri pojma izjednačuju, odnosno ne razlikuju se. Primjeri su:

- „Valencija kemijskog elementa jest onoliki broj koliko taj element posjeduje nesparenih (slobodnih) valentnih elektrona.“ (anketa 21)
- „Broj slobodnih elektrona u vanjskoj ljusci atoma.“ (anketa 138)
- „Broj slobodnih elektrona.“ (anketa 173)

Nešto manje studenata je objasnio pojam valencije atoma kemijskog elementa kao primanje ili predaju elektrona, a uočeno je i 7 miješanih odgovora u kojima studenti opisuju pojam valencije kroz dvije tvrdnje kao na primjer „Broj nesparenih elektrona u zadnjoj ljusci atoma. Broj veza koji atom može raditi s drugim atomom.“ (anketa 7) Točno je odgovorilo 13 studenata, dok njih 39 (20 %) nije odgovorilo na zadatak. U kategoriju nema odgovora su stavljeni i odgovori poput „Nogometni klub“ te su na taj način isključeni podatci koji nisu od interesa za ovo istraživanje.

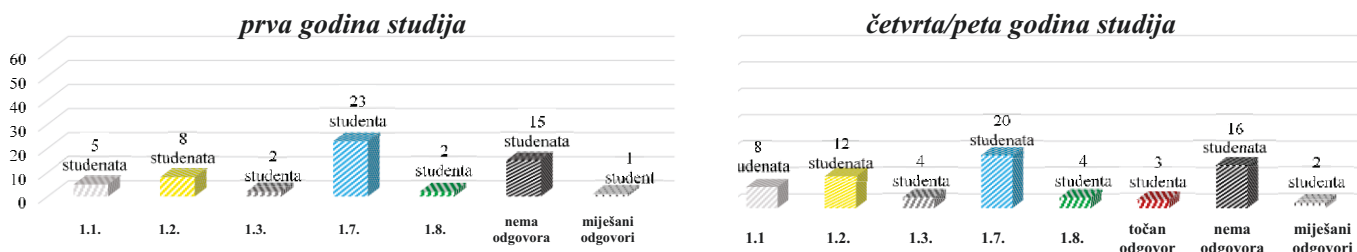
Prilikom obrade podataka uočeno je da je kod studenata Fizičkog odsjeka učestalija poteškoća definiranja i poistovjećivanja pojma valencije atoma kemijskog elementa sa svim valentnim elektronima koje taj atom posjeduje (34,4 %), dok se kod studenata Kemijskog odsjeka pojavljuje samo u 19,4 % studenata. Kod studenata Kemijskog odsjeka poteškoća definiranja i poistovjećivanja pojma valencije atoma kemijskog elementa na temelju broja valentnih crtica je učestalija (22,39 %) nego kod studenata Fizičkog odsjeka (16 %) te je također uočeno da su studenti Kemijskog odsjeka dali više točnih odgovora (14,92 %) od studenata Fizičkog odsjeka (2,4 %).



Slika 12. Učestalost uočenih poteškoća kod studenata Fizičkog i Kemijskog odsjeka svih godina

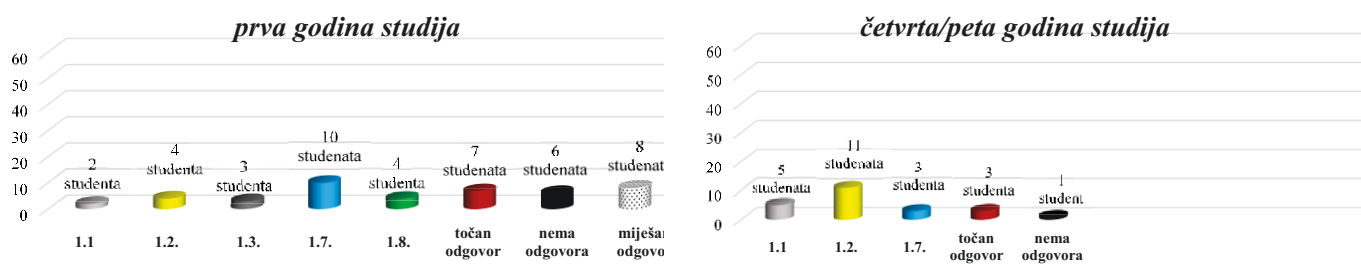
Vodeći se interesom za obradu podataka učestalosti uočenih studentskih poteškoća prema godini studija, napravljena je još jedna specifičnija obrada podataka u svrhu proučavanja utjecaja prethodno naučenih znanja na odabrane odgovore što je prikazano na slici 13.

a) Fizički odsjek



Kemijski odsjek, 1. godina

b) Kemijski odsjek

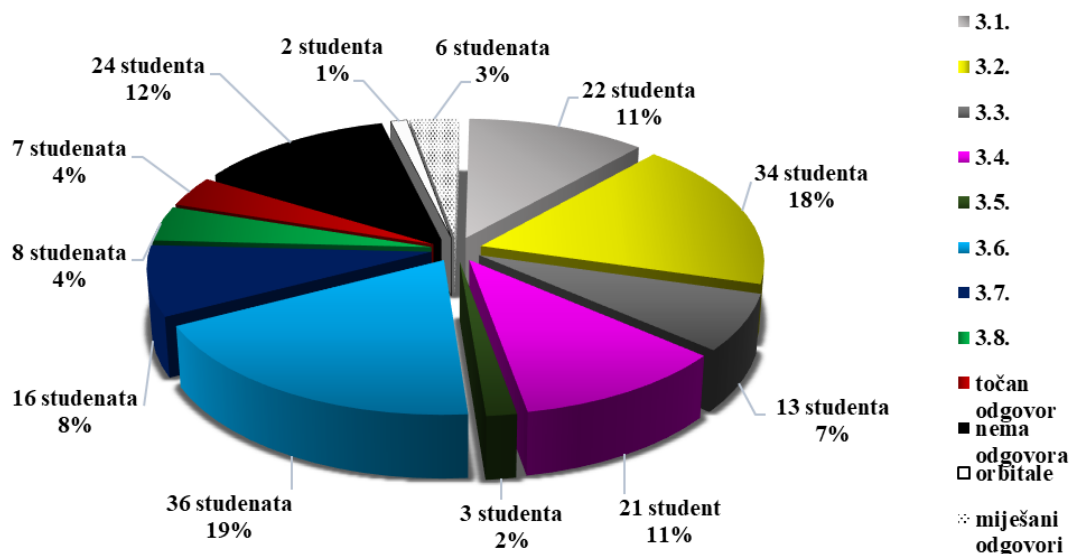


Slika 13. Raspodjela studentskih poteškoća studenata prve i pete godine Fizičkog (a) i Kemijskog (b) odsjeka

Usporedbom obrade podataka odgovora prvog zadatka prema godini studija uočeno je da kod studenata Fizičkog odsjeka prve i četvrte/pete nema prevelikih odstupanja od danih odgovora. Učestalija studentska poteškoća i na prvoj i na petoj godini jest ona povezana sa svim valentnim elektronima (**studentska poteškoća 1.7.**), a samo je troje studenata pete godine dalo točan odgovor. Iz rezultata se može zaključiti da prethodno naučena znanja nemaju nikakav utjecaj na odabir odgovora. Za razliku od studenata Fizičkog odsjeka, kod studenata Kemijskog odsjeka na prvoj godini raspodjela svih odgovora je približno jednaka, dok su na petoj godini uočene učestalije **studentske poteškoće 1.1. i 1.2.** Također, manje studenata Kemijskog odsjeka pete godine je odgovorilo točno, ali smanjio se i broj prisutnih studentskih poteškoća. Kod studenata Fizičkog odsjeka prve i pete godine učestalija je **studentska poteškoća 1.7.**, dok kod studenata Kemijskog odsjeka pete godine prevladava **studentska poteškoća 1.2.**

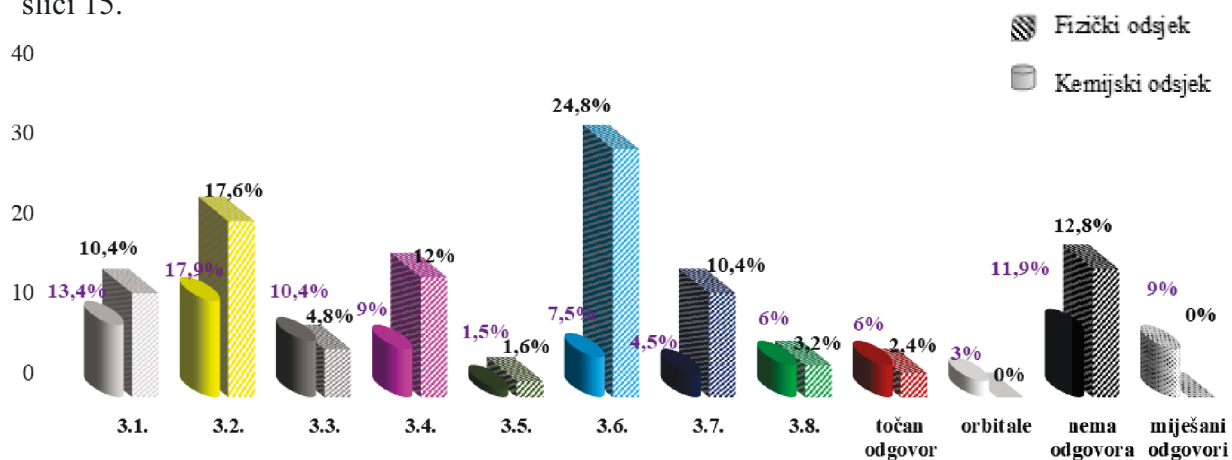
5.2. Valencija atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima

Obradom podataka drugog zadatka analizirani su odgovori dvaju pitanja. Prvim pitanjem studenti su morali analizirati kovalentne spojeve i razlučiti valenciju atoma kemijskog elementa u zadanim spojevima (CH_4 , NH_3 , H_2O , HCl) dok se drugim pitanjem ispitivala procjena tvrdnji kojima je opisan pojam valencija atoma kemijskog elementa. Analiza podataka dala je uvid u raspodjelu odgovora koji obuhvaćaju točno/netočno određene valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju, objašnjenja na koji način se je odredila valencija i kategorizacije pojma valencija atoma u kovalentnom spoju. Od 192 studenata, 24 studenta (12,5 %) nije odredilo valenciju i dalo objašnjenje, a 26 studenata (13,5 %) nije odgovorilo na treće pitanje drugog zadatka. Ukupno je 94 (49 %) studenata točno odredilo valenciju atoma kemijskog elementa, dok je njih 74 (38,5 %) odredilo netočno. Analizom objašnjenja pokazalo se je da su **studentske poteškoće 3.6., 3.2., 3.1. i 3.4.** najučestalije (36 studenata, 19 %; 34 studenta, 18 %; 22 studenta 11 %; 21 student, 11 %). 16 studenata (8 %) je određivalo valenciju atoma u kovalentnom spoju prema broju mogućih ostvarenih veza istoimenog atoma s atomom vodika (**studentska poteškoća 3.7.**), dok je samo 7 studenata imalo točno obrazloženje (4 %). Analiza podataka odgovora na drugo pitanje drugog zadatka svih studenata nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka prikazana je na slici 14.



Slika 14. Raspodjela pogrešnih shvaćanja na drugo pitanje drugog zadatka svih nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka

Kod studenata Fizičkog odsjeka najučestalija **poteškoća** je **3.6.** (24,8 %), a slijede je redom **poteškoće 3.2.** (17,6 %), **3.4.** (12 %) i **3.1.** (10,4 %). Kod studenata Kemijskog odsjeka situacija je nešto drugačija jer je najučestalija **poteškoća 3.2.** (17,9 %), a slijede ju **poteškoće 3.1.** (13,4 %), **3.3.** (10,4 %) i **3.4.** (9 %). Od studenata Fizičkog odsjeka nitko nije odredio valenciju atoma u kemijskom spoju pomoću orbitala, dok ih je na Kemijskom odsjeku odredilo samo dvoje. Nadalje, više je studenata Fizičkog odsjeka odredilo valenciju atoma kemijskog elementa u molekuli prema broju mogućih ostvarenih veza istoimenog atoma s atomom vodika (**poteškoća 3.7.**, 10,4 %) od studenata Kemijskog odsjeka (4,5 %), a broj točnih odgovora na oba odsjeka je veoma malen (Fizički odsjek–3 studenta, Kemijski odsjek–4 studenta). Analiza studentskih objašnjenja određivanja valencije atoma kemijskog elementa u jednostavnijim kovalentnim spojevima svih studenata nastavnčkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka prikazana je na slici 15.

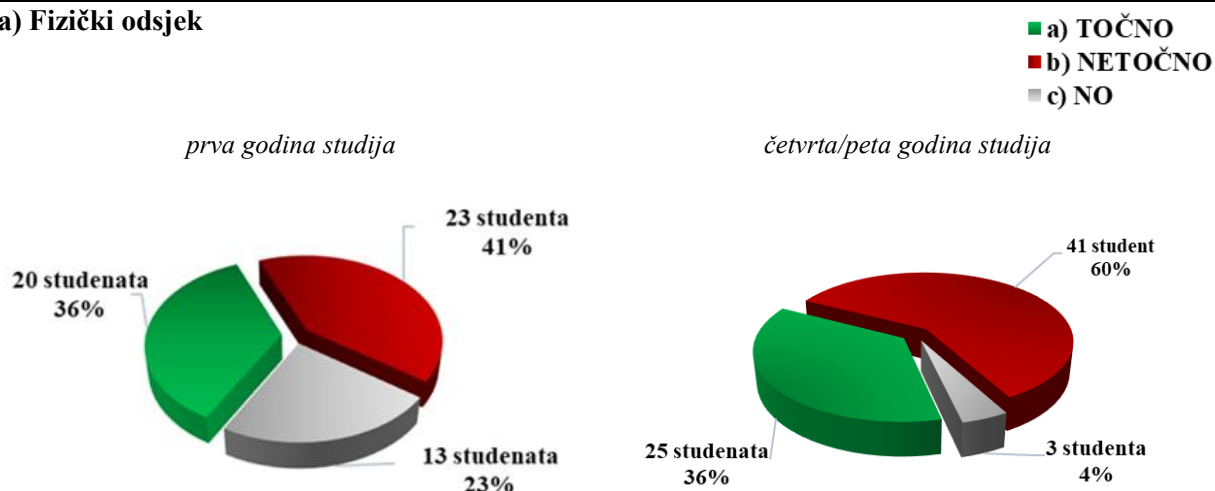


Slika 15. Raspodjela pogrešnih objašnjenja određivanja valencije atoma kemijskog elementa u jednostavnijim kovalentnim spojevima svih nastavnčkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka

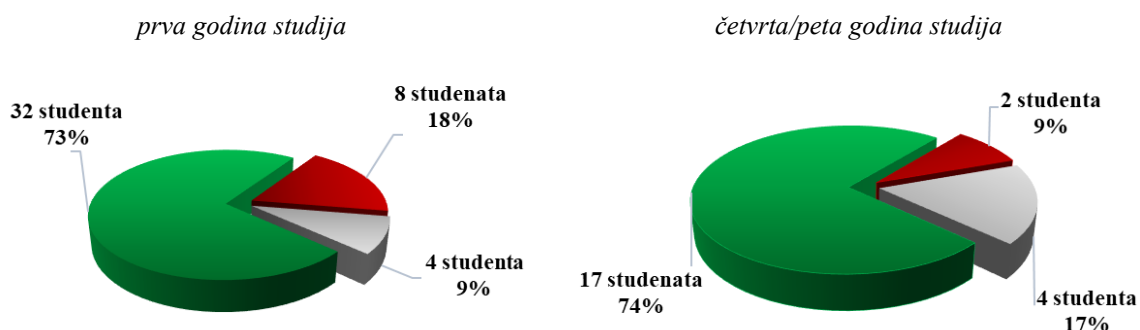
Detaljnijim pregledom rezultata studentska objašnjenja podijeljena su na dvije skupine; točno i netočno određene valencije (i pripadajuće objašnjenje) atoma kemijskog elementa u kovalentnim spojevima. Važno je napomenuti da usprkos tome što je više studenata Kemijskog odsjeka točno odredilo valenciju atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju (73,1 %) od studenata Fizičkog odsjeka (36 %), studentske poteškoće vezane za određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju su prisutna i kod odgovora kod kojih je valencija atoma nekog kemijskog elementa bila točno određena.

Valenciju je odredilo točno 36 % studenata Fizičkog odsjeka prve godine studija, dok je 73 % studenata Kemijskog odsjeka prve godine točno odredilo valenciju atoma u kovalentnim spojevima. Prema obradi točnih odgovora studenata četvrte/pete godine studija Fizičkog i Kemijskog odsjeka uočeno je da studenti više godine imaju jednak postotak točnih odgovora kao i studenti prve godine studija. Kod studenata Fizičkog odsjeka broj netočnih odgovora je porastao (prva godina (41 %), četvrta/peta godina (60 %)), dok se kod studenata Kemijskog odsjeka smanjio (prva godina (18 %), četvrta/peta godina (9 %)). Obrada podataka točnih i netočnih odgovora određivanja valencije atoma u kovalentnom spoju prikazana je na slici 16.

a) Fizički odsjek



b) Kemijski odsjek



Slika 16. Raspodjela točno i netočno određenih valencija atoma kemijskog elementa u jednostavnijim kovalentnim spojevima svih nastavničkih smjerova a) Fizičkog i b) Kemijskog odsjeka

Kod većine odgovora s točno određenom valencijom uočeno je da pripadajuća objašnjenja određivanja valencije potvrđuju očekivane studentske poteškoće posebno vezane samo za kovalentne spojeve, a dok su analizom netočno određenih valencija atoma uočene i neke dodatne studentske poteškoće.

Tako na primjer, analiza točno određenih valencija (13 studenata) uz objašnjenje I), potvrdila je očekivanu **studentsku poteškoću 3.1.** vezanu za određivanje valencije atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju brojanjem atoma u molekuli, a neki od primjera su:

- „Bor se „spaja“ s 3 atoma vodika pa je trovalentan.“ (anketa 125)
- „Bor je vezan s 3 vodika, a svaki vodik s jednim atomom bora.“ (anketa 102)
- „Atom vodika je jednovalentan, a valencija atoma bora odredi se brojanjem atoma vodika vezanih na nj.“ (anketa 114)
- „Preko broja vezanih atoma.“ (anketa 126)

Analizom objašnjenja I) netočno određenih valencija (9 studenata) uočena je dodatna studentska poteškoća, poistovjećivanje valencije atoma kemijskog elementa s indeksom, odnosno brojem atoma u molekuli:

- „Bor je samo jedan, a H ima tri.“ (B(I), H(III)) (anketa 164)
- „U spoju se nalaze 3 vodika i jedan dušik.“ (B(I), H(III)) (anketa 125)

Obradom objašnjenja II) točno određenih valencija (20 studenata) uočena je **studentska poteškoća 3.2.**, a neki od odgovora su:

- „Bor stvara ukupno tri veze s atomima vodika, a svaki vodik stvara po jednu vezu s atomom bora.“ (anketa 5)
- „B ostvaruje 3 veze, a H jednu.“ (anketa 29)
- „Bor tvori tri veze, vodik jednu.“ (anketa 110)
- „3 crtice iz B, nema ih iz H.“ (anketa 162)

Kod netočnih odgovora (14 studenata) uočena je dodatna studentska poteškoća, poimanje neveznih elektrona atoma s kemijskom vezom. Nekolicina studenata je nepodijeljene elektrone atoma opisala kemijskim vezama odnosno „priključcima“ na koje se mogu vezati atomi. Neki od primjera su:

- „N ima 5 veza na koje dolazi H, H ima jedan pa je I.“ (N(V), H(I)) (anketa 163)
- „Peterovalentan jer tako su iskorištene samo 3 veze u ovom slučaju.“
(N(V), H(I)) (anketa 169)
- „Dušik veže tri vodika i ostaju mu dvije slobodne veze.“ (N(V), H(I)) (anketa 179)
- „Ovaj N ima 2 neiskorištena priključka pa je ukupno 5.“ (N(V), H(I)) (anketa 180)

Zanimljivo je da usprkos učestalijem susretanju s pojmom kemijske veze, kod niti jednog

studenta Kemijskog odsjeka koji je netočno odredio valenciju atoma kemijskog elementa u kovalentnim spojevima nije uočena prisutna studentska poteškoća 3.2.

Studenti kod kojih je uočena **studentska poteškoća 3.4.** imali su približan postotak točno i netočno određenih valencija atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju. Kod točnih odgovora uočen je obrazac rješavanja po kojoj je određivana valencija atoma (matematičkim računom), dok kod netočnih odgovora, valencija atoma je doslovno poistovjećena sa skupinom periodnog sustava elemenata u kojoj se taj element nalazi, a primjeri su:

- „Iz pse.“ (O(VI), H(I)) (anketa 37)
- „Na temelju poretka u periodnom.“ (Cl(VII), H(I)) (anketa 80)
- „Kisik je pripadnik 16. skupine $\rightarrow 16 - 10 = 6$.“ (O(VI), H(I)) (anketa 157)

Prilikom obrade podataka uočeno je da kod niti jednog studenta Kemijskog odsjeka četvrte/pete godine nije prisutna poteškoća 3.4.

U studentskim odgovorima uočena je i **studentska poteškoća 3.5.**, poistovjećivanje valencije i oksidacijskog broja atoma nekog kemijskog elementa, a jedan od primjera je:

- „Ugljik je (IV) jer se nalazi u 14 skupini, a vodik (-I).“ (C(IV), H(-I)) (anketa 22)
- $$\begin{aligned} & „ 4 + 4x = 0 \\ & 4x = -4 \\ & x = -1 “ \end{aligned}$$

Kod studenata koji su određivali valenciju atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju „brojanjem svih valentnih elektrona” na temelju napisane kemijske i prikazane strukturne formule (**studentska poteškoća 3.6.**) samo je tri studenta točno odredilo valenciju od njih 36. Poteškoća 3.6. je tri puta učestalija kod studenata Fizičkog odsjeka nego kod studenata Kemijskog odsjeka, a primjeri su:

- „Dušik se nalazi u 15. sk. PSE i ima 5 val el. S 3 vodika (je svaki jednoval.) stvara tri kov. veze i ima 1 el. par nesparen.“ (N(V), H(I)) (anketa 123)
- „Tri elektrona su otišla na vodike, 2 su ostala.“ (N(V), H(I)) (anketa 173)
- „Broj veza + točkice.“ (N(V), H(I)) (anketa 183)
- „Kisik ima 6 valentnih elektrona a vodik jedan.“ (O(VI), H(I)) (anketa 1)
- „Analogno b). Broj crtica ili točkica oko O je 6.“ (O(VI), H(I)) (anketa 161)

Prilikom obrade objašnjenja uočene su dvije dodatne studentske poteškoće. Prva je nepoznavanje terminologije vezane uz pojmo veznih/neveznih elektrona i slobodnog elektrona gdje se ta dva pojma poistovjećuju:

- „Brojim veze i slobodne elektrone.“ (Cl(VII), H(I)) (anketa 156)
- „Cl je sa jednim elektronom povezan, a ima 6 slobodnih te je stoga sedmerovalentan.“
- „Vodik je I, a klor VII zbog 1 kovalentne veze + 6 slobodnih elektrona.“ (Cl(VII), H(I)) (anketa 82)
- „N ima 5 sl. e⁻, vezao se s 3H, dva su mu ostala slobodna.“ (N(V), H(I)) (anketa 137)

Druga dodatna studentska poteškoća je nerazlikovanje neveznih/veznih elektrona i nepoznavanje činjenice koji elektroni općenito sudjeluju u izgradnji jednostruke kemijske veze:

- „Na N smo stavili tri H i imamo još dvije nesparene veze.“ (N(V), H(I)) (anketa 158)
- „H ima samo jednu vezu, N prima 3 atoma H i ima još 2 slobodna mjesta.“ (N(V), H(I)) (anketa 172)
- „Zbog valentnih crtica.“ (N(V), H(I)) (anketa 72)
- „Zbog točkica.“ (N(II), O(IV)) (anketa 90)
- „Vodik je u prvom stupcu. Klor je četverovalentan jer postoje još 3 mjesta gdje se mogu vezati ostali elementi.“ (Cl(IV), H(I)) (anketa 174)
- „Atomu klora je ostalo još 6 elektrona osim jednog kojim se spojio s atomom vodika.“ (Cl(IV), H(I)) (anketa 141)

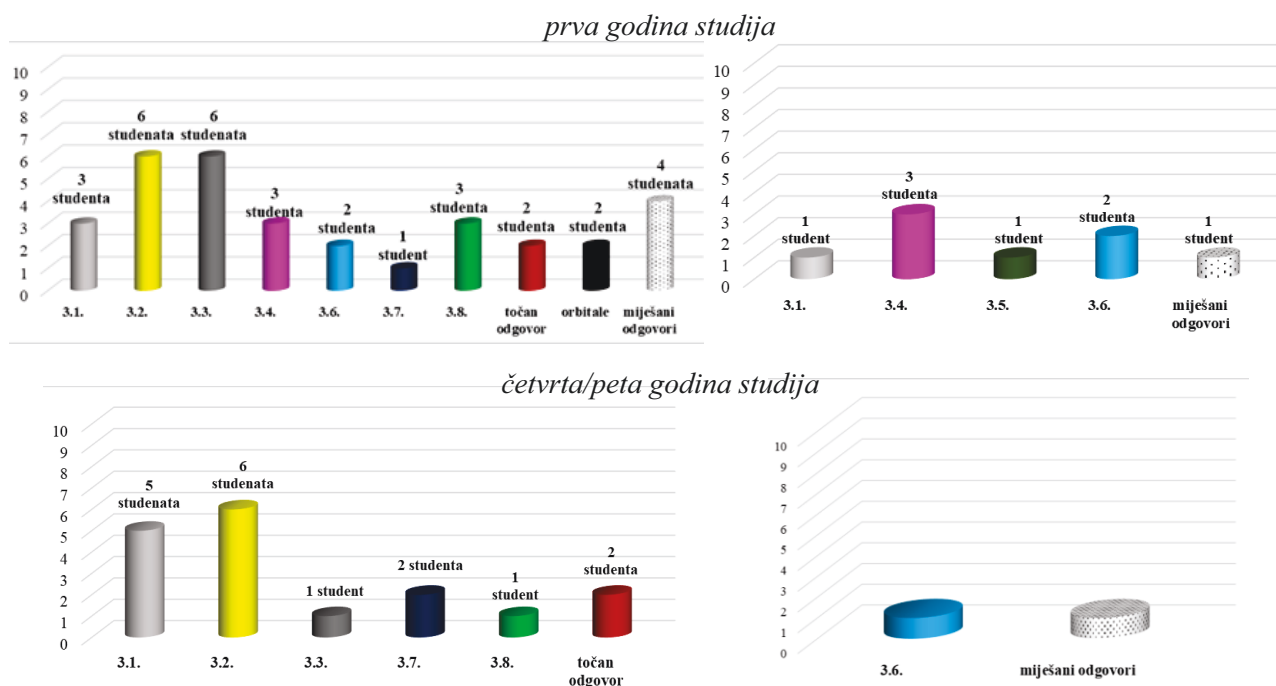
Svi studenti koji su određivali valenciju atoma kemijskog elementa u kovalentnom spoju brojanjem otpuštenih ili primljenih elektrona kako bi se postigla elektronska konfiguracija najbližeg plemenitog plina (**poteškoća 3.3.**) odredili su je točno.

Analizom objašnjenja studenata Kemijskog odsjeka točnih i netočnih odgovora uočeno je da se broj studentskih poteškoća smanjio i kod jednih i kod drugih s obzirom na godinu studija. Tako je na prvoj godini uočeno 10 vrsta studentskih poteškoća, dok se na četvrtoj/petoj godini studija taj broj smanjio na 6 studentskih poteškoća. Kod studenata Fizičkog odsjeka koji su odgovorili točno također je uočen isti trend, broj studentskih poteškoća se smanjio s 8 na 5 (slika 17.)

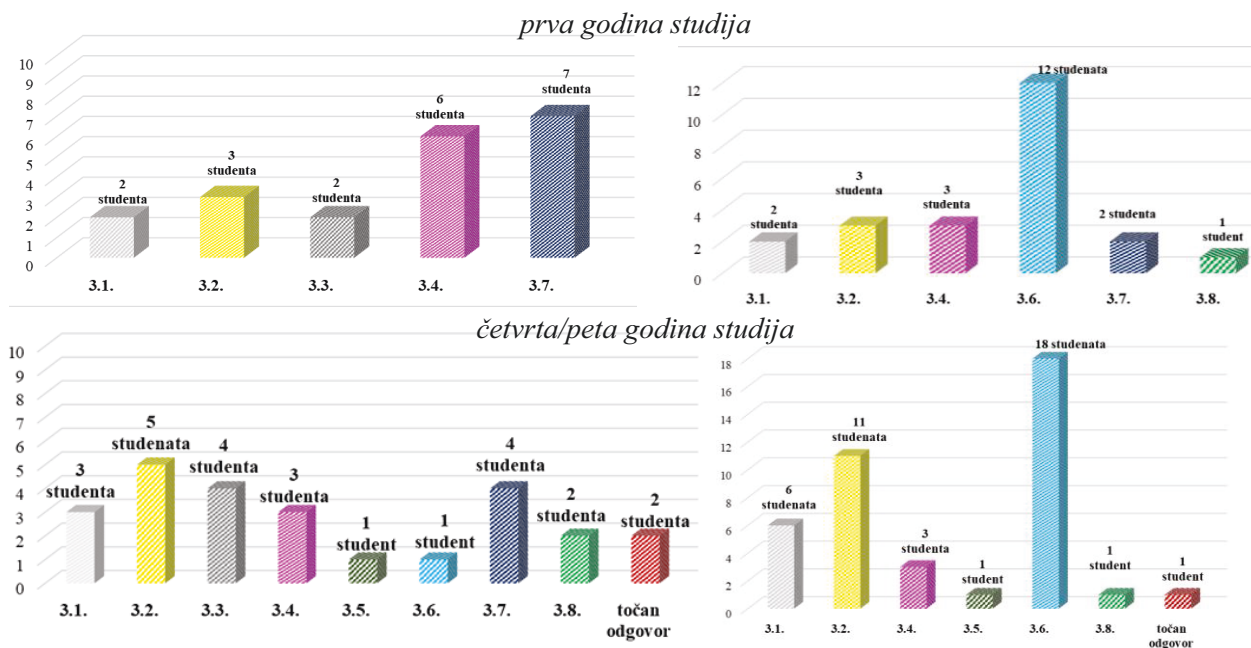
točno određene valencije u zadatku

netočno određene valencije u zadatku

a) Kemijski odsjek

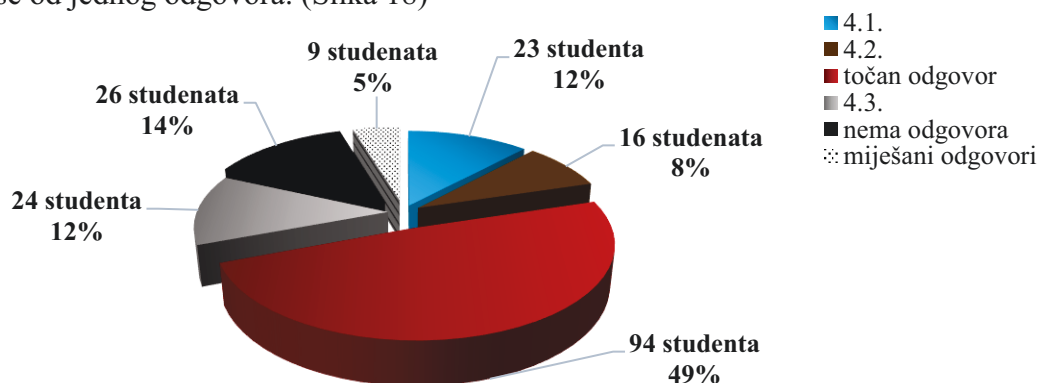


a) Fizički odsjek



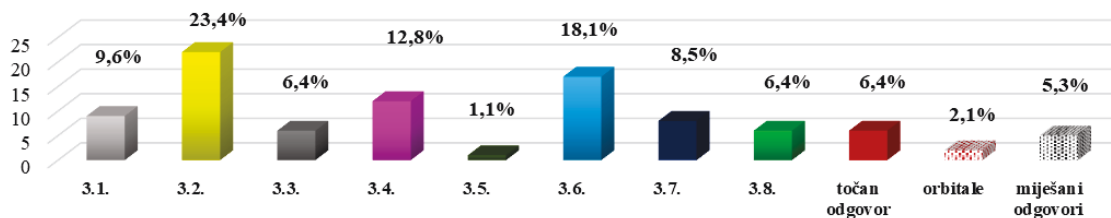
Slika 17. Brojnost pogrešnih shvaćanja studenata svih nastavničkih smjerova po godini studija

Valenciju atoma kemijskog elementa nije analiziralo 26 studenata (13,5 %), dok je podjednak broj studenata poistovjetilo valenciju atoma u kovalentnom spoju s brojem svih valentnih elektrona u atomu (**poteškoća 4.1.**, 23 studenata; 12 %) i s brojem atoma drugih elemenata s kojima je atom povezan (**poteškoća 4.3.**, 24 studenata; 12,5 %). Kod manjeg broja studenata je uočena **poteškoća 4.2.** (16 studenata, 8,3 %), a samo 9 studenata (4,7 %) je zaokružilo više od jednog odgovora. (Slika 18)



Slika 18. Raspodjela odgovora na treće pitanje drugog zadatka

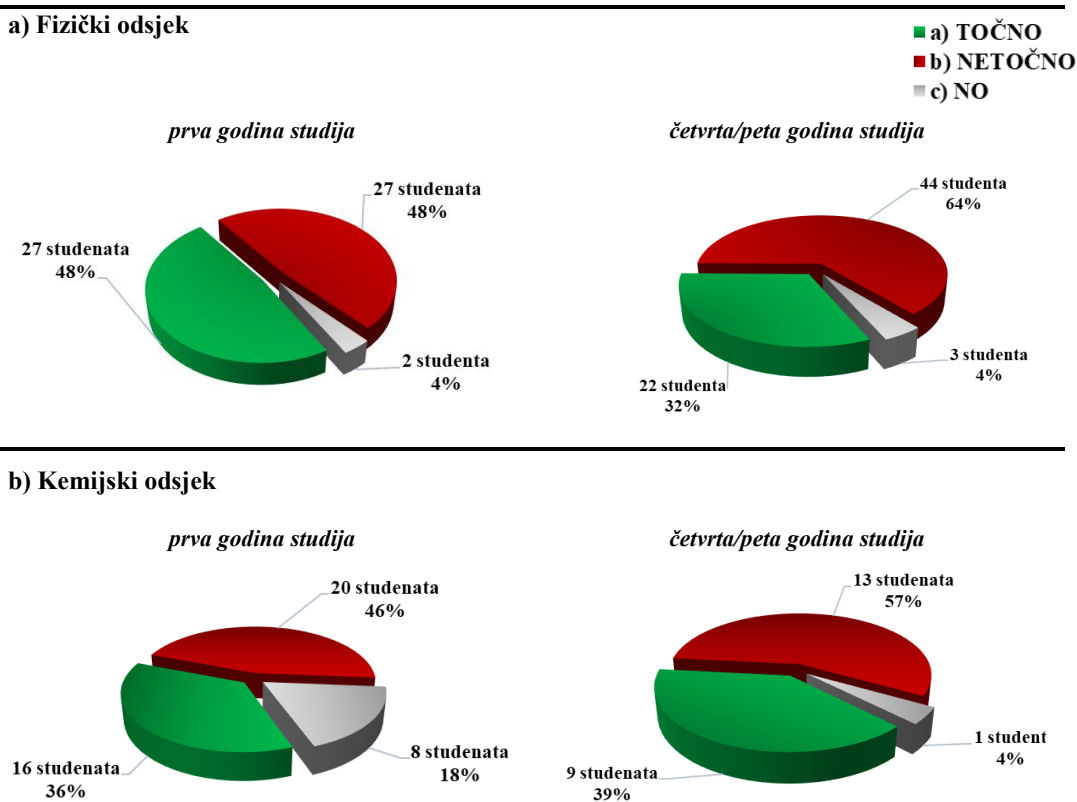
Najviše studenata je poistovjetilo valenciju atoma kemijskog elementa s valentnim elektronima kojima taj atom sudjeluje u kemijskom vezivanju (94 studenata, 49 %) te je time i točno odgovorilo na treće pitanje drugog zadatka. Međutim detaljnijom analizom točnih odgovora na treće pitanje uočeno je da studenti nisu bili konzistentni sa svojim prethodnim odgovorima. Tako od ukupno 94 studenata koje je točno odgovorilo na treće pitanje je netočno odredilo valenciju (29 studenata, 39 %), a samo je 6 studenata prethodno dalo točno obrazloženje određivanja valencije atoma u kovalentnom spoju. Obradom podataka uočeno je da je većina studenata koje je točno odgovorila na treće pitanje drugog zadatka pokazala pogrešna shvaćanja na prethodnim pitanjima što ukazuje na veliki postotak prisutnosti naučenog znanja koje studenti nisu u mogućnosti primijeniti. Raspodjela pogrešnih shvaćanja koja su uočena na prethodnim pitanjima kod studenata koji su točno odgovorili na treće pitanje drugog zadatka je na slici 19.



Slika 19. Raspodjela uočenih poteškoća kod studenata koji su točno odgovorili na treće pitanje drugog zadatka

5.2.1. Valencija atoma nekog kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima

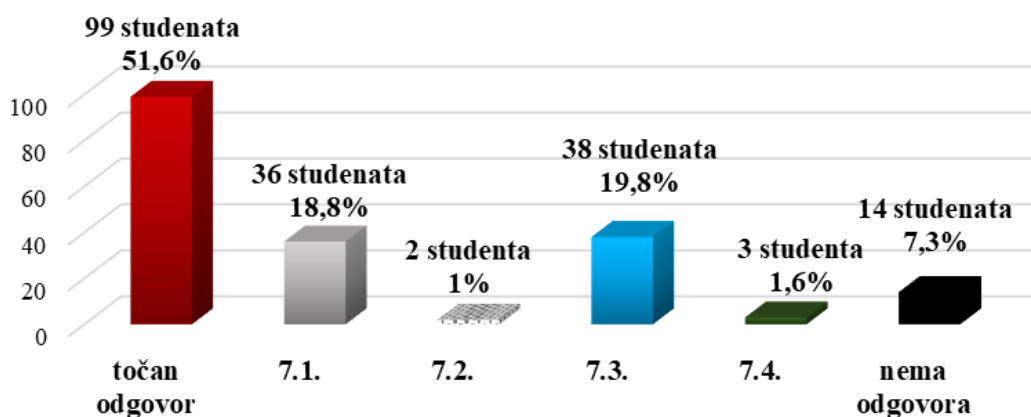
Obradom podataka analizirani su odgovori dvaju pitanja trećeg zadatka. U prvom pitanju studenti su morali razlučiti valenciju atoma kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima ($[\text{BH}_4]^-$, $[\text{NH}_4]^+$, H_3NBH_3 , $[\text{H}_3\text{O}]^+$), dok se drugim pitanjem ispitala procjena tvrdnji kojima je opisan pojam valencija atoma kemijskog elementa. Obradom studentskih odgovora na prvo pitanje uočeno je da je na višoj kognitivnoj dimenziji (analizi) porastao broj netočno određenih valencija. Tako je 54,2 % studenata netočno odredilo valenciju atoma kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima. Za razliku od drugog zadatka gdje je ukupno 94 (49 %) studenata točno odredilo valenciju atoma kemijskog elementa, valenciju atoma kemijskog elementa u trećem zadatku je točno odredilo 74 studenta (38,5 %), a 14 studenata (7,3 %) nije odgovorilo na prvo pitanje trećeg zadatka. Obrada podataka točnih i netočnih odgovora određivanja valencije atoma u nabijenim kovalentnim spojevima prikazana je na slici 20.



Slika 20. Raspodjela točno i netočno određenih valencija atoma kemijskog elementa u nabijenim kovalentnim spojevima svih nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka

Prema obradi podataka uočeno je da je više studenata Fizičkog odsjeka prve godine studija (48 %) točno odredilo valenciju atoma kemijskog elementa od studenata Kemijskog odsjeka prve godine (36 %). Analizom podataka uočen je također i porast netočnih odgovora s obzirom na godinu studija i kod studenata Kemijskog i Fizičkog odsjeka. Tako je 48 % studenata prve godine Fizičkog odsjeka odredilo netočno valenciju atoma, a na petoj godini se ta vrijednost povećala na 64 %. Kod studenata Kemijskog odsjeka uočen je isti trend, 36 % studenata prve godine Kemijskog odsjeka odredilo je netočno valenciju atoma, a na petoj godini se ta vrijednost povećala čak na 57 %.

Valenciju atoma kemijskog elementa u nabijenom kovalentnom spoju s valentnim elektronima kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju poistovjetilo je 99 studenata (51,6 %), dok su **poteškoće 7.1.** (36 studenata) i **7.3.** (38 studenata) podjednako zastupljene, a obrada podataka odgovora na drugo pitanje trećeg zadatka prikazana je na slici 21.



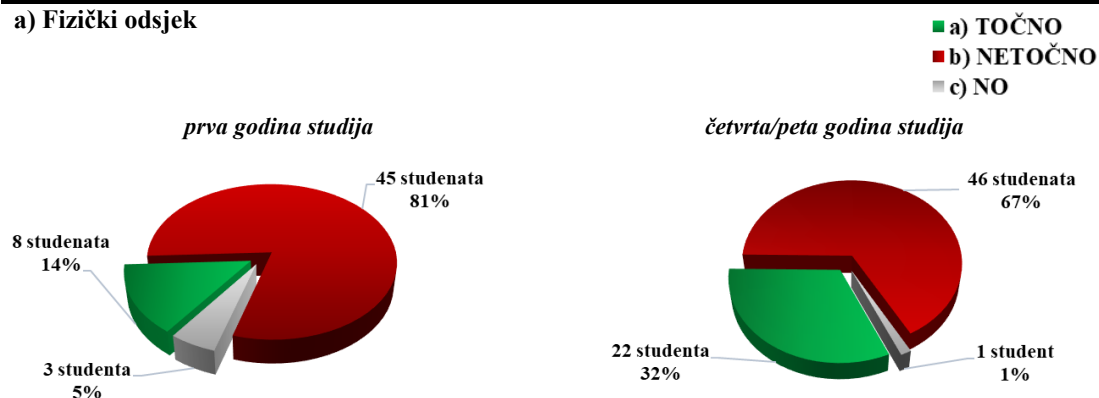
Slika 21. Raspodjela odgovora na drugo pitanje trećeg zadatka

Također, važno je napomenuti da iako je najviše studenata poistovjetilo valenciju atoma kemijskog elementa s valentnim elektronima kojima taj atom sudjeluje u kemijskom vezivanju, detaljnijom analizom navedenih odgovora uočeno je da većina tih studenata nije bila konzistentna sa svojim prethodnim odgovorima. Tako od ukupno 99 studenata koje je točno odgovorilo na drugo pitanje, 69 studenata (69,7 %) je prethodno netočno odredilo valenciju što ukazuje na prisutnost naučenog znanja kod studenata koje se nije primijenilo na drugo pitanje trećeg zadatka.

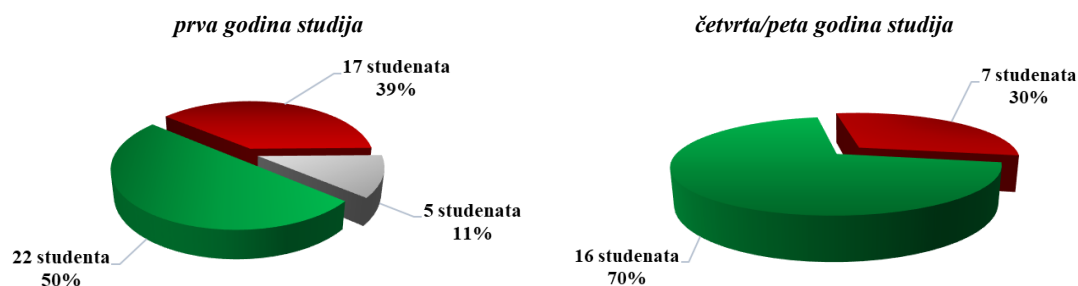
5.2.2. Valencija atoma nekog kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama

Četvrti zadatak kao i treći također ima dva pitanja. Prvim pitanjem studenti su morali analizirati kovalentne spojeve s višestrukim vezama i razlučiti valenciju atoma kemijskog elementa u zadanim spojevima (C_2H_4 , C_2H_2 , H_2O_2 , SO_3) dok se drugim pitanjem ispitala procjena tvrdnji kojima je opisan pojam valencija atoma kemijskog elementa. Kao i treći zadatak, četvrti zadatak je zadatak četvrte razine Bloomove taksonomije te je obradom studentskih odgovora na prvo pitanje uočen porast netočno određenih valencija atoma kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama. Tako je 59,9 % studenata (115) netočno odredilo valenciju atoma, 35,4 % studenata (68) je točno odredilo valenciju atoma, dok od 192 studenata samo 9 studenata (4,7 %) nije odgovorilo na prvo pitanje četvrtog zadatka. Obrada podataka točnih i netočnih odgovora određivanja valencije atoma u nabijenim kovalentnim spojevima svih nastavničkih smjerova prikazana je na slici 22.

a) Fizički odsjek

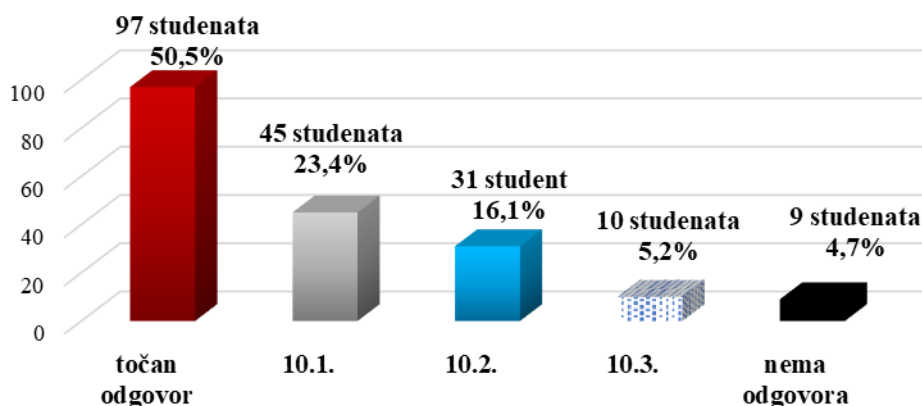


b) Kemijski odsjek



Slika 22. Raspodjela točno i netočno određenih valencija atoma kemijskog elementa u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama svih nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka

Za razliku od trećeg zadatka, studenti Fizičkog odsjeka i prve i pete godine studija imaju više netočno određenih valencija atoma u kemijskom elementu nego od studenata Kemijskog odsjeka. Kod studenata i Kemijskog i Fizičkog odsjeka se smanjio postotak netočnih odgovora i povećao postotak točnih odgovora porastom godine studija. Detaljnijom obradom podataka uočeno je da je 97 studenata (50,5 %) procijenilo valenciju atoma nekog kemijskog elementa kao valentne elektrone kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama. Od pogrešnih shvaćanja kod studenata je najviše zastupljena **poteškoća 10.1.** (45 studenata; 23,4 %) dok su **poteškoće 10.2.** i **10.3.** kod studenata zastupljene u nešto manjem broju. Na drugo pitanje četvrtog zadatka nije odgovorilo 9 studenata (4,7 %), a obrada podataka odgovora na drugo pitanje četvrtog zadatka prikazana je na slici 23.

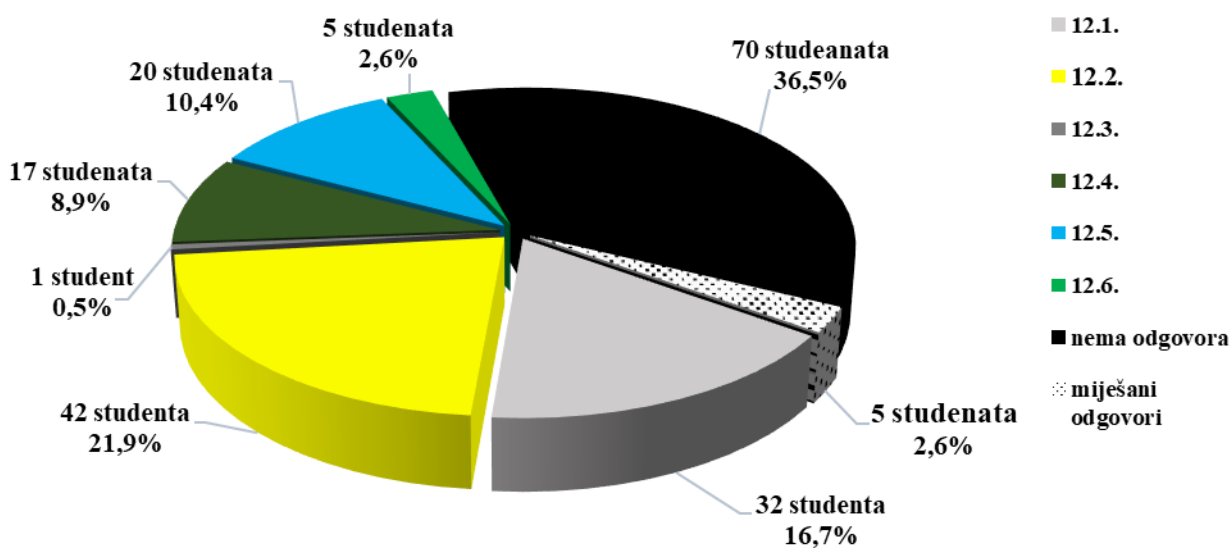


Slika 23. Raspodjela odgovora na drugo pitanje četvrtog zadatka

Kao i u trećem zadatku najviše je studenata procijenilo valenciju atoma kemijskog elementa s valentnim elektronima kojima taj atom sudjeluje u kemijskom vezivanju. Međutim, za razliku od trećeg zadatka uočeno je da se broj nekonzistentnih odgovora smanjio. Tako je 47,4 % studenata točno odgovorilo na drugo pitanje, ali je prethodno netočno odredilo valenciju atoma u kovalentnim spojevima s višestrukim vezama.

5.3. Valencija atoma nekog kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima

Obradom podataka petog zadatka analizirani su odgovori triju pitanja. Analiza podataka dala je uvid u raspodjelu odgovora koji obuhvaćaju točno/netočno određene valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju, objašnjenja na koji način se je odredila valencija i evaluacije pojma valencija atoma u koordinacijskom spoju. Analizom podataka uočen je značajan porast broja studenata koji nisu dali objašnjenje (70 studenata, 36,5 %) i koji su netočno odredili valenciju atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju (103 studenta, 53,6 %). Samo je 19 studenata (9,9 %) točno odredilo valenciju atoma. Budući da je velik broj anketa isključen iz obrade podataka, analiza petog zadatka nije rađena posebno nad studentima prve/pete godine ili nad studentima Fizičkog/Kemijskog odsjeka. Daljnjom analizom objašnjenja pokazalo se je da su **studentske poteškoće 12.2.** (21,9 %), **12.1.** (16,7 %), **12.5.** (10,4 %) i **12.4.** (8,9 %) najučestalije. Učestalost studentskih poteškoća prikazana je na slici 24.



Slika 24. Raspodjela pogrešnih objašnjenja određivanja valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima svih nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka

Studenti su najučestalije određivali valenciju atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju “brojanjem veza” na temelju shematskog prikaza strukturne formule, a samo neki od odgovora su sljedeći:

- „6 veza s amonijakom.“ (Co(VI)), (anketa 32)
- „Broj veza kojim je atom vezan za druge čestice.“ (Co(VI)), (anketa 40)
- „Vidim 6 crtica.“ (Cu(VI)), (anketa 68)
- „Šest veza pa je šesterovalentan.“ (Co(VI)), (anketa 175)

Nesmotreno, ne vodeći računa o shematskom prikazu, u petom zadatku koordinacijski spoj $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ je nacrtan shematskim prikazom valentnih crtica, dok je kompleks $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ prikazan klinastom formulom. Prilikom obrade podataka uočeno je da su neki od studenata to primijetili te na temelju različitog shematskog prikaza različito i odredili valencije atoma u zadanim spojevima, dok je neke to samo zbunjivalo. Neki od primjera su:

- anketa 77: „Jer ima 6 veza s dušikom.“ (Co(VI))
„Jer ima dvi veze.“ (Cu(II))
- anketa 100: „Broj crtica kao kovalentnih veza.“ (Co(VI))
„Ne znam odgovor.“
- anketa 162: „Šest crtica iz co prema NH_3 .“ (Co(VI))
„Dvije pune crtice, u kontradikciji s gornjim primjerom.“ (Cu(II))

Obradom podataka **poteškoća 12.1.** je druga najučestalija uočena poteškoća među studentima, a ovo su samo neki od odgovora:

- „Po tome koliko se molekula vezalo na njega.“ (Co(VI)), (anketa 38)
- „Zato što je kobalt povezan s 6 molekula amonijaka..“ (Co(VI)), (anketa 41)
- „Zato što je povezan s još 6 drugih elemenata.“ (Co(VI)), (anketa 49)
- „6 atoma je na Co.“ (Co(VI)), (anketa 58)
- „Na temelju s koliko je atoma Co u vezi.“ (Co(VI)), (anketa 80)
- „Co je vezan s 6 atoma.“ (Co(VI)), (anketa 144)
- „Co je vezan s 6 atoma H_3N .“ (Co(VI)), (anketa 147)

U odgovorima je uočeno nepoznavanje terminologije pojmova molekule i atoma i pripadajućih kemijskih formula. Bilo je i studenata koji su određivali valenciju atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju brojanjem atoma (**poteškoća 13.3.**):

- „Zato jer je jedan Co.“ (Co(I)), (anketa 90)
- „Gledam samo broj atoma pojedinog elementa.“ (Co(I)), (anketa 131)

Studenti kod kojih je bila uočena **poteškoća 12.4.** većinom su točno odredili valenciju atoma u koordinacijskom spoju, ali su valenciju povezali s apsolutnom vrijednošću nabojnog broja kemijskog spoja, a ne valentnim elektronima kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju. Neki od odgovora su:

- „Valencija kobalta nam ovdje govori naboj iona, tj. kobalt je trovalentan.“ (Co(III)), (anketa 4)
- „Ovisi o nabojnom broju.“ (Co(III)), (anketa 24)
- „Jer je molekula nabijena 3+.“ (Co(III)), (anketa 35)
- „Zbog ovog 3+ gore.“ (Co(III)), (anketa 47)
- „Naboj vrste je +3 (što dolazi od naboja Co).“ (Co(III)), (anketa 105)

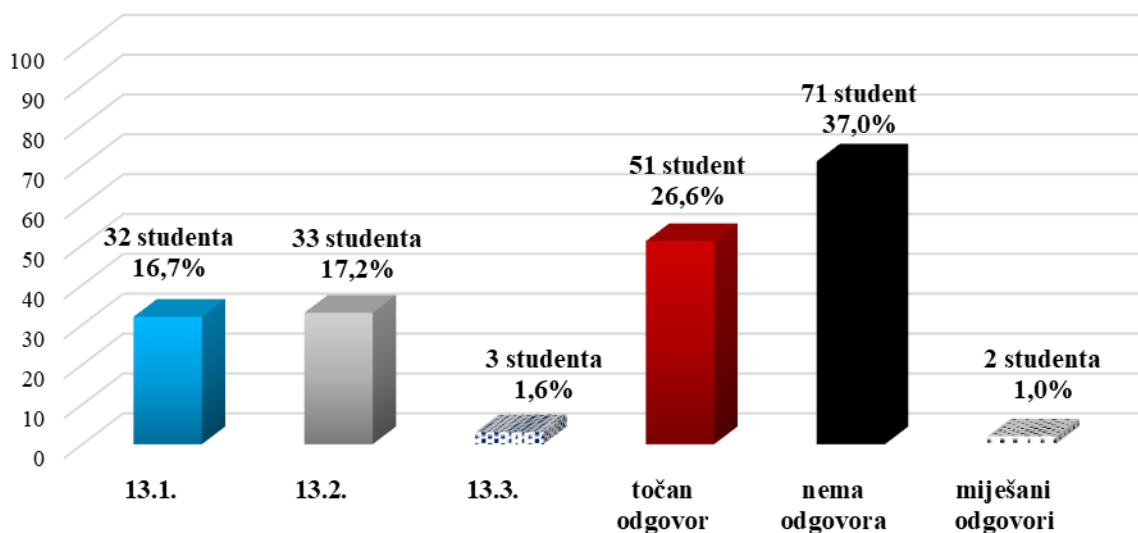
Među studentima koji su netočno odredili valenciju atoma u koordinacijskom spoju uočeno je nepoznavanje razlike između valencije i oksidacijskog broja te su sukladno tome valencije tretirali kao pozitivne ili negativne vrijednosti, a neki od odgovora su:

- „Zbroj valencija mora biti jednak naboju izvan zagrade.“ (Co(+III)), (anketa 2)
- „Zbog nabojnog broja.“ (Co(+III)), (anketa 14)
- „NH₃ je zbroj 0, a ukupno mora biti 3+, pa Co je -III.“ (Co(-III)), (anketa 138)

Za razliku od drugog zadatka, studentska objašnjenja oblika VII) (**poteškoća 12.5.**) su manje učestala kod studenata, a samo neki od učestalijih odgovora su:

- „Sudjeluje sa šest elektrona iz valentne ljuske u vezivanju.“ (Co(VI)), (anketa 18)
- „6 valentnih e⁻ je uspostavilo vezu s NH₃ pa je atom 6-valentan.“ (Co(VI)), (anketa 25)
- „Ima 6 slobodnih elektrona koji sudjeluju u kemijskoj reakciji.“ (Co(VI)), (anketa 73)
- „Co je šesterovalentan jer sa svojih 6 elektrona sudjeluje u vezanju.“ (Co(VI)), (anketa 129)

Na treće pitanje petog zadatka nije odgovorio 71 student, a analizom podataka uočeno je da su **poteškoće 13.1. i 13.2.** približno jednako zastupljene. Tako je 33 studenta (17,2 %) evaluiralo valenciju atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju kao broj svih valentnih elektrona u atomu, dok je 32 studenta (16,7 %) evaluiralo valenciju atoma kemijskog elementa kao broj vezanih atoma drugog kemijskog elementa u koordinacijskom spoju. Obrada podataka odgovora na drugo pitanje četvrtog zadatka prikazana je na slici 25.

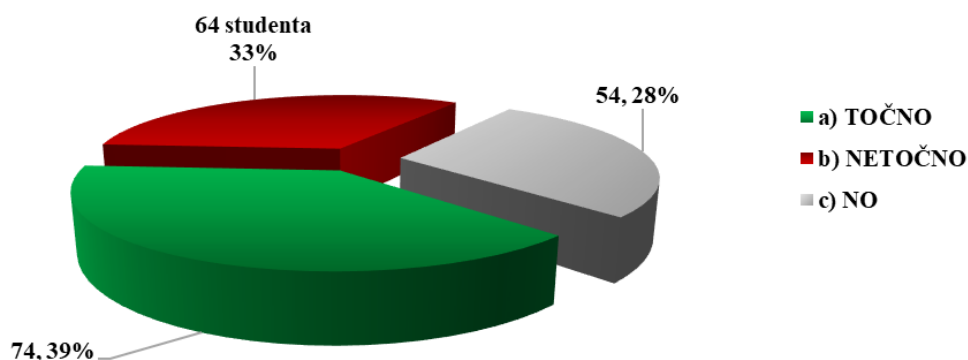


Slika 25. Raspodjela odgovora na drugo pitanje četvrtog zadatka

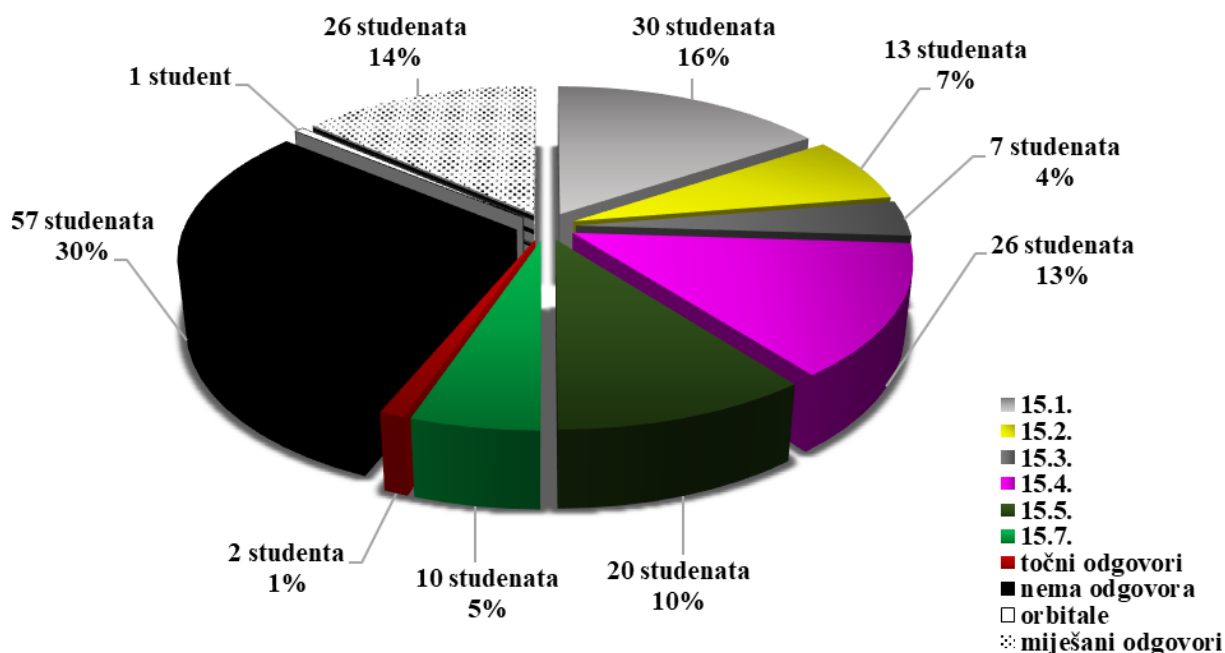
Iako je najviše studenata (51 student, 26,6 %) evaluiralo valenciju atoma kemijskog elementa kao valentne elektrone kojima taj atom sudjeluje u kemijskom vezivanju te na taj način odgovorilo točno na treće pitanje petog zadatka, detaljnijom analizom navedenih odgovora uočeno je da većina tih studenata nije bila konzistentna sa svojim prethodnim odgovorima. Detaljnijom analizom uočeno je da većina tih studenata prethodno netočno odredila valenciju. Od 51 studenta čak 72,7 % studenata je prethodno netočno odredilo valenciju atoma kemijskog elementa u koordinacijskom spoju. Broj nekonzistentnih odgovora je porastao s obzirom na prethodne zadatke što je sukladno s višom kognitivnom razinom zadatka (peti zadatak je na petoj razini Bloomove taksonomije, razini vrednovanja) te je ovakav rezultat i očekivan. Kao i u prethodnim pitanjima ovakvog tipa uočeno je da većina studenata nije bila u mogućnosti primijeniti naučeno znanje na treće pitanje petog zadatka.

5.4. Valencija atoma nekog kemijskog elementa u ionskim spojevima

Obradom podataka šestog zadatka analizirani su odgovori triju pitanja kao i u prethodnim zadacima (drugom i petom.) Analiza podataka dala je uvid u raspodjelu odgovora koji obuhvaćaju točno/netočno određene valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju, objašnjenja na koji način se je odredila valencija i kategorizacije pojma valencija atoma u ionskom spoju. Analizom studentskih odgovora uočene se su **studentske poteškoće 15.1., 15.2., 15.3., 15.4., 15.5. i 15.7.** Od 192 studenta, 20 studenata (10 %) povezuje valenciju atoma nekog kemijskog elementa s oksidacijskim brojem, 13 studenata (7 %) povezuje valenciju atoma s ostvarenim kemijskim vezama, dok 7 studenata (4 %) povezuje valenciju atoma s brojem primljenih ili otpuštenih elektrona kako bi se postigla elektronska konfiguracija plemenitih plinova. Za razliku od drugog zadatka gdje je najveći broj studenata pokazivao studentsku poteškoću poimanja valencije kao svih valentnih elektrona (19 %), u ovom zadatku najveći broj studenata (30 studenata, 16 %) pokazuje studentsku poteškoću poimanja valencije s brojem „okolnih“ atoma. Na zadatak nije odgovorilo 57 studenata (30 %), a samo su dva studenta dala točno obrazloženje. Raspodjela odgovora svih studenata nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka prikazana je na slici 27. Detaljnijim pregledom rezultata studentska objašnjenja podijeljena su na dvije skupine; točno i netočno određene valencije (i pripadajuće objašnjenje) atoma kemijskog elementa u kovalentnim spojevima, ali budući da je velik broj anketa isključen iz obrade podataka, analiza šestog zadatka nije rađena posebno nad studentima prve/pete godine ili nad studentima Fizičkog/Kemijskog odsjeka. Statistika točno i netočno određenih valencija kemijskog elementa u ionskom spoju prikazan je na slici 26.



Slika 26. Točno i netočno određene valencije atoma kemijskog elementa u ionskom spoju



Slika 27. Raspodjela pogrešnih objašnjenja određivanja valencije atoma kemijskog elementa u koordinacijskim spojevima svih nastavničkih smjerova Fizičkog i Kemijskog odsjeka

Analizom studentskih odgovora najučestalija studentska poteškoća posebno vezana za ionske spojeve je **studentska poteškoća 15.1.** Samo pet studenata je uz ovo objašnjenje odredilo točno valenciju, dok je većina studenata uz ovo objašnjenje netočno odredila valenciju atoma kemijskog elementa u ionskom spoju, a neki od odgovora su:

- „Ca je povezan s jednim atomom O.“ (O(I)), (anketa 95)
- „Jedan atom Ca se veže s jednim atomom kisika.“ (Ca(I)), O(I)), (anketa 124)
- „Preko broja vezanih atoma.“ (Ca(I)), O(I)), (anketa 126)
- „Ca je vezo jedan atom O, i O je vezan za 1 atom Ca.“ (Ca(I)), O(I)), (anketa 133)
- „Jedan Ca je vezan na 1 O.“ (Ca(I)), O(I)), (anketa 172)

Prilikom obrade objašnjenja uočena je jedna dodatna studentska poteškoća, povezivanje valencije atoma nekog kemijskog elementa s indeksom u kemijskoj formuli:

- „Nema brojeva.“ (Ca(I)), O(I)), (anketa 93)
- „Nema nikakvih drugih brojeva uz molekulsku formulu.“ (W(I)), Cl(VI) Ca(I)), O(I)), (anketa 160)

- „Bez ikakvih donjih brojeva.“ (W(I), Cl(VI) Ca(I)), O(I)), (anketa 162)
- „Brojevi u subskriptu su 1.“ (Ca(I)), O(I)), (anketa 181)

Studenti kod kojih je uočena **poteškoća 15.4.** većinom su točno odredili valenciju atoma u ionskom spoju, ali su valenciju povezali s brojem skupine periodnog sustava elementa, a ne s valentnim elektronima kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju, a samo neki od odgovora su:

- „Kalcij ima valenciju 2 jer se nalazi u 2. skupini PSE. Kisik najčešće ima valenciju II.“ (Ca(II)), O(II)), (anketa 33)
- „Po skupini gdje se nalaze...“ (Ca(II)), O(II)), (anketa 44)
- „Kalcij je u 2 stupcu, a O u 16.“ (Ca(II)), O(II)), (anketa 49)
- „Ca se nalazi u 2. stupcu periodnog znači da je Ca dvovalentan i što znači da je kisik dvovalentan.“ (Ca(II)), O(II)), (anketa 78)
- „Natrij je u 1. stupu, a klor u 17 pa zato su jednovalentni.“ (Na(I)), Cl(I)), (anketa 88)

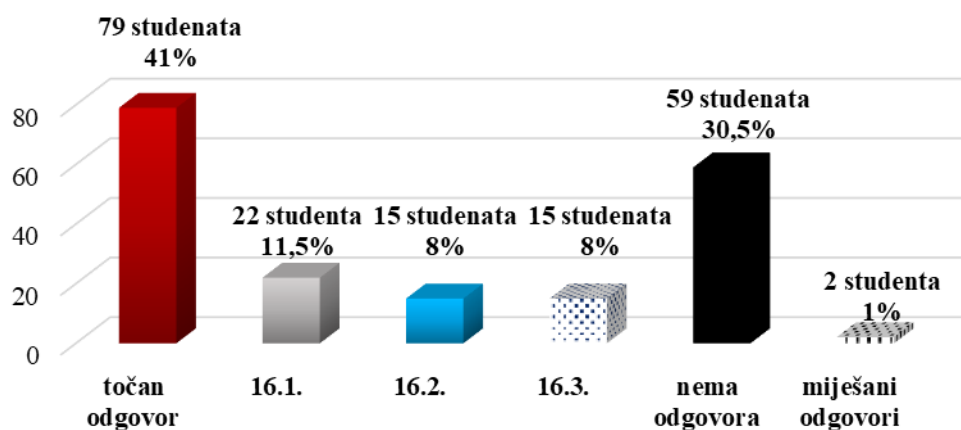
Iako u manjini, bilo je i studentskih odgovora koji su se vodili periodnim sustavom elemenata, a pritom su netočno odredili valenciju atoma nekog kemijskog elementa u ionskom spoju:

- „Periodni sustav.“ (Ca(II)), O(VI)), (anketa 66)
- „Kalcij je u 2. sk PSE a kisik je u 16.“ (Ca(II)), O(VI)), (anketa 123)
- „Iz PSE.“ (Ca(II)), O(VI)), (anketa 159)
- „Periodni sustav.“ (Ca(II)), O(XVI)), (anketa 158)

Obradom podataka **poteškoća 15.5.** je treća najučestalija uočena poteškoća među studentima, gdje studenti ne razlikuju pojam valencije i oksidacijskog broja te sukladno tome valencije tretiraju kao pozitivne ili negativne vrijednosti, a neki od odgovora su:

- „Kisik ima valenciju -II ako nije u peroksidima i superoksidima, a elementi druge skupine imaju valenciju +II.“ (Ca(+II)), O(-II)), (anketa 2)
- „Kisik je -II, a Ca 1-2:1 =II.“ (Ca(+II)), O(-II)), (anketa 82)
- „Zbroj valencija spoja jednak je nuli.“ (Nb(+V)), O(-II)), (anketa 84)
- „O je u 3. skupini od iza pa -II, ukupno mora bit 0, pa je Nb => V.“ (Nb(+V)), O(-II)), (anketa 138)

Na treće pitanje šestog zadatka nije odgovorilo 59 studenata, a analizom podataka uočeno je da su **poteškoće 16.2. i 16.3.** jednako zastupljene dok je 22 studenta (11,5 %) evaluiralo valenciju atoma kemijskog elementa u ionskom spoju kao broj vezanih atoma drugog kemijskog elementa u ionskom spoju (**studentska poteškoća 16.1.**) Obrada podataka odgovora na drugo pitanje šestog zadatka prikazana je na slici 28.

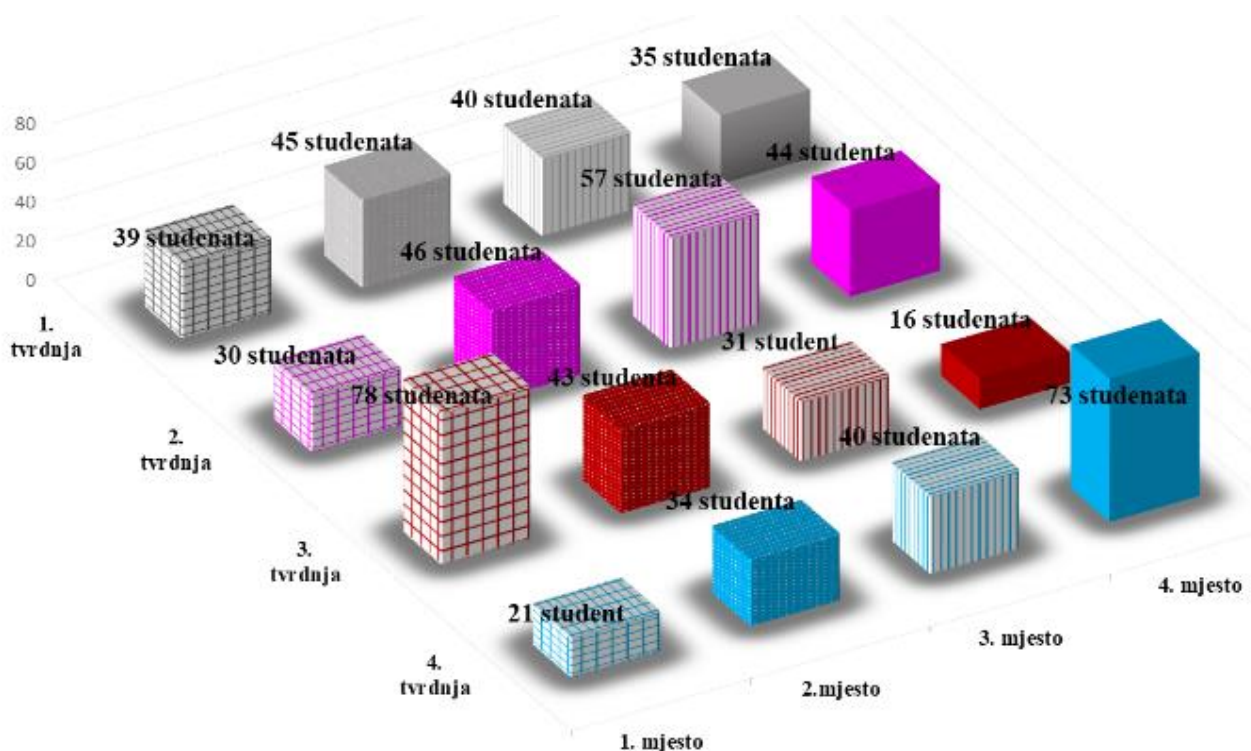


Slika 28. Raspodjela odgovora na treće pitanje šestog zadatka

Najviše studenata je poistovjetilo valenciju atoma kemijskog elementa s valentnim elektronima kojima taj atom sudjeluje u kemijskom vezivanju (79 studenata, 41 %) te je time i točno odgovorilo na treće pitanje šestog zadatka. Međutim detaljnijom analizom točnih odgovora na treće pitanje uočeno je da studenti nisu bili konzistentni sa svojim prethodnim odgovorima. Tako od ukupno 79 studenata koje je točno odgovorilo na treće pitanje je netočno odredilo valenciju (25 studenata, 32 %), a samo je dvoje studenata prethodno dalo točno obrazloženje određivanja valencije atoma u kovalentnom spoju. Obradom podataka uočeno je da je većina studenata koje je točno odgovorila na treće pitanje šestog zadatka pokazala pogrešna shvaćanja na prethodnim pitanjima što ukazuje na veliki postotak prisutnosti naučenog znanja koje studenti nisu u mogućnosti primijeniti. Ovaj rezultat potvrđuje, bez obzira na učestalost u *Nastavnom planu i programu*, podjednak postotak prisutnosti naučenog znanja koje studenti nisu u mogućnosti primijeniti na kovalentnim, koordinacijskim i ionskim spojevima.

5.5. Valencija atoma nekog kemijskog elementa

Na sedmi zadatak nije odgovorilo 24 studenta (12,5 %). Analiza podataka dala je uvid u opće poimanje valencije atoma nekog kemijskog elementa te u kojoj mjeri su prisutni krivi zaključci ili mišljenja oko pojma valencija atoma kemijskog elementa. Tvrdnja 1 u kojoj je valencija opisana kao broj vezanih atoma drugog kemijskog elementa najčešće je stavljena na drugo mjesto (45 studenata, 23,5 %), dok su tvrdnju 2 kojom je valencija određena skupinom periodnog sustava studenti stavljali najčešće na treće mjesto (57 studenata 30 %). Na prvo mjesto studenti su najčešće stavljali tvrdnju 3 u kojoj je valencija atoma određena brojem valentnih elektrona kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju (78 studenata, 41 %). Usprkos činjenici da je tvrdnja 4 kojom je valencija atoma opisana svim valentnim elektronima najčešće stavljena na četvrto mjesto (73 studenata, 38 %), zabrinjavajuće je što zajedno s tvrdnjom 1 ova tvrdnja se nalazi u dosta velikom postotku i na drugom i trećem mjestu što ukazuje na činjenicu na postojanje krivih zaključaka o pojmu valencija atoma kemijskog elementa na općenitoj razini. Raspodjela evaluacije odgovora sedmog zadatka prikazana je na slici 29.



Slika 29. Evaluacija tvrdnji kojom je opisan pojam valencija svih nastavničkih smjerova
Fizičkog i Kemijskog odsjeka

6. DISKUSIJA

Može li se uopće kriviti čitatelja udžbeničke literature ukoliko dođe do krivih zaključaka o valenciji atoma kemijskog elementa kada u niti jednoj navedenoj literaturi¹⁰⁻³¹ ne postoji dogovor, konsenzus ili barem neka zajednička premisa koja bi opisivala koncept takvog temeljnog kemijskog pojma kao što je valencija. Nije li ovo očiti primjer da je metodologiji poučavanja kemije potrebna standardizacija stručnog nazivlja i obrazloženja prilagođenih obrazovnom razdoblju koja zadržavaju znanstvenu točnost? Također, ne pokazuje li ovo možda nemarnost autora udžbenika jer se podvrgavaju minimalizmu koji odgovara metodologiji poučavanja još iz daleke 1939. godine? Ono što je očigledno, je da današnje znanstveno izražavanje u metodologiji poučavanja kemije u primarnom obrazovanju niti približno ne uključuje sve nove spoznaje i znanja. Nadalje, na temelju ovog istraživanja možemo postaviti legitimno pitanje kada nastavnici prestaju ulagati u svoje znanje i pritom nesmotreno učenicima uskraćuju kvalitetnije obrazovanje koje nudi nešto više, nudi inspiraciju i motivaciju za nove kreativne ideje i saznanja i zašto se ne ulažući u obrazovanje prvo osobno pa onda naših učenika zanemaruje činjenica da su odgoj i obrazovanje djece stup suvremenog društva te uz znanost predstavljaju najvažniju strukturnu djelatnost?²⁹

Imajući na umu da je „*Obrazovanje najjače oružje koje se može iskoristiti da bi se promijenio svijet*“ u okviru specifičnog cilja rada pokušano je implementirati trenutna postignuća znanosti i tehnologije u metodologiju poučavanja pojma valencija u nastavi kemije. Vodeći se time, predložena je definicija pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa u početnom poučavanju koji bi bio primjenjiv na ionske i kovalentne spojeve, a na višoj razini znanja i dalje znanstveno konzistentan čime bi se omogućilo točnije znanstveno izražavanje u nastavi kemije: „**Valencija atoma kemijskog elementa je svojstvo atoma koje je određeno brojem (valentnih) elektrona s kojima taj atom sudjeluje u izgradnji kemijske veze u nekom kemijskom spoju.**“

Cilj ove diskusije je potaknuti čitatelja da obavezno razmisli „*Postoji li suvisao način da se toliko sadržajan pojam valencije objasni na nižoj razini, a da i dalje ostane znanstveno konzistentan prateći znanja i spoznaje današnjeg suvremenog doba?*“

7. HUMANA ŠKOLA KEMIJE

7.1. Humana škola

„Kada sam 1976. godine u naslovu jedne knjige koju je izdala nakladnička kuća Hanser postavio pitanje “Što je to Humana škola” želio sam pokazati da u modernoj školi djeca i mladi doduše manje pate, ali da ta škola nije svladala svoju beskorisnost za čovjeka. Ona je stvorila neizbježan i neugodan, otuđen i nezreo odnos – „svejedno je li reformirana ili je još starog kova“. Više se ne radi o prikrivanju zlorabaka i pogrešnih pravaca razvoja. Škola mora postati drugačija jer su i djeca postala drugačija.“³⁰

Humana Škola, Hartmut von Hentig

Hartmut von Hentig je jedan od najoriginalnijih pedagoga koji je uvelike dao doprinos problemima didaktike i školske reforme u razvoju školstva Njemačke. Autor je poznate „Humane škole“ u kojoj iznosi legitimnu činjenicu – da suvremena škola nije savladala „svoju beskorisnost za čovjeka“, na učenje bez kritičke analize i na pamćenje koje postaje odbojno i mučno, stoga nije niti čudno što djeca ne vole ići u školu. Zašto je nastavnicima i učenicima dosadno, koji je uzrok malodušnosti i nepostojanja entuzijazma, zašto su obrazovne institucije „izvori nezrelosti“ i naposljetku zašto obrazovni sustav stvara „ropsku masu mediokriteta“ su samo neka pitanja na koja nam autor nudi odgovore kroz knjigu.

U knjizi je također dan prijedlog i preporuka, odnosno autor je iznio svoje predodžbe kako ponovno humanizirati školu. Među ostalima, navedeno je da je potrebno mijenjati stil života u kojemu su novac i bogatstvo glavne vrednote i njegovati kulturu suživota, škole ne smiju biti učenicima dosadne te da mlade treba također podučavati samostalnosti i odgovornosti. Kao jedan od glavnih problema obrazovanja navodi se nepostojanje odgoja za kritičko mišljenje, a kao prijedlog za sprječavanje stvaranja “čovjekolikih robota” ustraje na učeniku koji kritički promišlja jer učenje napamet nije znanje, nego učenje “koje pliva po površini mozga”.³⁰

7.2. Gardnerova teorija višestrukih inteligencija

U različitim kulturama sposobnosti odraslih ljudi zapravo su različite kombinacije sedam različitih vrsta inteligencija. Iako svi ljudi mogu u određenom opsegu koristiti sve te inteligencije, za svaku je osobu karakteristična jedinstvena kombinacija relativno jačih i slabijih inteligencija čime se tumači postojanje individualnih razlika. Konvencionalni testovi inteligencije dobro predviđaju uspjeh u školi, ali ne i kasniji uspjeh na poslu i druga postignuća, dok američki psiholog Howard Gardner smatra da mjere drugih sposobnosti (npr. interpersonalna inteligencija) mogu doprinijeti predviđanju ovih ishoda. Prema Gardnerovom viđenju ljudi posjeduju mnogo raznih tipova inteligencije, odnosno da svaki pojedinac ima određenu razinu među različitim inteligencijama, a samu teoriju višestrukih inteligencija Gardner je razvio sedamdestetih godina prošlog stoljeća. Prema Gardnerovoj teoriji višestrukih inteligencija postoji sedam različitih specifičnih sposobnosti, talenata ili inteligencija (Gardner, 1983.) što je prikazano u tablici 3.³¹

Tablica 3. Sedam različitih specifičnih sposobnosti, talenata ili inteligencija prema Gardneru³¹

Inteligencija		Vještine
1.	logičko-matematička	Osoba prirodno i spontano organizira stvari u red ili poredak, lako napamet barata količinama, brzo shvaća matematičke pojmove, voli igre logike, zagonetke i kompjutore
2.	lingvističko-verbalna	Osoba uživa u čitanju, pisanju, govoru, ali i slušanju. Dobro pamti verbalne podatke i voli razvijati svoj rječnik. Lijepo priča priče ili prepričava događaje. Ima smisla za strane jezike
3.	vizualno-spacijalna	Osoba lako zamjećuje simetriju i sklad. S lakoćom može «uglavi» rotirati složene likove i nacrtati štogod vidi. Uspješna je u slagalicama i lako se snalazi na ulicama novog i nepoznatog grada.
4.	tjelesno-kinestetička	Osoba je dobra u rukovanju predmetima, a i svoje tijelo pokreće skladno i s lakoćom. Uživa jer je uspješna u tjelesnim vježbama. Vrlo je vješta i spretna pa uspješno izrađuje razne predmete.
5.	Glazbena	Osoba može otkriti ritam, obrazac i tempo u stvarima koje ih naizgled nemaju, primjerice u pjesmi ptica. Voli razne vrste glazbe i svira neki instrument, bilo da je to učila, bilo da to čini po sluhu.
6.	Interpersonalna	Osoba lako razumije druge ljude, njihova raspoloženja i osjećaje. Prirodni je vođa, vješto posreduje u međuljudskim sukobima jer je u stanju vidjeti situaciju očima objiju strana. Omiljena je među ljudima
7.	Intrapersonalna	Osoba vrlo dobro poznaje samu sebe. Svjesna je svojih osjećaja, ideja, potreba i snova. Uporna je, gotovo tvrdoglava, u aktivnostima kojima se voli baviti.

7.3. Posebne odgojno-obrazovne potrebe

Učenici s posebnim potrebama su oni kojima je potrebna posebna pomoć i resursi kako bi u obrazovnom okruženju mogli ostvariti svoje pune potencijale. Kategorija učenika s posebnim potrebama uključuje učenike s teškoćama kao i darovite učenike, a neki učenici istodobno mogu pripadati u obje skupine. Na temelju članka 65. stavka 2. Zakona o odgoju i obrazovanju u osnovnoj i srednjoj školi (»Narodne novine«, 152/2014.), donesen je Pravilnik o osnovnoškolskom i srednjoškolskom odgoju i obrazovanju učenika s teškoćama u razvoju u kojem su navedene teškoće.

Tablica 4. Orijentacijska lista vrsta teškoća prema Zakonu o odgoju i obrazovanju

skupine vrsta teškoća		teškoće	podskupine	
1.	Oštećenja vida	1.1.	sljepoća	1.1.1. – 1.1.4.
		1.2.	slabovidnost	1.2.1. – 1.2.2.
2.	Oštećenja sluha	2.1.	gluhoća	2.1.1. – 2.1.2.
		2.2.	naglušost	2.2.1. – 2.2.3.
3.	Oštećenja jezično-govorne-glasovne komunikacije i specifične teškoće u učenju	3.1.	poremećaji jezično-govorne glasovne komunikacije	3.1.1. – 3.1.4.
		3.2.	specifične teškoće u učenju	3.2.1. – 3.2.6.
4.	Oštećenja organa i organskih sustava	4.1.	oštećenja mišićno-koštanoga sustava	
		4.2.	oštećenja središnjega živčanog sustava	
		4.3.	oštećenja perifernoga živčanog sustava	
		4.4.	oštećenja drugih sustava (dišni, srčanožilni, probavni, endokrini, koža i potkožna tkiva, mokraćni, spolni)	
5.	Intelektualne teškoće	5.1.	laka intelektualna teškoća	
		5.2.	umjerena intelektualna teškoća	
		5.3.	teža intelektualna teškoća	
		5.4.	teška intelektualna teškoća	
6.	Poremećaji u ponašanju i oštećenja mentalnog zdravlja	6.1.	organski, uključujući simptomatski mentalni poremećaj	
		6.2.	poremećaji raspoloženja	
		6.3.	neurotski poremećaji, poremećaji vezani uz stres i somatoformni	
		6.4.	shizofrenija, shizotipni i sumanutni poremećaji	
		6.5.	poremećaji iz autističnoga spektra	
		6.6.	poremećaji aktivnosti i pažnje	
7.	Postojanje više vrsta teškoća u psihofizičkom razvoju	uključuje teškoće iz dvije ili više skupina koje su predviđene u Orijentacijskoj listi vrsta teškoća.		

7.4. Kritika društvu, školi, nastavnicima, stavu prema poučavanju i prijeko potrebna humanizacija škole

7.4.1. *Pitanja koja se postavljaju*

Kroz povijest do današnjeg suvremenog vremena razvoj novih tehnologija i razvoj industrije uvelike su doprinjele današnjem izgledu modernog vremena. Ako se na primjer pogleda telefon prije dvadesetak godina i današnji iphone uređaj ili ako se uspoređi internetski svijet od prije 100 godina i danas, razlika je ogromna. Nadalje, ako malo pogledamo povijest školstva unutar cijelog jednog stoljeća i zavirimo u sliku razreda na početku 20. stoljeća i u sliku razreda danas, u mnogim učionicama ništa se značajno nije promijenilo u metodologiji poučavanja. Možemo se zapitati što se je to dogodilo čovjeku i nadasve samom društvu da se jedna slika razreda nije promijenila čak kroz jedno stoljeće? Postavlja se pitanje usmjerava li obrazovanje nastavnika da pripremaju nove naraštaje za budućnost ili prošlost? Učenici sjede u redovima, moraju dići ruku žele li govoriti, tjeramo ih da se natječu za izvrsne ocjene bez obzira na uporabljena sredstva. Kako se je dogodilo da društvo podržava obrazovanje u kojem „škola nije svladala svoju beskorisnost za čovjeka“? Kako se je dogodilo da je društvo postalo malodušno prema obrazovanju nastavnika koji reflektiraju naučene stavove o važnosti poučavanja na nove naraštaje? Možemo li začarani krug nedostatka entuzijazma, ne mijenjanja stila života temeljenog na krivim vrijednostima, ne ulaganja u obrazovanje i podcijenjenosti prema poučavanju od strane same akademske zajednice ikako prekinuti i postoji li ikakvo sredstvo za takav potpuni preokret? I na kraju, danas se samo možemo pitati do kada će društvo, akademska zajednica, škola pa i sami nastavnici dopustiti da humana škola bude još samo jedna od čovjekovih utopija te kada će istoimeni shvatiti da je način i stav prema poučavanju mladih, novih naraštaja sredstvo za prekid začaranog kruga nezadovoljstva, njihove ravnodušnosti prema novim izazovima, nedostatke kreativnosti i naposljetku iskrivljenih životnih vrijednosti?

7.4.2. Škola zahtijeva promjene

Škola predstavlja najveću društvenu priredbu naše kulture. Ona uzima najvitalnije godine života čovjeka u kojima je on najsposobniji za učenje. Ona troši – uzme li se u obzir i studij – često dvadeset godina života, polovicu od sljedećih četrdeset godina tijekom kojih će čovjek raditi. Ona ne proždire djecu, ali zato proždire djetinjstvo i mladost. Kada mladi ljudi napuštaju školu puni su znanja, ali su siromašni iskustvom, njihova očekivanja su velika, ali se oni ne znaju orijentirati, slobodni su, ali nesamostalni – veliki broj mladih ljudi nema nikakav odnos prema zajedništvu, otuđeni su i neprijateljski raspoloženi što graniči s barbarstvom. Nesrazmjer između rashoda i uspjeha, između namjera i rezultata je tako velik i sada tako očit... “³⁰

Humana Škola, Hartmut von Hentig

Kao niti prije tridesetak godina, znanje niti danas nije neki trend ili štoviše statusni simbol među mladima, a učenicima su škole i danas dosadne i smatraju se obavezom koja se mora odraditi. Škole su već odavno prestale biti polisi u kojima učenici diskutiraju o idejama, raspravljaju o postavljenim problemima i u konačnici škole su već odavno prestala biti središta u kojima se živi, stječe iskustvo, na čijim idealima, problemima i zadaćama mladi uče, gdje se potiču razni interesi učenika, njihova kreativnost i naposljetku suradnja s drugim učenicima i zajedništvo. Škole danas postoje jer jednostavno prema društvenim normama moraju postojati te su kao takve poprimile ulogu ustanova koje čuvaju djecu i u međuvremenu su postale tvornice automatiziranih „skorojevića“ koji nemaju razvijeno kritičko mišljenje, odgovornost i samostalnost koji su prijeko potrebni u svijetu odraslih. Tiranijom svjedodžbi, neumoljivosti gradiva, znanjem koje je određeno vremenom, škola je ista kao i nekad, ona je trgovina mješovitom robom, ali danas u suvremenom dobu ona opstaje pod težim okolnostima i s puno manje uspjeha. I na kraju, današnja škola nas obmanjuje jer na žalost nije u stanju pružiti svoju temeljnu zadaću budućim mladim naraštajima, pomoći im da odrastu u svijetu u kojem žive. Stoga škola bi prvo to trebala naučiti i promijeniti svoju svijest, čime bi u konačnici i poprimila barem neku dozu dostojanstva, oblika, smisla i pedagoške funkcije.

7.4.3. Nastavnik kao sredstvo za postizanje utopije humane škole

„Da bi osigurali zaleđe boljem znanju i volji u nama samima i da bi ojačali za ozbiljan slučaj, samoobveza mi se čini korisnim sredstvom. Podarit ću joj određenu strogoću i svečani ton i nazvat ću je prisegom. Ona će se zvati prema velikom učitelju i prijatelju istine “Sokratovom prisegom”.”³⁰

Sokratova prisega koju ovdje predlažem trebala bi za pedagoge imati istu ulogu kao i Hipokratova prisega za liječnike.”³⁰

„Nije prekasno za ono što je pravilno. Pokušajmo raditi s ovim sredstvom u vrijeme kad nema pobijanja i u kojem moramo uvježbati i razmišljanje i djelovanje. Prisega ne znači da ćemo u svako doba biti snažni, hrabri i neovisni da ju slijedimo. Ona nas ne želi zavesti na samoobmanu, na još jednu “idealističku laž”. Onaj koji ovo izgovori treba provjeriti želi li doista ono što je izgovorio. Ako pak ne želi, neka se ostavi prisege. Ako želi smije se nadati da će mu prisega pomoći kad kucne čas istine.

Zamišljam da učitelji i odgajatelji pri uručanju potvrde o zaposlenju – recimo – još jednom – dobrovoljno – izgovore ovu prisegu i da se to potvrdi u tom dokumentu.

Sokratova prisega

Kao učitelj i odgajatelj obvezujem se,

- štovati osobine svakog djeteta i braniti ih od svih;*
- zalagati se za njegovo tjelesno i duševno jedinstvo;*
- štovati njegove osjećaje, slušati ga, uzeti ga ozbiljno u obzir;*
- tražiti njegovo odobrenje za sve ono što činim glede njegove osobe, isto onako kao što bih postupao prema odraslima*
- koliko je moguće spoznati zakonitost njegova razvoja, postaviti ju na dobre temelje i omogućiti djetetu prihvaćanje te zakonitosti;*
- otkriti i unaprijediti njegove sklonosti*
- zaštititi ga, ako je slabo, i pomoći mu u prevladavanju straha i krivnje, zloće i laži, sumnji i nepovjerenja – ako mu je to potrebno;*

- *ne lomiti njegovu volju – ni onda kad nam se čini da je besmislena; pomoći mu da razum ovlada njegovom voljom; poučiti ga kako se koristiti razumom i što je to umijeće razumijevanja i shvaćanja;*
- *osposobiti ga za preuzimanje odgovornosti u zajednici i za zajednicu*
- *omogućiti mu da spozna što je i kakav je to dobar život;*
- *pružiti mu viziju boljeg svijeta i uvjeriti ga da se ona može ostvariti;*
- *poučiti ga istinoljubivosti, a ne istini, jer „ona je samo kod Boga“.*

Ovim se također obvezujem,

- *da ću, koliko sam u mogućnosti, sam tako živjeti i primjerom pokazati kako se izlazi na kraj s poteškoćama, s napadima i šansama u našem svijetu, pa i s vlastitim ograničenjima i s vlastitom krivnjom;*
- *u skladu sa svojim snagama pobrinut ću se za to da naraštaj koji dolazi zatekne takav svijet u kojem se isplati živjeti i u kojem naslijeđeni tereti i poteškoće ne vrše pritisak na vlastite ideje i mogućnosti;*
- *javno ću obrazložiti moja uvjerenja i djela, izložiti ću se kritici – posebno kritici onih koji su time pogođeni kao i kritici stručnjaka, moje prosudbe savjesno ću provjeravati;*
- *usprotiviti ću se ipak svim osobama i odnosima - pritisku javnog mnijenja, interesima udruge, propisima službe – ako budu sprječavali namjere koje sam ovdje iznio.*

Ovu obvezu osnažit ću svojom spremnošću da se u svako doba provjeri moja djelatnost i ja sam preko danih mjerila.“³⁰

7.5. Prijedlog nastavnog sata

Kako objasniti izuzetno kompleksan i sadržajan pojam *valencija*, nastavniku u osnovnoj školi na neki način predstavlja izazov. Naime, bez sumnje se može reći da je to i jedan od složenijih pojmova koji uz sebe veže niz potrebnih znanja koja se usvajaju na višoj razini obrazovanja (npr. elektronska konfiguracija, valentni elektroni, nevezni i vezni elektronski parovi/elektroni, priroda kemijske veze i dr.) kako bi se konceptualno razumio. Stoga poučavati učenika koji se još nije susreo s navedenim pojmovima o valenciji jest zaista pravi izazov, a da se pritom još i ne načine znanstveno neutemeljene osnove za daljnje kemijsko obrazovanje. Takav sadržajan pojam je još teže obraditi za djecu s posebnim obrazovnim potrebama, a da pojam valencije poprimi dublji smisao. Stoga, u sklopu zadnjeg i najvažnijeg cilja ovog dijela diplomskog rada dan je prijedlog za unaprjeđenje nastavne prakse u osnovnoj školi pri poučavanju pojma valencija temeljen na strategiji učenja otkrivanjem uključujući Gardnerovu teoriju višestrukih inteligencija i Bloomovu taksonomiju s ciljem prilagodbe djeci s posebnim obrazovnim poteškoćama vodeći se idejom humane škole pedagoga H. von Hentiga.

U sklopu prijedloga sata dizajniran je višenamjenski trodimenzionalni periodni sustav elemenata za slijepe i slabovidne učenike „Vitez Čovek“, a sam prijedlog nastavnog sata je nekonvencionalan te izborom postupaka i nastavnih metoda nema uzora u standardnoj metodologiji poučavanja u nastavi kemije. Pokušalo se na jedan nov i drugačiji način omogućiti ostvarivanje istraživački usmjerene nastave u kojoj se razvija kreativno i kritičko učenje s naglaskom na individualnost, talente i poteškoće. Nastavnik u ovom satu nema ulogu pripovjedača i ocjenjivača, nego ima ulogu motivatora, prenositelja znanja i onu najvažniju, ulogu usmjeravanja učenikovog razmišljanja. Metodologija poučavanja u ovom prijedlogu nastavnog sata je na kreativan način vođena Gardnerovom teorijom višestrukih inteligencija u kojoj nastavnik teži poučavanju djece različitih sposobnosti i talenata na različit način. Na drugačiji način, s pogledom „van kutije“ i sinergijom znanosti i umjetnosti u ovom prijedlogu sata željelo se je pokazati da nastava kemije može poprimiti sasvim neku drugu dimenziju, odnosno da nastava kemije može poprimiti onaj viši smisao poučavanja u kojem nastava ujedno i „savladava svoju beskorisnost za čovjeka“.

7.5.1. *Prijedlog sata prema istraživački usmjerenoj nastavi*

Struktura sata sadrži uvod, srednji dio i završni dio, a vođena je istraživački usmjerenom nastavom te kao takva nastoji obuhvatiti oba aspekta nastave; usmjerenost na istraživanje i interaktivnost. U uvodnom dijelu se otvara problem pitanjem „Što je to što je odgovorno za to da se dva atoma „spoje“ odnosno kemijski vežu?“ Sakupljanje učeničkih ideja i postavljanje hipoteze vodi do glavnog dijela sata. U njemu se kroz radionicu vodi usmjerena rasprava kojom se učenike vodi do rješenja problema. Pitanja u sklopu radionice su jednostavna, kratka i jasna, a pitanja su sljedeća:

- ✓ Kako biste modelirali/prikazali model atoma pomoću hula-hoopa, učenika i učionice?
- ✓ Što bi u modelu predstavljalo jezgru, a što elektronski omotač?
- ✓ Miruju li elektroni?
- ✓ Kome je „lakše izaći“ iz atoma, protonu ili elektronu?
- ✓ Kako biste sada pokazali kemijsko vezivanje dvaju atoma?
- ✓ Pa što je to što je odgovorno za to da se dva atoma „spoje“ odnosno kemijski vežu?
- uvodi se pojam „*Valencija atoma kemijskog elementa*“

Nakon radionice učenici ispunjavaju radni listić prilikom čega nastavnik/ica usmjereno vođenom raspravom i postavljenim pitanjima zajedno s učenicima interpretira i razmišlja o prethodno postavljenoj hipotezi. Prilikom rasprave nastavnik/ica mora dodatno naglašavati i povezivati učeničke odgovore, dati vremena za razmišljanje, odgovarati pitanjima, a ne odgovorima jer inače radni listić gubi smisao koji mu je namijenjen, da su učenici intelektualno aktivni prilikom samog sata. U završnom dijelu sata se daje primjer na kojem učenici moraju analizirati valenciju atoma kemijskog elementa na četvrtoj razini Bloomove taksonomije. Kroz cijelu izvedbu sata, osim usmjerene rasprave s učenicima, kao još jedna od interaktivnih nastavnih metoda korištena su konceptualna pitanja s karticama. Ovaj sat je predložen za 45 minuta, odnosno za jedan školski sat, a nastavna priprema ovog sata i pripadajući radni listić nalaze se u prilogu (tablice P5 i P6).

Važno je napomenuti da je ovakav prijedlog sata izveden nekoliko puta u nastavničkoj praksi te se je kao takav pokazao uspješan u pristupu s djecom s odgojno-obrazovnim potrebama što se je očitovalo u njihovoj većoj uključenosti u raspravama, samoinicijativnom javljanju i iznošenju vlastitog mišljenja. Izvedenim satovima su prisustvovali učenici s problemima u ponašanju, s oštećenjem vida i intelektualnim teškoćama.

7.5.2. Prijedlog sata prema Gardnerovoj teoriji višestrukih inteligencija

U prijedlogu sata metodologija poučavanja je vođena Gardnerovom teorijom višestrukih inteligencija. U ovom satu različiti pojmovi su poučavani prema različitim specifičnim sposobnostima jer naposljetku svatko od nas doživljava svijet oko sebe na svoj jedinstven način, pa tako i gradivo koje je potrebno usvojiti prilikom osnovnoškolskog i srednjoškolskog obrazovanja u nastavi kemije. U metodologiji poučavanja tokom izvedbe sata dan je naglasak na lingvističko-verbalnu, vizualno-spacijalnu i tjelesno-kinestetičku inteligenciju.

7.5.2.1. Lingvističko-verbalna inteligencija

Za učenike koji imaju jaču lingvističko-verbalnu inteligenciju, ovaj sat prožima pjesmica koja je napisana od strane nastavnika/ice, a prilikom njenog čitanja nastavnik/ica pokušava angažirati sve učenike te ojačati ovakvu vrstu inteligencije kod učenika kod kojih nije izražena.

„O ŠAROLIKOSTI SVIJETA“

*Kemijskih spojeva raznih ima,
pitanje je kako se broj atoma baš na određen način u njima „naštima“.
U elektronskom omotaču je opet cijela caka,
vjerujte mi, logika je ovo laka.*

*Od jezgre i elektrona je atom sagrađen,
nemojte da nakon tolikog ponavljanja, netko opet bude iznenađen.
Već znamo da protoni i neutroni „ništa“ ne „rade“,
dok elektroni svakakve veze među atomima grade.*

*Pa naravno da su elektroni ti kreativci,
za nastajanje veza među atomima su oni krivci.
No pravo je pitanje, jesu li svi elektroni mali marljivci,
molim vas ljudi, ne budite pravi naivci.*

*Naime postoji jedno SVOJSTVO ATOMA koje se naziva VALENCIJA,
nadam se da vam oko nje neće biti potrebna nikakva intervencija.
Koliko je elektrona nekog atoma uključeno u vezanje s drugim atomima VALENCIJA nam kaže,
te se na temelju toga KEMIJSKA FORMULA nekog spoja lako ISKAŽE.*

*Kako i na koji način su ti elektroni u cijelu priču uključeni,
za tu priču ćemo u prvom srednje biti poučeni.*

*No, sada je opet vrijeme za naš šalabahter stari,
sada ćete čut' što je na stvari:
Valencije nemojte molim vas na pamet učiti,
jer ćete se samo bez veze namučiti.*

*I samo ću vam reći,
da ćemo znanje o valencijama kroz naš „periodni“ jednostavno steći.
U prvoj skupini vlada velika reaktivnost,
samo jedan elektron stvara tu silnu njihovu kreativnost.
Dok je skupina druga poznata po valenciji dva,
Čekajte još malo nije to priča sva.*

*Aluminij je trovalentan uvijek,
a kisik dvovalentan, zapamtite to zauvijek.
14. skupina razne valencije ima,
u toj skupini uvijek vlada neka ugodna klima.*

*Ali zato je atom dušika čudan jako,
ne zamarajte se njegovim valencijama, to je jednostavno tako.
A 17. skupinu krasi valencija jedan,
tu je u igri elektron jako vrijedan.*

*18. skupinu čine plinovi inertni i tromi,
totalno su nereaktivni i baš su u komi.
Još moramo znati da se valencija RIMSKIM BROJEVIMA označava,
pomoću nje se omjer atoma u kemijskom spoju provjerava.*

*U svakom slučaju je lijepo valenciju nekog atoma znati,
jer se pomoću nje može „sadržaj“ nekog kemijskog spoja saznati.
Upravo je svojstvo valencije zaslužno za šarolikost svijeta našeg,
sve je tako jednostavno, nema tu ničeg lakšeg.*

7.5.2.2. Tjelesno-kinestetička inteligencija

Prvi dio glavnog dijela sata orijentiran je na tjelesno-kinetičku inteligenciju. Kako bi se poučavanje nastavne jedinice „Valencija“ približila djeci s izraženom vizualno-spacijalnom inteligencijom te je u sklopu toga osmišljena radionica koja odgovara na pitanje „Što je to što je odgovorno za to da se dva atoma „spoje“ odnosno kemijski vežu?“

RADIONICA 1. „Hula hoop“

- nastavnik/ ica će usmjerenom raspravom navoditi učenike da naprave model atoma
- određeni broj djece će se stati u hula hoop (u skladu s veličinom obruča), što će biti model jezgre gdje obruč hula hoopa modelira jaku nuklearnu silu koja drži jezgru atoma na „okupu“
- jedan dio učenika će morati hodati po učionici modelirajući elektrone, pritom im dajući sliku da elektroni nisu stacionarni i da ne znamo točno gdje se nalaze u prostoru oko jezgre
- analizirajući građu atoma, učenici će morati povezati neutralnost atoma s brojem protona u jezgri i brojem elektrona u elektronskom omotaču
- učenici će biti u mogućnosti povezati prethodno naučena znanja (kationi i anioni) s modelom atoma kojeg sačinjavaju učionica, hula hoop i oni sami
- daljnjim modeliranjem nastavnik/ica će učenike usmjerenom raspravom potaknuti da naprave još jedan model atoma kako bi se mogli spojiti
 - ✓ OČEKIVANJE NASTAVNIKA/ICE:
učenici će napraviti vezanje dvaju atoma tako da će „dotaknuti jezgre“
- cilj modeliranja je da se učenicima skrene pozornost da se jezgre međusobno ne dodiruju, nego je riječ o elektronima u elektronskom omotaču koji su odgovorni za kemijsko vezivanje

7.5.2.3. Vizualno-spacijalna i logičko matematička inteligencija

Za darovite učenike koji imaju izraženu vizualno-spacijalnu i logičko matematičku inteligenciju u metodologiji poučavanja osmišljen je višenamjenski trodimenzionalni model periodnog sustava koji je pomnije objašnjen u poglavlju 7.6. „Vitez Čovek“.

7.5.3. *Prijedlog sata prilagođen učenicima s teškoćama i darovitim učenicima*

„Glavna novost kod poremećaja nedostatka pozornosti ili PNP-a je uporaba tih riječi da se opiše nesposobnost učenja. Taj problem postoji sve otkako postoje učitelji koji pokušavaju podučavati učenike predmetima koji ove ne zanimaju. U većini slučajeva to ne bi trebalo nazivati nesposobnošću učenja, nego nesposobnošću poučavanja.“³²

Dar disleksije, Ronald D. Davis, Eldon M. Braun

Vodeći se idejom humane škole da poučavanje treba težiti svim potrebama učenika, odnosno da treba težiti ostvarivanju specifičnih sposobnosti, talenata i maksimumu potencijala, ovaj prijedlog sata daje pogled na poučavanje iz drugog kuta te na jedan kreativan način involvira metode poučavanja za individualizirani pristup u standardni sat kemije. Ovaj prijedlog sata prilagođen je za učenike s oštećenjem vida (slijepe, slabovidne) jer je za izvedbu ovog nastavnog sata dizajniran model „Vitez Čovek“ trodimenzionalnog periodnog sustava elemenata kako bi se učenicima dao osjećaj za odnos rednog broja atoma kemijskih elemenata, omogućavajući im oslanjanje na taktilni osjet. Osim za učenike s oštećenjem vida, „Vitez Čovek“ ima razne primjene i može biti tema raznih projekata u svrhu poticanja darovitih učenika (primjene su navedene u poglavlju 7.6. „Vitez Čovek“). Ovaj prijedlog sata je namijenjen i učenicima sa specifičnim teškoćama u učenju (disleksija, disgrafija, diskalkulija) jer se prilikom pristupa problemu i poučavanju pojma „Valencija“ koriste druge metode poučavanja od konvencionalnih u nastavi; čitanja, pisanja i računanja, a sam radni listić (prilog, slika P6) je napisan posebnim fontom *dyslexie*³³, a sam tekst radnog listića je oblikovan da ga osobe s disleksijom lakše čitaju.

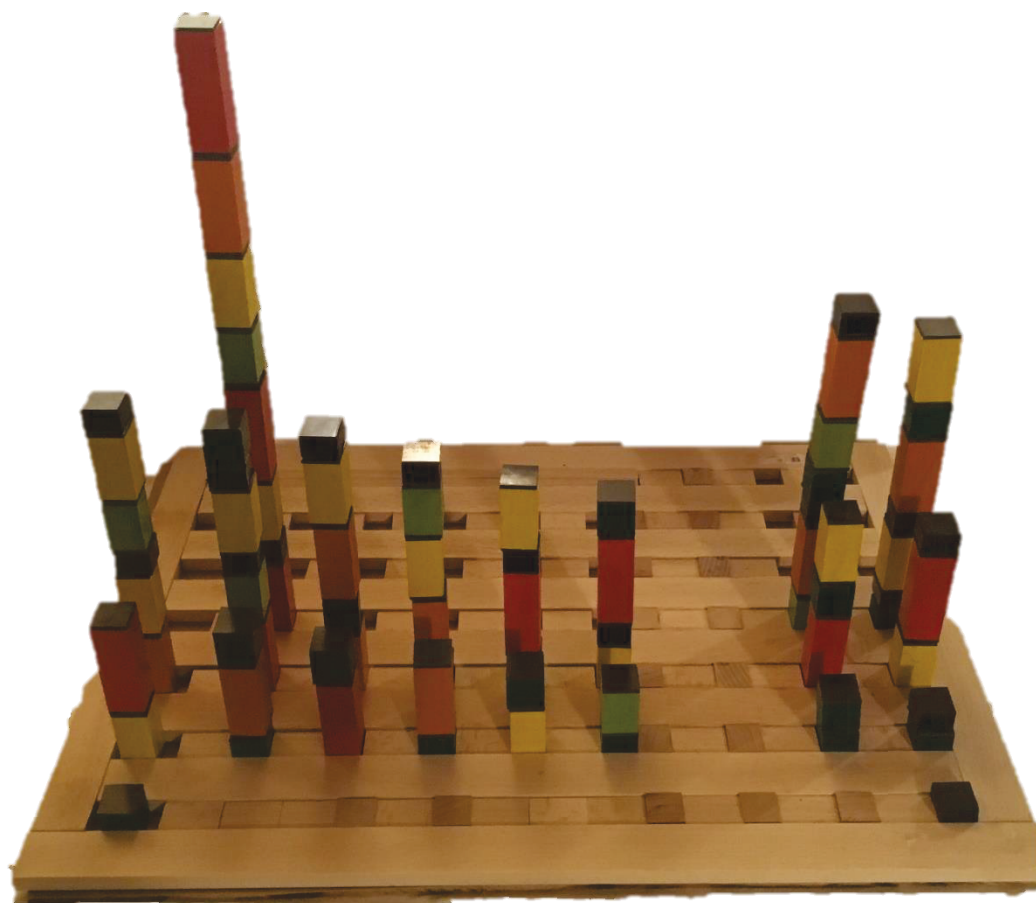
Ovim prijedlogom sata daje se jedan drugačiji pogled na metodologiju poučavanja u nastavi kemije jer je ovaj nastavni sat kreiran za većinu prema manjini gdje nastava kemije teži prilagođavanju svih potreba učenika. Ovakvom sveobuhvatnom metodologijom poučavanja koja je vođena idejom humane škole, Gardnerovom teorijom višestrukih inteligencija, Bloomovom taksonomijom, metodologijom poučavanja koja je van tradicionalnih okvira, željelo se je pokazati da je moguće približiti znanost djeci s posebnim odgojno-obrazovnim potrebama, jer ipak naposljetku, mogućnost učenja i usvajanja novih saznanja trebalo bi biti pristupačno svim učenicima, a i *“izvrsnost u poučavanju se postiže tek onda kada napravimo sve što možemo, kako bi naši učenici postali sve ono što mogu”*.^{30, 31, 32}

7.6. „Vitez Čovek“

Vitez Čovek je višenamjenski trodimenzionalni model periodnog sustava elemenata koji je dizajniran kao didaktičko pomagalo za djecu s posebno odgojno-obrazovnim potrebama (s teškoćama i daroviti) koje istodobno ima ulogu u modeliranju različitih koncepata koji se moraju usvojiti prilikom osnovnoškolskog ili srednjoškolskog obrazovanja u nastavi kemije. Didaktičko pomagalo za slijepe i slabovidne učenike, didaktičko pomagalo za darovite učenike, modeliranje periodnog sustava prema atomskom broju za osnovne škole, modeliranje periodičnosti atoma (afinitet prema elektronu, energija ionizacije, radijus atoma) za srednje škole su sve primjene u svrhu kojih je kreiran trodimenzionalan model periodnog sustava „Vitez Čovek“. Budući da je model primarno dizajniran za potrebe osnovne škole, model ne sadrži *d* blok periodnog sustava elemenata jer prema *Nastavnom planu i programu* kemije za sedmi razred učenici moraju samo poznavati kemijske elemente prve i druge skupine te skupine nemetala, tj. glavne skupine kemijskih elemenata. Model je napravljen od drveta, ali se na temelju prijedloga model može napraviti brže, jednostavnije i ekonomičnije pomoću lego kocaka. Za izradu modela potrebna je samo temeljna ploča oblika periodnog sustava (može se nacrtati i na papir) i kockice različitih duljina i boja čime se potiče vizualnost i kreativnost kod djece. Redoslijed kockica kojim se slaže PSE nije ograničen, ali visina stupca mora odgovarati rednom broju atoma kemijskog elementa ukoliko će se PSE slagati prema atomskom broju. Posebno, prilikom obrađivanja nastavne cjeline „Valencija atoma kemijskog elementa“ u modelu zadnja/e kockica/e može/gu predstavljati broj valentnog/ih elektrona, a sam model je prikazan na slici 30. Ukoliko se model Viteza Čoveka primjenjuje u nastavi kemije za srednje škole, redoslijed kockica kojim se slaže PSE nije ograničen, ali visine stupca moraju odgovarati trendovima koji prate periodička svojstva kemijskih elemenata (radijus atoma, energija ionizacije i elektronegativnost)³⁴, a sam model je prikazan na slici 31.

7.6.1. „Vitez Čovek“ i Nastavni plan i program za osnovnu školu

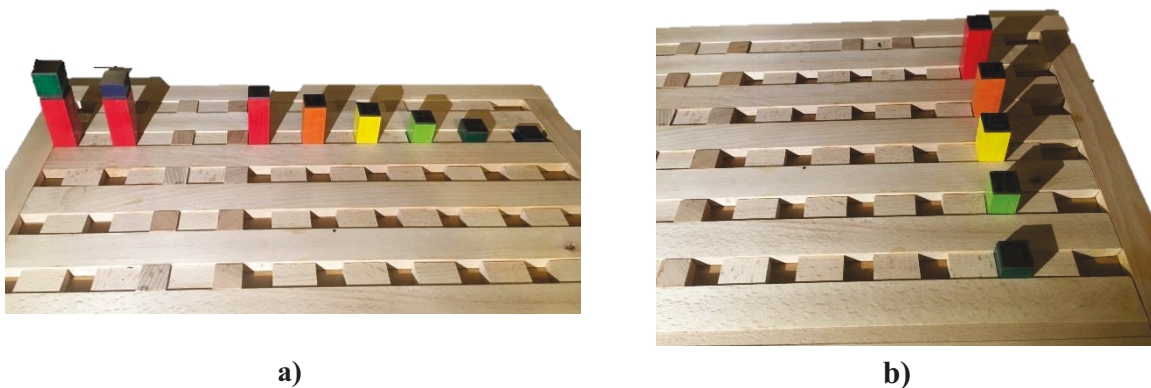
Prema službenom *Nastavnom planu i programu kemije za osnovnu školu* u sedmom razredu obrađuju se nastavne teme „Atomi i kemijski elementi“, „Ioni i ionske strukture“, „Valencije i kemijske formule“ u sklopu kojih se obrađuju neki temeljni koncepti kemije. U skladu s navedenim trodimenzionalan periodni sustav elemenata „Vitez Čovek“ dizajniran prema porastu atomskog broja omogućava učenicima da vizualno-spacijalno spoznaju odnose veličine atoma, razmještaj kemijskih elemenata (metala i nemetala) u periodnom sustavu elemenata, razliku atoma od iona, razliku aniona i kationa. Upravo zbog koncepata koji su vezani za građu tvari ovaj model je prigodan za primjenu u nastavi prilikom poučavanja ključnih pojmova kao što su atomi, subatomske čestice, kemijski element, periodni sustav elemenata, ion, naboj aniona i kationa i valencija.



Slika 30. Model trodimenzionalnog periodnog sustava „Vitez Čovek“ prema porastu atomskog broja

7.6.2. „Vitez Čovek“ i Nastavni plan i program za srednje škole

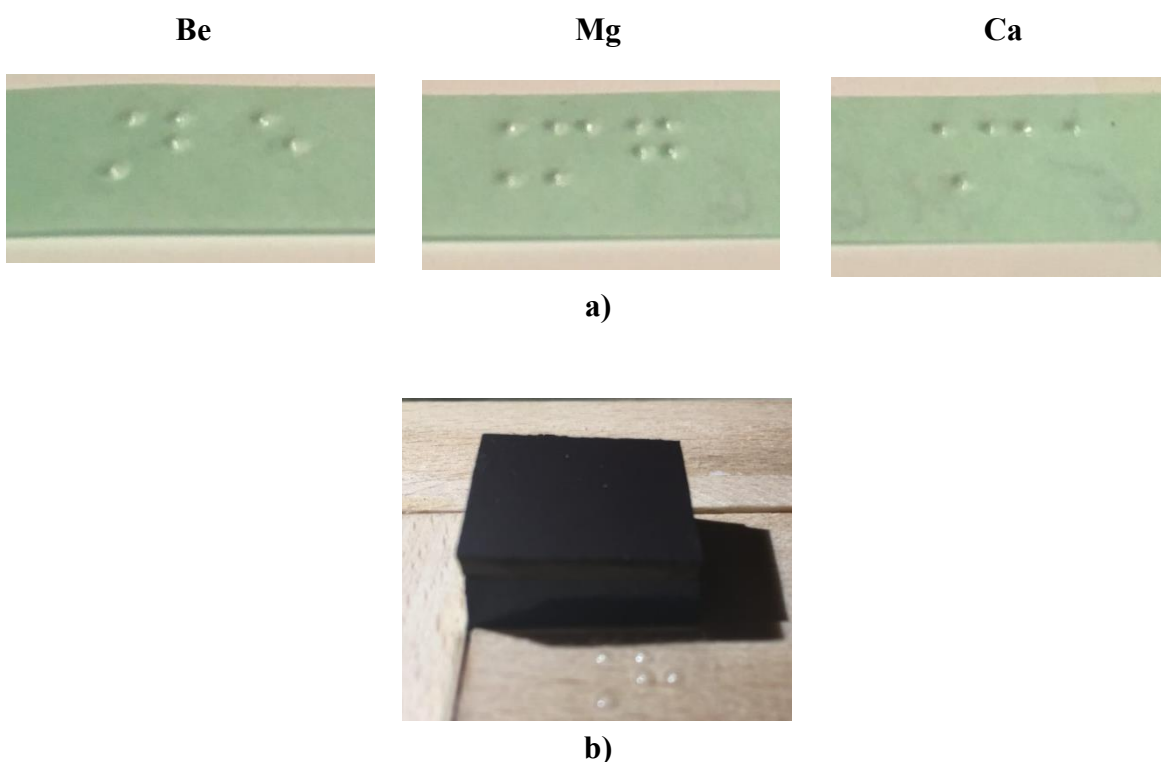
Prema službenom *Nastavnom planu i programu kemije za srednju školu* u prvom razredu gimnazije obrađuju se nastavne teme *Građa atoma*, *Elektronski omotač atoma*, *Periodni sustav elemenata*, *Kemijske veze* i *Unutarnja građa kristala* u sklopu kojih se nadograđuju usvojena znanja o građi atoma. U skladu s navedenim trodimenzionalan periodni sustav elemenata „Vitez Čovek“ se također može dizajnirati i prema atomskom radijusu³⁴, energiji ionizacije³⁴ i elektronegativnosti³⁴ (slika 31) omogućavajući učenicima da vizualno-spacijalno spoznaju periodična svojstva elemenata (atomska polumjer, energija ionizacije i elektronegativnost). Stoga ovaj model osim što je primjenjiv za osnovnu školu, primjenjiv je i za srednju školu prilikom obrađivanja nastavnih jedinica *Suvremeni periodni sustav elemenata* i *Periodičnost svojstava*. Važno je napomenuti da prilikom modeliranja periodičnosti atoma (afinitet prema elektronu, energija ionizacije, radijus atoma) kockice samo ukazuju na ponašanje (trend) periodičnosti atoma, nije im pripisana nikakva vrijednost.



Slika 31. a) Model trodimenzionalnog periodnog sustava „Vitez Čovek“ prema smanjenju radijusa atoma kemijskog elementa u periodi
b) Model trodimenzionalnog periodnog sustava „Vitez Čovek“ prema smanjenju elektronegativnosti atoma kemijskog elementa unutar skupine

7.6.3. „Vitez Čovek“ kao didaktičko pomagalo za slijepe i slabovidne učenike

Vitez Čovek ima ulogu didaktičkog pomagala u nastavi kemije za sedmi razred osnovne škole namijenjenog za slijepe i slabovidne učenike. Budući da je ispod svakog kemijskog elementa posebno navedeno ime kemijskog elementa na Braillovom pismu (slika 32a) ovaj model periodnog sustava je prigodan za primjenu u nastavi prilikom upoznavanja periodnog sustava elemenata. Nadalje zbog svoje trodimenzionalnosti, model Vitez Čovek omogućuje slijepim i slabovidnim učenicima da taktilnim osjetom steknu predodžbu o odnosima veličina atoma pojedinih kemijskih elemenata i njihovoj atomskoj građi (slika 32b) te kao takav ovaj model može imati primjenu prilikom poučavanja različitih nastavnih cjelina kao što su npr. „Periodni sustav elemenata“, „Ioni i ionske strukture“ i „Valencije i kemijske formule“ u osnovnoj školi i prilikom obrađivanja nastavnih jedinica *Suvremeni periodni sustav elemenata* i *Periodičnost svojstava* u srednjoj školi. Važno je napomenuti da je veličina svake kockice označena na samoj kockici Brailleovim pismom.³⁴



Slika 32. a) kemijski simboli pisani Brailleovim pismom
b) trodimenzionalnost koja omogućuje da se taktilnim osjetom stekne predodžba o građi atoma

8. ZAKLJUČAK

Literaturnim pregledom povijesti metodologije poučavanja pojma valencija u osnovnim školama je vrlo naglašena neujednačenost definicija pojma valencija atoma kemijskog elementa te je ustanovljeno da ne postoji dogovor, suglasnost ili barem neka zajednička premisa koja bi opisivala koncept pojma valencija atoma nekog kemijskog elementa. Literaturnim pregledom također je ustanovljeno da udžbenička literatura primarnog obrazovanja koja je danas u uporabi niti približno ne uključuje sve nove spoznaje i znanja metodološki i u mjeri prilagođenoj uzrastu. Provedeno preliminarno istraživanje studentskih poteškoća vezanih za pojam valencija u studentskoj populaciji različitih godina studija pokazalo je prisutnost većine pretpostavljenih mogućih krivih zaključaka (očekivanih studentskih poteškoća) o pojmu valencija temeljenih na čitanju udžbeničke literature. Obradom podataka ustanovljeno je da su najzastupljeniji krivi zaključci, „*Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju, valentnih elektrona koje taj atom posjeduje*“, „*Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju ostvarenih kemijskih veza („valentnih crtica“) koji taj atom ostvaruje*“ i „*Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je broju atoma koji okružuju taj atom u kemijskom spoju*“ ukoliko se radi o kovalentnim ili koordinacijskim spojevima. Kod ionskih spojeva najzastupljeniji krivi zaključak je „*Valencija atoma nekog kemijskog elementa jednaka je apsolutnoj vrijednosti nabojnog broja.*“ Na temelju rezultata predložena je definicija pojma valencije atoma nekog kemijskog elementa u početnom poučavanju koji bi bio primjenjiv na ionske i kovalentne spojeve, a na višoj razini znanja i dalje znanstveno konzistentan čime bi se omogućilo točnije znanstveno izražavanje u nastavi kemije: **„Valencija atoma kemijskog elementa je svojstvo atoma koje je određeno brojem (valentnih) elektrona s kojima taj atom kemijskog elementa sudjeluje u izgradnji kemijske veze u nekom spoju.“**

Prijedlog sata za unaprjeđenje nastavne prakse u osnovnoj školi pri poučavanju pojma valencija temeljen je na strategiji učenja otkrivanjem uključujući Gardnerovu teoriju višestrukih inteligencija i Bloomovu taksonomiju s ciljem prilagodbe djeci s posebnim obrazovnim poteškoćama. Kroz nastavnu pripremu vođenu idejom humane škole pedagoga H. von Hentiga predložene su mogućnosti prilagodbe nastavne prakse za većinu prema manjini. U sklopu prijedloga sata osmišljen je i načinjen višenamjenski 3D model periodnog sustava elemenata koji je dizajniran kao didaktičko pomagalo za djecu s posebnim odgojno-obrazovnim potrebama koje istodobno ima ulogu u modeliranju različitih koncepata koji se moraju usvojiti prilikom osnovnoškolskog ili srednjoškolskog obrazovanja u nastavi kemije.

9. POPIS LITERATURE

1. W. F. Kieffer, *J. Chem. Educ.* **1973**, 50, A105
2. D. Grdenić, *Povijest kemije*, Školska knjiga, Zagreb, **2001**
3. V. Njegovan i M. Krajčinović, *Hemija za više razrede srednjih i stručnih škola*, Zagreb, **1939**.
4. Z. Pinterović, *Kemija za više razrede srednjih i sličnih škola*, Zagreb, **1943**.
5. V. N. Verhovski, *Anorganska kemija za VII. razred gimnazije*, Zagreb, **1947**.
6. M. Krajčinović i A. Pucić, *Kemija za VII. razred osmogodišnje škole i III. razred gimnazije*, Školska knjiga, Zagreb, **1951**.
7. J. Herak, *Uvod u kemiju za studente v.p.š.*, Školska knjiga, Zagreb, **1952**.
8. J. Herak, *Izvođenje nastave kemije; Priručnik za učitelje i nastavnike osmogodišnjih škola*, Školska knjiga, Zagreb, **1957**.
9. J. Herak, *Građa prirode; Kemija za VII. razred osnovne škole*, Školska knjiga, Zagreb, **1961**.
10. J. Herak, *Građa prirode; Kemija za VII. razred osnovne škole*, Školska knjiga, Zagreb, **1967**.
11. L. Ivanček, *Kemija za osnovno obrazovanje odraslih*, Školska knjiga, Zagreb, **1967**.
12. J. Herak, *Građa prirode I; Kemija za VII. razred osnovne škole*, Školska knjiga, Zagreb, **1971**.
13. J. Herak, *Građa prirode I; Knjiga za nastavnika*, Školska knjiga, Zagreb, **1971**.
14. L. Ivanček, *Kemija za osnovno obrazovanje odraslih*, Školska knjiga, Zagreb, **1971**.
15. J. Herak, *Građa prirode I; Kemija za VII. razred osnovne škole*, Školska knjiga, Zagreb, **1972**.
16. J. Herak, *Građa prirode I; Kemija za VII. razred osnovne škole*, Školska knjiga, Zagreb, **1973**.
17. J. Herak, *Građa prirode I; Kemija za VII. Razred osnovne škole*, Školska knjiga, Zagreb, **1974**.
18. J. Herak, *Građa prirode I; Kemija za VII razred osnovne škole*, Školska knjiga, Zagreb, **1985**.
19. I. Planinić, I. Filipović, M. Bukovac, *Svijet kemije I; Udžbenik za VII razred osnovne škole*, 1. izdanje, Školska knjiga, Zagreb, **1986**.
20. S. Lukić, M. Varga, N. Trenčevska, D. Volarević, I. Dujmović, *Kemija 7; Udžbenik kemije u sedmom razredu osnovne škole*, Školska knjiga, Zagreb, **2014**.
21. D. Mrvoš-Sermek, M. Kovačević, D. Barić, *Kemija 7; udžbenik iz kemije za sedmi razred osnovne škole*, Alfa, Zagreb, **2014**.

22. A. Battistutti-Pecha, Ž. Mrklič, M. Petković, N. Štiglić, *U svijetu kemije 7, Promatram, istražujem, učim*, Profil Klett, Zagreb, **2015**.
23. E. Kovač-Andrić, N. Štiglić, A. Lopac Groš, *Kemija 7*, Profil Klett, Zagreb, **2015**.
24. A. Battistutti-Pecha, N. Štiglić, *U svijetu kemije 7, Promatram, istražujem, učim*, Profil Klett, Zagreb, **2015**.
25. G. Parkin, *J. Chem. Educ.* **2006**, 83, 791-799
26. M. Matijević, *Ocjenjivanje u osnovnoj školi*, Tipex, Zagreb, **2004**, pp. 23-25
27. <https://www.qtiplot.com> (24. srpnja 2017.)
28. Microsoft Office Excel, **2016**.
29. J. O. Frank, *J. Chem. Educ.* **1929**, 6, 718-719
30. H. von Hentig, *Humana škola; Škola mišljenja na nov način*, München, **1993**.
31. H. Gardner, *Multiple Intelligences; The Theory in Practice*, New York, **1993**.
32. R. D. Davis, E. M. Braun, *Dar disleksije*, Alinea, Zagreb, **2001**.
33. <https://www.dyslexiefont.com/en/home/> (19. svibnja 2016.)
34. S. Melaku, J. O. Schreck, K. Griffin and R. B. Dabke, *J. Chem. Educ.* **2016**, 93, 1049-1055

10. PRILOZI

10.1. Blomoova taksonomija

Tablica P1. Razine postignuća za kognitivno područje (revidirana Bloomova taksonomija)

1.	DOSJETITI SE (ZNAJJE) <i>sposobnost prizivanja činjenica, klasifikacija, definicija i teorija, mogućnost reprodukcije naučenog u izvornom obliku</i>	definirati, opisati, identificirati, označiti, nabrojati, povezati, odabrati, navesti, reproducirati, imenovati, poredati, popisati, prisjetiti se, ponoviti, rasporediti
2.	SHVATITI (RAZUMIJEVANJE) <i>sposobnost transfera podataka iz jednog oblika u drugi; interpretacija važnosti vlastitim riječima, mogućnost uočavanja i povezivanja glavnih ideja, opisivanje tijeka događaja ili procesa</i>	objasniti, proširiti, generalizirati, dati primjer, opisati, klasificirati, zaključiti, parafrazirati, predvidjeti, locirati, izraziti, prepričati, sumirati, grupirati, identificirati, preformulirati, pregledati, odabrati, razvrstati, reći, prenijeti neku informaciju, raspraviti
3.	PRIMIJEENITI (PRIMJENA) <i>sposobnost primjene stečenih znanja, iskustva vještina i pravila u novoj situaciji</i>	primijeniti, izračunati, demonstrirati, rukovati, riješiti, prilagoditi, prikupiti, pripremiti, proizvesti, povezati, pokazati, odabrati, koristiti, isplanirati, ilustrirati, interpretirati, obavljati, prakticirati
4.	ANALIZIRATI (ANALIZA) <i>sposobnost razdvajanja informacija na različite dijelove kako bi se utvrdili uzroci i posljedice, mogućnost generalizacije</i>	analizirati, razlikovati, razlučiti, identificirati, rastaviti, ilustrirati, zaključiti, prikazati, ukazati na, staviti u odnos sa, izdvojiti, klasificirati, kategorizirati, napraviti inventar, testirati, ispitati, napraviti dijagram, usporediti, procijeniti, izračunati, analizirati razliku
5.	PROSUĐIVATI (VREDNOVANJE) <i>sposobnost davanja procjena, argumenata, kritika, mogućnost vrednovanja i kritičkog odnosa prema činjenicama, mogućnost procjene valjanosti ideja</i>	ocijeniti, vrednovati, evaluirati, zaključiti, procijeniti, usporediti, preporučiti, razlikovati, kritizirati, objasniti, diskriminirati, prosuditi, prosuditi, predvidjeti, braniti, podržati, odabrati, klasificirati, argumentirano napasti, zagovarati
6.	STVARATI (SINTEZA) <i>sposobnost stvaranja novih informacija na osnovi prikupljenih, mogućnost stvaranja novih ideja, rješenja, sintetiziranje bitnoga, uočavanje novih obrazaca</i>	kategorizirati, kombinirati, organizirati, sastaviti, skladati, stvoriti, odlučiti, dizajnirati, objasniti, planirati, pripremiti, predložiti, postaviti hipotezu, modificirati, revidirati, napisati, rasporediti, posložiti, prikupiti, sastaviti, upravljati, napraviti sintezu, formulirati, konstruirati

Tablica P2. Razine postignuća za psihomotoričko područje

1.	PERCEPCIJA / MOĆ ZAPAŽANJA <i>sposobnost upotrebljavanja osjetila kao vodstvo u motoričkim aktivnostima</i>	izabrati, prepoznati, izdvojiti, povezati, čuti, slušati, primijeniti, vidjeti, osjetiti, gledati, pratiti
2.	SPREMNOST <i>mentalna, emotivna i fizička spremnost za aktivnost</i>	izabrati, prepoznati, izdvojiti, povezati, čuti, slušati, primijeniti, vidjeti, osjetiti, gledati, pratiti
3.	VOĐENI RAZGOVOR <i>sposobnost oponašanja i razvijanja vještina (vježba), često diskretnim koracima</i>	početi, objasniti, pokrenuti, nastaviti, reagirati, odgovoriti
4.	AUTOMATIZIRANI ODGOVOR <i>Sposobnost izvršavanja radnje s povećanom efikasnošću, sigurnošću i okretnošću</i>	oponašati, kopirati, izvršiti uz nadzor, vježbati, pokušati, ponoviti, prirediti, rastaviti, sastaviti
5.	SLOŽENA OPERACIJA-AUTOMATIZACIJA <i>moгуćnost automatiziranog izvršavanja radnje</i>	izvesti, konstruirati, podići, provesti, voditi, izvršiti, ubrzati, proizvesti
6.	PRILAGODBA <i>sposobnost prilagođavanja vještina problemskoj situaciji</i>	popraviti, izgraditi, upravljati, demonstrirati, kontrolirati, upravljati, voditi, ovladati
7.	ORGANIZACIJA/STVARANJE <i>moгуćnost stvaranja novih obrazaca za posebne situacije ili slučajeve</i>	prilagoditi, uskladiti, preokrenuti, revidirati, promijeniti

Tablica P3. Razine postignuća na afektivnom području

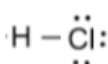
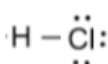
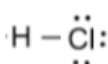
1.	PRIHVAĆANJE <i>sposobnost pažljivog praćenja nastave, osjetljivost za socijalne probleme, prihvaćanje različitosti i tolerancija</i>	pitati, izabrati, opisati, slijediti, dati, prepoznati, imenovati, pokazati, upotrijebiti, odabrati, identificirati, ukazati, izabrati, odgovoriti, koristiti
2.	REAGIRANJE <i>poštovanje školskih pravila, sposobnost izvršavanja obveza, sudjelovanje u razrednoj raspravi, dobrovoljno javljanje za zadatke, pomaganje drugima,</i>	odgovoriti, pomoći, složiti se, pozdraviti, raspraviti, pročitati, izvijestiti, reći, napisati, izvesti, označiti, izvoditi, prakticirati, predstaviti, čitati, izdvojiti
3.	KRITIČKO VREDNOVANJE <i>prihvaćanje znanstvenih načela u svakodnevnom životu, uvažavanje potrebe za društvenim napretkom, sposobnost održavanja demokratske atmosfere</i>	dovršiti, opisati, razlikovati, objasniti, oblikovati, započeti, potaknuti, pridružiti se, opravdati, pročitati, izvijestiti, proučiti, raditi, uključiti, prosuditi, predložiti, izraditi
4.	ORGANIZIRANJE <i>uvažavanje ravnoteže između slobode i odgovornosti, prepoznavanje potrebe za sustavnim rješavanjem problema, preuzimanje odgovornosti, prihvaćanje vlastitih jakih i slabih strana</i>	objediniti, sakupiti, urediti, prirediti, obraniti, objasniti, zastupati, prilagoditi, organizirati, sintetizirati, usporediti, integrirati, slijediti, prihvatiti, mijenjati, dopuniti, generalizirati, integrirati, modificirati, staviti u odnos
5.	VRIJEDNOSNO PROSUDIVANJE <i>izražavanje samopoštovanja i poštovanja prema drugima, spremnost za suradnju, mogućnost utvrđivanja objektivnih kriterija procjene, marljivost i samodisciplina</i>	djelovati, razlikovati, poštovati, utjecati, pokazivati, izvesti, predložiti, procijeniti, riješiti, upotrijebiti, potvrditi, provjeriti, prikazati, utjecati, slušati, modificirati, ispitati, koristiti, vrednovati

10.2. Metodologija istraživanja

Tablica P4. Preliminarni test o valenciji atoma kemijskih elemenata

ANKETA									
1. Definirajte svojim riječima pojam <i>valencija</i> atoma nekog kemijskog elementa. _____ _____ _____ _____									
2. i) Odredite valenciju atoma pojedinog elementa u navedenim spojevima na temelju prikazanih molekulskih i strukturnih formula. Upišite odgovore u drugi stupac tablice koristeći jedan od navoda: <table style="width: 100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 50%;">a) jednovalentan (I)</td> <td style="width: 50%;">e) peterovalentan (V)</td> </tr> <tr> <td>b) dvovalentan (II)</td> <td>f) šestervalentan (VI)</td> </tr> <tr> <td>c) trovalentan (III)</td> <td>g) sedmerovalentan (VII)</td> </tr> <tr> <td>d) četverovalentan (IV)</td> <td>h) osmerovalentan (VIII)</td> </tr> </table> Pod OBRAZLOŽITE potrebno je obrazložiti način na koji ste odredili valenciju atoma pojedinog elementa u molekuli spoja.		a) jednovalentan (I)	e) peterovalentan (V)	b) dvovalentan (II)	f) šestervalentan (VI)	c) trovalentan (III)	g) sedmerovalentan (VII)	d) četverovalentan (IV)	h) osmerovalentan (VIII)
a) jednovalentan (I)	e) peterovalentan (V)								
b) dvovalentan (II)	f) šestervalentan (VI)								
c) trovalentan (III)	g) sedmerovalentan (VII)								
d) četverovalentan (IV)	h) osmerovalentan (VIII)								

Nadopunite:													
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <th style="text-align: center; padding: 5px;">MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA</th> <th style="text-align: center; padding: 5px;">a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA</th> </tr> <tr> <td style="padding: 10px; text-align: center;"> BH_3  </td> <td style="padding: 10px;"> B: _____ H: _____ </td> </tr> <tr> <td colspan="2" style="padding: 10px;"> b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____ </td> </tr> </table>	MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA	BH_3 	B: _____ H: _____	b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____		<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <th style="text-align: center; padding: 5px;">MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA</th> <th style="text-align: center; padding: 5px;">a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA</th> </tr> <tr> <td style="padding: 10px; text-align: center;"> CH_4  </td> <td style="padding: 10px;"> C: _____ H: _____ </td> </tr> <tr> <td colspan="2" style="padding: 10px;"> b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____ </td> </tr> </table>	MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA	CH_4 	C: _____ H: _____	b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____	
MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA												
BH_3 	B: _____ H: _____												
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____													
MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA												
CH_4 	C: _____ H: _____												
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____													

<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <th style="text-align: center; padding: 5px;">MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA</th> <th style="text-align: center; padding: 5px;">a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA</th> </tr> <tr> <td style="padding: 10px; text-align: center;"> NH_3  </td> <td style="padding: 10px;"> N: _____ H: _____ </td> </tr> <tr> <td colspan="2" style="padding: 10px;"> b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____ </td> </tr> </table>	MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA	NH_3 	N: _____ H: _____	b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____		<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <th style="text-align: center; padding: 5px;">MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA</th> <th style="text-align: center; padding: 5px;">a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA</th> </tr> <tr> <td style="padding: 10px; text-align: center;"> HCl  </td> <td style="padding: 10px;"> H: _____ Cl: _____ </td> </tr> <tr> <td colspan="2" style="padding: 10px;"> b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____ </td> </tr> </table>	MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA	HCl 	H: _____ Cl: _____	b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____	
MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA												
NH_3 	N: _____ H: _____												
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____													
MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA												
HCl 	H: _____ Cl: _____												
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____													
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <th style="text-align: center; padding: 5px;">MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA</th> <th style="text-align: center; padding: 5px;">a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA</th> </tr> <tr> <td style="padding: 10px; text-align: center;"> H_2O  </td> <td style="padding: 10px;"> O: _____ H: _____ </td> </tr> <tr> <td colspan="2" style="padding: 10px;"> b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____ </td> </tr> </table>	MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA	H_2O 	O: _____ H: _____	b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____		ii) Na temelju vaših prethodnih odgovora i obrazloženja, valenciju atoma nekog elementa biste prvotno povezali s: ☐ brojem svih valentnih elektrona u atomu ☐ brojem periode periodnog sustava elemenata u kojoj se atom nalazi ☐ brojem valentnih elektrona kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju ☐ brojem atoma drugih elemenata s kojima je atom povezan						
MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA												
H_2O 	O: _____ H: _____												
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____													

3. Proučite navedene valencije pojedinih atoma za jedinke u tablici:

MOLEKULSKA FORMULA	STRUKTURNA FORMULA	TVRDNJA O VALENCIJI ATOMA
$[\text{BH}_4]^-$		Borov atom je četverovalentan (IV) u molekuli spoja $[\text{BH}_4]^-$.
$[\text{NH}_4]^+$		Dušikov atom je četverovalentan (IV) u molekuli spoja $[\text{NH}_4]^+$.
H_3NBH_3		Borov atom je četverovalentan (IV) u molekuli spoja H_3NBH_3 .
$[\text{H}_3\text{O}]^+$		Kisikov atom je trovalentan (III) u molekuli spoja $[\text{H}_3\text{O}]^+$.

- i) Odaberite točan odgovor:

- ☐ Navedene valencije za sve atome u razmatranim jedinkama su **netočne**.
- ☐ Navedene valencije za sve atome u razmatranim jedinkama su **točne**.
- ☐ Svaki je od navedenih atoma u razmatranim jedinkama jednovalentan (I).

- ii) Odaberite tvrdnju kojom možete obrazložiti svoj izbor odgovora:

- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa određena je brojem valentnih elektrona koji sudjeluju u kemijskom vezivanju.
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa ovisi o broju vezanih atoma drugog kemijskog elementa.
- ☐ U razmatranim jedinkama nalazi se samo jedan borov, dušikov odnosno kisikov atom pa su njihove valencije (I).
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa određena je brojem svih svojih valentnih elektrona
- ☐ Razmatrane jedinice imaju jednaku apsolutnu vrijednost nabojnog broja, pa su navedeni atomi jednovalentni (I).

4. Odredite valenciju atoma pojedinog elementa u navedenim spojevima na temelju prikazanih molekulskih i strukturnih formula.

Upišite odgovore u drugi stupac tablice koristeći jedan od navoda:

- a) jednovalentan (I) e) peterovalentan (V)
 b) dvovalentan (II) f) šestervovalentan (VI)
 c) trovalentan (III) g) sedmerovalentan (VII)
 d) četverovalentan (IV) h) osmerovalentan (VIII)

MOLEKULSKA I STRUKTURNA FORMULA	ODREDITE VALENCIJU ATOMA
C_2H_4	C: _____
C_2H_2	C: _____
H_2O_2	O: _____
SO_3	S: _____

- Odaberite tvrdnju kojom možete obrazložiti svoj izbor odgovora:

- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa određena je brojem valentnih elektrona koji sudjeluju u kemijskom vezivanju.
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa ovisi o broju vezanih atoma istovrsnog ili drugog kemijskog elementa.
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa u nekom spoju jednaka je broju svih valentnih elektrona.
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa u nekom kemijskom spoju određena je brojem tih atoma u molekuli spoja.

5. i) Odredite valenciju atoma pojedinog elementa u navedenim spojevima na temelju prikazanih strukturnih formula.

- a) jednovalentan (I) e) peterovalentan (V)
 b) dvovalentan (II) f) šestervovalentan (VI)
 c) trovalentan (III) g) sedmerovalentan (VII)
 d) četverovalentan (IV) h) osmerovalentan (VIII)

Pod **OBRAZLOŽITE** potrebno je obrazložiti način na koji ste odredili valenciju atoma pojedinog elementa u molekuli spoja.

Nadopunite:

STRUKTURNA FORMULA 	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA Co: _____
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____	

STRUKTURNA FORMULA 	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA Cu: _____
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____	

ii) Odaberite tvrdnju kojom možete obrazložiti svoj izbor odgovora:

- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa određena je brojem svih valentnih elektrona koji sudjeluju u kemijskom vezivanju.
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa ovisi o broju vezanih atoma drugog kemijskog elementa.
- ☐ U razmatranim jedinkama nalazi se samo jedan kobaltov odnosno bakrov atom pa su njihove valencije (I).
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa određena je brojem valentnih elektrona kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju.

6. i) Odredite valenciju atoma pojedinog elementa u navedenim spojevima na temelju prikazanih molekulskih formula.

- | | |
|-----------------------|--------------------------|
| a) jednovalentan (I) | e) peterovalentan (V) |
| b) dvovalentan (II) | f) šestervalentan (VI) |
| c) trovalentan (III) | g) sedmerovalentan (VII) |
| d) četervalentan (IV) | h) osmerovalentan (VIII) |

Pod **OBRAZLOŽITE** potrebno je obrazložiti način na koji ste odredili valenciju atoma pojedinog elementa u molekuli spoja.

Nadopunite:

MOLEKULSKA FORMULA NaCl	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA Na: _____ Cl: _____
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____	

MOLEKULSKA FORMULA WCl₆	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA W: _____ Cl: _____
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____	

MOLEKULSKA FORMULA CaO	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA Ca: _____ O: _____
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____	

MOLEKULSKA FORMULA Nb₂O₅	a) ODREDITE VALENCIJU ATOMA Nb: _____ O: _____
b) OBRAZLOŽITE: _____ _____ _____	

ii) Odaberite tvrdnju kojom možete obrazložiti svoj izbor odgovora:

- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa određena je brojem valentnih elektrona koji sudjeluju u kemijskom vezivanju.
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa ovisi o broju vezanih atoma istovrsnog ili drugog kemijskog elementa.
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa u nekom spoju jednaka je broju svih valentnih elektrona.
- ☐ Valencija atoma pojedinog elementa u nekom kemijskom spoju određena je brojem tih atoma u molekuli spoja.

7. Na temelju vaših prethodnih odgovora i obrazloženja prilikom ankete, rangirajte navedene tvrdnje od 1 do 4 tako da najznačajnijoj tvrdnji s kojom biste prvotno povezali pojam valencije atoma nekog kemijskog elementa dodijelite broj 1:

- ___ Valencija atoma određena je brojem vezanih atoma drugog kemijskog elementa (npr. ugljikov atom je u molekuli nekog ugljikovodika valentan onoliko koliko veže vodikovih atoma).
- ___ Valencija atoma određena je brojem skupine periodnog sustava elemenata u kojoj se atom nalazi.
- ___ Valencija atoma određena je brojem valentnih elektrona kojima atom sudjeluje u kemijskom vezivanju.
- ___ Valencija atoma u nekom spoju određena je brojem svih valentnih elektrona.

10.3. Humana škola kemije

Tablica P5. Prijedlog sata

PRIPREMA ZA IZVOĐENJE NASTAVNOGA SATA			
Nastavni predmet: Kemija	Datum:	Razred: 7	Broj sata:
Nastavna cjelina / tema: GRAĐA TVARI	Nastavna jedinica: VALENCIJE I KEMIJSKE FORMULE		Tip nastavnoga sata: obrada novih sadržaja
Cilj nastavnoga sata: - objasniti pojam valencije - povezati periodni sustav elemenata i valencije pojedinih atoma - identificirati valenciju pojedinog atoma - na temelju valencije atoma napisati kemijsku formulu nekog kemijskog spoja - na temelju shematskog prikaza molekule, razlučiti pomoću valentnih crtica koliko je pojedini atom valentan			
Temeljni koncepti: valencija atoma kemijskog elementa, kemijska formula kemijskog spoja			
Ključni pojmovi: valencija atoma, kemijska formula, valentna crtica			
Korelacija (suodnos):			
Predznanja: - opisati građu atoma i značenje protonskog broja - pisati simbole kemijskih elemenata - definirati pojam kemijski spoj - sumirati kemijske spojeve na molekule i formulske jedinice			
Pitanja za ponavljanje prethodno obrađenih i usvojenih nastavnih sadržaja: PP prezentacija: Od atoma kisika i atoma vodika se sastojim, a kod ljudi žed svaki dan ugasi nastojim. Tko sam ja? PP prezentacija: Kristalić sam boje modre, moje otopine su za prskanje vinograda jako dobre. Tko sam ja? ✓ Od kojih se atoma kemijskih elemenata sastoji molekula vode ili formulska jedinica modre galice? ✓ Od čega je građen atom, što bi moglo utjecati na nastanak veza između atoma?			
Nastavne metode: razgovor, zapisivanje, usmeno izlaganje, interaktivna komunikacija, prezentacija, radni listić, radionica, kartice, prikazivanje modela atoma i iona (hula – hoop)			

Oblici rada: frontalni, individualni, grupni

Sredstva, pomagala i pribor: udžbenik, bilježnica, radni listić, ploča, kreda (flomasteri), računalo, projektor, kartice, hula – hoop

Projektni zadatak:

Obrazovna postignuća i očekivani ishodi poučavanja:

1. Definirati atom

- 1.1. navesti građu atoma
- 1.2. zaključiti da su elektroni odgovorni za međusobno vezanje atoma
- 1.3. interpretirati na modelu uključenost elektrona atoma u vezivanju s drugim atomima

2. Definirati valenciju

- 2.1. definirati valenciju
- 2.2. povezati periodni sustav elemenata i valencije pojedinih atoma
- 2.3. identificirati valenciju pojedinog atoma

3. Napisati kemijsku formulu

- 3.1. razlučiti od kojih se atoma sastoji pojedini kemijski spoj
- 3.2. napisati valencije pojedinih atoma u kemijskom spoju
- 3.3. revidirati valencije pojedinih atoma te na temelju toga napisati kemijsku formulu

4. Zaključiti o valenciji elementa na temelju napisane kemijske formule

5. Na temelju shematskog prikaza molekula odrediti valenciju pojedinog atoma pomoću valentne crtice

Literatura za nastavnika i učenike:

1. Kovačević M., Mrvoš-Sermek D., Ribarić N., Švelec M.: *Kemija 7 – Metodički priručnik*. Alfa, Zagreb, 2014.
2. Sikirica M.: *Metodika nastave kemije*, Školska knjiga, Zagreb, 2003.
3. Ribarić N., Kovačević M., Mrvoš-Sermek D.: *Zbirka zadataka s repetitorijem za učenike 7 razreda osnovne škole*. Alfa, Zagreb, 2009.
4. Mrvoš-Sermek D., Kovačević M., Barić D.: *Kemija 7 – Udžbenik* Alfa, Zagreb, 2014.
5. Mrvoš-Sermek D., Ribarić N., Barić D.: *Kemija 7 – Radna bilježnica*. Alfa, Zagreb, 2014.

Razrada postignuća (ishoda)	Razina ishoda	Zadatak/pitanje za provjeru usvojenosti ishoda	Razina zadatka
1. Definirati atom			
NAVESTI GRAĐU ATOMA INTERPRETIRATI NA MODELU UKLJUČENOST ELEKTRONA ATOMA U VEZIVANJU S DRUGIM ATOMIMA	1	- Od čega je građen atom? Od kojih se atoma kemijskih elemenata sastoji molekula vode - Kako biste modelirali nastajanje jedne molekule pomoću hula hoopa? - Spajaju li se jezgre tih dvaju atoma?	R1 R2 R3
2. Definirati valenciju			
DEFINIRATI VALENCIJU POVEZATI PERIODNI SUSTAV ELEMENATA I VALENCIJE POJEDINIH ATOMA odrediti VALENCIJU POJEDINOG ATOMA	2.	- Što je valencija elementa? - Kako označujemo valenciju atoma u imenu kemijskog spoja? - Koliko su valentni atomi prve skupine periodnog sustava elemenata? - Koliko su valentni atomi elemenata 17. skupine? - Koliko je valentan aluminijev atom? - Koliko je valentan kisikov atom? - Koliko su valentni sljedeći atomi kemijskih elemenata? (pitanje iz radnog listića)	R1

3. Napisati kemijsku formulu spoja			
RAZLUČITI OD KOJIH SE ATOMA SASTOJI POJEDINI KEMIJSKI SPOJ	3.	- Kojim kemijskim simbolima ćemo napisati kemijski spoj koji se sastoji od atoma vodika i atoma kisika	R1
NAPISATI VALENCIJE POJEDINIH ATOMA U KEMIJSKOM SPOJU		- Odredi valenciju elemenata u tom kemijskom spoju	R2
REVIDIRATI VALENCIJE POJEDINIH ATOMA TE NA TEMELJU TOGA NAPISATI KEMIJSKU FORMULU SPOJA		- Odredi kemijsku formulu tog spoja	R3
4. Zaključiti o valenciji elementa na temelju napisane kemijske formule			
ODREDITI VALENCIJU atoma kemijskog ELEMENATA U pojedinim SPOJEVIMA	4.	- Odredi valencije atoma elemenata u sljedećim spojevima: NaCl, CaO, Al ₂ S ₃ - Odredi valencije atoma elemenata u sljedećim spojevima: H ₂ O, CO ₂ , NH ₃ , N ₂ O ₅	R2
5. Na temelju shematskog prikaza molekula odrediti valenciju pojedinog atoma pomoću valentne crtice			
ODREDITI VALENCIJU atoma U SHEMATSKOM PRIKAZU MOLEKULE NA TEMELJU BROJA VALENTNIH CRTICA	5.	- Koliko je valentan dušikov atom u molekuli NH ₃ ? - Koliko je valentan sumporov atom u molekuli SO ₃ ?	R2 R3

Tablica P6. Radni listić

Metodička praksa nastave kemije

Penić Nikolina



„O ŠAROLIKOSTI SVIJETA...”

Kemijskih spojeva raznih ima,
pitanje je kako se broj atoma baš na određen način u njima „naštima“.
U elektronskom omotaču je opet cijela caka,
vjerujte mi, logika je ovo laka.

Od jezgre i elektrona je atom sagrađen,
nemojte da nakon tolikog ponavljanja, netko opet bude iznenađen.
Već znamo da protoni i neutroni „ništa“ ne „rade“,
dok elektroni svakakve veze među atomima grade.

Pa naravno da su elektroni ti kreativci,
za nastajanje veza među atomima su oni krivci.
No pravo je pitanje, jesu li svi elektroni mali marljivci,
molim vas ljudi, ne budite pravi naivci.

Koliko atom kemijskog elementa olova ima elektrona?

Dovršite sijedeći izraz: $\text{Pb} \rightarrow \text{Pb}^{2+} + \underline{\hspace{2cm}}$

Koliko je elektrona u ovom slučaju bilo uključeno u nastajanje olovljevog kationa?



Naime postoji jedno **SVOJSTVO ATOMA** koje se naziva **VALENCIJA**,
nadam se da vam oko nje neće biti potrebna nikakva intervencija.
Koliko je elektrona nekog atoma uključeno u vezanje s drugim atomima **VALENCIJA** nam
kaže,
te se na temelju toga **KEMIJSKA FORMULA** nekog spoja lako **ISKAŽE**.
Kako i na koji način su ti elektroni u cijelu priču uključeni,
za tu priču ćemo u prvom srednje biti poučeni.

No, sada je opet vrijeme za naš šalabahter stari,
sada ćete čut' što je na stvari:
Valencije nemojte molim vas na pamet učiti,
jer ćete se samo bez veze namučiti.
I samo ću vam reći,
da ćemo znanje o valencijama koz naš „periodni“ jednostavno steći.

U PRVOJ SKUPINI vlada velika reaktivnost,
SAMO JEDAN ELEKTRON stvara tu silnu njihovu kreativnost.
Dok je **SKUPINA DRUGA** poznata po **VALENCIJI DVA**,
Čekajte još malo nije to priča sva.

ALUMINIJ je **TROVALENTAN UVIJEK**,
a **KISIK DVOVALENTAN**, zapamtite to **ZAUVIJEK**.
14. skupina razne valencije ima,
u toj skupini uvijek vlada neka ugodna klima.

Ali zato je atom dušika čudan jako,
ne zamarajte se njegovim valencijama, to je jednostavno tako.
a 17. skupinu krase **VALENCIJA JEDAN**,
tu je u igri elektron jako vrijedan.

Koliko su valentni atomi sljedećih kemijskih elemenata?

natrija, aluminijs, kisika, broma, magnezija, kalija, kalcija, ugljika, joda, sumpora, kalcija, bora

jednovalentni: _____

četverovalentni: _____

dvovalentni: _____

peterovalentni: _____

trovalentni: _____

šesterovalentni: _____



18. skupinu čine plinovi inertni i tromi,
totalno su nereaktivni i baš su u komi.

Još moramo znati da se valencija **RIMSKIM BROJEVIMA** označava,
pomoću nje se omjer atoma u kemijskom spoju provjerava.

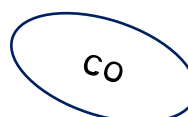
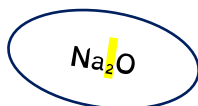
Napišite na temelju valencija atoma kemijskih elemenata kemijske formule navedenih spojeva:

- kemijski spoj koji se sastoji od **vodikovih atoma** i **kisikovih atoma**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **magnezijevih atoma** i **atoma klora**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **kalcijevih atoma** i **kisikovih atoma**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **aluminijevih atoma** i **kisikovih atoma**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **ugljikovih(II) atoma** i **kisikovih atoma**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **sumporovih(IV) atoma** i **kisikovih atoma**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **kalijevih atoma** i **atoma joda**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **natrijevih atoma** i **kisikovih atoma**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **ugljikovih(IV) atoma** i **kisikovih atoma**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **atoma željeza (III)** i **atoma kisika**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **atoma aluminija** i **atoma broma**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **atoma sumpora (VI)** i **atoma kisika**: _____
- kemijski spoj koji se sastoji od **atoma dušika (III)** i **atoma vodika**: _____

Odredi valenciju atoma kemijskih elemenata u navedenim spojevima:



Izbacite uljeza.





Nadalje, **SAMO MOLEKULE** možemo shematski prikazati,
te u tom prikazu valenciju **VALENTNOM CRTICOM** iskazati.

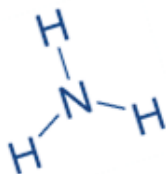
To je jedna baš velika kemičarska fora,
jer vam tada valencija neće biti noćna mora.

U svakom slučaju je lijepo valenciju nekog atoma znati,
jer se pomoću nje može „sadržaj“ nekog kemijskog spoja saznati.

**I UPRAVO JE SVOJSTVO VALENCIJE ATOMA ZASLUŽNO ZA ŠAROLIKOST SVIJETA
NAŠEG',**

sve je tako jednostavno, nema tu ničeg lakšeg.

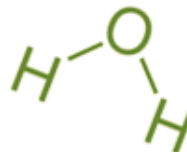
Pozorno promotrite shematski strukturni prikaz molekula kemijskih formula. Napišite njihovu molekulsku formulu te odredite na temelju valentnih crtica valencije pojedinih atoma u kemijskom spoju. Dolje su shematski prikazane molekule kemijskih formula. Napišite njihovu molekulsku formulu te odredite na temelju valentnih crtica valencije pojedinih atoma u kemijskom spoju.



molekulska formula: _____

valencije atoma vodika: _____

valencija atoma dušika: _____



molekulska formula: _____

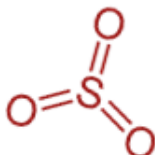
valencije atoma vodika: _____

valencija atoma kisika: _____

molekulska formula: _____

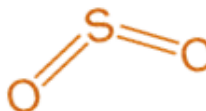
valencije atoma kisika: _____

valencija atoma sumpora: _____



molekulska formula: _____

valencije atoma kisika: _____



molekulska formula: _____

valencije atoma kisika: _____

valencija atoma sumpora: _____