

Karboksilatni kompleksi bakra(II). E-škola kemije - korisnici

Pavličić, Ivana

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:217:600636>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-23**



Repository / Repozitorij:

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





Sveučilište u Zagrebu
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
Kemijski odsjek

Ivana Pavličić

KARBOKSILATNI KOMPLEKSI BAKRA(II)

***E*-ŠKOLA KEMIJE – KORISNICI**

Diplomski rad

predložen Kemijskom odsjeku

Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu

radi stjecanja akademskog zvanja

magistre edukacije biologije i kemije

Zagreb, 2018.

Ovaj diplomski rad izrađen je u Zavodu za opću i anorgansku kemiju Kemijskog odsjeka Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu pod mentorstvom i neposrednim vodstvom izv. prof. dr. sc. Nenada Judaša.

Zahvale

Posebno želim zahvaliti mentoru izv. prof. dr. sc. Nenadu Judašu na strpljivosti, susretljivosti, povjerenju, razumijevanju, stručnoj pomoći i danim savjetima prilikom izrade ovog diplomskog rada. Zahvalna sam na svemu što ste me naučili i na onome što ćete me tek naučiti. Jedno skromno, ali istovremeno od srca, veliko hvala.

Zahvaljujem se i dr. sc. Biljani Tomašević s Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu na ugodnoj suradnji i pruženoj pomoći prilikom rada na analizi rezultata projekta *E-škola kemije* u sklopu metodičkog dijela ovog diplomskog rada.

Posebno hvala mojim roditeljima i sestri na pruženoj podršci, odricanju i razumijevanju tijekom svih ovih godina mog fakultetskog obrazovanja.

Hvala svim mojim prijateljima, kolegicama i kolegama, koji su me sve vrijeme podržavali i bili potrebna motivacija u teškim trenucima.

Sadržaj

SAŽETAK.....	IX
ABSTRACT	XI
§ 1. UVOD.....	1
§ 2. LITERATURNI PREGLED	2
2.1. Supramolekulska sinteza	2
2.2. Kompleksni spojevi	6
2.3. Međumolekulske interakcije	7
2.4. Dinuklearne molekule bakrovih(II) karboksilata.....	9
2.5. Molekule alkohola i vode kao poveznice	12
2.6. Ciljevi	13
§ 3. EKSPERIMENTALNI DIO	14
3.1. Opis polaznog materijala.....	14
3.2. Difrakcijski pokusi s monokristalnim uzorcima	14
§ 4. REZULTATI.....	16
4.1. Rezultati pokusa difrakcije rendgenskog zračenja na monokristalnim uzorcima.....	16
§ 5. RASPRAVA	19
5.1. Kristalna i molekulska struktura spoja A	19
5.2. Kristalna i molekulska struktura spoja B.....	21
§ 6. ZAKLJUČAK ISTRAŽIVAČKOG DIJELA	27
§ 7. POPIS OZNAKA, KRATICA I SIMBOLA.....	28
§ 8. METODIČKI DIO.....	29
8.1. Kratki osvrt na povijest projekta <i>E</i> -škola kemije (dio drugi).....	29
8.2. O srodnim portalima na internetu.....	32
8.3. Analiza odabranih sadržaja portala <i>E</i> -škola kemije	34
8.3.1. Metodologija rada.....	35
8.3.2. Rezultati i rasprava analize odabranih sadržaja portala <i>E</i> -škola kemije.....	38
8.4. Zaključak metodičkog dijela.....	54
§ 9. LITERATURNI IZVORI.....	56
§ 10. DODATAK	XIII
§ 11. ŽIVOTOPIS	XXIV



Sveučilište u Zagrebu
Prirodoslovno-matematički fakultet
Kemijski odsjek

Diplomski rad

SAŽETAK

KARBOKSILATNI KOMPLEKSI BAKRA(II)

(istraživački dio)

E-ŠKOLA KEMIJE – KORISNICI

(metodički dio)

Ivana Pavličić

Opisane su kristalne i molekulske strukture tetra- μ -kloracetato- $\kappa^8 O:O'$ -bis(metanol)bakar(II) difenazinskoga adukta i hidrata tetra- μ -kloracetato- $\kappa^8 O:O'$ -bis[(akva)bakar(II) voda (4/10). Monokristalni uzorci dobiveni su hlapljenjem metanolnih i vodenih otopina. Oba spoja, kokristal sastava $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ i hidrat sastava $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5 \text{H}_2\text{O}$, kristaliziraju u triklinskom sustavu. Istraživanje potvrđuje sintonska svojstva molekula fenazina na temelju kojih ih se može uporabiti kao templatne molekule u supramolekularnoj sintezi.

Metodički dio ovog diplomskog rada bavi se analizom dijela sadržaja internetskog portala *E-škola kemije*. Cilj je bio utvrditi tko su u tom periodu bili korisnici rubrike *Vi pitate e-škola odgovara*. Analizirano je 5000 odgovorenih pitanja, koja su postavljena u periodu od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine. Pitanja je postavilo 3492 učenika. Osim toga, utvrđeno je tko su osobe koje su postavile najviše pitanja, kakva je učestalost postavljanja pitanja, kakva je njihova raspodjela prema dobu dana te za koja područja kemije su vezana.

Rad je napisan hrvatskim jezikom, a sadrži 82 (58+24) stranice, 19 slika, 20 tablica, 9 histograma, 4 tortna prikaza i 56 literaturnih navoda.

Rad je pohranjen u Središnjoj kemijskoj knjižnici Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Horvatovac 102a, Zagreb i Repozitoriju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu.

Ključne riječi: fenazin, karboksilati bakra(II), supramolekulska sinteza, *E-škola kemije*

Mentor i neposredni voditelj: izv. prof. dr. sc. Nenad Judaš

Ocjenitelji:

1. izv. prof. dr. sc. Nenad Judaš (Kemijski odsjek, PMF SuZ)
2. izv. prof. dr. sc. Iva Juranović Cindrić (Kemijski odsjek, PMF SuZ)
3. izv. prof. dr. sc. Jasna Lajtner (Biološki odsjek, PMF SuZ)

Zamjena: izv. prof. dr. sc. Petar Kružić (Biološki odsjek, PMF SuZ)

Datum diplomskog ispita: 23. veljače 2018.



University of Zagreb
Faculty of Science
Department of Chemistry

Diploma Thesis

ABSTRACT

CARBOXYLATO COMPLEXES OF COPPER(II)
(chemical research part)

E-SCHOOL OF CHEMISTRY – THE USERS
(methodology of chemical education part)

Ivana Pavličić

This thesis deals with crystal and molecular structure of tetra- μ -chloroacetato- $\kappa^8 O:O'$ -bis(methanol)copper(II) diphenazine adduct and hydrate tetra- μ -chloroacetato- $\kappa^8 O:O'$ -bis(aqua)copper(II) water (4/10). Single crystals were obtained by slow evaporation of methanol and aqueous solutions containing starting compounds. Both, cocrystal $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ and hydrate $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5 \text{H}_2\text{O}$ are triclinic. Obtained data indicate specific synthone properties of phenazine molecules and their possible use as templates in supramolecular synthesis.

Methodical (didactical) part of the thesis presents analysis of data that are available on web-portal *E-school of chemistry*, specifically its column *You ask E-school answers*. The goal was to assess the total number of users in period since November 2000 to September 2012, to determine the most frequent authors of questions, spread of topics and daily dynamics of asking questions. The data revealed that 5000 analyzed questions were posted by 3492 users.

Thesis is written in Croatian and comprises, 82 (58+24) pages, 19 figures, 20 tables, 9 histograms, 4 pies and 56 references.

Thesis is deposited at Central Chemical Library, Faculty of Science, University of Zagreb, Horvatovac 102a, Zagreb, Croatia and in Repository of the Faculty of Science, University of Zagreb.

Keywords: copper(II) carboxylates, phenazine, supramolecular synthesis, *E*-school of chemistry

Mentor: Dr. sc. Nenad judaš, Associate Professor, Division of Chemistry, Faculty of Science, UniZg

Reviewers:

1. Dr. sc. Nenad judaš, Associate Professor, Department of Chemistry, Faculty of Science, UniZg
2. Dr. sc. Iva Juranović Cindrić, Associate Professor, Department of Chemistry, Faculty of Science, UniZg
3. Dr. sc. Jasna Lajtner, Associate Professor, Department of Biology, Faculty of Science, UniZg

Substitute: Dr. sc. Petar Kružić, Associate Professor, Department of Biology, Faculty of Science, UniZg

Date of exam: February 23rd 2018

§ 1. UVOD

Prošlo stoljeće, obilježeno ogromnim napretkom znanosti, iznjedrilo je novo područje sintetske i primijenjene kemije – supramolekulsku sintezu. Broj znanstvenika zainteresiranih za istraživanje ovog područja sve je veći, a dobiveni materijali nalaze različitu primjenu – od građevinske industrije i industrije materijala pa sve do medicinske i farmaceutske industrije. Dakle, u prvi plan supramolekulske sinteze stavljeni su svojstva ciljanih materijala, a time i građevnih jedinica od kojih su oni napravljeni. Cilj supramolekulske sinteze nije sama molekula već molekulska nakupina koja nastaje molekulskim samoudruživanjem. Živi svijet savršen je primjer važnosti molekulskog samoudruživanja – molekule DNA imaju uzvojitu strukturu upravo zahvaljujući *intramolekulskim* i *intermolekulskim* vodikovim vezama.¹

Mala promjena u kristalnoj strukturi supramolekulske građevine često dovodi do promjene jednog ili više fizikanih ili kemijskih svojstava materijala. Kontrolirano oblikovanje organskih i anorganskih komponenti, koje će biti uprabljene pri sintezi nekog materijala, posljedično omogućuje kontrolirano mijenjanje njegovih svojstava (primjerice magnetizma ili inkluzijskog potencijala).

Bakrovi(II) karboksilati, pa tako i halogenirani bakrovi(II) acetati, pogodni su građevne jedinice u supramolekulskoj sintezi. Zbog svojih strukturnih karakteristika često ih se koristi za izgradnju metal-organskih mreža (tzv. MOF, od eng. *metalorganic framework*), supramolekulske tvorevine koje zbog svoje poroznosti imaju široku primjenu.

Supramolekulske spojeve sintetizira se različitim metodama. Iako još uvijek prevladava klasična otopinska sinteza, sve češće se koriste i ekološki prihvatljivije metode poput sonokemijske i mehanokemijske sinteze. Takozvana *zelena kemija* budućnost je kemijske sinteze, prvenstveno zbog smanjene uporabe otapala (ili korištenja njihova vrlo malog volumena) što smanjuje količinu sporednih produkata i rasterećuje sintetski proces. Uz to, vrijeme potrebno za dobivanje željenog produkta kraće je (često znatno) nego vrijeme utrošeno na njegovo dobivanje otopinskom sintezom.

Glavni cilj ovog rada analiza je kristalnih i molekulskih struktura koje su dobivene uporabom građevne jedinice tetra- μ -kloracetato- $\kappa^8 O:O'$ -bis[bakra(II)]. U jednom slučaju to je adicijski spoj s fenazinom i metanolom, a u drugom slučaju riječ je o hidratnoj strukturi.

§ 2. LITERATURNI PREGLED

2.1. Supramolekulska sinteza

Glavna karakteristika kemije kao znanstvene discipline je sinteza novih tvari. U klasičnom smislu, nove tvari i materijale dobivamo ostvarivanjem nove povezanosti atoma ili atomskih skupina jakim kemijskim vezama (kovalente, ionske i metalne veze). No, nasuprot ovakvoj klasičnoj sintetskoj strategiji, pred pedesetak godina počeo se razvijati jedan drugačiji pristup kemijskoj sintezi koji se temelji na povezivanju molekula u ciljane cjeline pomoću slabih, tj. nekovalentnih (međumolekulskih) interakcija. Taj novi pristup nazvan je supramolekulska sinteza, a kao „*kemiju molekulskih nakupina i međumolekulskih veza*” definirao ga je Jean Marie Lehn.²

Korijeni supramolekulske sinteze znatno su stariji i sežu još jedno stoljeće unazad, u vrijeme kada je Johannes Diderik van der Waals započeo razvijati koncept međumolekulskih interakcija. Kao idejni temelj supramolekulske sinteze može se uzeti ideja Hermanna Emila Fischera prema kojoj interakcije enzima i supstrata slijede model *ključa i brave*, što je temeljno obilježje međumolekulskog prepoznavanja.

Koncept vodikovih veza počeo se razvijati tijekom 1920-ih, a njihov utjecaj, kako na atomsko-molekulske, tako i na makroskopske razine, brzo je prepoznat.³

S vremenom, postalo je moguće koristiti te ideje i primjeniti ih u ciljanoj sintezi spojeva i materijala. Tijekom 1960-ih uspjele su sinteze krunastih etera i srodnih molekula koje su specifično osjetljive ili na vrstu iona ili na oblik molekula s kojima će se povezivati. Početni razvoj supramolekulske kemije obilježili su, svatko na svoj način, Charles John Pedersen, Donald James Cram, Jean Marie Lehn, Fritz Vögtle, Gerhard Schmidt i Margaret Cairns Etter. Kao jedan od ključnih doprinosa iz tog doba nameće se razvoj tzv. *kemije domaćina i gosta* (eng. *host-guest chemistry*) za što su Cram, Lehn i Pedersen još 1987. godine dobili Nobelovu nagradu za kemiju.

Ne smije se zaboraviti ni fizičara Richarda Feynmana koji je 1959. godine u svom poznatom predavanju naslova *There's Plenty of Room at the Bottom* prikazao ideju izrade strojeva na atomsko-molekulske razine. Od tada su mnogi kemičari i fizičari pokušavali sintetizirati molekulske sustave čije bi funkcije i principi rada bili preslika strojeva iz makrosvijeta. U konačnici, 2016. godine, Jean-Pierre Sauvage, Sir James Fraser Stoddart i Bernard Lucas.

Feringa dobili su Nobelovu nagradu za kemiju za razvoj molekulskih strojeva (eng. *molecular machines* ili *nanomachines*). Time je ponovo naglašen značaj i utjecaj područja supramolekulske kemije kao načina dobivanja iznimno sofisticiranih supramolekulskih nakupina u čvrstom stanju – u rasponu od molekulskih mašina do visokospecifičnih senzora, elektroničkih i bioloških međupovršina pri čemu se koriste sve složenije građevne jedinice poput molekula fularena ili složeniji sustavi nanočestica i dendrimera.¹

Velik je interes i za materijale koji su poznati kao metal-organske mreže (eng. *metal-organic frameworks*, MOF). To su porozne strukture u kojima su atomi metala međusobno povezani organskim ligandima. Ovi spojevi strukturom su slični zeolitima. Ipak, za razliku od zeolita koji su čisto anorganski spojevi, MOF-ovi su organsko-anorganski hibridni materijali. Osim toga, koordinacijske veze u MOF-ovima slabije su od Si–O ili Al–O veza u mikroporoznim zeolitima i mezoporoznim molekulskim sitima.⁴

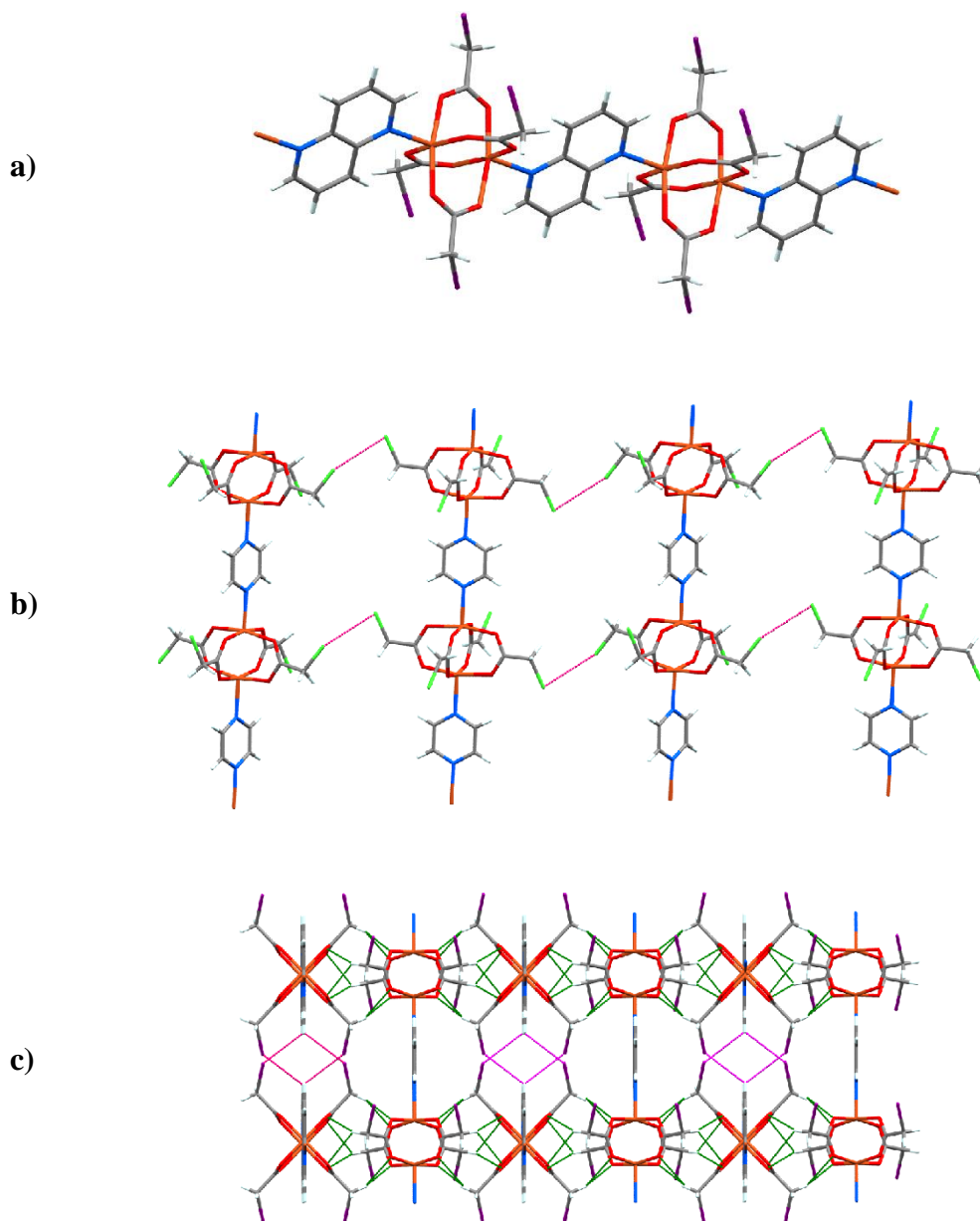
Uz ovakav pristup supramolekulskoj kemiji, koji podrazumijeva ciljanu upotrebu koordinacijskih (slabijih kovalentnih) veza, razvio se još i pristup koji je usmjeren na povezivanje molekula slabim nekovalentnim interakcijama. Sinteza organsko-anorganskog hibrida temelji se na reakciji iona prijelaznog metala (taj ion je primarna građevna jedinica; eng. *primary building block*) ili karboksilatnog spoja iona prijelaznog metala (takva molekula je sekundarna građevna jedinica; eng. *secondary building unit*, SBU)* s neutralnim nukleofilom – molekulom (atomom) poveznicom (eng. *spacer, linker, adend*). Ako je poveznica polarna, tj. na dva ili više mjesta ima povećanu elektronsku gustoću, može postati premošćujući ligand.⁵

U tom slučaju građevne jedinice povezuju se u koordinacijske lance (štapiceaste strukture, Slika 1a, str. 3), dvodimenzijske mreže (slojevite strukture, Slika 1b, str. 3) ili trodimenzijske mreže (Slika 1c, str. 3) prije svega tako što s poveznicama tvore koordinacijske veze. No, pri tom se ne smije zanemariti i nekovalentne interakcije koje će građevne jedinice ostvarivati sa susjednim molekulama. Proces povezivanja građevnih jedinica i poveznica nazivamo molekulske samoudruživanje, a uloga poveznica može biti:

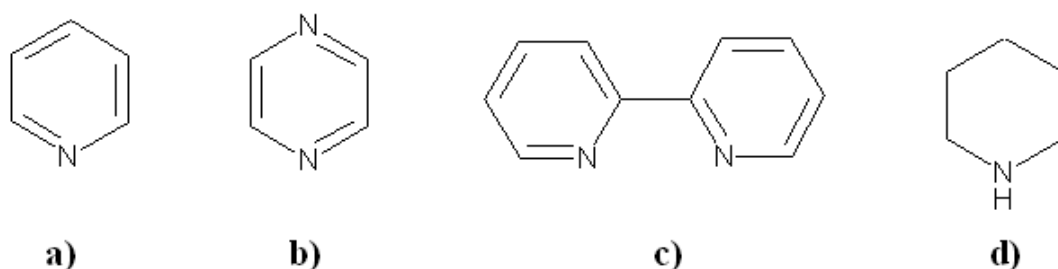
- a) kelatna,
- b) topologijska,
- c) funkcijska.

* U daljnjem tekstu će se za pojmove *primary building unit* i *secondary building unit* koristiti općeniti naziv *građevna jedinica*.

Poveznice (adende) općenito razvrstavamo prema njihovim kelacijskim svojstvima, tj. prema broju ligantnih atoma i broju veza koje mogu ostvariti s istim ionom metala. Primjerice, molekule piridina i pirazina su monodentatne, pri čemu molekule pirazina mogu biti i premošćujuće poveznice. S druge strane, molekule 2,2'-bipiridina primjer su bidentatnih liganada (Slika 2a, 2b, 2c).⁵



Slika 1. Prikaz povezivanja: **a)** asimetričnih jedinica u jednodimenzionalnoj koordinacijskoj polimernoj lancu; **b)** molekulske lance u slojevima povezane nekovalentnim Cl...Cl interakcijama (ružičasti štapići); **c)** slojeva u mrežu povezane slabim C-H...O vodikovim vezama (zeleni štapići). Crteži su načinjeni programima Mercury⁶, RasTop⁷ i POV-Ray⁸.



Slika 2. Strukturni prikaz molekula topološki različitih vrsta adenada.

U topologijskom smislu, adende razlikujemo prema broju mjesta s kojima ostvaruju koordinacijsku vezu s različitim atomima metala. Tako će molekule piridina biti monotopne, a molekule pirazina ditopne.

U funkcijskom smislu, dakle prema broju vrsta interakcija koje ostvaruju s drugim molekulama, adendne molekule razvrstavamo na unifunkcijske, bifunkcijske... i polifunkcijske. Tako će, primjerice, molekula piperidina (Slika 2d, str. 4) biti jednofunkcijska (ako ostvaruje samo koordinacijsku vezu s atomom metala) ili bifunkcijska (ako osim koordinacijske veze ostvaruje i vodikovu vezu prema nekom heteroatomu susjedne molekule).⁵

Može se reći i da je svrha supramolekulske sinteze zapravo kontrolirano dobivanje poroznih materijala, klatrata i inkluzijskih spojeva. Takve porozne strukture, najčešće izgrađene kombinacijom građevnih jedinica i poveznica, potencijalni su *domaćini* (eng. *host*) unutar čijih se šupljina mogu smjestiti molekule *gosti* (eng. *guest*). Vrsta molekule *gosta* koji će popuniti šupljinu *domaćina* ovisi o veličini, a djelomično i o obliku same šupljine, te o vrsti interakcija koje će molekula *gosta* ostvariti sa *zidovima* šupljine. Vezno mjesto definirano je kao područje u kojem se molekule *domaćina* i *gostiju* povezuju nekovalentnim interakcijama.⁶ Tijekom sinteze ovakvih inkluzijskih spojeva (*domaćin-gost*) bitno je da nakon vezanja ili otpuštanja molekule *gosta* molekula *domaćina* ostane očuvana. Eventualno, može doći do malog proširenja veznog mjesta.

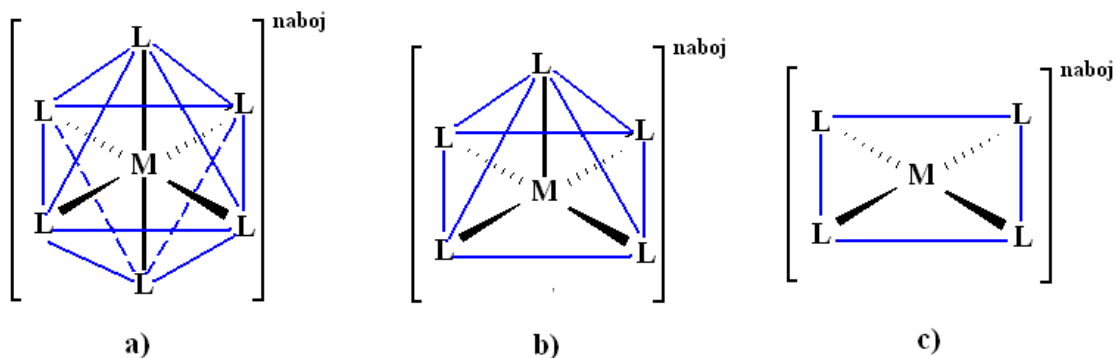
Kao što je već navedeno, vezanje molekule *gosta* ovisi o interakcijama koje će ostvariti sa zidovima MOF-a (eng. *walls of MOF*). Odabir molekula koje će se vezati može se kontrolirati odabirom organskog dijela porozne mreže. Primjerice, moguće je sintetizirati tzv. obrnute metal-organske mreže (eng. *inverted metal-organic frameworks*, IMOF) u kojima će organski ligandi poslužiti kao građevne jedinice, a ioni metala (vezani za neku organsku skupinu) kao poveznice. Velika raznolikost molekula koje se mogu vezati na metalni centar i reverzibilna priroda interakcija koje se uspostavljaju između iona prijelaznih metala i liganada omogućuju

postizanje željene selektivnosti obrnutih metal-organskih mreža.³ Cilj je supramolekulske sinteze prirediti seriju metal-organskih mreža s različitom veličinom šupljina koje će kasnijom obradom biti moguće funkcijski specijalizirati. Tako bismo dobili MOF-ove različitih fizikanih i kemijskih svojstava.¹⁰ Zbog svoje poroznosti, metal-organske mreže nalaze primjenu u katalizi, skladištenju plinova, separaciji enantiomera te adsorpciji i desorpciji lijekova.

2.2. Kompleksni spojevi

Kompleksnim spojevima (Wernerovim kompleksima; prema Alfredu Werneru, kemičaru koji je prvi ponudio teoriju kemijskog vezanja u kompleksnim spojevima) nazivamo one spojeve u kojima su atomi ili molekule (ligandi) više ili manje čvrsto povezane sa središnjim atomom (najčešće ionom metala). Vezu između središnjeg atoma i liganda uobičajeno se naziva koordinacijskom vezom, no ta je veza u principu kovalentne naravi, iako uglavnom ima i značajan udio ionskog karaktera.¹¹ Prema Lewisovoj teoriji kiselina i baza, molekula liganda je Lewisova baza (nukleofil), a središnji atom (ion) metala Lewisova kiselina (elektrofil).

Kompleksna jedinica, $[ML_n]^{naboj}$, sadrži n ligandnih molekula vezanih na središnji atom metala (n može, ali i ne mora odgovarati koordinacijskom broju iona metala). Ukupni naboj kompleksne jedinice određen je nabojima iona metala i vezanih liganada. Koliko će se liganada vezati za središnji ion metala ovisi o njegovom koordinacijskom broju i stereokemijskim karakteristikama te o nukleofilnosti liganada i njihovoj veličini. Ligandi vezani za metalno središte svojim ligantnim atomima tvore oko njega koordinacijski poliedar. Struktura koordinacijskog poliedra ovisi o koordinacijskom broju i elektronskim svojstvima iona metala i vezanih liganada. Za koordinacijski broj šest najčešći koordinacijski poliedar je oktaedar (Slika 3a), za koordinacijski broj pet kvadratna piramida (Slika 3b) ili trigonska bipiramida, a za koordinacijski broj četiri karakteristični su poliedri kvadrat (Slika 3c) i tetraedar.



Slika 3. Koordinacijski poliedri: a) oktaedar, b) kvadratna piramida i c) kvadrat.

Primjerice, ako je ion metala Cu^{2+} , koordinacijski poliedar bit će kvadrat u slučaju liganada koji su jaki elektron-donori (molekule amonijaka), a tetraedar u slučaju slabih elektron-donora (npr. kloridni ioni).

Koordinacijske veze često su termodinamički postojane, ali kinetički labilne. To svojstvo može se iskoristiti prilikom sinteze spojeva željenih svojstava. Kontroliranim postupcima, koordinacijski povezane sastavnice mogu se razdvojiti i zatim ponovno povezati u željene strukture.

2.3. Međumolekulske interakcije

Kao što je napisano u dijelu 2.1. *Supramolekulska sinteza*, osim na koordinacijskim (kovalentnim) vezama supramolekulska sinteza temelji se i na slabijim (međumolekulskim) interakcijama. Iako postoji više vrsta nekovalentnih interakcija, za ovaj rad posebno su značajne vodikove veze i halogenske interakcije.

Vodikove veze su nekovalentne interakcije koje se ostvaruju između različitih molekula (ili između više dijelova iste molekule) preko vodikovog atoma koji je vezan na atom donora vodikove veze, oznaka **D**. Atom koji sadrži nevezni elektronski par, prema kojem će se usmjeriti atom vodika iz donorskog dijela, nazivamo akceptorom vodikove veze, oznaka **A**.³ Stoga vodikovu vezu možemo općenito označiti kako je prikazano.



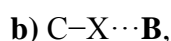
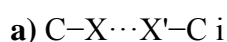
Jakost vodikove veze ovisi o više parametara. U prvom redu, ovisi o vrsti atoma donora i vrsti atoma akceptora. Ako su **D** i **A** neki jako elektronegativni atomi (primjerice atom fluora, kisika ili dušika), vodikova veza bit će jača nego u slučaju u kojem će **D** i **A** biti atomi ugljika, sumpora, klora, broma ili joda.³ Nadalje, jakost vodikove veze ovisi i o njezinoj duljini (udaljenost između atoma donora i atoma akceptora) i valentnom kutu $\angle(\text{DHA})$.

Duljina vodikove veze mora biti manja od zbroja van der Waalsovih radijusa atoma **A** i **D**, a kreće se u rasponu od 2,5 Å do 3,5 Å. Vodikovoj vezi najviše pogoduje linearan raspored atoma donora, atoma vodika i atoma akceptora. Međutim, u principu, ovisno o vrsti interakcije bit će prihvatljiv svaki kut veći od 120°. ¹² Energija vodikovih veza približno je jednaka desetini energije uobičajene σ -veze, a duljine su im dvostruko veće.

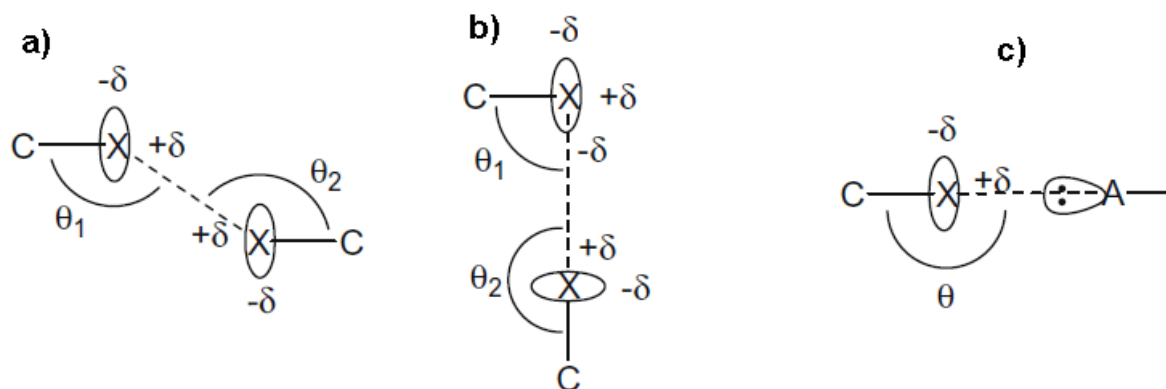
Osim vodikovih veza, u supramolekulskoj kemiji važne su i druge nekovalentne interakcije, a posebice halogenske veze.¹³ Na neki način, halogenske veze analogne su vodikovim vezama

jer u ovom slučaju atom halogena premošćuje (povezuje) atoma donora i atoma akceptora. Međutim, dok je jasno zašto vodikov atom, kojeg se uzima kao mjesto djelomično pozitivnog naboja (mjesto u kojem prevladava pozitivno električno polje), privlači neki elektronegativniji atom, za atom halogenog elementa, kojeg uobičajeno smatramo područjem djelomično povećane gustoće negativnog naboja (prevladava negativno električno polje), nije odmah jasno zašto bi sudjelovao u takvoj interakciji.¹³

Analizom strukturnih podataka dostupnih u kristalografskoj bazi *Cambridge Structural Database*¹⁴ zamijećeno je da atomi halogena, u slučaju kad su vezani za atome ugljika, ostvaruju dvije vrste interakcija:

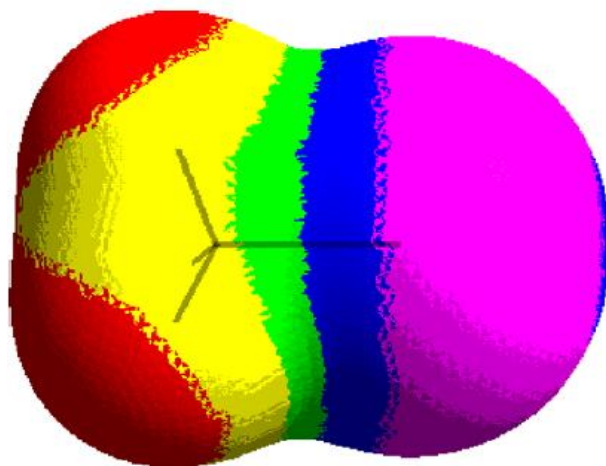


gdje je **B** neki nukleofil (Lewisova baza). Za $X \cdots X'$ interakcije karakteristična su dva prostorna rasporeda (Slika 4a i 4b), dok su $C-X \cdots B$ kontakti isključivo linearni (Slika 4c). Ta činjenica objašnjena je teorijskim modelima i rezultatima rendgenske difrakcije koji su dobiveni s uzorcima velike difrakcijske moći. Naime, elektronska gustoća oko halogenog atoma zapravo je anizotropna – u ekvatorijalnom području atoma halogena, u odnosu na usmjerenost veze prema atomu za kojeg je vezan, velika je gustoća negativnog naboja, a malena u području duž osi C–X veze (Slika 5, str. 8). Ovakva raspodjela izraženija je kod većih halogenih atoma.¹³



Slika 4. Karakteristični prostorni rasporedi halogenskih veza: **a)** i **b)** stereokemijska obilježja $X \cdots X'$ kontakata; **c)** stereokemijsko obilježje $C-X \cdots B$ kontakata.

Unatoč nekim prijašnjim mišljenjima, danas je općeprihvaćeno da su halogenske interakcije u suštini dipol-dipol interakcije, iako im može doprinijeti i prijenos naboja.



Slika 5. Kompjutorski izračunata raspodjela elektronske gustoće na površini molekule kloroforma, CH_3Cl . Elektronska gustoća opada u nizu: ljubičasto > plavo > zeleno > žuto > crveno.¹³

2.4. Dinuklearne molekule bakrovih(II) karboksilata

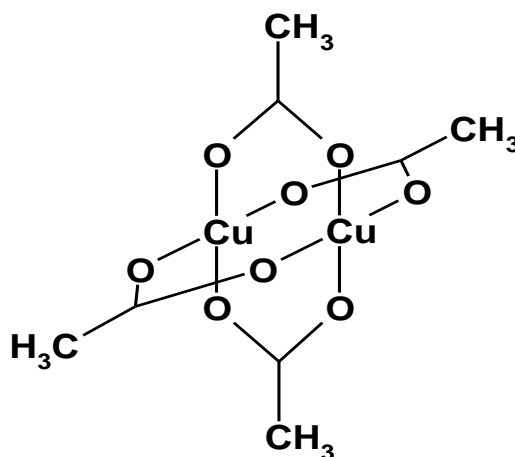
Dinuklearne molekule bakrovih(II) karboksilata poznate su zbog svog izgleda kao *molekule vodeničnog kola*[†], (eng. *paddlewheel molecules*, PW). Njih izgrađuju dva bakrova(II) iona koje premošćuju četiri karboksilatna aniona. Umjesto bakrovih(II) iona mogu se naći i drugi dvovalentni ioni metala iz d-bloka periodnog sustava elemenata.¹⁵ Dinuklearne karboksilatne molekule uspješno se koriste u supramolekulskoj sintezi od njezinih početaka.

U ovom slučaju sekundarne građevne jedinice (stereokemijski kruti karboksilatni ligandi) dovode primarne građevne jedinice (ione metala) u točno određen prostorni raspored. Stereokemijske karakteristike ovako nastalih molekula određuju daljnje međumolekulsko povezivanje, a karakteristike budućih poveznica mogućnost (ili nemogućnost) prožimanja budućih molekulskih mreža, tj. mogućnost nastajanja šupljina potrebnih za vezanje molekula koje će u njima biti *gosti*. Često je veličina uporabljenih građevnih jedinica ono što određuje (i omogućuje) nastajanje stabilnih poroznih struktura, koje će biti prikladne za nastajanje inkluzijskih spojeva i katalizu.¹⁰

Danas je poznat povećani broj znanstvenih radova u kojima je opisana uporaba tetra- μ -acetato- $\kappa^8 O:O'$ -dibakar(II) građevnih jedinica za sintezu supramolekulskih metal-organskih mreža

^{††} Kako hrvatsko kemijsko nazivlje još nema specifičan izraz za ovu vrstu molekula, a sama fraza molekule vodeničnog kola nije prikladna, u ovom radu dalje će se koristiti pohrvaćeni izraz *paddlewheelska* građevna jedinica ili *paddlewheelska* molekula.

(Slika 6), dok su ostali bakrovi karboksilati značajno slabije zastupljeni. Ove molekule imaju tri potencijalna vezna mjesta: bakrove(II) ione, karboksilatne kisikove atome i metilne skupine karboksilata. Bakrovi(II) ioni pogodna su mjesta za vezanje različitih nukleofila koordinacijskim vezama. Ti nukleofili mogu biti O- ili N-donori, primjerice molekule vode ili alkohola, odnosno molekule piridna, pirazina, bipyridina itd.



Slika 6. Shematski prikaz molekulske strukture građevne jedinice dinuklearnog bakrova(II) acetata.

Kisikovi atomi iz karboksilatnih mostova potencijalni su akceptori vodikovih veza dok su metilne skupine karboksilata potencijalni donori C–H···O vodikovih veza. Dakle, dobri nukleofili mogu povezivati građevne jedinice u koordinacijske polimere premošćući bakrove(II) ione, dok će karboksilatni kisikovi atomi i metilni ogranci biti odgovorni za slabije međumolekulske interakcije.

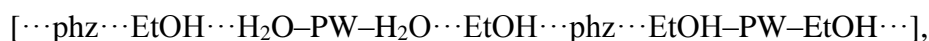
Umjesto acetata, *paddlewheelska* građevna jedinica može sadržavati neki drugi karboksilat, npr. halogenirani acetat. U tom slučaju, neka svojstva *paddlewheelske* građevne jedinice znatno će se izmijeniti. Prije svega, induktivni efekt halogenog atoma značajno će smanjiti elektronsku gustoću na bakrovim(II) ionima zbog čega će porasti njihova elektrofilnost. Osim toga, halogenirani acetati moći će se povezivati međumolekulskim halogenskim vezama koje su u pravilu jače od slabih C–H···O interakcija što će povećati raznolikost mogućeg međumolekulskog povezivanja. No, induktivni efekt čini Cu–O veze polarnijima pa vezanjem nukleofila na ion bakra može doći do njihovog pucanja.

Važnu ulogu u supramolekulskoj sintezi imaju i molekule otapala. Pogodnim odabirom otapala može se utjecati na strukturu i svojstva ciljane supramolekule. Primjerice, pri otopinskoj sintezi adukta bakrova(II) jodoacetata s fenazinom uz isparavanje otapala, kada su kao otapala korišteni

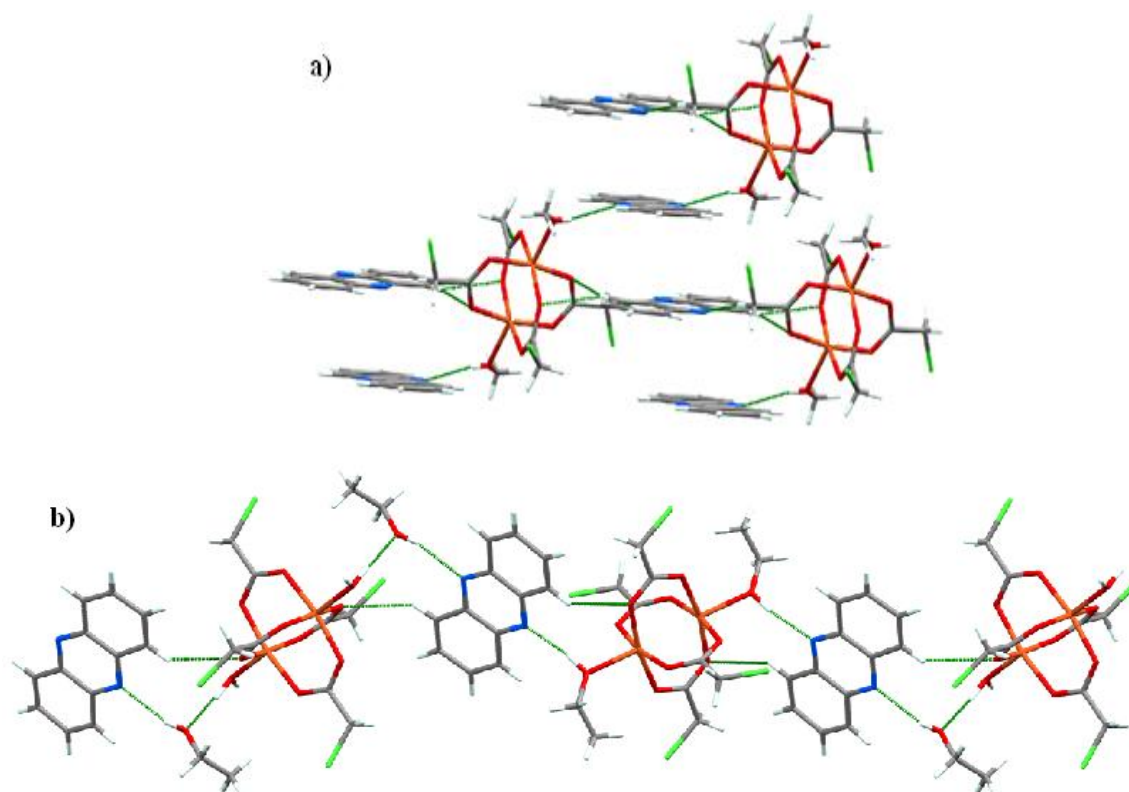
metanol i etanol, dobiveni su spojevi različitih struktura (Slika 7, str. 10).¹⁶ Ponavljajuća jedinica u supramolekulskom lancu dobivena iz metanolne otopine bila je



a u onom dobivenom iz etanolne otopine



gdje phz označava molekulu fenazina, a PW *paddlewheelsku* građevnu jedinicu bakrova(II) jodacetata.



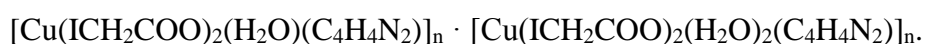
Slika 7. Utjecaj otapala na ishod supramolekulske sinteze.¹⁶ Adukti nastali reakcijom $\text{Cu}_2(\text{IACO})_4$ i fenazina u metanolu (**a**) i etanolu (**b**).

Prepoznavanje ponavljajućih građevnih jedinica važno je za razvoj metoda supramolekulske sinteze, jer time postaje moguće prirediti spojeve sličnih svojstava zamjenom pojedinih poveznica sa strukturno srodnima. Kada su kloroformske otopine reaktanata, $\text{Cu}_2(\text{IACO})_4$ i pirazina (pz), pomiješane u različitim množinskim omjerima dobivena su dva produkta **P1** i **P2**:

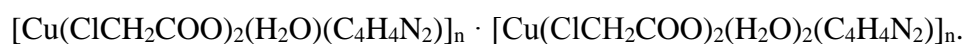
P1 $n[\text{Cu}_2(\text{IACO})_4] : n(\text{pz}) = 1 : 1$, kemijska formula dobivenog produkta bila je



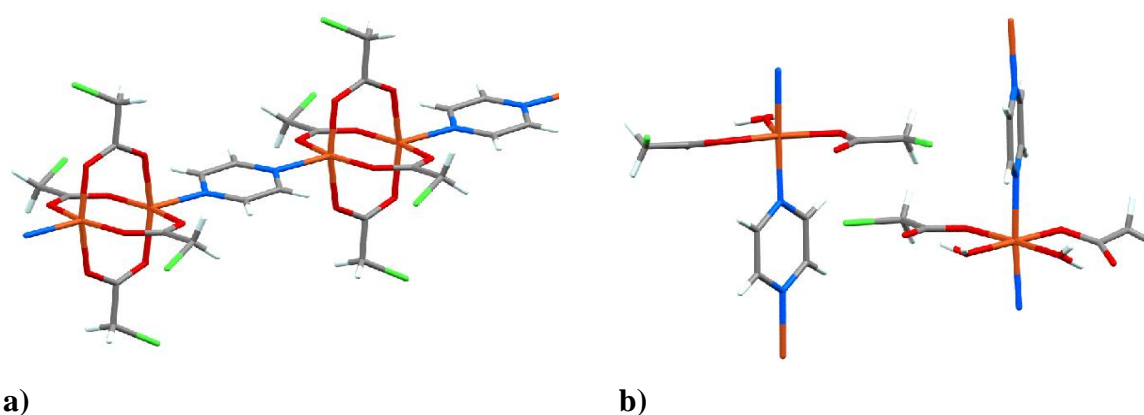
P2 $n[\text{Cu}_2(\text{IACO})_4] : n(\text{pz}) = 1 : 4$, kemijska formula dobivenog produkta bila je



Ali, konačan ishod sintetskog postupka može ovisiti i o reakcijskom mediju (utjecaj otapala). Nadslojavanjem kloroformske otopine prethodnom primjeru srodnih reaktanata benzenom dobiven je spoj **P3**, $\text{Cu}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_4(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)_n$, (Slika 8a). Međutim, kada se reakciju, uz jednak stehiometrijski omjer reaktanata $n[\text{Cu}_2(\text{ClAcO})_4] : n(\text{pz}) = 1 : 4$, provelo u vodenom mediju nastao je produkt **P4** sljedeće kemijske formule:



Ovaj spoj imao je bitno drugačiju i kristalnu i molekulsku strukturu u odnosu na spoj dobiven difuzijom benzena u kloroform (Slika 8b).¹⁶



Slika 8. Prikaz molekularnih struktura spojeva **P3** i **P4** koje nastaju iz različitih reakcijskih medija, iako je uporabljen jednak stehiomterijski omjer reaktanata.¹⁶

2.5. Molekule alkohola i vode kao poveznice

Važnu ulogu u supramolekularnoj sintezi, osim odabira građevnih jedinica, ima i odabir poveznica (eng. *linkers*). Poveznice su molekule koje posjeduju više nukleofilnih elektronskih parova pa njima građevne jedinice povezuje u jednodimenzijske, dvodimenzijske ili trodimenzijske koordinacijske supramolekularne mreže.⁵

Molekule poveznice (primjerice, molekule pirazina ili piridina) može se u reakcijsku smjesu dodati u definiranom stehiometrijskom omjeru prema sekundarnim građevnim jedinicama ili, u slučaju otopinske sinteze one mogu biti i same molekule otapala. Prikladnim odabirom poveznica moguće je kontrolirano mijenjati strukturnu metriku, a time i fizikalno-kemijska svojstva konačnih struktura. O odabiru poveznica također će ovisiti hoće li doći do prožimanja supramolekularnih mreža. Tako benzenski polikarboksilati neće tvoriti π -veze za razliku od aromatskih N-donornih heterocikličnih molekula.¹⁷

Molekule alkohola pogodni su nukleofilni adendi u supramolekularnoj sintezi čijim se odabirom može znatno utjecati, ne samo na konformacijsku, nego i na molekularnu strukturu polaznih građevnih jedinica. Bakrovi(II) karboksilati, kao relativno dobro istražena skupina kemijskih spojeva, prisutni su u velikom broju kristalnih struktura. Različita svojstva tih kristalnih struktura proizlaze iz bazičnosti vezanih molekula liganada, njihovih stereokemijskih svojstava te mogućnosti tvorenja vodikovih veza i drugih nekovalentnih međumolekulskih interakcija. Uporabom molekula različitih alkohola, dobit će se različiti rezultati. Primjerice, miješanjem vodenih otopina bakrovog(II) acetata monohidrata s alkoholnim otopinama benzojeve kiseline te sporim uparavanjem dobivenih reakcijskih smjesa nastaju različiti monokristalni uzorci. Kao alkoholna otapala korišteni su metanol,¹⁸ etanol,^{19,20} propan-1-ol²¹, butan-1-ol²¹ i pentan-1-ol,²¹ a dobivenim produktima određene su kristalne i molekularne strukture difrakcijom rendgenskog zračenja.

Kada je reakcija provedena kombinacijom otopina u metanolu i vodi, dobivene su dimerne jedinice bakrova(II) benzoata s apikalno vezanim molekulama benzojeve kiseline umjesto očekivanih molekula metanola. Kombinacijom otopina u etanolu i vodi, apikalno su se na ione bakra vezale molekule etanola. Kombinacijom otopina u propan-1-olu i vodi, dobiven je kokristal različito apikalno urešenih bakrovih(II) benzoata. U prvoj slučaju, za bakrove ione apikalno su bile vezane molekule propan-1-ola, a u drugom, neočekivano, dvije molekule vode.

2.6. Ciljevi

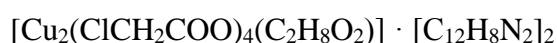
U istraživačkom dijelu ovog diplomskog rada proučavane su kristalne i molekularne strukture, tj. načini povezivanja, kloriranih dinuklearnih molekula bakrovih(II) karboksilata kojima su u apikalne položaje vezane molekule metanola ili molekule vode, a dodatno je istraživana i mogućnost vezanja molekula fenazina u apikalne položaje kloracetatnih *paddlewheelskih* građevnih jedinica.

§ 3. EKSPERIMENTALNI DIO

3.1. Opis polaznog materijala

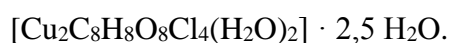
Produkte kojima je u ovom diplomskom radu opisana kristalna i molekulska struktura priredila je tijekom izrade svojeg diplomskog rada mag. chem. Sandra Čičić.¹⁶ Priređeni su monokristalni uzorci dvaju produkata:

A difenazin tetra- μ -kloracetato- $\kappa^8 O:O'$ -bis[(metanol)bakra(II)]



i

B tetra- μ -kloracetato- $\kappa^8 O:O'$ -bis[(akva)bakar(II) voda (4/10)]



Monokristalni uzorak spoja **A** dobiven je isparavanjem metanolne otopine priređene otapanjem bakrovog(II) kloracetata trihidrata i fenazina u metanolu u množinskom omjeru 1 : 2. Monokristalni uzorak spoja **B** dobiven je isparavanjem vodene otopine bakrovog(II) kloracetata trihidrata.

3.2. Difrakcijski pokusi s monokristalnim uzorcima

Kristal pogodan za difrakcijski pokus odabran je promatranjem pod svjetlosnim mikroskopom. Nakon toga, odabrani kristal pričvršćen je dvokomponentnim ljepilom na staklenu nit nosača (*holdera*) koji je učvršćen na goniometarsku glavu četverokružnog difraktometara *Oxford Diffraction Xcalibur* te je položaj kristala podešen tako da cijeli kristal tijekom snimanja stalno bude obasjan rendgenskim zračenjem.

Izvor rendgenskog zračenja bila je rendgenska cijev s molibdenskom anodom i grafitnim monokromatorom. Radni napon anode bio je 50 kV, jakost struje 40 mA, a valna duljina proizvedenog zračenja, $\lambda(\text{Mo K}\alpha)$, 0,71073 Å.

Detektor uređaja bio je CMOS senzor Sapphire3. Za upravljanje difraktometrom, optimizaciju difrakcijskog pokusa i prikupljanje podataka korišten je program *CrysAlis CCD*.²² Parametri jediničnih ćelija određeni su programom *CrysAlis RED*²³ na temelju 4714 difrakcijskih maksimuma za spoj **A** i 1166 difrakcijskih maksimuma za spoj **B**. Prikupljeni podatci istim su programom reducirani i korigirani na apsorpciju zračenja te na Lorentzov i polarizacijski

učinak. Prostorna grupa pojedinog kristala određena je pomoću programa GRAL, koji je sastavni dio programskog paketa *CrysAlis RED*.

Programski paket WinGX²⁴ korišten je za rješavanje i utočnjavanje strukturnih modela, a oni su određivani direktnim metodama pomoću programskog paketa SHELXS 97²⁵. Utočnjavanje strukturnih modela obavljeno je metodom najmanjih kvadrata pri čemu su korišteni kvadrati strukturnih faktora.

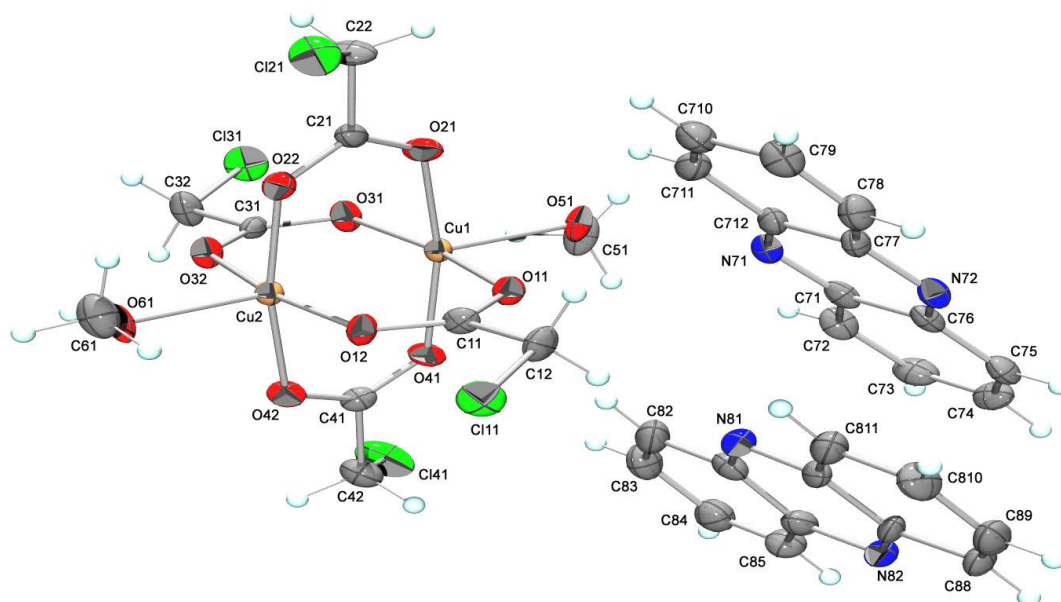
Položaji nevodikovih atoma pronađeni su u razlikovnoj (diferencijskoj) Fourierovoj mapi pomoću programa SXGRAPH²⁴, a koordinate vodikovih atoma koji nisu uključeni u vodikove veze generirane su u skladu sa stereokemijskim pravilima.

Za izračun strukturnih parametara na temelju atomskih koordinata uporabljen je program PARST²⁶. Prikazi detalja kristalnih i molekulskih struktura izrađeni su programskim paketima *ORTEP-3*²⁴, *Mercury*⁶, *RasTop*⁷ i *POVRay*⁸.

§ 4. REZULTATI

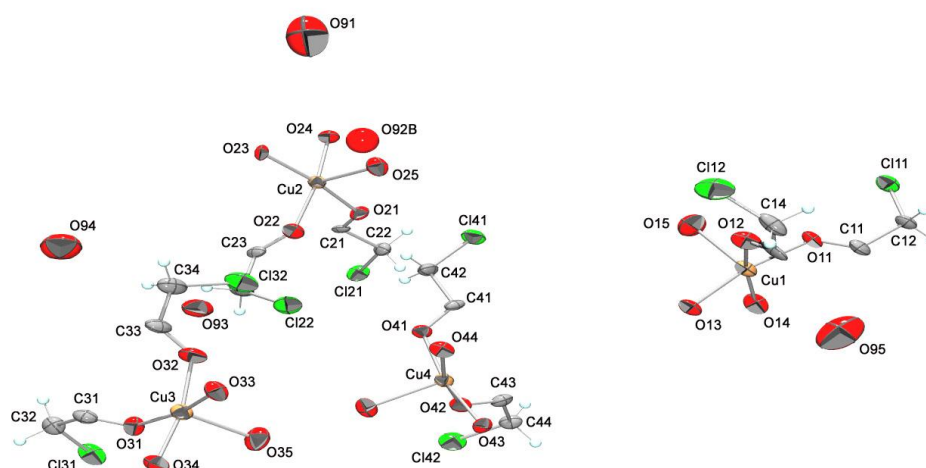
4.1. Rezultati pokusa difrakcije rendgenskog zračenja na monokristalnim uzorcima

Molekulska struktura spoja **A**, zajedno sa shemom označavanja atoma, prikazana je na slici 9, a njegovi opći i kristalografski podatci dani su u tablici 1 (str. 17). Položajni parametri, ekvivalentni izotropni temperaturni koeficijenti, anizotropni parametri pomaka, međuatomske udaljenosti, valentni kutovi, računate koordinate vodikovih atoma i torzijski kutovi prikazani su tablično u prilogu (Dodatak, Tablice D10 – D15., str. XIII – XIX).



Slika 9. Crtež asimetrične jedinice spoja **A** s prikazanom shemom označavanja nevodikovih atoma. Vibracijski elipsoidi nevodikovih atoma odgovaraju 30 % vjerojatnosti elektronske gustoće. Vodikovi atomi prikazani su kao kuglice proizvoljnog radijusa. Crtež je izrađen u programima *ORTEP3*²⁴ i *POV-Ray*⁸.

Molekulska struktura spoja **B** i shema označavanja atoma prikazani su na slici 10 (str. 17), a njegovi opći i kristalografski podatci dani su u tablici 2 (str. 18). Položajni parametri, ekvivalentni izotropni temperaturni koeficijenti, anizotropni parametri pomaka, međuatomske udaljenosti, valentni kutovi, računate koordinate vodikovih atoma i torzijski kutovi prikazani su tablično u prilogu (Dodatak, Tablice D16 – D21., str. XX – XXIII.)



Slika 10. Crtež asimetrične jedinice spoja **B** s prikazanom shemom označavanja nevodikovih atoma. Vibracijski elipsoidi nevodikovih atoma odgovaraju 30 % vjerojatnosti elektronske gustoće, a vodikovi atomi prikazani su kao kuglice proizvoljnog radijusa. Crtež je izrađen programima *ORTEP3*²⁴ i *POV-Ray*⁸.

Tablica 1. Opći kristalografski podatci za spoj **A**.

Bruto formula	$\text{Cu}_2\text{C}_{34}\text{H}_{32}\text{N}_4\text{O}_{10}\text{Cl}_4$
Molarna masa, $M / \text{g mol}^{-1}$	925,55
Kristalni sustav i prostorna grupa	Trikliniski, $P \bar{1}$
Parametri jedinične ćelije:	
$a / \text{Å}$	7,8444(7)
$b / \text{Å}$	11,4393(10)
$c / \text{Å}$	12,7157(13)
$\alpha / ^\circ$	109,04(1)
$\beta / ^\circ$	101,33(1)
$\gamma / ^\circ$	108,86(1)
$V / \text{Å}^3$	960,8(2)
Broj formulskih jedinica po ćeliji (Z)	2
Linearni apsorpcijski faktor (μ / mm^{-1})	1,45
Temperatura pokusa, T / K	293
Dimenzije kristala / mm	0,13 x 0,03 x 0,01 mm ³
Metoda pretraživanja difrakcijskih maksimuma	ω
Strukturni faktor difrakcijskih maksimuma, $F(000)$	864
Broj neovisnih difrakcijskih maksimuma	7927
Broj parametara	493
Faktor nepouzdanosti, $R, [(F^2) > 2\sigma(F^2)]$	0,0448
Težinski faktor nepouzdanosti, $wR(F^2)$	0,1276
Faktor slaganja, S	1,034
Minimalna elektronske gustoće u mapi, ($e \text{ Å}^{-3}$)	-1,15
Maksimum elektronske gustoće u mapi, ($e \text{ Å}^{-3}$)	0,74

Tablica 2. Opći kristalografski podatci za spoj B.

Bruto formula	$\text{Cu}_4\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{O}_{25}\text{Cl}_8$
Molarna masa, $M / \text{g mol}^{-1}$	1146,05
Kristalni sustav i prostorna grupa	Triklinski, $P\bar{1}$
Parametri jedinične ćelije:	
$a / \text{Å}$	11,304(2)
$b / \text{Å}$	13,176(2)
$c / \text{Å}$	15,404(3)
$\alpha / ^\circ$	65,10(2)
$\beta / ^\circ$	76,51(2)
$\gamma / ^\circ$	88,83(1)
$V / \text{Å}^3$	2015,9(7)
Broj formulskih jedinki po ćeliji (Z)	2
Linearni apsorpcijski faktor (μ / mm^{-1})	2,694
Izračunata gustoća ($D / \text{g cm}^{-3}$)	1,888
Temperatura pokusa, T / K	293
Dimenzije kristala / mm	0,14 x 0,09 x 0,06
Metoda pretraživanja difrakcijskih maksimuma	ω
Strukturni faktor difrakcijskih maksimuma, $F(000)$	1128
Broj neovisnih difrakcijskih maksimuma	2674
Broj parametara	478
Faktor nepouzdanosti, $R, [(F^2) > 2\sigma(F^2)]$	0,0512
Težinski faktor nepouzdanosti, $wR(F^2)$	0,1361
Faktor slaganja, S	0,672
Minimum elektronske gustoće u mapi, ($e \text{ Å}^{-3}$)	-0,39
Maksimum elektronske gustoće u mapi, ($e \text{ Å}^{-3}$)	0,54

§ 5. RASPRAVA

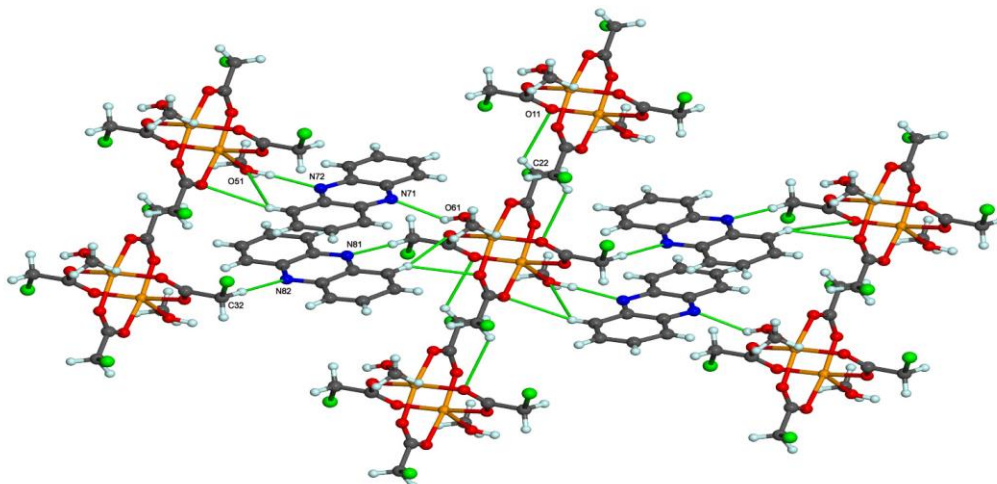
5.1. Kristalna i molekulska struktura spoja A

Kompleksni spoj $[\text{Cu}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_4(\text{MeOH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ (A) kristalizira u triklinskom sustavu (prostorna grupa $P\bar{1}$), a jedinična ćelija sadrži dvije formulske jedinice. Koordinacijski poliedri bakrovih(II) iona blago su iskrivljene kvadratne piramide (slika 9, str. 16). Baze koordinacijskih piramida čine po četiri atoma kisika iz karboksilatnih skupina koje premošćuju metalna središta. Vrhove piramida čine atomi kisika iz metanolnih liganada. Prvi bakrov(II) ion, atom Cu1, okružuju atomi O11, O21, O31, O41 i O51, a drugi, atom Cu2, atomi O12, O22, O32, O42 i O61. Duljine veza, $d(\text{Cu}-\text{O})$, prema atomima kisika koji čine baze koordinacijskih piramida kreću se u rasponu od 1,9441(1) Å do 1,989(1) Å i u skladu su s analognim vezama u srodnim karboksilatima bakra(II). Duljine veza prema apikalno vezanim atomima molekula metanola, $d(\text{Cu1}-\text{O51}) = 2,129(1)$ Å i $d(\text{Cu2}-\text{O61}) = 2,167(1)$ Å, nešto su dulje, ali i dalje u skladu s duljinama analognih veza u srodnim spojevima. Udaljenost između bakrovih(II) iona u *paddlewheelskoj* građevnoj jedinici je 2,632(1) Å. *Paddlewheelske* građevne jedinice i molekule fenazina primarno su povezane $\text{O51}-\text{H1}\cdots\text{N72}^i$ i $\text{O61}-\text{H2}\cdots\text{N71}$ vodikovim vezama u jednodimenzijski lančasti polimer (Tablica 3, str. 20).

Stabilnost polimernog lanca dodatno je pojačana nizom C–H \cdots O interakcija, od kojih valja izdvojiti one nešto kiselijih vodikovih atoma klormetilnih ogranaka prema karboksilatnim atomima kisika O11, O22, O32 i O41 ($\text{C22}-\text{H22A}\cdots\text{O41}^{iv}$, $\text{C22}-\text{H22B}\cdots\text{O11}^{iv}$, $\text{C42}-\text{H42B}\cdots\text{O32}^v$, $\text{C42}-\text{H42A}\cdots\text{O22}^v$). Ovim se interakcijama *paddlewheelske* jedinice povezuju u lanac u kojem međusobno zauzimaju zasjenjenu konformaciju. Ovako povezane, *paddlewheelske* građevne jedinice i molekule fenazina izgrađuju kristalni sloj u kojem prethodno definirani molekularni lanci međusobno zatvaraju kut od 82°.

Dodatnoj stabilizaciji kristalne strukture doprinosi niz C–H \cdots Cl interakcija (Tablica 3, str. 20) kod kojih je udaljenost između atoma vodika jedne molekule i atoma klora druge molekule u rasponu od 2,9 Å do 3,2 Å, a C–H \cdots Cl kut u rasponu od 131° do 151°.

Molekule fenazina međusobno su ukriženo naslagane jedne iznad drugih u smjeru kristalografske osi *a* pri čemu razmak između ravnina susjednih molekula fenazina iznosi 3,400 Å (slike 12 i 13, str. 21). Na taj način ostvaruje se maksimalno ispunjenje prostora.



Slika 11. Crtež prikazuje sustav mogućih vodikovih veza (zeleno obojane) u kristalu spoja **A**. Crtež je napravljen pomoću programa *Mercury 2.3*,⁶ *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.

Tablica 3. Međumolekulske vodikove veze i moguće C–H···Cl interakcije za spoj **A**.

	D–H	H···A	D···A	∠(DHA)
O–H···N				
O51–H1···N72 ⁱ	0,700(1)	2,184(2)	2,877(1)	176(1)
O61–H2···N71	0,900(2)	2,073(1)	2,841(1)	143(2)
C–H···O				
C711–H711···O22	0,930	2,791	3,624	145
C22–H22A···O41 ^{iv}	0,970	2,811	3,379	118
C22–H22B···O11 ^{iv}	0,970	2,775	3,378	122
C42–H42B···O32 ^v	0,970	2,766	3,442	122
C42–H42A···O22 ^v	0,970	2,944	3,433	118
C–H···N				
C12–H12B···N81	0,970	2,472	3,433	171
C32–H32A···N82 ^{vi}	0,970	2,455	3,416	171
C–H···Cl				
C72–H72···Cl21 ⁱⁱ	0,930	2,910	3,764	147
C61–H61A···Cl21 ⁱⁱ	0,960	2,910	3,764	147
C74–H74···Cl31 ^v	0,930	3,095	3,936	151
C78–H78···Cl41 ⁱⁱⁱ	0,930	3,059	3,737	131
C83–H83···Cl41	0,930	3,030	3,813	143
C85–H85···Cl11 ⁱⁱ	0,930	3,056	3,832	142
C89–H89···Cl21 ^v	0,930	2,987	3,808	148
C811–H811···Cl31 ^{vii}	0,930	3,118	3,859	138

$$i = 1+x, 1+y, 1+z$$

$$ii = x, -1+y, z$$

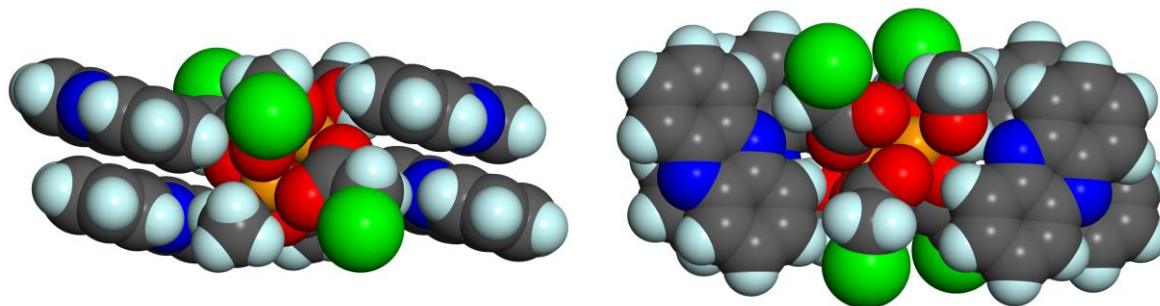
$$iii = -1+x, y, -1+z$$

$$iv = -1+x, y, z$$

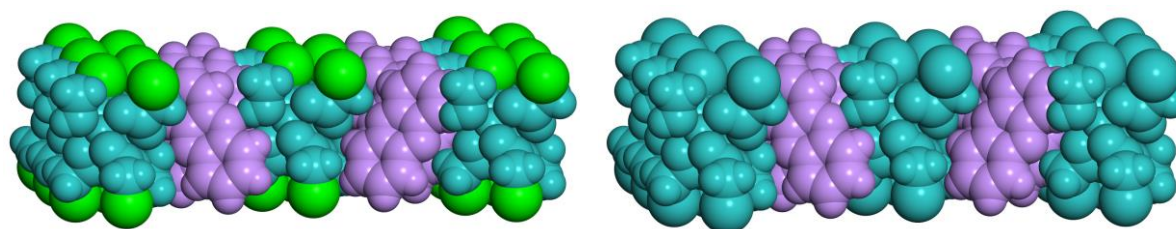
$$v = x, -1+y, -1+z$$

$$vi = x, 1+y, 1+z$$

$$vii = x, y, -1+z$$



Slika 12. Crtež prikazuje međusobnu orijentaciju i naslagivanje molekula fenazina u kristalu spoja **A**. Crtež je napravljen pomoću programa *Mercury 2.3.*⁶, *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.

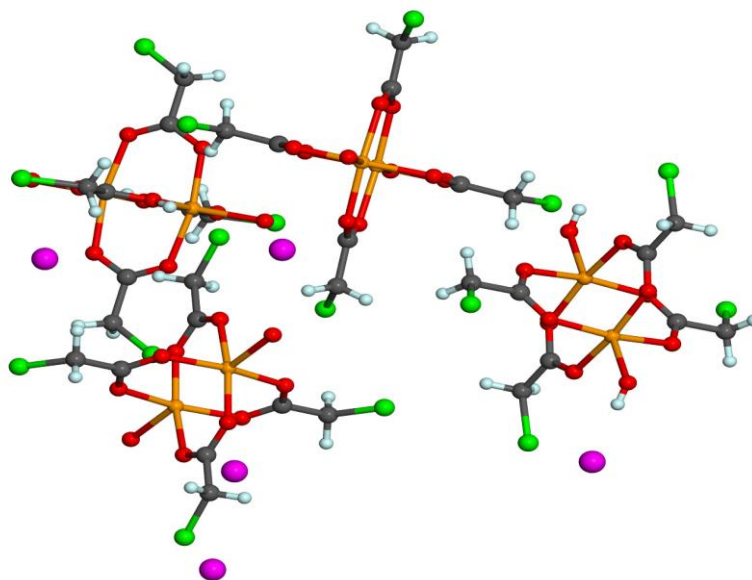


Slika 13. Crtež prikazuje naslagivanje slojeva *paddlewheel*skih građevnih jedinica i slojeva molekula fenazina u kristalu spoja **A**. Molekule fenazina obojane su ljubičasto. Atomi klora su u lijevom prikazu obojani svijetlozeleno. Crtež je napravljen pomoću programa *Mercury 2.3.*⁶, *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.

5.2. Kristalna i molekulska struktura spoja **B**

Kompleksni spoj $\text{Cu}_2(\text{ClCH}_2\text{COO})_4(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$, **B**, kristalizira u triklinskom sustavu (prostorna grupa $P\bar{1}$). Jedinična ćelija sadrži četiri *paddlewheel*ske građevne jedinice od kojih je svaka za sebe centrosimetrična, ali ujedno ima različitu okolinu. Svaku *paddlewheel*sku građevnu jedinicu izgrađuju dva premoštena bakrova atoma, četiri premošćujuća kloracetatna liganda i dvije apikalno vezane molekule vode (Slika 10, str. 17). Duljine veza $\text{Cu}-\text{O}_{\text{karboksilatni}}$ variraju u rasponu od 1,951 Å do 1,991 Å, a duljine veza $\text{Cu}-\text{O}_{\text{apikalni}}$ od 2,113 Å do 2,155 Å. Udaljenosti između bakrovih(II) iona u pojedinim *paddlewheel*skim građevnim jedinicama redom su 2,640 Å, 2,642 Å, 2,651 Å i 2,658 Å. Sve navedene veze u skladu su s analognim vezama u srodnim bakrovim(II) *paddlewheel*skim građevnim jedinicama. Kristalni uzorak bio je relativno loše kvalitete ($R = 0,0512$), a difrakcijska moć atoma vodika je malena pa nije bilo moguće iz mape elektronske gustoće iščitati položaje većine vodikovih atoma vezanih na atome

kisika, a za koje se očekuje i da su uključeni u vodikove veze O–H···O i O–H···Cl vrste.^{28,29,30,31} Stoga se daljnja analiza jačih međumolekulskih interakcija uglavnom temelji na međuatomskim udaljenostima između odgovarajućih atoma kisika i klora te logičnoj primjeni stereokemijskih pravila.



Slika 14. Crtež prikazuje prostorni raspored četiriju binuklearnih koordinacijskih jedinica spoja **B** i pet kristalizacijskih molekula vode (ljubičasto obojane). Crtež je napravljen programima *Mercury 2.3*,⁶ *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.

Kristalna i molekulska struktura ovog hidrata već su opisane,³² ali ovaj rad nudi detaljniju analizu međumolekulskih interakcija. Kao moguće O–H···O vodikove veze nisu razmatrani oni slučajevi u kojima je udaljenost između atoma kisika bila veća od 3,27 Å. S druge strane, vodikovi atomi vezani na atome ugljika generirani su na stereokemijski opravdane položaje pa je u tom smislu bilo moguće potražiti potencijalne C–H···O ili C–H···Cl interakcije.

Prva *paddlewheelska* građevna jedinica povezana je sa svojim susjedima nizom interakcija: vodikovom vezom O15–H2···O93 te interakcijama C12–H12B···O41ⁱ, C14–H14B···O31, C12–H12A···Cl42ⁱ i C14–H14A···Cl22ⁱ (Slika 15, str. XX, Tablica 4, str. XX).

Druga *paddlewheelska* građevna jedinica najpovezanija je sa svojim susjedima. Ostvaruje se sljedeći niz interakcija: vodikova veza s molekulom vode O92 kojoj položaj varira (*disorder*) O25···O92Aⁱ i O25···O92Bⁱ, zatim vodikova veza prema atomu klora Cl41, O22–H1···Cl41, zatim interakcija C22–H22B···O11ⁱ te niz interakcija C22–H22A···Cl42ⁱ, C24–H24A···Cl11^{xi}, C24–H24A···Cl31ⁱⁱⁱ, C24–H24A···Cl42^v, C24–H24B···Cl21^{iv} i C24–H24B···Cl11ⁱ (Slika 16, str. 25, Tablica 4, str. 23).

Tablica 4. Pregled međumolekulskih vodikovih veza i drugih mogućih međumolekulskih interakcija za spoj **B**. U slučajevima kada je bilo moguće odrediti položaj atoma vodika navedeni su svi parametri.

	D–H	H···A	D···A	∠(DHA)
Međumolekulske interakcije prve građevne jedinice				
O15–H2···O93	0,743(1)	2,117(2)	2,826(1)	160(1)
C12–H12B···O41 ⁱ	0,970	2,375	3,283	156
C14–H14B···O31	0,970	2,627	3,549	130
C12–H12A···Cl42 ⁱ	0,970	3,074	4,027	168
C14–H14A···Cl22 ⁱ	0,970	2,929	3,632	159
Međumolekulske interakcije druge građevne jedinice				
O25········O92A ⁱ			2,843(1)	
O25········O92B ⁱ			2,753(1)	
O22–H1···Cl41	0,839(1)	2,558(2)	3,391(1)	172(1)
C22–H22B···O11 ⁱ	0,970	2,628	3,535	156
C22–H22A···Cl42 ⁱ	0,970	2,909	3,573	127
C24–H24A···Cl11 ^{xi}	0,970	3,231	3,661	109
C24–H24A···Cl31 ⁱⁱⁱ	0,970	2,908	3,802	154
C24–H24A···Cl42 ^v	0,970	3,008	3,609	121
C24–H24B···Cl21 ^{iv}	0,970	2,927	3,837	157
C24–H24B···Cl11 ⁱ	0,970	2,942	3,443	113
Međumolekulske interakcije treće građevne jedinice				
O35········O93 ^v			2,820(1)	
O35········O95 ^{vii}			2,717(1)	
C32–H32B···O22 ⁱⁱⁱ	0,970	2,556	3,507	167
C32–H32B···Cl41 ⁱⁱⁱ	0,970	3,075	3,509	109
C34–H34A···O43	0,970	2,579	3,473	154
C34–H34A···Cl41	0,970	3,008	3,728	114
C34–H34B···Cl12	0,970	3,614	3,614	132
Međumolekulske interakcije četvrte građevne jedinice				
O45········O13 ⁱ			2,947(1)	
O45········O94 ^{viii}			2,780(1)	
C42–H42A···Cl11 ⁱ	0,970	3,006	3,945	163
C42–H42A···Cl21 ^{iv}	0,970	3,121	3,536	108
C42–H42B···Cl32	0,970	3,090	3,662	119
C43–H43A···Cl32	0,970	2,828	3,500	127
C43–H43B···O24 ^{ix}	0,970	2,593	3,491	154
C43–H43B···Cl21 ^{ix}	0,970	2,995	3,536	117

$$i = 1-x, 1-y, 1-z$$

$$ii = 1-x, -y, 2-z$$

$$iii = 2-x, -y, 1-z$$

$$iv = x, -1+y, z$$

$$v = x, y, 1+z$$

$$vi = 2-x, 1-y, 1-z$$

$$vii = x, 1+y, z$$

$$viii = 1+x, -1+y, z$$

Treća *paddlewheelska* građevna jedinica nešto je siromašnije povezana sa svojim susjedima u odnosu na drugu *paddlewheelsku* građevnu jedinicu. Ostvaruju se sljedeće interakcije: vodikove veze s molekulama vode O93^v i O95^{vii}, zatim interakcije C32–H32B···O22ⁱⁱⁱ i C34–H34A···O43 te niz interakcija C32–H32B···Cl41ⁱⁱⁱ, C34–H34A···Cl41 i C34–H34B···Cl12 (Slika 17, str. 26, Tablica 4, str. 23).

Tablica 5. Pregled međumolekulskih vodikovih veza kristalizacijskih molekula vode za spoj B. U slučajevima kada je bilo moguće odrediti položaj atoma vodika navedeni su svi parametri.

	D–H	H···A	D···A	∠(DHA)
Međumolekulske interakcije molekule vode O91				
O91······O93 ^{ix}			2,800(1)	
O91······O94 ^{vi}			2,827(1)	
O91······O95 ^x			2,716(1)	
Međumolekulske interakcije molekule vode O92				
O92A······O25 ⁱ			2,843	
O92A······O44			2,960	
O92B······O25 ⁱ			2,753	
O92B······O44			2,918	
Međumolekulske interakcije molekule vode O93				
O93······O91 ^{ix}			2,820(1)	
O15–H2···O93	0,743(1)	2,117(2)	2,826(1)	160(1)
O93······O23 ⁱ			2,927(1)	
O93······O35 ^{vii}			2,820(1)	
Međumolekulske interakcije molekule vode O94				
O94······O91 ^{vi}			2,827(1)	
O94······O95 ^{xi}			2,870(1)	
O94······O34			2,940(1)	
O94······O45 ^{vi}			2,780(1)	
Međumolekulske interakcije molekule vode O95				
O95······O91 ^{xii}			2,716(1)	
O95······O94 ^{xiii}			2,870(1)	
O95······O14 ^{xiv}			2,931(1)	
O95······O35 ^{xiv}			2,717(1)	

$$ix = 1-x, 2-y, 1-z$$

$$x = 1+x, 1+y, z$$

$$xi = 1+x, y, 1+z$$

$$xii = -1+x, -1+y, z$$

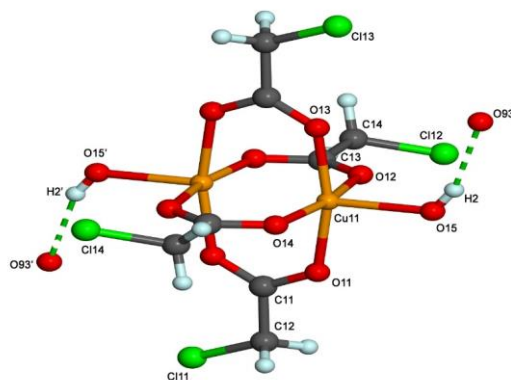
$$xiii = -1+x, y, -1+z$$

$$xiv = x, y, -1+z$$

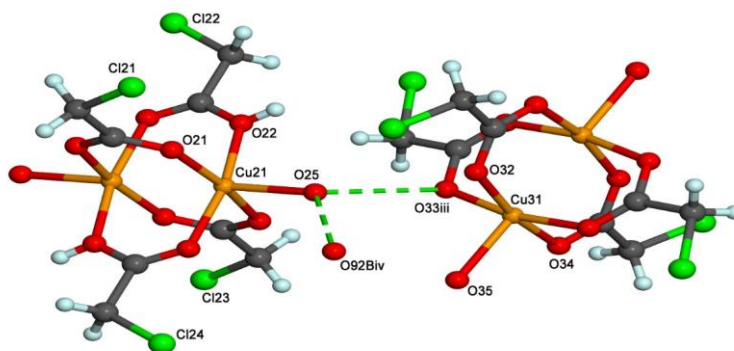
Četvrta *paddlewheelska* građevna jedinica, kao i druga, bogatija je u povezanosti sa susjedima. Atomom kisika O45 ostvaruje vodikove veze s atomom O13ⁱ iz susjedne jedinice i s molekulom

vode O94^{viii}. Slijedi interakcija C43–H43B···O24^{ix} te niz interakcija C42–H42A···Cl11ⁱ, C42–H42A···Cl21^{iv}, C42–H42B···Cl32, C43–H43A···Cl32 i C43–H43B···Cl21^{ix} (Slika 18, str. 26, Tablica 4, str. 23).

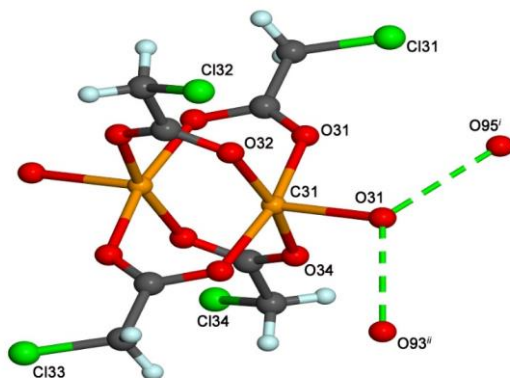
Kristalizacijske molekule vode ispunjavaju prazne prostore između *paddlewheelskih* građevnih jedinica i pri tome ih umrežuju nizom vodikovih veza (Tablica 5, str. 24). Te molekule vode tvore kluster od osam molekula vode (Slika 19, str. 26) koji svojom građom ne odgovara do sada opisanim klusterima koje kristalizacijske molekule vode čine u ovakvoj vrsti spojeva.³³ Ovaj kluster zapravo je heksagonski prsten kojeg čini šest molekula vode. Ima konformaciju stolice, a na prvu i četvrtu molekulu vode tog prstena vodikovim vezama su vezane još po jedna molekula vode pa ih tako kluster čini ukupno osam. Cijeli oktamerni kluster molekula vode dalje je vezan na atome kisika (O14, O15, O23, O34, O35, O45) nizom vodikovih veza u rasponu udaljenosti $d(\mathbf{D}\cdots\mathbf{A})$ od 2,780 Å do 2,940 Å. Ovaj oktamerni molekularni kluster mogao bi biti templat koji upravlja prostornim rasporedom *paddlewheelskih* građevnih jedinica.



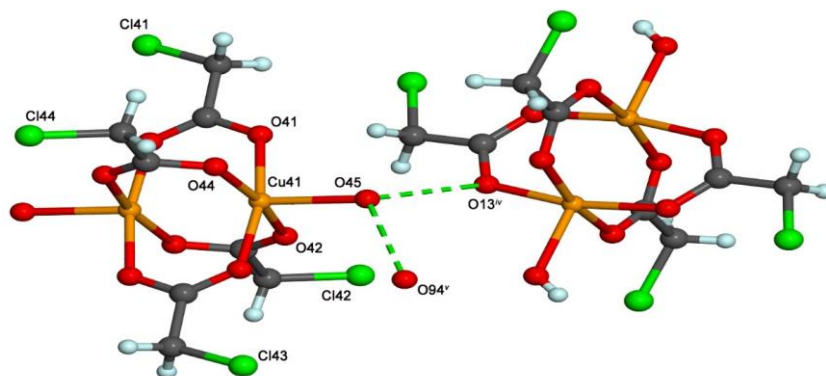
Slika 15. Crtež prikazuje najjače vodikove veze prve *paddlewheelske* građevne jedinice u kristalu spoja **B**, a napravljen je programima *Mercury 2.3*.⁶, *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.



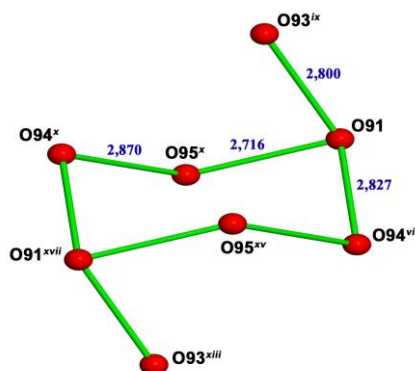
Slika 16. Crtež prikazuje najjače vodikove veze druge *paddlewheelske* građevne jedinice u kristalu spoja **B**, a napravljen je programima *Mercury 2.3*.⁶, *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.



Slika 17. Crtež prikazuje najjače vodikove veze treće *paddlewheelske* građevne jedinice u kristalu spoja **B**, a napravljen je programima *Mercury 2.3.*⁶, *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.



Slika 18. Crtež prikazuje najjače vodikove veze četvrte *paddlewheelske* građevne jedinice u kristalu spoja **B**, a napravljen je programima *Mercury 2.3.*⁶, *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.



Slika 19. Crtež prikazuje prostornu građu oktamernog klustera molekula vode u kristalu spoja **B**, a napravljen je programima *Mercury 2.3.*⁶, *RasTOP*⁷ i *POV-Ray*⁸.

§ 6. ZAKLJUČAK ISTRAŽIVAČKOG DIJELA

U ovom radu opisana je kristalna i molekulska struktura kokristala molekula fenazina i molekula kloracetatnog dinuklearnog bakrovog(II) karboksilata kojima su u apikalne položaje vezane molekule metanola, spoj **A**. Osim toga, opisana je kristalna i molekulska struktura hidrata kloracetatnog dinuklearnog bakrovog(II) karboksilata, spoj **B**.

Kokristalni spoj, spoj **A**, ima slojevitou strukturu u kojoj se izmjenjuju slojevi *paddlewheelskih* građevnih jedinica i molekula fenazina za koje se može reći da imaju templatnu ulogu, tj. da svojim nekovalentnim interakcijama usmjeruju proces samoorganiziranja molekula tijekom procesa kristalizacije.

Kristalna i molekulska struktura hidrata kloracetatnog dinuklearnog bakrovog(II) karboksilata, spoja **B**, zanimljiva je stoga što jediničnu ćeliju čine četiri centrosimetrične *paddlewheelske* jedinice od kojih svaka ima karakterističnu kristalografsku okolinu. U dostupnoj literaturi već se može naći djelomičan opis kristalne i molekulske strukture ovog hidrata kojeg su dali Carlotto i suradnici 2015. godine. Ipak, analiza međumolekulskih interakcija, koja je dana u ovom diplomskom radu, značajno je detaljnija. Iako su parametri jediničnih ćelija kristala koji je opisan u ovom radu i kristala koji su opisali Carlotto i suradnici vrlo slični, postoje značajne razlike u opisu kristalnih struktura, a mogu se sažeti na:

a) opis okoline pojedinih *paddlewheelskih* građevnih jedinica (Carlotto i suradnici prepoznaju samo jednu okolinu, a ovaj rad četiri) i

b) opis klustera molekula vode (Carlotto i suradnici navode heksamerni, a ovaj rad oktamer).

Nedostatak ove analize predstavlja kvaliteta kristala, zbog čega nije bilo moguće na temelju mape elektronske gustoće preciznije odrediti položaje vodikovih atoma, koji su uključeni u vodikove veze.

Stoga se preporuča ponovna priprava monokristalnih uzoraka koji će imati bolju difrakcijsku moć.

§ 7. POPIS OZNAKA, KRATICA I SIMBOLA

EtOH – etanol ili molekula etanola

MeOH – metanol ili molekula metanola

IMOF – obrnuta metal-organska mrežasta struktura (eng. *inverted metal-organic framework*)

MOF – metal-organska mrežasta struktura (eng. *metal-organic framework*)

phz – fenazin ili molekula fenazina

PBU – primarna građevna jedinica (eng. *primary building unit*)

pz – pirazin ili molekula pirazina

PW – *paddlewheelska* građevna jedinica (eng. *paddlewheel unit*)

SBU – sekundarna građevna jedinica (eng. *secondary building unit*)

§ 8. METODIČKI DIO

8.1. Kratki osvrt na povijest projekta *E-škola kemije* (dio drugi)

Projekt *E-škola kemije* započeo je s radom prije nešto više od dvadeset godina (tijekom školske godine 1996./1997.) kao dio većeg edukacijskog programa koji je još uključivao *E-školu fizike*, *E-školu biologije*, *E-školu astronomije* i *E-školu geografije*. Potporu projektu *E-škola* dalo je Hrvatsko prirodoslovno društvo koje je, s jedne strane, nudilo dovoljno slobode za djelovanje, a s druge je strane svakoj struci jamčilo stručnu podršku svojih društava-članica. Tako je područje kemije dobilo i podršku Hrvatskog kemijskog društva.

U početku se program *E-škole kemije* temeljio uglavnom na izvedbi mini-projekata koje su učenici, uz mentoriranje svojih nastavnika i znanstvenika s hrvatskih sveučilišta i instituta, trebali provesti u svojim školama. Internet je bio svježije rješenje koje je omogućivalo brzo povezivanje svih sudionika bez obzira na to gdje se oni nalazili, tj. omogućivalo je svakodnevnu komunikaciju. Više detalja o samom projektu dostupno je u literaturi.^{34,35,36}

Značajan događaj za projekt dogodio se u listopadu 2000. godine kada je web-servis *E-škole kemije* prebačen s klasične *html*-tehnologije na novu *PHP/MySQL*-tehnologiju. Time je značajno unaprijeđena funkcionalnost, operativnost i mogućnost ažuriranja web-stranica. Ujedno je i izuzetno olakšano ostvarivanje zadanih, kao i planiranje novih, sadržaja. Sudionici projekta sada su mogli pristupiti platformi i obaviti obnovu sadržaja spajanjem na mrežu, s bilo koje lokacije. Otvorene su nove rubrike, npr. *Kemijski udžbenik*, *Molekula mjeseca*, *Susreti i natjecanja* i druge, a neki dotadašnji oblici rada (*chat*-liste za odgovaranje na pitanja, savjetovanje i sl.) zamijenjene su novom vrstom komunikacije. Tako je nastala rubrika *Vi pitajte, E-škola odgovara* za koju je izrađen poseban obrazac koji je značajno povećao operativnost rubrike, a ujedno i omogućio prikupljanje podataka o dnevnoj učestalosti upita, području upita, dobi osobe koja je postavila upit (razred, vrsta škole), kemijskoj tematici upita te mnoge druge parametre.

Međutim, prelazak na nove tehnologije ubrzo je pokazao i da se projekt, osim u virtualnoj, nužno mora razvijati i u realnoj domeni, jer će tako postići još veći utjecaj na učenje i poučavanje kemije. Stoga je voditelj projekta Nenad Judaš odlučio pokrenuti niz sastanaka korisnika pod nazivom *Seminari E-škole kemije za učenike i nastavnike*. Za mjesto prvog takvog *Seminara* odabrana je *Osnovna škola Novi Marof*, jer su učenici te škole do tog trenutka

postavili najviše pitanja u rubrici *Vi pitajte E-škola odgovara*. Taj prvi Seminar održan je 16. studenog 2002. godine, a prisustvovalo mu je 58 učenika te 16 učitelja i nastavnika kemije iz Varaždinske županije. Radni tim *E-škole kemije* činili su: Nenad Judaš, Ernest Meštrović, Milan Sikirica i Petar Vrkljan, a održali su sljedeća predavanja i radionice: *Mišljenja o kurikularnom pristupu promjenama u osnovnom školstvu* (Milan Sikirica), *Pljusak pokusa iliti vrijeme zabave* (Milan Sikirica), *Primjena informacijske tehnologije u nastavi kemije* (Ernest Meštrović), *Razvoj novih materijala* (Ernest Meštrović), *Kreiranje istraživačkog mini-projekta* (Petar Vrkljan), *Od Wöhlera do Preloga* (Petar Vrkljan), *Zadatci, zadaće i njihovi ciljevi* (Nenad Judaš) i *Svijet malih stvari – brojanje molekula i atoma* (Nenad Judaš).

Na *Seminaru* je organiziran i susret učenika i prvih hrvatskih kemijskih olimpijaca, koji su svi tada već bili studenti kemije na zagrebačkom Prirodoslovno-matematičkom fakultetu. Bili su to: Vladimir Stilinović iz Osijeka (dobitnik prve brončane medalje za Hrvatsku na 32. Međunarodnoj kemijskoj olimpijadi koja je 2000. godine održana u Kopenhagenu u Danskoj), Ana Toplak iz Varaždina (koja je na istoj olimpijadi dobila pohvalu za najbolje riješen zadatak), Nena Peran iz Rijeke (dobitnica pohvale na 33. Međunarodnoj kemijskoj olimpijadi održanoj u Moombaiu u Indiji 2001. godine), Filip Kolundžić iz Zagreba (dobitnik brončane medalje na 34. Međunarodnoj kemijskoj olimpijadi održanoj 2002. godine u Groningenu u Nizozemskoj) i Ilija Čorić iz Zagreba (također sudionik 34. Međunarodne kemijske olimpijade).

Nakon prvog *Seminara*, koji je nedvojbeno pokazao da postoji velik interes za takvim zbivanjima, praksa je nastavljena te je do danas (do završetka pisanja ove diplomske radnje) održano 79 *Seminara*. Od tih *Seminara* dva su održana i izvan granica Republike Hrvatske – u Livnu u Bosni i Hercegovini, a ostali u 32 hrvatska grada (Tablica 6, str. 31). Tijekom tih *Seminara* održano je više od 630 radionica od kojih svaka predstavlja jedan 90-minutni nastavni sat kemije koji se temelji na nastavnoj strategiji učenja otkrivanjem. Tematski gledano, te radionice pokrivaju većinu nastavnih tema koje pripadaju osnovnoškolskom ili srednjoškolskom programu nastave kemije. Prevedeno u minute, ukupno vrijeme održanih radionica predstavlja više od 56 000 minuta nastave kemije, tj. 948 puna sata nastave kemije iliti više od 39 dana neprekidne nastave kemije.

Po posjećenosti, najveći *Seminar* održan je 8. studenoga 2008. godine u VI. Osnovnoj školi Varaždin u Varaždinu. Ovaj *Seminar* pohodilo je ukupno 176 osnovnoškolaca i srednjoškolaca te učitelja i nastavnika kemije, a šest voditelja održalo je 12 radionica. Ukupno gledano, može se reći da je sve do sada održane *Seminare* pohodilo bliže 6000 učenika i oko 1600 hrvatskih

učitelja i nastavnika kemije. Bitno je naglasiti da se ovi *Seminari*, u pravilu, zbog ostalih obveza voditelja radionica održavaju subotom, a tome valja dodati i činjenicu da za polaznike nisu obvezni – kako za učenike, tako, u pravilu, ni za učitelje i nastavnike. Osim toga, voditelji radionica svoj posao obavljaju volonterski, a glavnom nagradom za svoj rad na projektu smatraju izravno iskustvo u radu s učenicima, učiteljima i nastavnicima.

Tablica 6. Popis gradova i mjesta te broj *Seminara E-škole kemije za učenike i nastavnike* koji su u njima održani.

Mjesto	Broj <i>Seminara</i>	Mjesto	Broj <i>Seminara</i>
Bjelovar	4	Pazin	3
Čakovec	6	Petrinja	4
Đakovo	2	Požega	1
Dubrovnik	3	Radoboj	1
Đurmanec	1	Rijeka	1
Gospić	2	Šibenik	1
Gunja	1	Sisak	2
Horvati	1	Split	4
Karlovac	5	Varaždin	15
Knin	1	Vinkovci	1
Krapina	1	Virovitica	1
Križevci	4	Vukovar	1
Labin	1	Zabok	1
Livno (BiH)	2	Zadar	2
Novi Marof	1	Zagreb	1
Osijek	4	Županja	1

Ukupno je voditelja radionica na *Seminarima* bilo 29 (navedeni abecednim redom: Darko Androić, Valentina Bartol, Anja Biruški, Jelena Bobetić, Ivana Brekalo, Damjan Gjukić, Mihaela Vrbnjak Grđan, Karmen Holenda, Igor Huskić, Nenad Judaš, Srđan Lisac, Hrvoje Mesić, Aleksandar Meštrić, Ernest Meštović, Martina Meznarić, Krešimir Molčanov, Margerita Mužić, Ivana Pavličić, Vesna Petrović Peroković, Kristina Plavšić, Tomislav Portada, Milan Sikirica, Vladimir Stilinović, Lana Šarić, Katarina Šplajt, Filip Topić, Nikola Topolovčan, Dubravka Turčinović i Petar Vrkljan. Najveći broj sudjelovanja na *Seminarima* i broj na njima održanih radionica imaju voditelj seminarskih zbivanja Nenad Judaš (od svih održanih propustio je samo jedan) i Petar Vrkljan (nije propustio niti jedan od prvih 63).³⁷

Sve u svemu može se reći da je projekt *E-škola kemije* ovim nizom *Seminara* dotaknuo i oplemenio hrvatsku nastavu kemije praktički na području cijele Hrvatske, a prikazani nastavnici

satovi i iskustvo predstavljaju vrijedno znanje koje može pomoći pri daljnjem osmišljavanju nastavne prakse i nastave usmjerene na učenike.

8.2. O srodnim portalima na internetu

Nakon što se javila ideja za analizom podataka koji su dostupni na internetskom portalu *E-škola kemije*, postavljeno je i pitanje koliko je na internetu sličnih portala. Kako u današnjem svijetu, mediji imaju važnu ulogu u dobivanju informacija, internet je postao svakako najjednostavniji (korisniku najbliži) izvor informacija. Stoga su na internetu potraženi portali koji svojim ustrojem i organiziranošću podsjećaju na portal *E-škola kemije*, portal koji prvenstveno učenicima omogućuje *virtualnu* sigurnost i mogućnost dobivanja odgovora na postavljeno pitanje. Neke od portala pronašla je i analizirala Ines Mikulić u sklopu svog diplomskog rada, *E-škola kemije – geografski dosezi*, 2016. godine.³⁵ U ovom diplomskom radu još će ih se jednom prokomentirati.

Prvi je turski portal na kojem je provedeno istraživanje slično ovome.³⁸ S obzirom na to da su u tom istraživanju osobni podatci, tj. uzrast osoba koje su postavljale pitanja nepoznati, što nije slučaj s većinom osoba koje postavljaju pitanja na portalu *E-škola kemije*, samo je na temelju oblika i sadržaja postavljenih pitanja pretpostavljeno da se radi o studentima, profesionalnim kemičarima ili osobama koje su svojim radom usko vezane za područja kemije. Na portalu se odgovaralo na pitanja iz područja anorganske, organske i fizikalne kemije. Rezultati ovog istraživanja pokazali su da se potreba korisnika za korištenjem ovog web-portala javila radi povećanja komunikacije studenata i njihovih nastavnika – dobivanje brzih, korisnih i kvalitetnih odgovora.

Sljedeći od portala na kojem učenici postavljaju pitanja je *General Chemistry Online: Just ask Antoine!*³⁹ Na ovom portalu na pitanja odgovara profesor kemije sveučilišta *Frostburg State University*, Frederick A. Senese. Kao i na portalu *E-škola kemije*, ako učenici žele postaviti pitanje moraju se pridržavati određenih pravila. Prije svega, ne smiju tražiti hitne odgovore i odgovore kojima je svrha rješavanje domaćih zadaća. Nadalje, pitanja koja postavljaju trebaju biti jasno definirana. Prilikom postavljanja pitanja, kao i na portalu *E-škola kemije*, učenici trebaju o sebi ostaviti određene podatke poput: imena i prezimena, naziva škole koju pohađaju, e-mail adrese i razreda. Pitanja se prema sadržaju razvrstavaju u kategorije, a to razvrstavanje obavljaju samo učenici prilikom njihova postavljanja. Odgovori na pitanja su opsežni, jednostavno objašnjeni i omogućuju vizualan prikaz rješenja problema.

Nešto drugačiji je portal *Chemistry Stack Exchange*⁴⁰ na kojem se sve osobe koje žele postaviti pitanje trebaju prijaviti na stranicu, ali se one uglavnom prijavljuju pod pseudonimom. Autor odgovora ne treba nužno biti kemičar. Pitanja koja se postavljaju pokrivaju sva područja kemije. Ovaj portal funkcionira poput *chat-liste*. Prednost ovakvog portala je nadovezivanje autora pitanja na dobiveni odgovor te mogućnost nastavka daljnje rasprave autora odgovora i osobe koja je postavila pitanje. Negativna strana ovakve vrste portala je u tome što sve osobe koje odgovaraju nisu nužno kompetentne za određeno područje, a količina i točnost informacija kojima raspolažu su raznolike.

Slijedi još jedan sličan portal na kojem se komunikacija između autora pitanja i autora odgovora ostvaruje na prethodno opisani način – taj portal je *Reddit – ChemHelp*⁴¹. Ono što ovaj portal razlikuje od ostalih je da su pitanja na koja su najčešće dobiveni odgovori, upravo pitanja vezana uz zadatke iz domaćih zadaća.

Sljedeći pronađeni portal, ali ponešto drugačiji, je *Assignment Expert*⁴². Na ovom portalu, osim kemije, korisnici mogu postavljati pitanja iz biologije, ekonomije, matematike, fizike i inženjerstva.

Sve veći broj web-stranica koje se pojavljuju u današnje vrijeme, kada se u internet pretraživač upiše *chemistry portals*, odnosi se na gotove stranice koje imaju niz postavljenih pitanja i odgovora koje su osmislili sami autori stranice ili pak sadržaje iz područja kemije o kojima autori pišu informativno. Internetski pretraživači sve češće korisnike upućuju na stranice koje vode do privatnih instruktora koji za određenu naknadu odgovaraju na postavljena pitanja, pojašnjavaju nejasan sadržaj ili daju virtualne poduke. Ostale web-stranice odnose se na stranice za online učenje. U ovom obilju, kao nešto drugačiji istaknuo se portal *Academic Earth*⁴³ koji je povezan na *youtube tutorials* i sadrži video isječke od 5 do 10 minuta koji objašnjavaju razne teme iz područja organske kemije, anorganske kemije i biokemije. Autori video isječaka su *Khan Academy*⁴⁴, grupa ljudi koja je osnovala ovaj portal s namjerom edukacije ljudi diljem svijeta iz različitih područja zanimanja, bez obzira na prebivalište i struku (uz uvjet da znaju engleski jezik).

Nešto drugačiji od *Academic Earth* portala je portal *Refrence.com*⁴⁵, koji sadrži pitanja i odgovore iz različitih područja. Na ovom portalu područja prirodnih znanosti podijeljena su u nekoliko kategorija: *Astronomija, Ekologija, Biologija, Forenzika, Kemija, Ljudska anatomija, Boje, Mjerenja, Geologija, Fizika i Meteorologija*. Nema podataka o tome tko je postavio pitanje ili na njega dao odgovor. Uz odgovore, na dnu stranice nalaze se i poveznice koje vode

na *izvore* koji su poslužili u pisanju odgovora. Također, uz odgovore se veže i niz povezanih pitanja na koja je odgovoreno već ranije. Ako osobu zanima pitanje na koje nije odgovoreno, na vrhu stranice se nalazi *Reference* tražilica u koju može upisati novo pitanje ili pojam. Pitanje ili pojam vode prema nizu web-stranica ili web-članaka koji nužno ne pripadaju *Reference* domeni.

8.3. Analiza odabranih sadržaja portala *E-škola kemije*

Statistička obrada podataka portala *E-škola kemije* provedena je u nekoliko faza. Sve je započelo idejom i potrebom statističke analize te prikaza sveukupnog rada i postignuća projekta *E-škola kemije* tijekom dvadeset godina njegova postojanja i stalne aktivnosti na internetu. Rad su započeli izv. prof. dr. sc. Nenad Judaš i dr. sc. Biljana Tomašević, koja je u to vrijeme boravila u Zagrebu na poslijedoktorskom usavršavanju. Definirani su mnogi parametri koje valja istražiti, a prije svega taj rad bio je usmjeren na analizu sadržaja rubrike *Vi pitajte, E-škola odgovara*.⁴⁶ Analiza odabranih sadržaja rubrike *Vi pitajte, E-škola odgovara* ujedno je i tema ovog diplomskog rada.

Rubrika *Vi pitajte, E-škola odgovara* primarno je namijenjena učenicima osnovnih i srednjih škola, studentima, nastavnicima, no može poslužiti i svim ostalim osobama koje zanima poneko pitanje iz područja kemije. Kako bi osobe koje odgovaraju na pitanja mogle ponuditi dobar, kvalitetan i uzrastu primjeren odgovor, osoba koja postavlja pitanje mora u obrascu za postavljenje pitanja ostaviti i određene podatke o sebi kao što su: ime i prezime, škola, razred, mjesto, država... Da bi sve valjano funkcioniralo, portal i rubrika imaju svoju javnu i skrivenu domenu. Javna domena dostupna je svim korisnicima te je na njoj vidljivo postavljeno pitanje, dani odgovor, ime i prezime korisnika koji je postavio pitanje i njegova *e-mail* adresa te ime i prezime i *e-mail* adresa osobe koja je odgovorila na postavljeno pitanje. Svi ostali podatci skriveni su i vidljivi samo osobama koje odgovaraju na pitanja, tj. administratorima portala. Pravila o predstavljanju postavljena su odmah na samom početku aktivnosti iz više razloga. S jedne strane, da bi odgovor bio kvalitetno sročeno (primjeren uzrastu i stručnosti) nužno je znati kome se odgovara. S druge strane, autori odgovora predstavljaju se punim imenom i prezimenom da bi korisnici stekli uvid u njihovu stručnost, a time i u kvalitetu dobivenih podataka. Ovim pravilima ravnaju se i korisnici portala i njegovi administratori od početka njegove aktivnosti 2000. godine, a postavljanjem pitanja i ispunjavanjem obrasca korisnici ujedno daju i svoju privolu za objavljivanjem odabranih podataka o sebi.

8.3.1. Metodologija rada

Rubriku *Vi pitate, E-škola odgovara* u proteklih dvadesetak godina koristilo je više tisuća korisnika, a kako bi se podatci mogli analizirati, bilo ih je potrebno ujednačiti. Stoga je u programu *Microsoft Office Excel* izrađena tablica koja sadržava niz stupaca od kojih su za dio analize kojim se bavi ovaj diplomski rad bitni sljedeći podatci (Tablica 7):

- redni broj pitanja u Excel tablici (BP),
- redni broj pitanja u bazi *E-škola kemije* (BB),
- spol osobe koja postavlja pitanje,
- ime i prezime osobe koja je postavila pitanje,
- godina, mjesec, dan i vrijeme kada je postavljeno pitanje,
- popunjenost obrasca i
- aktivnost internetske poveznice u odgovoru.

Ovim parametrima dodijeljene su brojčane vrijednosti kako bi se kasnije programom *Microsoft Office Excel* mogla napraviti statistička analiza podataka. Podatci su analizirani za razdoblje od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine, a obrađeno je 5000 pitanja.

Tablica 7. Izvadak iz Excel tablice (prvih 15 pitanja i odgovora s prikazom analiziranih parametara).

BP	BB	Spol	Učenik	Godina	Mjesec	Vrijeme	Obrazac	Poveznica
1	11	1	Dalibor Milić	2000	11	2	3	
2	9	1	Marko Saten	2000	11	2	3	2
3	8	2	Marica Župančić	2000	11	2	3	2
4	90	1	Janko Petrović	2001	2	3	3	
5	99	1	Darko Katalenić	2001	3	1	1	
6	104	2	Kristina Salaje	2001	3	1	1	
7	102		Tesla	2001	3	1	4	
8	92	2	Lamija Pasalic	2001	2	3	1	2
9	67	2	Željka Uremović	2001	2	3	1	
10	103	1	Emanuel Kišerlo	2001	3	2	1	
11	100	1	Sandi Winter	2001	3	1	1	
12	110	1	Anđelko Gašparac	2001	3	3	3	
13	98	1	Emil Negro	2001	2	3	1	
14	129	1	Edi Bečirović	2001	4	3	3	
15	130	1	Ivan Zoldoš	2001	3	2	1	

Redni broj pitanja na stranicama koje su vidljive javnosti nije jednak rednom broju istog pitanja

na skrivenoj domeni (na javnosti skrivenim stranicama portala nalazi se približno tri puta veći broj postavljenih pitanja nego na javnosti vidljivim stranicama). Zbog toga je za potrebe analize bilo nužno kopirati dio teksta postavljenog pitanja na javnosti vidljivom dijelu rubrike *Vi pitajte, E škola odgovara* i unijeti ga u tražilicu skrivenog dijela domene. Na taj način moglo se pronaći izvornik pitanja i iz obrasca izvaditi sljedeće podatke o postavljaču pitanja:

- ime i prezime osobe koja postavlja pitanje,
- e-mail adresa postavljača pitanja,
- naziv institucije,
- nivo obrazovanja,
- smjer,
- razred,
- grad (mjesto),
- datum i vrijeme postavljanja pitanja,
- tko je autor odgovora na pitanje.

Na početku rada, prijenos podataka iz baze u Excel tablicu bio je spor, jer je trebalo ujednačiti mnoge parametre te im dodijeliti broјčane vrijednosti kako bi ih se moglo analizirati. Kategorija *Spol*, upisivana je u Excel tablicu sa sljedećim broјčanim oznakama:

1 – muški **2** – ženski

U situacijama kada se osoba nije predstavila imenom i prezimenom, već samo nadimkom ili pseudonimom, spol se pokušalo odrediti iz konteksta postavljenog pitanja ili načina predstavljanja. Ako se ni tako nije moglo prepoznati spol osobe koja je postavila pitanje, rubrika je ostavljena prazna.

Sljedeća analizirana kategorija bila je *Razred*. I ona je, kao i kategorija *Spol*, unošena broјčanom oznakom i to prema sljedećoj kategorizaciji:

5 – peti razred OŠ,	6 – šesti razred OŠ,	7 – sedmi razred OŠ
8 – osmi razred OŠ,	1 – prvi razred SŠ,	2 – drugi razred SŠ,
3 – treći razred SŠ,	4 – četvrti razred SŠ	

Osobama starijeg uzrasta, studentima s različitih godina studija, dodijeljivane su broјčane vrijednosti od 10 do 60 i to: 10 za prvu godinu studija, 20 za drugu i tako po deset više za svaku studijsku godinu (do 60 za šestu godinu studija). Broјčana vrijednost 70 dodijeljivana je

apsolventima. Kao i prethodne, ova kategorija popunjavana je kada je bilo navedeno ili je bilo moguće odrediti *Razred*, tj. uzrast (dob) osobe koja je postavila pitanje.

Kategorija *Obrazac* određivana je prema ispunjenosti interaktivnog obrasca za postavljanje pitanja. Kao i prethodno navedene kategorije i za ispunjenost obrasca dodijeljene su sljedeće brojčane vrijednosti:

- | | | | |
|-------------|------------------|-------------------|-----------------|
| 1 – potpuno | 2 – nepotpuni | 3 – djelomično | 4 – vrsta škole |
| | 5 – grad, država | 6 – nema podatka. | |

Ako je osoba koja postavlja pitanje navela ime i prezime, školu, grad i razred u obrascu, ispunjenost obrasca smatrana je potpunom te bi joj je bila dodijeljena numerička vrijednost **1**. Kada je u obrascu bilo navedeno samo ime osobe (bez prezimena), a svi ostali podatci bili su ispravno napisani, tada je popunjenost obrasca dobivala brojčanu vrijednost **2**. Kod djelomične popunjenosti obrasca bili bi izostavljeni podatci o školi ili gradu. Numerička vrijednost **4** dodjeljivana je kada je u obrascu bila unijeta samo vrsta škole ili ime/pseudonim osobe koja je postavila pitanje. Za parametre *grad* i *država*, numerička vrijednost **5** dodijeljivana je u slučaju kada je uz ime osobe bio napisan samo grad ili je jedino grad bio naveden u obrascu. Ako obrazac nije sadržavao podatke niti za jedan od gore navedenih parametara, dodijeljivana je brojčana vrijednost **6**.

Za kategoriju *Vrijeme* uvedena su tri vremenska intervala kojima su pridružene sljedeće brojčane vrijednosti:

- | | | |
|------------------|-------------------|-------------------|
| 1 – od 8 do 14 h | 2 – od 14 do 20 h | 3 – od 20 do 8 h. |
|------------------|-------------------|-------------------|

Kategoriji *Mjesec* dodijeljivane su brojčane vrijednosti od **1** do **12** ovisno o mjesecu u kojem je pitanje postavljeno, a u kategoriji *Aktivnost poveznice* brojčana vrijednost **1** označavala je aktivnu poveznicu, **2** neaktivnu poveznicu te **3** odgovor u kojem su navedene i aktivne i neaktivne poveznice.

Postupak popunjavanja Excel tablice bio je zahtijevan i iziskivao je mnogo vremena. Veliki broj podataka trebalo je obraditi i ujednačiti prije definiranja konačnih parametara proučavanja te dodjeljivanja brojčane vrijednosti. Na početku rada rubrike *Vi pitajte, E-škola odgovara*, osobe koje su postavljale pitanja, o sebi su ostavljale malo podataka, pa je i broj parametara i njima pripadajućih brojčanih vrijednosti s vremenom rastao. Tek nakon što je obrađen veći broj podataka, pa je stečen uvid u raznolikosti dobivenih informacija, bilo je moguće utvrditi

parametre koje će se pratiti i njima dodijeliti konačne brojučane vrijednosti. Nadalje, kako se mnoge osobe prilikom postavljanja pitanja nisu predstavljale punim imenom i prezimenom, već samo imenom, kada je došlo do potrebe za analizom osoba s najvećim brojem postavljenih pitanja, svim osobama s istim imenima, bez prezimena, uz ime je dodijeljen i broj kako ih sustav ne bi registrirao kao istu osobu. Da bi analiza imala smisla, bilo je nužno u Excel tablicu upisati jednoznačne podatke. Prilikom upisivanja imena i prezimena nužno je bilo paziti da kategorija uvijek bude jednoznačno upisana (u tom smislu trebalo je ispraviti pogrešne upise, neželjene razmake, tipfelere...) kako sustav ne bi jednu osobu registrirao kao dvije. U slučajevima kada su korisnici rubrike *Vi pitate, E-škola kemije odgovara* više puta postavili pitanje, i pritom se nisu u potpunosti predstavili, a njihovi podatci bili su poznati od ranije, Excel tablica nadopunjavana je već poznatim podacima kako bi sustav osobu registrirao kao istu. Pri tome je kategorija *Obrazac* dobivala brojčanu vrijednost prema popunjenosti obrasca prilikom postavljanja pitanja. Konačni podatci u Excel tablici analizirani su funkcijom *Pivot Table* programa *Microsoft Office Excel*. Rezultati analiza prikazivani su tablično te različitim vrstama histogramskih i tortnih prikaza.

8.3.2. Rezultati i rasprava analize odabranih sadržaja portala *E-škola kemije*

Za razdoblje od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine analizirano je 5000 odgovorenih pitanja, a analizom je utvrđeno da je tih 5000 pitanja postavilo 3492 osoba što prosječno po osobi daje 1,432 pitanja. Najviše pitanja postavio je Ivica Cvrtila (64), koji je pitanja postavljao u razdoblju od ožujka 2003. godine do kolovoza 2006. godine (Tablica 8, str. 39). Drugi po broju postavljenih pitanja je Siniša Habazin (52), a slijede ga Tomislav Lukić i Tamara Vasilj (po 36 pitanja) te Vedran Barbarić i Ivor Lončarić (po 24 pitanja).

Uzevši u obzir ovako veliki broj postavljenih pitanja pojedinaca, teško je ne zapitati se jesu li te osobe kasnije pronašle svoju profesionalnu budućnost u prirodoslovnim zanimanjima i jesu li krenule znanstvenim putovima. Osim što je postavio najveći broj pitanja na portalu *E-škola kemije*, Ivica Cvrtila kasnije je postao i jedna od najzaslužnijih osoba za funkcioniranje portala velikim brojem danih odgovora. Nakon srednjoškolskog obrazovanja upisao je studij kemije na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu gdje je stekao titulu magistra kemije, a nakon toga upisao je doktorski studij kod, u uvodu prvog dijela ovog diplomskog rada spomenutog nobelovca, profesora Bernarda Lucasa Feringae na Sveučilištu u Groningenu u Nizozemskoj. Danas živi i radi u Hrvatskoj. Osim što je kao učenik postavljao pitanja u rubrici

Vi pitate E-škola odgovara, kasnije je kao student i odgovarao na njih. Svoj prvi odgovor dao je u siječnju 2007. godine. Od 5000 analiziranih pitanja on je odgovorio na njih 1117.

Siniša Habazin je nakon završene zagrebačke Prirodoslovne škole Vladimira Preloga upisao studijski smjer *Znanosti o okolišu* na Biološkom odsjeku zagrebačkog Prirodoslovno-matematičkog fakulteta. Nakon završetka studija i stjecanja zvanja magistar ekologije, zaposlio se u Zavodu za opću i anorgansku kemiju Instituta Ruđer Bošković u Zagrebu.

Tablica 8. Učenici koji su postavili najviše pitanja u rubrici *Vi pitate, E škola kemije odgovara*.

Osoba	Broj postavljenih pitanja
Ivica Cvrtila	64
Siniša Habazin	52
Tomislav Lukić	36
Tamara Vasilj	36
Vedran Barbarić	24
Ivor Lončarić	24
Sven Stojanović	22
Sandra Mikulandrić	21
Bruno Diklić	19
Ninoslav Rudman	17
Ivan Novak	17
Goran Levak	16
Arben Beriša	16
Ivana Grgić	15
Filip Topić	12
Dario Dabić	12

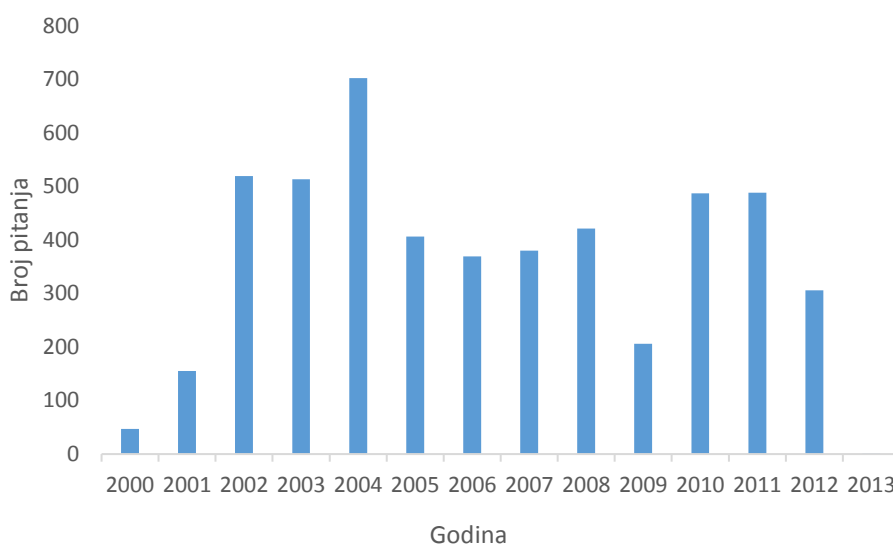
Tamara Vasilj je nakon srednjoškolskog obrazovanja upisala Medicinski fakultet Sveučilišta u Zagrebu. Studentskim znanstvenim radom bavila se na Zavodu za farmakologiju Medicinskog fakulteta pri Jedinici za molekularnu dijagnostiku i genetiku Kliničke bolnice Dubrava. Autorica je više studentskih znanstvenih članaka te je sudjelovala ili pomagala u organizaciji više studentskih i biomedicinskih kongresa u Hrvatskoj i inozemstvu. Nakon završetka studija primljena je na specijalizaciju iz hematologije u istom Zavodu.

Ivor Lončarić je nakon završene srednje škole upisao studij fizike na Fizičkom odsjeku zagrebačkog Prirodoslovno-matematičkog fakulteta. Nakon završenog istraživačkog studija fizike upisao je doktorski studij na baskijskom Sveučilištu u San Sebastianu. Trenutno radi i djeluje na Zavodu za teorijsku fiziku Instituta Ruđer Bošković u Zagrebu.

Arben Beriša je, nakon završene Prirodoslovne škole Vladimira Preloga u Zagrebu, upisao i završio zagrebački Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije.

Filip Topić je svoje prvo pitanje na portalu postavio u siječnju 2002. godine kao učenik VI. Osnovne škole Varaždin u Varaždinu. Pitanja je nastavio postavljati tijekom srednjoškolskog obrazovanja u varaždinskoj gimnaziji. Upisavši studij kemije na Kemijskom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu ubrzo je i sam počeo odgovarati na pitanja. Svoj prvi odgovor u rubrici *Vi pitate, E-škola kemije odgovara* dao je u lipnju 2007. godine. Trenutno radi na kanadskom sveučilištu *McGill University of Canada* kod prof. dr. sc. Tomislava Friščića (koji je svojevremeno i sam bio administrator portala *E-škola kemije*).

Kao godina s najvećim brojem odgovorenih pitanja ističe se 2004. godina (702 odgovorena pitanja, Histogram 1). Za njom slijede, 2002. i 2003. godina s gotovo jednakim brojem odgovora na pitanja (u oba slučaja više od 500).



Histogram 1. Prikaz ukupnog broja odgovorenih pitanja prema godinama u razdoblju od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine.

U listopadu 2000. godine *E-škola kemije* prebacila je sve svoje web-servise s klasične html-tehnologije na novu PHM/MySQL-tehnologiju, čime je značajno unaprijeđena funkcionalnost i operativnost portala. Iako se internet u Hrvatskoj počeo koristiti još u prvoj polovici 1990-ih godina, on je u Hrvatskoj počeo dobivati na značaju tek je krajem tog desetljeća. Zagrebački Prirodoslovno-matematički fakultet bio je među prvim ustanovama koje su se spojile na internetsku mrežu, a državni projekt kojim se pomoću gigabitnih tehnologija krenulo razvijati visoko kvalitetnu infrastrukturu koja je bila namijenjena fakultetima i istraživačkim institutima

pokrenut je tek 2003. godine. Tim je projektom svim njegovim korisnicima omogućeno dvostruko brže povezivanje, a time i značajno povećana dostupnost informacija.

Popularnost *E-škole kemije* kao internetskog projekta nije bila trenutačna, jer se trebala razviti i korisnička internetska mreža. Nadalje, opstanak *E-škole kemije* iziskivao je volju i želju velikog broja ljudi čiji je rad tijekom svih tih godina bio i ostao dobrovoljan (volonterski).

Na početku je za provođenje projektnih aktivnosti trebalo okupiti dovoljan broj kvalificiranih ljudi koji će odgovarati na pitanja učenika i studenata i ostalih osoba koje su postavljale pitanja.

Na samom početku bili su to Ernest Meštrović i Nenad Judaš s Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu (voditelj i suvoditelj projekta) te Goran Štefanić i Srećko Kirin s Instituta Ruđer Bošković (suradnici). Kasnije su im se pridružili i drugi, a od njih prema broju danih odgovora valja izdvojiti: Ivicu Cvrtilu (>3000), Tomislava Portadu (>1300), Kristijana A. Kovača (>400), Vladimira Stilinovića (>250), Filipa Topića (>150), Igora Huskića (>100), Juricu Aleškovića (>100), Ivana Halasza (>100), Marka Grbu (>70) i Mateju Vlatković (>50). Valja napomenuti da su mnogi od spomenutih i sami kao učenici bili korisnici portala (Cvrtila, Topić, Huskić, Grba, Vlatković).

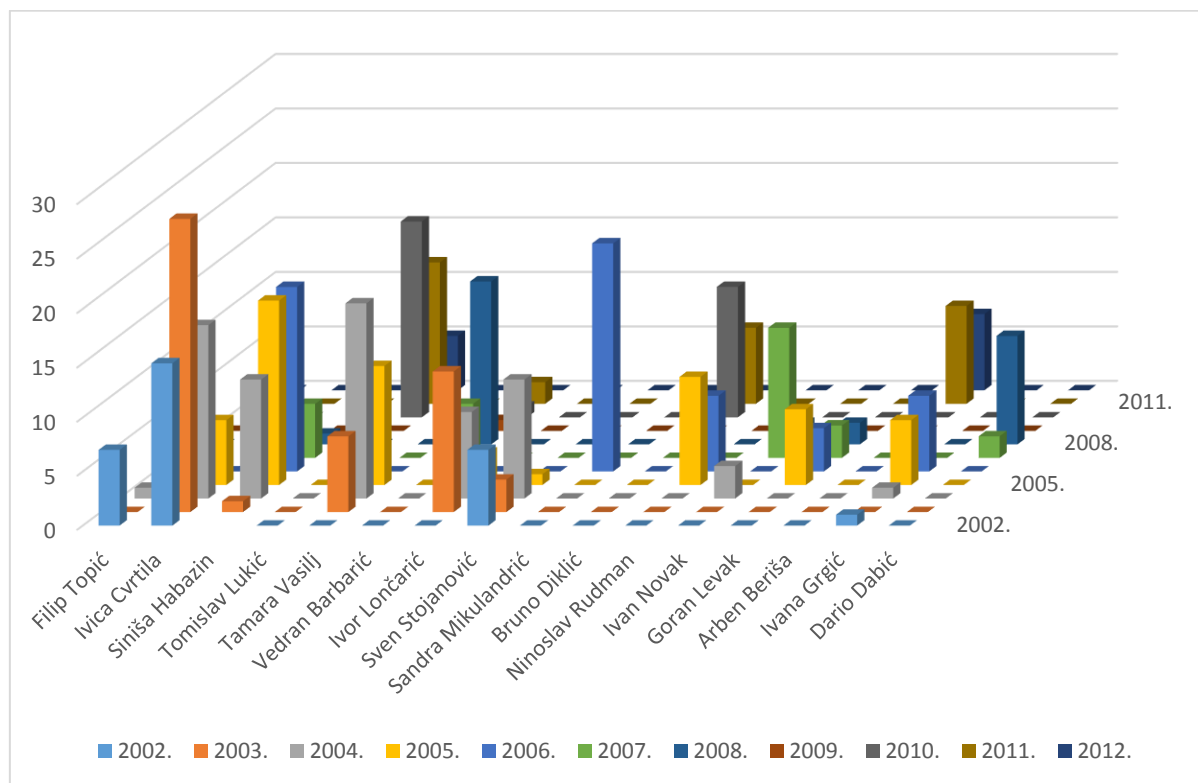
Jedan od načina popularizacije ovog portala svakako je bila usmena predaja. Nastavnici su o njemu govorili svojim učenicima i studentima, a ovi pak svojim kolegama i prijateljima. U histogramu 1 (str. 40) vidljiv je porast broja pitanja od 2000. godine prema 2004. godini što se može objasniti gore navedenim činjenicama. Osim toga, u tom razdoblju računala i internet postali su dostupniji hrvatskim kućanstavima te je uporaba interneta dobila potrebni zamah.

I danas ćemo, ako u većinu internetskih tražilica upišemo pojam *kemija*, među prvim poveznicama dobiti i poveznicu na rubriku *Vi pitate, E-škola odgovara*.

Kako je rastao broj postavljenih pitanja, tako je rasla i potreba za sve većim brojem kvalificiranih osoba koje bi na njih davale odgovore. Pri tome se uvijek pazilo da osoba zadovoljava visoke kriterije kako po pitanju kemijskog znanja, tako i po pitanju pismenosti – kako pismenosti u okvirima kemijske struke tako i pismenosti u okvirima standarda hrvatskog jezika. Broj autora koji su odgovorili na analiziranih 5000 pitanja dosegnuo je 31. Najveći broj odgovora dali su Ivica Cvrtila, Tomislav Portada, Nenad Judaš i Kristijan A. Kovač.³⁵

Nakon utvrđivanja broja korisnika i dinamike postavljanja pitanja prema godinama, valjalo je istražiti koliko su upravo te osobe svojom učestalošću postavljanja pitanja pridonijele porastu njihova broja u godinama s najvećim brojem odgovorenenih pitanja. Najveća je frekvencija i porast broja pitanja u intervalu od 2002. godine do 2004. godine. Nakon toga zabilježen je

određeni pad u broju postavljenih pitanja. U periodu od 2005. godine do 2009. godine broj upita je stagnirao. Od 2010. godine do 2011. godine došlo je do porasta broja odgovorenih pitanja u odnosu na prethodne godine. U tom smislu, pokušalo se utvrditi zašto je 2004. godina bila uspješnija od ostalih.



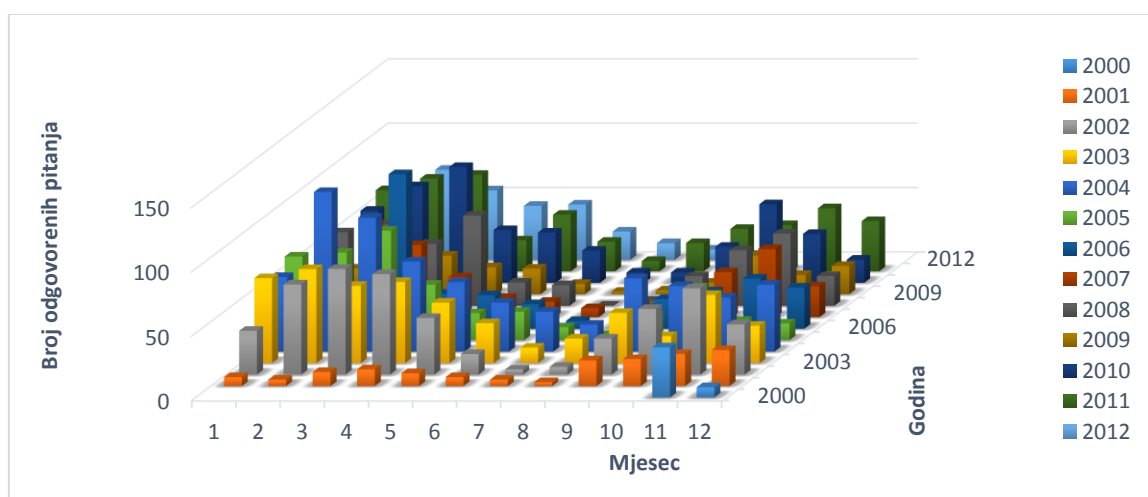
Histogram 2. Prikaz ukupnog broja odgovorenih pitanja učenicima koji su ih najčešće postavljali u razdoblju od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine.

U 2002. godini s postavljanjem pitanja započeli su Filip Topić, Ivica Cvrtila i Sven Stojanović (kao učenici 8. i 1. razreda) (Histogram 2). Od ukupnog broja postavljenih pitanja te godine, njihova predstavljaju 5,70 %. Isti ovi učenici nastavili su postavljati upite i tijekom 2003., 2004. i 2005. godine. Tadašnja popularnost portala i aktivnost određenog broja korisnika očito su jedan od važnijih čimbenika koji su 2004. godinu učinili uspješnijom.

Sama 2005. godina bilježi se kao godina s naglim padom broja postavljenih pitanja, iako su od njihova ukupnog broja (406 odgovorenih pitanja), gore navedeni učenici kojima su se pridružili Tamara Vasilj, Ninoslav Rudman i Goran Levak, postavili su čak 16,1 %.

Godine 2010., kada se ponovno bilježi porast broja postavljenih pitanja, Bruno Diklić (7. razred) i Tomislav Lukić (1. razred) postaviše 6,32 % pitanja od ukupnog broja odgovorenih pitanja. Oni su nastavili postavljati pitanja i tijekom sljedećih godina.

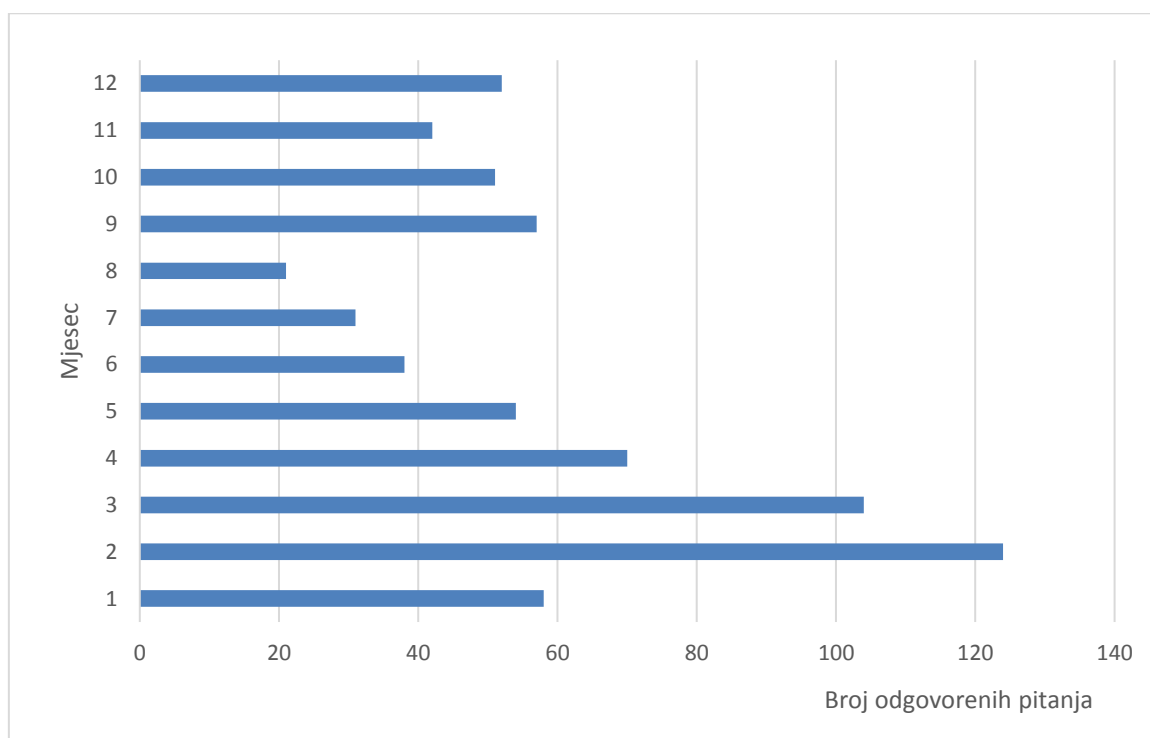
S obzirom na to da je u sklopu ovog diplomskog rada obavljena i analiza raspodjele odgovorenih pitanja prema godinama (Histogram 3) i mjesecima te frekvencija odgovorenih pitanja prema razredima osnovnih i srednjih škola u intervalu od 2002. do 2012. godine, bitno je istaknuti da upravo ovi učenici pridonose njihovoj brojnosti. Ipak, svake godine pojavljuju se mnoga *nova* imena, a i mnoga *stara* nestaju. U principu, većina učenika postavi jedno do dva pitanja. Svega je devedeset pet osoba od ukupnog broja osoba koje su postavljale pitanja, postavilo više od četiri pitanja. Većina učenika postavila je pitanje samo tijekom razreda kojeg su u tom trenutku polazili. Učenici koji postavljaju upite tijekom više razreda, većinu pitanja uglavnom upućuju tijekom 7. i 8. te 3. i 4. razreda. Razlozi za to mogu biti različiti, ali nema dovoljno podataka za njihovu identifikaciju pa o tome nema smisla ni spekulirati.



Histogram 3. Broj postavljenih pitanja prema mjesecima u razdoblju od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine

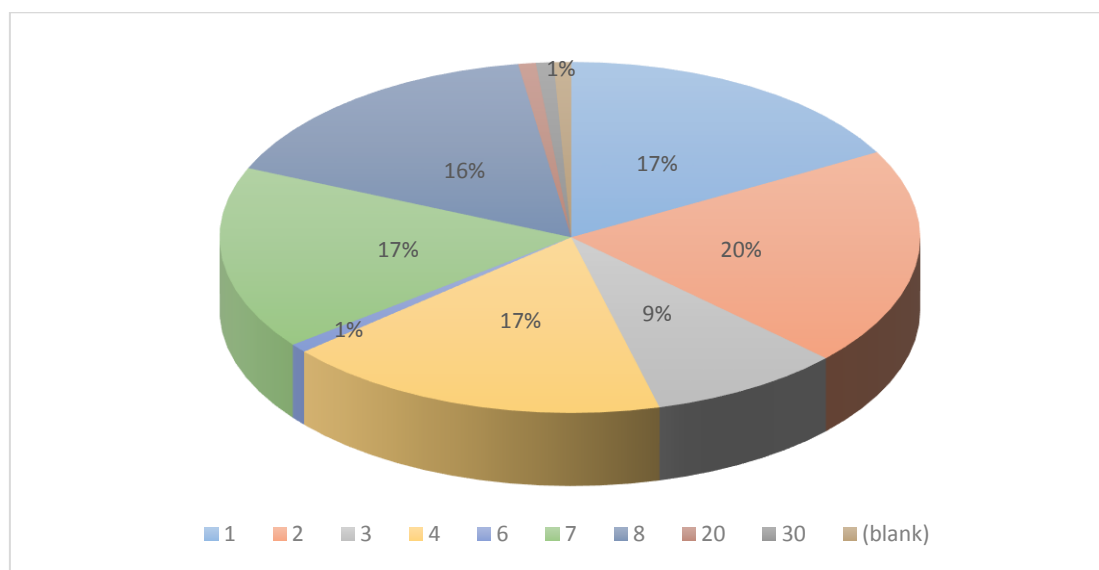
Tijekom 2009. godine vidljiv je pad broja odgovorenih pitanja, no to je uglavnom uzrokovano gubitkom dijela podataka, jer je serverski uređaj *E-škole kemije* bio *hakiran* što je prouzročilo određene tehničke poteškoće te je dio pitanja (i postavljenih i odgovorenih) izgubljen. Najveća je frekvencija postavljanja pitanja u zimskim mjesecima, dok stagnira u ljetnim. Porast broja pitanja od siječnja do ožujka može se povezati s provjerama znanja koje slijede u tom razdoblju. Ipak, potrebno je naglasiti i da sadržaj pitanja nekih učenika koji u tom razdoblju postavljaju pitanja nije nužno vezan za nastavne sadržaje koje se pritom obrađuje u školama. Manje su frekvencije postavljanja pitanja u periodima od lipnja do rujna kada su učenici na praznicima. Međutim, i u tom razdoblju ima učenika koji postavljaju pitanja. Najčešće su to učenici koji se pripremaju za različite ispite ili ih zanimaju kemijske teme, pa stoga žele znati više.

Najveći broj odgovorenih pitanja bilježi 2004. godina pa je ona analizirana na mjesečnoj razini te je utvrđeno da je frekvencija pitanja bila najveća u veljači (Histogram 4).



Histogram 4. Prikaz broja odgovorenih pitanja po mjesecima za 2004. godinu, kao godinu s najviše postavljenih pitanja.

Analizira li se mjesec veljača 2004. godine prema razrednim odjeljenjima, najveći broj postavljenih pitanja postavili su učenici drugih razreda srednjih škola (Tortni prikaz 1).



Tortni prikaz 1. Raspodjela odgovorenih pitanja u veljači 2004. godine prema razrednim odjeljenjima.

Prema nastavnom programu kemije u osnovnoj školi⁴⁷ i nastavnom programu kemije za gimnazijsku nastavu⁴⁸ i usporedbom nastavnih tema koje su navedene u popularnijim školskim udžbenicima u to se vrijeme obrađuju sljedeće nastavne teme:

Sedmi razred:⁵⁰ **Atom:** *Teorija o atomu, Kemijski elementi, Periodni sustav elemenata, Izotopi, Relativna atomska masa, Kako su građene elementarne tvari?, Kako su građeni kemijski spojevi?, Kemijski spojevi građeni od iona.*

Osmi razred:⁵¹ **Organski spojevi s kisikom:** *Alkoholi; Od šećera do etanola; Svojstva etanola; Karboksilne kiseline, Nastajanje karboksilnih kiselina; Svojstva i uporaba karboksilnih kiselina, Reakcije karboksilnih kiselina.*

Prvi razred srednje škole:⁵² **Veze između atoma i molekula:** *Elektronegativnost atoma i dipolne molekule, Van der Waalsove sile, Vodikova veza, Ionska veza, Metalna veza*

Drugi razred srednje škole:⁵³ **Ravnoteža kemijskih reakcija:** *Kemijska ravnoteža, Konstanta kemijske ravnoteže, Pomak kemijske ravnoteže – čimbenici: koncentracija, Pomak kemijske ravnoteže – čimbenici: temperatura i tlak, Kiseline, baze, soli: Kiseline, baze*

Treći razred srednje škole:⁵⁴ **Vodik:** *Vodik – rasprostranjenost i dobivanje, Svojstva vodika, Vodik – novi izvor energije, Halogeni elementi: Halogeni elementi – klor, Klorovodik i klorovodična kiselina, Halkogeni elementi: Halkogeni elementi – kisik, Kružnje kisika u prirodi, Ozon, Voda*

Četvrti razred srednje škole:⁵⁵ **Organski s pojevi s kisikom:** *Derivati karboksilnih kiselina, amidi, Kiralnost i optička aktivnost: Vrste stereoizomera, Amini: Amini – struktura i svojstva, Amini – biomolekule iz prirode, Biološki važni spojevi: Ugljikohidrati – monosaharidi, oligosaharidi, polisaharidi, Lipidi.*

Za obradu i analizu sadržaja pitanja koja su postavljena u veljači 2004. godine, korištena je baza podataka koju je, tijekom svojeg studijskog boravka u Zagrebu, napravila dr. sc. Biljana Tomašević s Hemijskog fakulteta Univerziteta u Beogradu. Ona je u toj bazi sadržaje svih 5000 odgovorenih pitanja rasporedila prema pravilima koja je sama definirala. Cilj je bio utvrditi koliko se sadržaj tih pitanja podudara s izvedbenim planovima i nastavnim programima kemije za osnovne i srednje škole. Jedna od proučavanih kategorija bila je *Vrste (pitanja prema namjeri)*, a podijeljena je u deset potkategorija. Svakoju potkategoriji dodijeljena specifična numerička vrijednost:

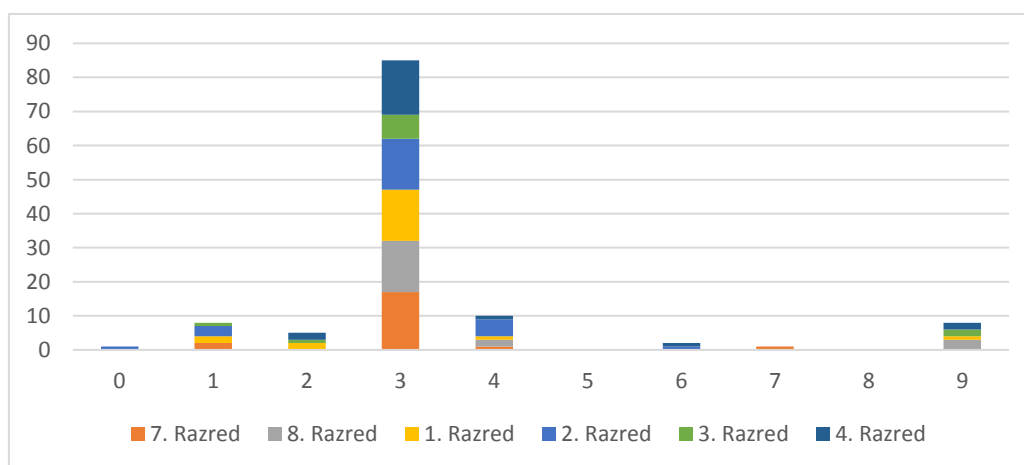
0 – ne sadrži pitanje

1 – informacije o natjecanjima

2 – traženje literature

- 3 – objašnjenje kemijskog pojma 4 – rješenja zadatci i pitanja
 5 – pokusi za ciljane nastavne sadržaj 6 – pokusi za slobodno odabrane teme
 7 – primjeri zadataka s natjecanja 8 – ostali zadatci 9 – nema kemijski sadržaj.

Numerička vrijednost **0** dodjeljivana je pitanjima u kojima se radilo o obraćanju administratorima portala zbog zahvaljivanja na odgovoru, pohvalama, predstavljajima, pozdravima i sličnom. Vrijednost **1** dodjeljivana je pitanjima u kojima su tražene informacije o natjecanjima, rang-listama, prolaznosti, vrednovanju zadataka i literaturi za natjecanja. Vrijednost **2** dodjeljivana je pitanjima u kojima se traži dodatnu literaturu, a vrijednost **3** za pitanja koja su se odnosila na traženje objašnjenja kemijskih pojmova. Vrijednost **4** pripisivana je pitanjima u kojima se tražilo odgovore i rješenja računskih ili problemskih zadataka, a vrijednost **5** pitanjima u kojima se tražilo informacije o pokusima koji su povezani s određenim nastavnim sadržaj ili njihovo objašnjenje. Vrijednost **6** dodjeljivana je pitanjima u kojima se tražilo informacije o pokusima na slobodno odabranu temu (nevezanu s nastavnim programom) i objašnjenje istih. Vrijednost **7** dodjeljivana je pitanjima u kojima su korisnici tražili primjere zadataka s natjecanja. Vrijednost **8** dodjeljivana je pitanjima u kojima se traži dodatne zadatke vezane uz određeni nastavni sadržaj, a vrijednost **9** kada postavljena pitanja nisu bila strogo kemijske naravi, tj. interdisciplinarnim pitanjima.

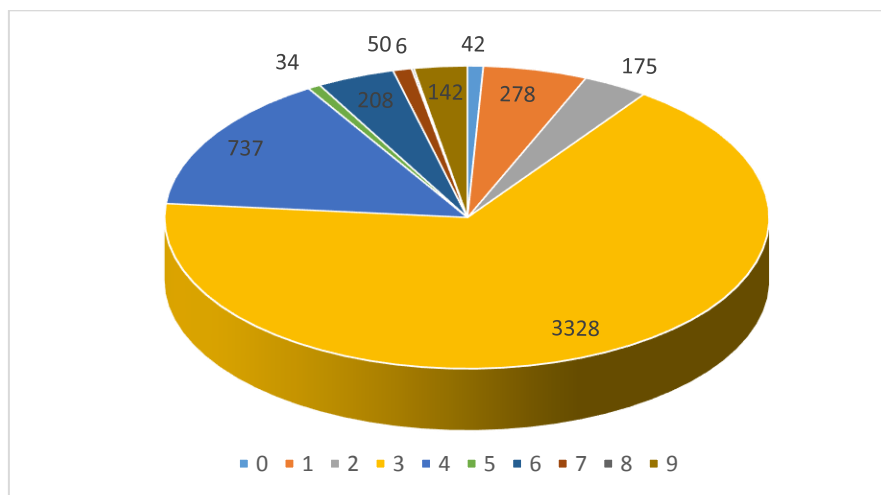


Histogram 5. Raspodjela pitanja u kategoriji *Vrste (pitanja prema namjeri)* prema potkategorijama i razrednim odjeljenjima za uzorak iz veljače 2004. godine

Histogram 5 pokazuje raspodjelu odgovorenih pitanja u kategoriji *Vrste (pitanja prema namjeri)* prema potkategorijama i razrednim odjeljenjima za veljaču 2004. godine. Najveći broj odgovorenih pitanja u toj kategoriji bio je usmjeren na potkategoriju **3** (68,5 % analiziranih

pitanja), tj. na pitanja u kojima se tražilo objašnjenje kemijskih pojmova. Slijedi potkategorija 4 (8 % analiziranih pitanja), tj. pitanja koja traže rješenja računskih i problemskih zadataka.

Takav je trend i u ukupnom uzorku od 5000 odgovorenih pitanja (Tortni prikaz 2). Najveći broj pitanja čine pitanja u kojima učenici traže objašnjenje ili pojašnjavanje nekog pojma iz kemije (66,5 %), a za njima u znatno manjem postotku slijede pitanja u kojima učenici od autora odgovora traže rješenja problemskih zadataka (kemijski račun) ili smjernice kako ih riješiti. Samo 2,84 % pitanja nema nikakve veze s kemijom niti kemijskim sadržajima.



Tortni prikaz 2. Prikaz raspodjele odgovorenih pitanja kategorije *Vrste (pitanja prema namjeri)* prema potkategorijama.

Osim prema namjeri, odgovorena pitanja bila su razvrstavana i prema tematici, tj. sadržaju. U tu svrhu osnovana je kategorija odgovorenih pitanja naziva *Tema*. Kategorija *Tema* podijeljena je u osamnaest potkategorija ovisno o sadržaju pitanja, a svaka potkategorija označena je specifičnom numeričkom vrijednosti (Tablica 9, str. 48).

Obradom podataka i uspoređivanjem s nastavnim programima iz kemije za osnovne i srednje škole, utvrđeno je da 28,5 % pitanja učenika sedmog razreda pripada potkategoriji 9 *Anorganska kemija* (odnose se na atmosferu, sastav zraka i kisik), 21 % potkategoriji 1 *Struktura tvari*, koja se u praksi i obrađuje tijekom veljače, te 7 % pitanja pripada potkategoriji 2 *Kemijske reakcije*.

Za osme razrede, 68 % postavljenih pitanja pripada potkategoriji 10 *Organska kemija*. S jedne strane, to ne čudi jer ova potkategorija programski obuhvaća polovinu nastavnih sadržaja kemije osmog razreda. Većina tih pitanja odnosila se na građu i kemijske reakcije karboksilnih kiselina te na alkohole i njihova svojstva, što ponovo koincidira s obradom nastavnih sadržaja tijekom veljače i ožujka.

Trećina pitanja učenika prvih razreda srednjih škola pripada potkategoriji **1** *Struktura tvari* od čega se njih 33,3 % odnosi na Lewisove strukturne formule, metalnu vezu i međumolekulske interakcije i sile. Od ostalih, prednjači potkategorija **9** *Anorganska kemija* s 20 % odgovorenih pitanja (s tim da su ona u dobroj mjeri vezana uz kristalnu strukturu dijamanta i nastanak soli pa bi, na neki način, mogla biti razvrstana i u potkategoriju **1** *Struktura tvari*).

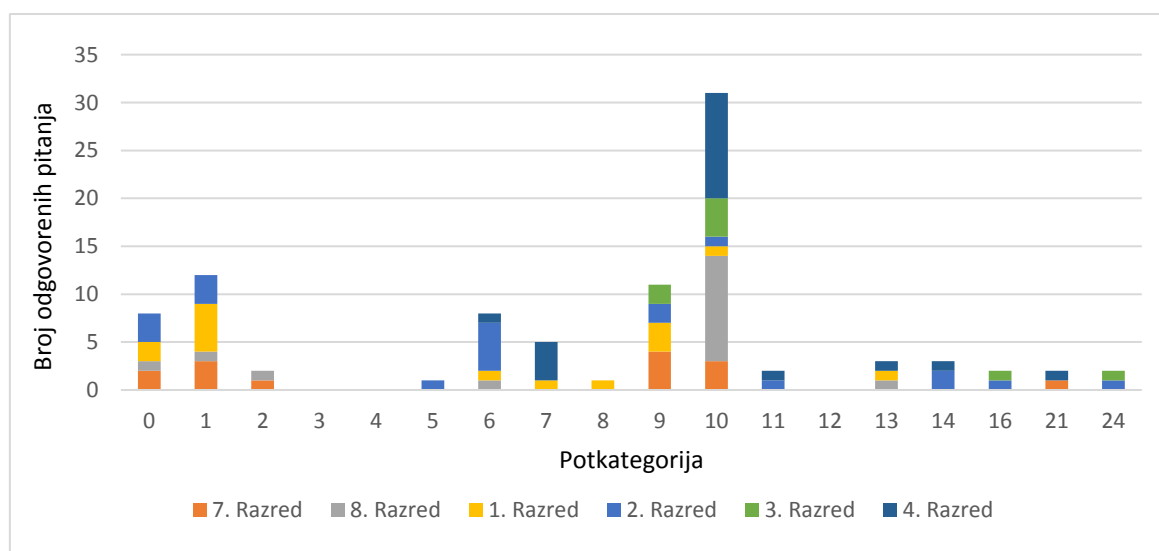
Tablica 9. Numeričke oznake, nazivi i kratki opisi potkategorija za raspodjelu odgovorenih pitanja u kategoriji *Teme*.

Potkategorija	Kratki opis sadržaja potkategorije
0 – Fizikalna svojstva	agregacijska stanja, fazni prijelazi (talište, vrelište, tlak pare, temperatura), vrste tvari, kemijski elementi, smjese, električna i toplinska vodljivost, gustoća, osmoza i osmotski tlak, fizikalno-kemijska svojstva, fizikalne veličine i njihove jedinice, površinska napetost
1 – Struktura tvari	građa atoma, kemijske veze, kristalna struktura, molekulska struktura i prostorna građa, radioaktivnost, međumolekulske sile
2 – Kemijske reakcije	pisanje i izjednačavanje jednadžbi kemijskih reakcija
3 – Kinetika	energija aktivacije, brzina kemijske reakcije, katalizatori
4 – Termokemija	entalpija, entropija, Gibbsova energija, Hessov zakon, promjena entalpije, termokemijski dijagrami
5 – Kemijska ravnoteža	konstanta ravnoteže, Le Chatelierovo načelo
6 – Disperzivni sustavi	otopine, topljivost, produkt topljivosti, koligativna svojstva otopina, kvalitativni sastav otopina, koloidni sustavi
7 – Kiseline i baze	pojam kiselina i baza, teorije kiselina i baza, hidroliza, pH-vrijednost, konstanta disocijacije, indikatori, neutralizacija, puferi
8 – Elektrokemija	oksidacijsko-redukcijske promjene i promjene oksidacijskog broja, elektroliza, redukcijski potencijal, sagorijevanje, galvanški članci
9 – Anorganska kemija	nomenklatura anorganskih spojeva, nemetali, kiseline, metali, hidroksidi, plemeniti plinovi, periodni sustav elemenata, voda, zrak, atmosfera
10 – Organska kemija	organski spojevi, ugljikovodici, spojevi s kisikom, spojevi s dušikom i sumporom, spojevi s halogenim elementima, polimerizacija, alkaloidi, fosilna goriva, ugljikohidrati, aminokiseline, proteini, vitamini, detergentski, psihoaktivne tvari, IUPAC nomenklatura, mehanizmi kemijskih reakcija
11 – Biokemija	biokemijski mehanizmi, enzimi, proteini, sinteza i struktura biomolekula, RNA, DNA, toksične tvari, hormoni
12 – Okoliš i zaštita	onečišćenje i zaštita, ekološki problemi
13 – Stehiometrija	temeljni pojmovi kemijskog računa (A_r , M_r , mol, m_u , N_A , V_m), množinski, maseni i volumni udio, opća plinska jednadžba, empirijska formula, molekulska formula, veličina atoma
14 – Laboratorijski postupci	laboratorijski pribor i posude, postupci razdvajanja smjesa, metode kemijske analize
16 – Primjena kemije	hrana, lijekovi, pesticidi, umjetna gnojiva
21 – Povijest kemije	poznati kemičari, nobelovci, otkriće periodnog sustava elemenata
24 – Ostalo	prirodni proizvodi

Učenici drugih razreda većinom su usmjereni na potkategoriju **6** *Disperzivni sustavi* (25 %). Potkategorijama **0** *Fizikalna svojstva tvari* i **1** *Struktura tvari*, pripada 15 % pitanja koja su postavili učenici trećih razreda. Zanimljivo je da čak 50 % pitanja učenika trećih razreda pripada potkategoriji **10** *Organska kemija*, a malen je udio pitanja koja pripadaju potkategoriji **9** *Anorganska kemija*, iako je potkategorija **9**, a ne potkategorija **10**, programski propisana tematika (barem za gimnazijske razrede).

Većina pitanja učenika četvrtih razreda srednjih škola (55 %) pripada potkategoriji **10** *Organska kemija*, a tematski su vezana za alkohole, karboksilne kiseline, lipide i proteine. No, to je u ovom slučaju potpuno u skladu s nastavnim programom.

Analiza tematskih sadržaja postavljenih pitanja dobro korelira s dinamikom obrade programskih sadržaja u praksi, tj. učenici najčešće postavljaju pitanja koja se tiču nastavnih sadržaja koji se u danom trenutku obrađuju u školama. Primjećuju se i određena odstupanja od uobičajenih izvedbenih planova, no njih se može pripisati različitom rasporedu obrade nastavnih sadržaja, ovisno o autoru i udžbeniku koji nastavnik koristi, ali i razlikama u usmjerenju korisnika (negimnazijski programi imaju drugačije rasporede nastavnih sadržaja). Nadalje, ne smije se zaboraviti ni psihološke karakteristike samih učenika – usvajanje nastavnih sadržaja ne može biti trenutačno pa moraju postojati i odmaci (pogotovo kod onih učenika koji zaista žele razumjeti to o čemu uče). To se dobro vidi u analizi tematike prema razredima za pitanja postavljena u veljači 2004. godine – određen broj učenika postavlja pitanja izvan nastavnih sadržaja koji odgovaraju uobičajenom izvedbenom programu (Histogram 6).



Histogram 6. Raspodjela postavljenih pitanja prema potkategorijama kategorije *Tema* i odjeljenjima za veljaču 2004. godine.

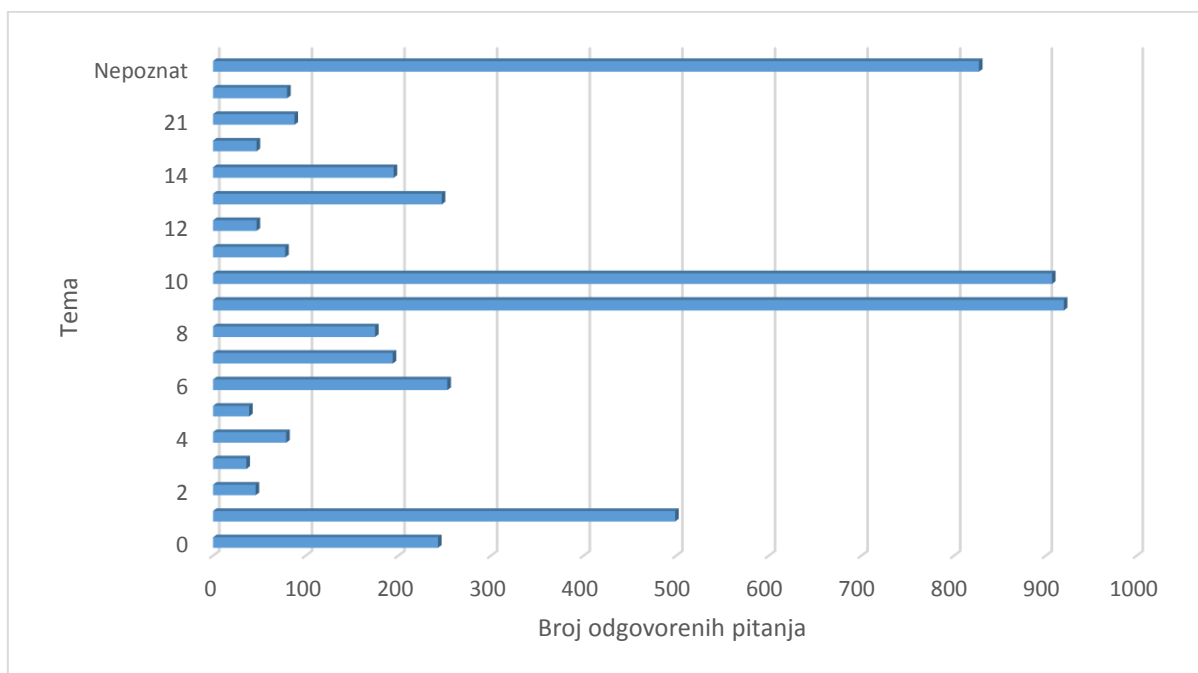
Portal *E-škola kemije* i njegova rubrika *Vi pitate, E-škola odgovara* dnevno zaprima velik broj pitanja. Mnoga se od tih pitanja ponavljaju iz dva razloga; u početku rubrika nije imala *tražilicu* (programsko rješenje kojim bi bilo moguće ključnim pojmom pretražiti već postojeće odgovore), a drugi je sama inercija (gotovanstvo) korisnika, tj. nesklonost pretraživanju već odgovorenenih pitanja i izučavanju postojećih odgovora. Osim toga, pitanja se razlikuju i prema kvaliteti – neka su loše sročena, neka traže trivijalnu informaciju koja je već dostupna u udžbenicima ili općenito na internetu, a neka pak traže detaljnije objašnjenje. Osvrnemo li se na zastupljenost pojedinih potkategorija u kategoriji *Tema* za svih 5000 obrađenih pitanja učenika (Histogram 7), tri najzastupljenije potkategorije su:

9 Anorganska kemija, 18,40 % pitanja,

10 Organska kemija, 18,14 % i

1 Struktura tvari 9,98 %.

Pri tome valja naglasiti da 827 pitanja iz analiziranog uzorka, njih 16,54 %, nije bilo moguće uvrstiti ni u jednu od navedenih potkategorija.

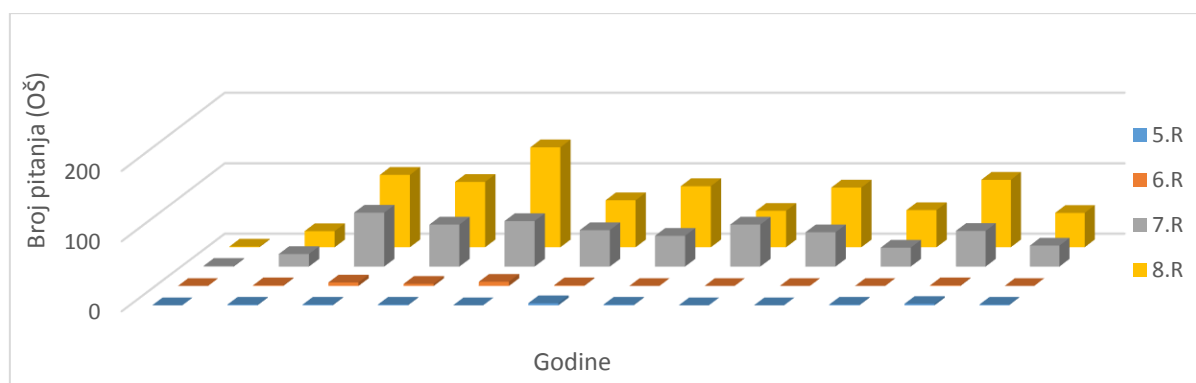


Histogram 7. Prikaz raspodjele broja pitanja (za razdoblje od 2000. do rujna 2012. godine) prema udjelu koji zauzimaju pojedine *Teme*.

Rubrika *Vi pitate, E-škola odgovara* primarno je zamišljena kao prostor za interakciju učenika koji postavljaju pitanja i osoba koje će na njih odgovarati. Pri tome su ciljanju skupinu činili

učenici sedmih i osmih razreda osnovne škole i učenici srednjih škola. Dakle, svi oni uzrasti koji uče kemiju, tj. koji imaju nastavni predmet kemija. Analiza podataka za razdoblje od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine potvrđuje da najveći broj korisnika i čine pripadnici ciljane skupine – učenici osnovnih i srednjih škola.

Učenici se s nastavom kemije susreću u sedmom razredu tako da je podatak, kako najviše pitanja osnovnoškolaca dolazi od osmaša, očekivan. Kao prvo, potrebno je vrijeme prilagodbe učenika na novi nastavni predmet. Kao drugo, potrebno je vrijeme u kojem će učenik razviti kompetencije i vještine da bi mogao postaviti kvalitetno pitanje koje se neće temeljiti na reprodukcijском znanju ili biti pitanje kojem se odgovor može pronaći u udžbeniku. Nadalje, bitnu ulogu imaju i nastavnici koji će (ili neće) svoje učenike uputiti na postojanje portala *E-škola kemije* i njegovu rubriku *Vi pitate, E-škola odgovara*.

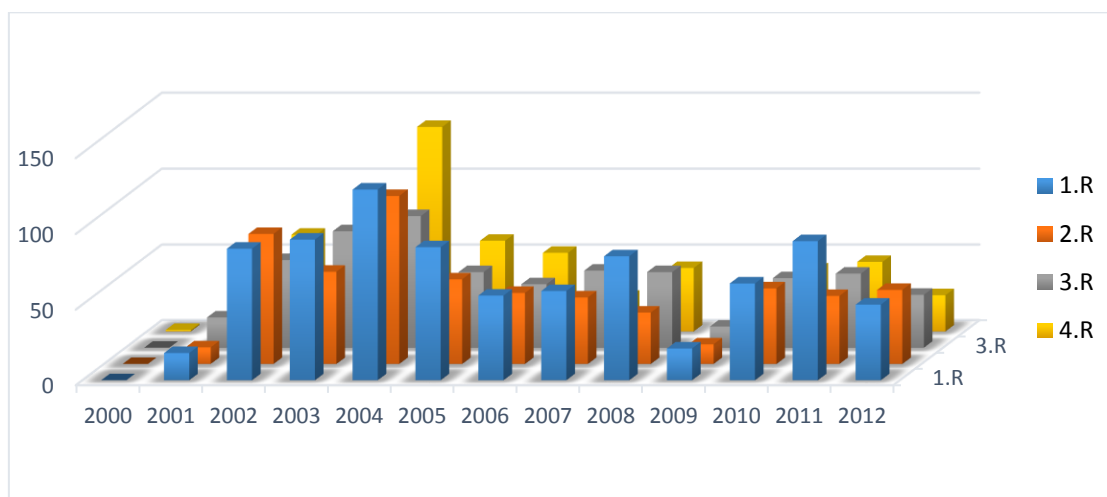


Histogram 8. Broj postavljenih pitanja u razdoblju od studenoga 2000. godine do rujna 2012. prema razrednim odjeljenjima osnovnih škola.

Na pitanja koja su postavili učenici sedmih razreda, od ukupnog broja analiziranih pitanja otpada 12 %, a udio pitanja koja su postavili osmaši je 18,8 %. No, valja upozoriti da su jedan manji broj pitanja (0,54 %) postavili učenici nižih razreda, petog i šestog (Histogram 8). Sadržaji tih pitanja uglavnom se odnose na teme koje povezuju obrazovne sadržaje nastavnih predmeta *Priroda* i *Kemija*, poput kruženja vode na Zemlji, atmosferi itd.

Prema analizi istog uzorka odgovorenih pitanja iz rubrike *Vi pitate, E-škola odgovara*, koju je u svom diplomskom radu o geografskim dosezima portala *E-škola kemije* napravila Ines Mikulić, najveći broj pitanja osnovnoškolaca postavili su učenici *Osnovne škole Novi Marof* iz Varaždinske županije. Iza njih slijede učenici *Osnovne škole Ivana Kozarca Županja* te učenici *Osnovne škole Lučac* iz Splita. U Gradu Zagrebu najveći broj pitanja došao je iz *Osnovne škole Cvjetno naselje*.³⁵

Osvrnemo li se na srednjoškolce, oni su postavili 52,7 % pitanja. To je, u principu, razumna vrijednost, ako se uspoređi brojnost populacija osnovnoškolaca i srednjoškolaca, ali i brojnost nastavnih sadržaja. Najveći broj pitanja uputili su učenici prvih razreda (16,7 %), a slijede ih učenici drugih razreda (12,1 %) (Histogram 9). Škole koje se izdvajaju po broju postavljenih pitanja su *Prirodoslovna škola Vladimira Preloga* iz Zagreba s najvećim brojem postavljenih pitanja, a slijede zagrebačka *XV. Gimnazija* te *Srednja škola Dragutina Stražimira* iz Sv. Ivana Zeline (čiji je učenik bio Ivica Cvrtila).

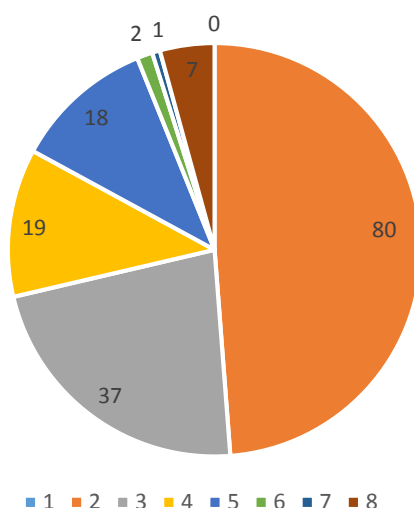


Histogram 9. Raspodjela broja postavljenih pitanja učenika srednjih škola prema razrednim odjeljenjima za period od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine.

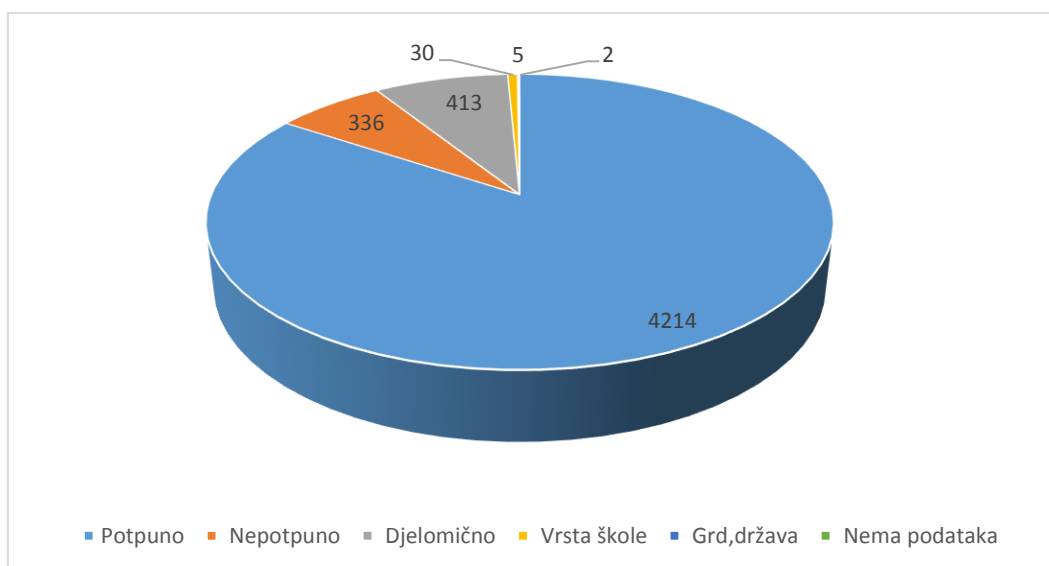
Osim učenika osnovnih i srednjih škola, pitanja su postavljali i studenti (Tortni prikaz 3, str. 53). Najveći broj pitanja postavili su studenti drugih godina fakulteta (1,60 %), zatim studenti prvih godina (0,74 %), a slijede treća i četvrta godina s gotovo jednakim udjelom postavljenih pitanja (0,38 %). Očekivano, u kategoriji fakulteta zagrebački *Prirodoslovno-matematički fakultet* zauzima prvo mjesto, a slijede ga zagrebački *Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije* te zagrebački *Prehrambeno-biotehnološki fakultet* i *Farmaceutsko-biokemijski fakultet*.

Ovakvu analizu bilo je moguće napraviti samo zato jer su osobe koje su postavljale pitanja bile savjesne u obavljanju potrebnih zadaća pri postavljanju pitanja. Naime, pri postavljanju potrebno je ispuniti određeni web-obrazac te u njemu ostaviti i određene podatke o sebi. Koliko su korisnici bili savjesni u obavljanju te zadaće pokazuju sljedeći rezultati (Tortni prikaz 4., str. 53). Najveći broj korisnika (84,24 %) korektno se predstavio te je u obrazac upisao sve tražene podatke. Nešto manji broj korisnika (8,26 %) ostavio je sve podatke osim prezimena, a takvi su korisnici razvrstani u kategoriju *Nepotpuno popunjenog obrasca*. Izrazito je mali broj korisnika

koji su o sebi ostavili premalo podataka. To pokazuje da su korisnici uglavnom skloni pridržavati se reda (propisanih pravila) određenog internetskog portala, pogotovo ako je to uvjet da dobiju odgovor na svoje pitanje. Ipak, a pogotovo u početku djelovanja portala, osobe koje su davale odgovor češće su morale zamoliti korisnika da ponovo pristupi obrascu za postavljanje pitanja i detaljno ga ispuni, tj. bilo je potrebno vrijeme *privikavanja na pravila*.



Tortni prikaz 3. Prikaz raspodjele broja postavljenih pitanja prema godinama studija za period od studenoga 2000. godine do rujna 2012. godine.



Tortni prikaz 4. Popunjenost prijavnih obrazaca za 5000 odgovorenih pitanja.

Tijekom vremena povećao se i broj odgovora u kojima su ostavljene web-poveznice kojima se korisnike preusmjerava na dodatne web-sadržaje ili na neko već odgovoreno pitanje. Kako se

na internetu svakodnevno pojavljuju nove informacije, a stare nestaju, analizirana je i funkcionalnost ostavljenih internetskih poveznica. U analiziranih 5000 odgovora, internetske poveznice prisutne su u njih 1020. Od toga je njih 77 % još uvijek funkcionalno, a ostale su uglavnom nefunkcionalne i na njima se ne mogu pronaći potrebne informacije.

Uzorak je analiziran i na doba dana u kojem su pitanja postavljena ne bi li se utvrdilo je li neko vrijeme pogodnije za postavljanje pitanja. U tom smislu definirana su tri intervala:

- jutarnji (8 do 14 sati),
- popodnevni (14 do 20 sati) i
- noćni (20 sati do 8 sati).

Najveći broj pitanja postavljen je u prvom intervalu (8 do 14 sati) u kojem je postavljeno 2159 pitanja (43,2 %). Slijedi interval od 14 do 20 sati s postavljenih 1578 pitanja (31,5 %). Najmanje pitanja, njih 1263 (25,3 %), postavljeno je u noćnom intervalu (od 20 do 8 sati). Dnevni termini očito su pogodniji, što je prihvatljivo uzme li se u obzir da su korisnici u najvećoj mjeri učenici, tj. maloljetnici, koji bi noću trebali spavati, a ne učiti ili izučavati internetske sadržaje.

8.4. Zaključak metodičkog dijela

Rubrika *Vi pitate, E-škola odgovara* djeluje u postojećem obliku od jeseni 2000. godine. Broj odgovorenih pitanja trenutno je 7391.⁵⁶ Analiza je provedena na uzorku od prvih 5000 odgovorenih pitanja. Pitanja i odgovori analizirani su kroz niz kategorija, što općenitih, što specifično definiranih. Nakon provedene analize, može se reći da korisnik portala *E-škola kemije* u pravilu u rubrici *Vi pitate, E-škola odgovara* postavi jedno do dva pitanja. Tijekom analize pitanja u kategoriji *Teme* najveći broj pitanja pripada potkategoriji *Anorganska kemija* (18,40 %). Slijedi potkategorija *Organska kemija* (18,14 %), a potom potkategorija *Struktura tvari* (9,98 %). Čak 16,54 % pitanja nije bilo moguće razvrstati u definirane potkategorije.

Da bi dobili željeni odgovor, korisnici su morali slijediti pravila portala koja podrazumijevaju ispunjavanje obrasca s osobnim podacima. Tih se pravila pridržavalo 84,24 % korisnika.

Od 5000 analiziranih pitanja, najveći broj postavio je Ivica Cvrtila, njih 64, a valja naglasiti da je kasnije kao autor odgovora ponudio odgovor na njih 1117. Broj njegovih odgovora i danas raste. Najveći broj odgovora dali su do danas: Ivica Cvrtila, Tomislav Portada, Nenad Judaš i Kristijan A. Kovač. Njima valja dodati Filipa Topića, Ivana Halasza, Marka Grbu i Mateju Vlatković koji su, uz Ivicu Cvrtilu ujedno bili i dvosmjerni korisnici portala – započeli su postavljajući pitanja, a svoj doprinos projektu zaokružili su kasnijim davanjem odgovora na

pitanja novih korisnika. Općenito, broj upita učenika osnovnih i srednjih škola, u promatranom razdoblju, ne varira značajno tijekom godina školovanja. Ističe su se dva podatka; 941 godišnji upit učenika osmih razreda i 917 godišnjih upita učenika prvih razreda srednje škole. No, godišnji broj upita za uzrast drugog razreda srednje škole redovito se prepolovi na nekih 460-tak. Kod ostalih uzrasta godišnji broj postavljenih pitanja je postojan i kreće se oko 600.

E-škola kemije je internetski projekt i bilo je potrebno određeno vrijeme za njegovu popularizaciju. U njegov rast i djelovanje uložen je trud velikog broja ljudi koji sve ove godine na njemu rade bez naknada. S druge strane, njegov opstanak ovisio je u velikoj mjeri i o korisnicima koji postavljaju pitanja, a njihov broj svakim danom sve više raste. Sva pitanja koja korisnici postavljaju nalaze se na skrivenoj domeni i vidljiva su samo autorima odgovora. Broj postavljenih pitanja gotovo je tri puta veći od broja odgovorenih pitanja koja su vidljiva javnosti. Mnogi korisnici ne koriste mogućnost pretraživanja baze odgovorenih pitanja (što u početku i nije bilo moguće) pa postavljaju pitanja na koja već postoje odgovori. Ponekad autori odgovora u nove odgovore unose internetske poveznice koje će korisnike odvesti do željenih odgovora. Kao godina s najviše odgovorenih pitanja ističe se 2004. godina, što je u skladu s tempom popularizacije i godinama djelovanja portala, dok je 2009. godina za analizirani period ona s najmanjim brojem. Ovaj podatak može se pripisati i činjenici da je serverski uređaj portala *E-škola kemije* tada bio hakiran što je prouzročilo gubitak dijela podataka.

Od svojih samih početaka, ovaj projekt profilirao se među edukacijskim portalima te je učenicima i nastavnicima postao nezamjenjiv, kao i svima ostalima koji su zainteresirani za kemiju. Unatoč brojevima koji idu u korist cijeloj ideji ove internetske platforme, oni bi mogli biti i bolji. Naime, mnogo učenika u Hrvatskoj i dalje ne zna za portal *E-škola kemije* – ili ga samostalno nisu otkrili ili ih njihovi nastavnici (i prijatelji) na njega nisu uputili. Edukacija učenika započinje edukacijom nastavnika, stoga je to element u obrazovanju koji se ne smije zanemariti. Nastavnik treba biti ona osoba koja će učenike uputiti u internetske mogućnosti i preporučiti im portale na kojima se nalaze provjerene i kvalitetne informacije, a koje su ujedno i kvalitetno prilagođene uzrastu. Takvo nastavno djelovanje trebalo bi rezultirati većim brojem korisnika i većim brojem pitanja koja bi premašivala opseg službenih nastavnih sadržaja. Osim toga, portal bi se trebao i osuvremeniti te postati dostupan novijim internetskim tehnologijama i društvenim mrežama. Time bi u određenoj mjeri i budućnost i status kemije kao znanosti u Hrvatskoj bili osigurani i unaprijeđeni.

§ 9. LITERATURNI IZVORI

1. J. W. Steed, J. L. Atwood, *Supramolecular Chemistry*, drugo izdanje, Wiley, Wiltshire, 2009.
2. J. M. Lehn, *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*, Wiley-VCH, Weinheim, 1995.
3. B. Kojić-Prodić, K. Molčanov, *Acta Chim. Slov.* **55** (2008) 692–708.78) 561–581.
4. D. Braga, F. Greponi, *Making Crystals by Design*, Wiley-VCH, Germany, 2007.
5. D. V. Soldatov, *J. Chem. Crystal.* **64** (2006). 246-253.
6. C. F. Macrae, P. R. Edgington, P. McCabe, E. Pidcock, G. P. Shields, R. Taylor, M. Towler, J. van der Streek, *J. Appl. Cryst.* **2006**, 39, 453–457.
7. Valadon, P. (2004). RasTop 2.0.3.; La Jolla, CA. (available at www.geneinfinity.org/rastop/)
8. POV-Ray; Persistence of Vision TM Raytracer, Pty. Ltd.: Williamstown, Australia, 2004.
9. J. L. Atwood, J. W. Steed, *Organic Nanostructures*, Wiley-VCH, Weinheim, 2008.
10. M. W. Hosseini, *Chem. Commun.* (2005) 5825-5829.
11. D. Grdenić, *Molekule i kristali*, Školska knjiga, Zagreb, 1973.
12. G. R. Desiraju, *Crystal Engineering. The Design of Organic Solids*, Elsevier, Amsterdam, 1989.
13. P. Metrangolo, G. Resnati, *Biomolecular Halogen Bonds. In Halogen Bonding I: Impact on Materials Chemistry and Life Science*, Springer International Publishing: Cham, Switzerland, 2015. str 241–276.
14. C. R. Groom, I. J. Bruno, M. P. Lightfoot, S. C. Ward, *Acta Cryst. B* **72** (2016), 171–179.
15. P. A. Nelson, R. A. Taylor, *Appl. Petrochem. Res.* **4** (2014) 253–285.
16. S. Čičić, *Međumolekulske interakcije u kristalnim strukturama adicijskih spojeva halogeniranih bakrovih(II) karboksilata s N-donornim ligandima*, Diplomski rad, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilišta u Zagrebu, 2011.
17. C. Janiak, J. Vieth, *New J. Chem.* **34** (2010) 2366-2369.
18. I. Bkouche-Waksman, C. Bois, G. A. Popovitch, P. L'Haridon, *Bull. Soc. Chim. Fr.* (1980) 69–72.

19. F. Hamza, G. Kickelbick, *Macromolecules* **42** (2009) 7762–7764.
20. J. Kang, X.-H. Huang, J.-H. Xu, Z.-Q. Jiang, C.-C. Huang, *Jiegou Huaxue* **28** (2009) 15–19.
21. F. Katzsch, A. S. Munch, F. O. R. L. Mertens, E. Weber, *J. Mol. Struct.* **1064** (2014) 122–128.
22. *CrysAlis CCD V171.34*, Oxford Diffraction (2003). Oxford Diffraction Ltd., Abingdon, Oxfordshire, UK.
23. *CrysAlis RED V171.34*, Oxford Diffraction (2003). Oxford Diffraction Ltd., Abingdon, Oxfordshire, UK
24. L. J. Farrugia, *J. Appl. Cryst.* **45** (2012) 849–854.
25. G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr. A* **64** (2008) 112–122.
26. L. J. Farrugia, *J. Appl. Cryst.* **45** (2012) 849–854.
27. C. B. Aakeröy, T. A. Evans, K. R. Seddon, I. Pálinkó, *New J. Chem.* (1999) 145–152.
28. A. Bondi, *J. Phys. Chem.* **68** (1964) 441–451.
29. G. R. Desiraju, *Acc. Chem. Res.* **35** (2002) 565–573.
30. R. Taylor, O. Kennard, *J. Am. Chem. Soc.* **104** (1982) 5063–5070.
31. T. Steiner, *Chem. Commun.* (1997) 727–734.
32. S. Carlotto, M. Casarin, A. Lanza, F. Nestola, L. Pandolfo, C. Pettinari, R. Scatena, *Cryst. Growth Design.* **15** (2015) 5910–5918.
33. a) L. Infantes, S. Motherwell, *CrystEngComm* **4** (2002) 454–461. b) L. Infantes, J. Chisholm, S. Motherwell, *CrystEngComm* **5** (2003) 480–486.
34. E. Meštrović, *Priroda*, **96(3)** (2007) 50–53
35. I. Mikulić, *Metioninski i cisteinski kompleksi bakra(II), E-škola kemije – geografski dosezi*, Diplomski rad, Kemijski odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilišta u Zagrebu, 2016.
36. Zapisnici Glavnih skupština Hrvatskog kemijskog društva
<https://hkd.hr/index.php/about-hkd/skupstine> (datum pristupa 19. veljače 2018.)
37. Osobna priopćenja Nenad Judaš.
38. R. Elmas, F. N. Akin, Ö. Geban, *Asia-Pacific Edu. Res.* **22** (2013) 559–569.
39. *General Chemistry Online: Just Ask Antoine!*,
<http://antoine.frostburg.edu/chem/senese/101/just-ask-antoine.shtml> (datum pristupa 10. veljače 2018.)

40. *Newest Questions – Chemistry Stack Exchange:*
<http://chemistry.stackexchange.com/questions> (datum pristupa 10. veljače 2018.)
41. *ChemHelp – A place to ask questions about chemistry:*
<https://www.reddit.com/r/chemhelp/> (datum pristupa 10. veljače 2018.)
42. *Chemistry Answers-Assignment Expert:* <https://www.assignmentexpert.com/homework-answers/chemistry> (datum pristupa 10. veljače 2018.)
43. *Academic Earth:* <https://academicearth.org/chemistry/> (datum pristupa 10. veljače 2018.)
44. *Khan Academy:* <https://www.khanacademy.org/science> (datum pristupa 10. veljače 2018.)
45. *Reference.com:* <https://www.reference.com/science?qo=leafPageTaxonomyHeader> (datum pristupa 10. veljače 2018.)
46. *E-škola kemije* <http://eskola.chem.pmf.hr/> (datum pristupa 10. veljače 2018.)
47. *MZOS – Osnovno obrazovanje:* <http://public.mzos.hr/Default.aspx?sec=2197> i <http://public.mzos.hr/Default.aspx?sec=2239> (datum pristupa 10. veljače 2018.)
48. Nacionalni centar za vanjsko vrednovanje obrazovanja,
49. <https://www.ncvvo.hr/nastavni-planovi-i-programi-za-gimnazije-i-strukovne-skole/> (pristupljeno 10. veljače 2018.)
50. E. Kovač-Andrić, A. Lapac Groš, N. Štiglić, *Kemija 7 – udžbenik kemije za 7. razred osnovne škole*, Zagreb, Profil, 2014.
51. M. Pernar, S. Šimičić, R. Vladušić, *Kemija 8 – udžbenik kemije za 8. razred osnovne škole*, Zagreb, Profil, 2014.
52. A. Habuš, S. Liber, V. Tomašić. *Opća kemija 1 – udžbenik iz kemije za prvi razred gimnazije*, Zagreb, Profil Klett, 2014.
53. A. Habuš, S. Liber, D. Stričević. *Opća kemija 2 – udžbenik iz kemije za drugi razred gimnazije*, Zagreb, Profil Klett, 2014.
54. S. Habuš, D. Stričević, V. Tomašić, *Anorganska kemija – udžbenik iz kemije za treći razred gimnazije*, Zagreb, Profil, 2009.
55. . D. Stričević, B. Sever, *Temelji organske kemije - udžbenik iz kemije za četvrti razred gimnazije*, Zagreb, Profil Klett, 2017.
56. *Vi pitate, e-škola odgovara:* <http://eskola.chem.pmf.hr/index2.php3> (datum pristupa 18. veljače 2018.)

§ 10. DODATAK

Tablica D10a. Položajni parametri i ekvivalentni izotropni koeficijenti U_{eq} ($\times 10^4 \text{ \AA}^2$) nevodikovih atoma za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{ C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$, spoj **A**.

Atom	x	y	z	U_{eq}
Cu1	0,965(1)	0,754(1)	0,613(1)	281(4)
O11	0,967(1)	0,716(1)	0,453(1)	375(30)
O21	0,759(1)	0,809(1)	0,577(1)	400(30)
O31	0,922(1)	0,755(1)	0,761(1)	382(31)
O41	1,135(1)	0,662(1)	0,634(1)	383(28)
O51	1,191(1)	0,953(1)	0,696(1)	422(28)
Cu2	0,678(1)	0,513(1)	0,525(1)	277(3)
O12	0,720(1)	0,509(1)	0,377(1)	367(30)
O22	0,514(1)	0,606(1)	0,505(1)	445(34)
O32	0,677(1)	0,552(1)	0,689(1)	410(35)
O42	0,889(1)	0,457(1)	0,561(1)	408(31)
O61	0,450(1)	0,309(1)	0,439(1)	416(31)
C11	0,848(1)	0,607(1)	0,369(1)	325(33)
C12	0,835(2)	0,579(1)	0,241(1)	448(42)
C111	1,020(1)	0,699(1)	0,225(1)	537(14)
C21	0,580(1)	0,729(1)	0,531(1)	328(36)
C22	0,437(2)	0,788(1)	0,502(1)	474(54)
C121	0,525(1)	0,911(1)	0,447(1)	629(14)
C31	0,803(1)	0,662(1)	0,769(1)	305(30)
C32	0,815(2)	0,690(1)	0,897(1)	477(42)
C131	0,626(1)	0,568(1)	0,914(1)	582(13)
C41	1,057(1)	0,535(1)	0,609(1)	312(38)
C42	1,197(1)	0,475(1)	0,632(1)	462(47)
C141	1,121(1)	0,362(1)	0,696(1)	733(17)
C51	1,217(2)	1,044(1)	0,639(1)	613(50)
C61	0,436(2)	0,227(1)	0,499(1)	541(50)
N71	0,339(1)	0,172(1)	0,190(1)	381(35)
C71	0,344(1)	0,057(1)	0,126(1)	370(37)
C72	0,369(2)	-0,032(1)	0,184(1)	441(41)
C73	0,378(2)	-0,152(1)	0,114(1)	523(49)
C74	0,369(2)	-0,188(1)	-0,002(1)	472(46)
C75	0,342(2)	-0,108(1)	-0,059(1)	437(47)
C76	0,329(1)	0,013(1)	0,004(1)	362(40)
N72	0,309(1)	0,094(1)	-0,052(1)	363(35)
C77	0,301(1)	0,213(1)	0,011(1)	345(35)
C78	0,280(2)	0,298(1)	-0,039(1)	483(49)
C79	0,265(2)	0,413(1)	0,016(1)	503(47)
C710	0,278(2)	0,450(1)	0,139(1)	549(49)
C711	0,300(2)	0,374(1)	0,195(1)	442(42)
C712	0,314(1)	0,248(1)	0,133(1)	347(36)
N81	0,795(1)	0,252(1)	0,122(1)	429(42)
C81	0,825(1)	0,177(1)	0,184(1)	422(37)
C82	0,831(2)	0,221(1)	0,300(1)	563(53)

Tablica D10b. Položajni parametri i ekvivalentni izotropni koeficijenti U_{eq} ($\times 10^4 \text{ \AA}^2$) nevodikovih atoma za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{ C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ (A).

Atom	x	y	z	U_{eq}
C83	0,865(2)	0,145(1)	0,365(1)	556(51)
C84	0,895(2)	0,027(1)	0,306(1)	567(52)
C85	0,890(2)	-0,014(1)	0,198(1)	488(49)
C86	0,858(2)	0,060(1)	0,129(1)	415(37)
N82	0,850(1)	0,014(1)	0,013(1)	428(43)
C87	0,816(1)	0,086(1)	-0,042(1)	380(35)
C88	0,807(2)	0,047(1)	-0,166(1)	452(49)
C89	0,777(2)	0,118(1)	-0,221(1)	581(52)
C810	0,754(2)	0,240(1)	-0,171(1)	561(60)
C811	0,759(2)	0,283(1)	-0,050(1)	514(41)
C812	0,792(2)	0,208(1)	0,013(1)	376(32)

Tablica D11. Računate koordinate vodikovih atoma za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{ C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ (A).

$[d(\text{C}_{\text{ar}}-\text{H}) = 0,93 \text{ \AA}]$, $[d(\text{C}_{\text{metilen}}-\text{H}) = 0,96 \text{ \AA}]$ i $[d(\text{C}_{\text{metil}}-\text{H}) = 0,97 \text{ \AA}]$

Atom	x	y	z
H12A	0,71490	0,57637	0,19976
H12B	0,83431	0,49053	0,20302
H22A	0,40996	0,83001	0,57312
H22B	0,31767	0,71497	0,44389
H32A	0,81713	0,77865	0,93460
H32B	0,93589	0,69237	0,93754
H42A	1,32077	0,54770	0,68450
H42B	1,21178	0,42729	0,55826
H51A	1,24134	1,00416	0,56772
H51B	1,32391	1,12882	0,69106
H51C	1,10369	1,05888	0,62061
H61A	0,49746	0,16759	0,47248
H61B	0,30411	0,17285	0,48321
H61C	0,49846	0,28213	0,58211
H72	0,37849	-0,00881	0,26251
H73	0,39142	-0,21062	0,14889
H74	0,38128	-0,26763	-0,04211
H75	0,33206	-0,13426	-0,13814
H78	0,27684	0,27460	-0,11721
H79	0,24631	0,46651	-0,02272
H710	0,27065	0,53131	0,18003
H711	0,30697	0,40081	0,27312
H82	0,81199	0,29840	0,33487
H83	0,86833	0,17146	0,44259
H84	0,91957	-0,02219	0,34761
H85	0,90644	-0,09343	0,16418
H88	0,82357	-0,03040	-0,20509
H89	0,76998	0,08782	-0,30022
H810	0,73747	0,28962	-0,21413
H811	0,73864	0,35993	-0,01483
H1	1,21620	0,99123	0,76282

Tablica D12. Međuatomske udaljenosti (Å) za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ (A).

Cu1–O11	1,944(1)	C71–C72	1,475(2)
Cu1–O21	1,945(1)	C71–C76	1,437(2)
Cu1–O31	1,970(1)	C72–C73	1,410(2)
Cu1–O41	1,982(1)	C73–C74	1,377(2)
Cu1–O51	2,129(1)	C74–C75	1,390(2)
O11–C11	1,248(1)	C75–C76	1,405(2)
O21–C21	1,286(1)	C76–N72	1,357(2)
O31–C31	1,215(1)	N72–C77	1,366(1)
O41–C41	1,271(1)	C77–C78	1,358(2)
O51–C51	1,426(2)	C77–C712	1,440(1)
Cu2–O12	1,957(1)	C78–C79	1,325(2)
Cu2–O22	1,946(1)	C79–C710	1,454(2)
Cu2–O32	1,989(1)	C710–C711	1,324(2)
Cu2–O42	1,984(1)	C711–C712	1,443(2)
Cu2–O61	2,167(1)	N81–C81	1,378(2)
O12–C11	1,289(1)	N81–C812	1,308(2)
O22–C21	1,239(1)	C81–C82	1,376(2)
O32–C31	1,252(1)	C81–C86	1,430(2)
O42–C41	1,216(1)	C82–C83	1,426(2)
O61–C61	1,385(2)	C83–C84	1,434(2)
C11–C12	1,527(2)	C84–C85	1,276(2)
C12–C111	1,740(1)	C85–C86	1,445(2)
C21–C22	1,529(2)	C86–N82	1,380(2)
C22–C121	1,781(2)	N82–C87	1,296(2)
C31–C32	1,525(2)	C87–C88	1,468(1)
C32–C131	1,780(1)	C87–C812	1,437(2)
C41–C42	1,500(0)	C88–C89	1,281(2)
C42–C141	1,754(2)	C89–C810	1,412(2)
N71–C71	1,317(1)	C810–C811	1,441(2)
N71–C712	1,337(2)	C811–C812	1,399(2)

Tablica D13a. Anizotropni temperaturni faktori ($\times 10^4 \text{Å}^2$) nevodikovih atoma za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ (A).

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Cu1	280(6)	251(4)	272(4)	95(4)	83(4)	84(4)
O11	435(43)	354(36)	239(28)	67(26)	129(27)	98(32)
O21	406(41)	284(31)	460(40)	114(28)	129(32)	138(29)
O31	421(40)	370(38)	283(32)	144(29)	120(31)	73(34)
O41	375(37)	358(36)	474(37)	236(30)	97(30)	187(30)
O51	432(38)	306(30)	320(31)	170(26)	–16(27)	–47(25)
Cu2	278(5)	245(4)	269(4)	92(3)	80(4)	85(4)
O12	403(42)	347(37)	304(32)	108(28)	130(31)	124(34)
O22	310(39)	390(37)	653(45)	195(32)	214(33)	160(31)
O32	410(44)	399(39)	308(31)	133(28)	109(29)	57(33)
O42	310(38)	411(38)	509(38)	195(31)	47(31)	212(32)
O61	633(49)	290(29)	230(28)	62(23)	129(29)	137(30)
C11	352(44)	316(37)	370(40)	201(32)	196(34)	113(32)
C12	636(63)	445(51)	250(36)	111(34)	188(40)	224(46)
C111	549(17)	655(18)	490(14)	319(13)	259(14)	220(15)
C21	291(44)	390(46)	293(37)	116(33)	103(33)	153(37)
C22	444(62)	506(56)	710(64)	395(50)	218(51)	326(50)

Tablica D13b. Anizotropni temperaturni faktori ($\times 10^4 \text{ \AA}^2$) nevodikovih atoma za

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Cl21	723(21)	555(13)	689(16)	390(12)	141(14)	289(13)
C31	334(40)	346(40)	207(30)	54(27)	59(27)	191(33)
C32	446(55)	475(52)	329(42)	166(38)	128(39)	-18(40)
Cl31	640(20)	631(17)	536(16)	355(14)	293(15)	170(15)
C41	405(51)	341(43)	320(39)	210(34)	162(37)	213(39)
C42	372(52)	525(56)	548(57)	322(46)	137(44)	168(43)
Cl41	588(19)	933(22)	957(22)	771(19)	185(16)	316(16)
C51	631(71)	491(58)	553(63)	270(49)	88(54)	56(50)
C61	907(85)	281(37)	411(49)	220(35)	237(52)	136(44)
N71	353(46)	368(43)	318(38)	119(33)	52(35)	89(36)
C71	259(45)	409(46)	398(45)	239(37)	62(36)	46(36)
C72	476(55)	454(49)	413(44)	295(38)	86(39)	143(41)
C73	461(60)	486(52)	730(71)	359(49)	167(52)	242(47)
C74	490(61)	329(41)	638(60)	203(41)	231(50)	194(41)
C75	335(57)	504(61)	355(43)	155(41)	-5(39)	135(48)
C76	241(47)	445(49)	318(41)	189(36)	21(35)	59(38)
N72	339(47)	400(45)	279(37)	162(33)	59(34)	79(37)
C77	333(51)	354(43)	247(37)	84(32)	44(35)	97(37)
C78	501(63)	483(57)	366(46)	160(39)	74(41)	149(46)
C79	501(65)	507(57)	477(49)	277(43)	114(45)	140(48)
C710	419(57)	533(59)	537(60)	143(49)	18(47)	180(47)
C711	411(55)	374(48)	463(50)	104(39)	163(42)	135(42)
C712	302(49)	284(38)	336(41)	81(31)	49(35)	65(35)
N81	433(54)	391(46)	401(42)	87(36)	154(39)	170(41)
C81	272(45)	406(47)	477(49)	170(38)	41(36)	77(37)
C82	553(74)	469(61)	450(53)	41(47)	140(52)	127(55)
C83	577(69)	579(63)	377(47)	190(44)	93(45)	134(54)
C84	492(64)	545(62)	577(61)	228(50)	157(49)	134(50)
C85	529(63)	517(54)	501(52)	263(44)	146(44)	284(49)
C86	322(50)	512(52)	403(46)	183(39)	139(37)	163(41)
N82	421(55)	353(45)	431(45)	70(37)	165(40)	152(41)
C87	386(52)	326(43)	281(37)	-8(31)	144(34)	95(38)
C88	521(64)	444(53)	296(42)	54(40)	163(42)	179(48)
C89	525(71)	690(69)	332(43)	68(44)	174(43)	154(57)
C810	586(73)	702(77)	398(49)	275(51)	76(47)	283(60)
C811	512(61)	459(52)	441(45)	75(38)	156(40)	169(45)
C812	338(47)	253(35)	383(45)	25(31)	60(35)	88(32)

Tablica D14a. Valentni kutovi ($^\circ$) za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2 (\text{A}).$

O11-Cu1-O21	88,1(1)	O32-C31-C32	118,1(1)
O11-Cu1-O31	168,3(1)	C31-C32-Cl31	115,0(1)
O11-Cu1-O41	90,2(1)	O41-C41-O42	128,6(1)
O11-Cu1-O51	97,0(1)	O41-C41-C42	114,1(1)
O11-Cu1-Cu2	87,0(1)	O42-C41-C42	117,1(1)
O21-Cu1-O31	90,9(1)	C41-C42-Cl41	111,6(1)
O21-Cu1-O41	168,9(1)	C71-N71-C712	115,8(1)
O21-Cu1-O51	96,3(1)	N71-C71-C72	118,1(1)
O21-Cu1-Cu2	82,3(1)	N71-C71-C76	124,3(1)

Tablica D14b. Valentni kutovi (°) za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ (A).

O31–Cu1–O41	88,5(1)	C72–C71–C76	117,6(1)
O31–Cu1–O51	94,7(1)	C71–C72–C73	117,0(1)
O31–Cu1–Cu2	81,3(1)	C72–C73–C74	123,4(1)
O41–Cu1–O51	94,8(1)	C73–C74–C75	120,7(1)
O41–Cu1–Cu2	86,6(1)	C74–C75–C76	119,3(1)
O51–Cu1–Cu2	175,7(1)	C71–C76–C75	121,8(1)
Cu1–O11–C11	120,5(1)	C71–C76–N72	118,9(1)
Cu1–O21–C21	125,2(1)	C75–C76–N72	119,3(1)
Cu1–O31–C31	125,6(1)	C76–N72–C77	118,7(1)
Cu1–O41–C41	117,9(1)	N72–C77–C78	121,3(1)
Cu1–O51–C51	121,9(1)	N72–C77–C712	118,7(1)
Cu1–Cu2–O12	82,0(1)	C78–C77–C712	120,0(1)
Cu1–Cu2–O22	86,0(1)	C77–C78–C79	124,0(1)
Cu1–Cu2–O32	86,9(1)	C78–C79–C710	117,1(1)
Cu1–Cu2–O42	82,0(1)	C79–C710–C711	122,5(1)
Cu1–Cu2–O61	175,1(1)	C710–C711–C712	119,9(1)
O12–Cu2–O22	89,0(1)	N71–C712–C77	123,6(1)
O12–Cu2–O32	168,8(1)	N71–C712–C711	119,8(1)
O12–Cu2–O42	90,2(1)	C77–C712–C711	116,6(1)
O12–Cu2–O61	93,5(1)	C81–N81–C812	117,5(1)
O22–Cu2–O32	89,8(1)	N81–C81–C82	119,1(1)
O22–Cu2–O42	168,0(1)	N81–C81–C86	119,8(1)
O22–Cu2–O61	95,8(1)	C82–C81–C86	121,0(1)
O32–Cu2–O42	88,7(1)	C81–C82–C83	119,4(1)
O32–Cu2–O61	97,7(1)	C82–C83–C84	117,6(1)
O42–Cu2–O61	96,3(1)	C83–C84–C85	123,6(1)
Cu2–O12–C11	124,7(1)	C84–C85–C86	121,0(1)
Cu2–O22–C21	122,0(1)	C81–C86–C85	117,5(1)
Cu2–O32–C31	117,2(1)	C81–C86–N82	121,3(1)
Cu2–O42–C41	124,4(1)	C85–C86–N82	121,2(1)
Cu2–O61–C61	118,2(1)	C86–N82–C87	116,5(1)
O11–C11–O12	125,8(1)	N82–C87–C88	120,6(1)
O11–C11–C12	121,5(1)	N82–C87–C812	123,0(1)
O12–C11–C12	112,7(1)	C88–C87–C812	116,3(1)
C11–C12–Cl11	114,8(1)	C87–C88–C89	121,5(1)
O21–C21–O22	124,5(9)	C88–C89–C810	124,6(2)
O21–C21–C22	118,6(9)	C89–C810–C811	117,0(1)
O22–C21–C22	116,9(9)	C810–C811–C812	119,9(1)
C21–C22–Cl21	111,6(1)	N81–C812–C87	121,8(1)
O31–C31–O32	128,9(1)	N81–C812–C811	117,4(1)
O31–C31–C32	113,0(1)	C87–C812–C811	120,7(1)

Tablica D15a. Torzijski kutovi (°) za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ (A).

O21-Cu1-O11-C11	-81,1(0,1)	O22-Cu2-O61-C61	-127,7(0,8)
O31-Cu1-O11-C11	4,0(2,2)	O32-Cu2-O61-C61	-37,1(0,8)
O41-Cu1-O11-C11	87,9(0,9)	O42-Cu2-O61-C61	52,4(0,8)
O51-Cu1-O11-C11	-177,2(0,8)	Cu2-O12-C11-O11	2,2(1,6)
Cu2-Cu1-O11-C11	1,3(0,8)	Cu2-O12-C11-C12	-175,4(0,7)
O11-Cu1-O21-C21	88,3(0,9)	Cu2-O22-C21-O21	-2,2(1,6)
O31-Cu1-O21-C21	-80,1(0,9)	Cu2-O22-C21-C22	175,1(0,8)
O41-Cu1-O21-C21	6,98(2,3)	Cu2-O32-C31-O31	5,6(1,6)
O51-Cu1-O21-C21	-174,9(0,9)	Cu2-O32-C31-C32	-174,9(0,7)
Cu2-Cu1-O21-C21	1,0 (0,8)	Cu2-O42-C41-O41	-7,8(1,7)
O11-Cu1-O31-C31	-1,2(2,3)	Cu2-O42-C41-C42	178,3(0,8)
O21-Cu1-O31-C31	83,6(0,9)	O11-C11-C12-C111	9,1(1,4)
O41-Cu1-O31-C31	-85,3(0,9)	O12-C11-C12-C111	-173,2(0,8)
O51-Cu1-O31-C31	180,0(0,9)	O21-C21-C22-C121	37,8(1,4)
Cu2-Cu1-O31-C31	1,5(0,9)	O22-C21-C22-C121	-139,9(1,0)
O11-Cu1-O41-C41	-91,1(0,8)	O31-C31-C32-C131	172,2 (0,8)
O21-Cu1-O41-C41	-10,0(2,3)	O32-C31-C32-C131	-7,3(1,4)
O31-Cu1-O41-C41	77,3(0,8)	O41-C41-C42-C141	138,1(0,9)
O51-Cu1-O41-C41	171,9(0,8)	O42-C41-C42-C141	-47,1(1,3)
Cu2-Cu1-O41-C41	-4,0(0,8)	C712-N71-C71-C72	-179,1(1,0)
O11-Cu1-O51-C51	35,8(0,9)	C712-N71-C71-C76	1,6(1,7)
O21-Cu1-O51-C51	-53,0(0,9)	C71-N71-C712-C77	-2,8(1,6)
O31-Cu1-O51-C51	-144,4(0,9)	C71-N71-C712-C711	177,9(1,0)
O41-Cu1-O51-C51	126,6(0,9)	N71-C71-C72-C73	-178,5(1,2)
Cu2-Cu1-O51-C51	-123,7(2,6)	C76-C71-C72-C73	0,8(1,7)
O11-Cu1-Cu2-O12	-0,2(0,4)	71-C71-C76-C75	177,7(1,1)
O11-Cu1-Cu2-O22	-89,8(0,4)	N71-C71-C76-N72	0,2(1,7)
O11-Cu1-Cu2-O32	-179,8(0,4)	C72-C71-C76-C75	-1,6(1,7)
O11-Cu1-Cu2-O42	91,1(0,3)	C72-C71-C76-N72	-179,0(1,0)
O11-Cu1-Cu2-O61	21,1(2,5)	C71-C72-C73-C74	1,3(2,0)
O21-Cu1-Cu2-O12	88,2(0,4)	C72-C73-C74-C75	-2,7(2,1)
O21-Cu1-Cu2-O22	-1,4(0,4)	C73-C74-C75-C76	1,8(1,9)
O21-Cu1-Cu2-O32	-91,4(0,4)	C74-C75-C76-C71	0,4(1,8)
O21-Cu1-Cu2-O42	179,5(0,3)	C74-C75-C76-N72	177,8(1,1)
O21-Cu1-Cu2-O61	109,5(2,5)	C71-C76-N72-C77	-1,0(1,6)
O31-Cu1-Cu2-O12	-179,7(0,4)	C75-C76-N72-C77	-178,5(1,0)
O31-Cu1-Cu2-O22	90,8(0,4)	C76-N72-C77-C78	-179,9(1,1)
O31-Cu1-Cu2-O32	0,8(0,4)	C76-N72-C77-C712	-0,1(1,5)
O31-Cu1-Cu2-O42	-88,4(0,4)	N72-C77-C78-C79	177,5(1,3)

Tablica D15b. Torzijski kutovi (°) za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{CH}_3\text{OH})_2] \cdot 2 \text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ (A).

O31-Cu1-Cu2-O61	-158,4(2,5)	C712-C77-C78-C79	-2,4(2,0)
O41-Cu1-Cu2-O12	-90,6(0,4)	N72-C77-C712-N71	2,1(1,7)
O41-Cu1-Cu2-O22	179,8(0,4)	N72-C77-C712-C711	-178,6(1,0)
O41-Cu1-Cu2-O32	89,8(0,4)	C78-C77-C712-N71	-178,1(1,2)
O41-Cu1-Cu2-O42	0,7(0,3)	C78-C77-C712-C711	1,3(1,6)
O41-Cu1-Cu2-O61	-69,3(2,5)	C77-C78-C79-C710	2,4(2,2)
O51-Cu1-Cu2-O12	159,4(2,8)	C78-C79-C710-C711	-1,5(2,1)
O51-Cu1-Cu2-O22	69,8(2,8)	C79-C710-C711-C712	0,6(2,0)
O51-Cu1-Cu2-O32	-20,2(2,8)	C710-C711-C712-N71	178,9(1,7)
O51-Cu1-Cu2-O42	-109,3(2,8)	C710-C711-C712-C77	-0,5(1,7)
O51-Cu1-Cu2-O61	-179,3(3,7)	C812-N81-C81-C82	179,3(1,2)
Cu1-O11-C11-O12	-2,4(1,5)	C812-N81-C81-C86	1,7(1,7)
Cu1-O11-C11-C12	175,0(0,8)	C81-N81-C812-C87	1,5(1,7)
Cu1-O21-C21-O22	0,4(1,5)	C81-N81-C812-C811	179,0(1,1)
Cu1-O21-C21-C22	-177,0(0,8)	N81-C81-C82-C83	-179,0(1,2)
Cu1-O31-C31-O32	-5,0(1,8)	C86-C81-C82-C83	-1,4(2,0)
Cu1-O31-C31-C32	175,5(0,7)	N81-C81-C86-C85	179,8(1,1)
Cu1-O41-C41-O42	8,2(1,6)	N81-C81-C86-N82	-3,4(1,8)
Cu1-O41-C41-C42	-177,8(0,8)	C82-C81-C86-C85	2,3(1,8)
Cu1-Cu2-O12-C11	-0,8(0,8)	C82-C81-C86-N82	179,0(1,2)
O22-Cu2-O12-C11	85,2(0,9)	C81-C82-C83-C84	0,7(2,1)
O32-Cu2-O12-C11	1,2(2,4)	C82-C83-C84-C85	-1,0(2,2)
O42-Cu2-O12-C11	-82,8(0,9)	C83-C84-C85-C86	1,9(2,2)
O61-Cu2-O12-C11	-179,1(0,9)	C84-C85-C86-C81	-2,5(1,9)
Cu1-Cu2-O22-C21	2,2(0,9)	C84-C85-C86-N82	-179,3(1,3)
O12-Cu2-O22-C21	-79,8(0,9)	C81-C86-N82-C87	1,6(1,7)
O32-Cu2-O22-C21	89,1(0,9)	C85-C86-N82-C87	178,2(1,1)
O42-Cu2-O22-C21	6,4(2,3)	C86-N82-C87-C88	179,1(1,1)
O61-Cu2-O22-C21	-173,2(0,9)	C86-N82-C87-C812	1,8(1,7)
Cu1-Cu2-O32-C31	-3,0(0,8)	N82-C87-C88-C89	-178,6(1,3)
O12-Cu2-O32-C31	-5,1(2,3)	C812-C87-C88-C89	-1,1(1,8)
O22-Cu2-O32-C31	-89,0(0,8)	N82-C87-C812-N81	-3,5(1,8)
O42-Cu2-O32-C31	79,1(0,8)	N82-C87-C812-C811	179,1(1,1)
O61-Cu2-O32-C31	175,2(0,8)	C88-C87-C812-N81	179,0(1,1)
Cu1-Cu2-O42-C41	2,9(0,9)	C88-C87-C812-C811	1,6(1,6)
O12-Cu2-O42-C41	84,7(0,9)	C87-C88-C89-C810	1,5(2,3)
O22-Cu2-O42-C41	-1,3(2,2)	C88-C89-C810-C811	-2,3(2,3)
O32-Cu2-O42-C41	-84,1(0,9)	C89-C810-C811-C812	2,8(2,0)
O61-Cu2-O42-C41	178,3(0,9)	C810-C811-C812-N81	180,0(1,2)
Cu1-Cu2-O61-C61	121,9(2,4)	C810-C811-C812-C87	-2,5(1,8)
O12-Cu2-O61-C61	143,0(0,8)	811-C811-C812-C87	177,5(1,2)

Tablica D16. Položajni parametri i ekvivalentni izotropni koeficijenti U_{eq} ($\times 10^4 \text{ \AA}^2$) nevodikovih atoma za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$ (**B**).

Atom	x	y	z	U_{eq}
Cu11	0,0628(1)	0,581(1)	1,004(1)	479(5)
O11	0,058(1)	0,660(1)	0,866(1)	487(24)
O12	0,201(1)	0,503(1)	0,967(1)	655(26)
O13	0,043(1)	0,477(1)	1,143(1)	505(24)
O14	-0,098(1)	0,634(1)	1,042(1)	625(31)
O15	0,176(1)	0,707(1)	1,004(1)	1007(44)
C11	0,012(1)	0,621(1)	0,818(1)	434(41)
C12	0,017(1)	0,689(1)	0,713(1)	445(35)
Cl11	0,083(1)	0,827(1)	0,666(1)	592(10)
C13	0,194(1)	0,419(1)	0,951(1)	557(47)
C14	0,310(1)	0,368(1)	0,920(1)	702(41)
Cl12	0,440(1)	0,420(1)	0,937(1)	1093(16)
Cu21	0,484(7)	0,041(1)	0,567(1)	370(4)
O21	0,554(1)	0,182(1)	0,451(1)	529(26)
O22	0,648(1)	-0,005(1)	0,572(1)	444(27)
O23	0,419(1)	-0,113(1)	0,663(1)	490(24)
O24	0,677(1)	-0,070(1)	0,460(1)	388(23)
O25	0,451(1)	0,108(1)	0,676(1)	582(25)
C21	0,587(1)	0,191(1)	0,365(1)	367(37)
C22	0,641(1)	0,304(1)	0,281(1)	540(37)
Cl21	0,925(1)	-0,131(1)	0,466(1)	574(9)
C23	0,710(1)	-0,050(1)	0,519(1)	282(32)
C24	0,834(1)	-0,077(1)	0,543(1)	396(34)
Cl22	0,677(1)	0,404(1)	0,321(1)	769(12)
Cu31	0,399(8)	0,012(1)	0,969(1)	482(5)
O31	0,352(1)	0,082(1)	1,060(1)	502(28)
O32	0,486(1)	0,156(1)	0,870(1)	610(29)
O33	0,480(1)	-0,060(1)	0,885(1)	530(26)
O34	0,345(1)	-0,137(1)	1,076(1)	592(29)
O35	0,235(1)	0,038(1)	0,918(1)	824(34)
C31	0,414(1)	0,097(1)	1,109(1)	430(39)
C32	0,373(1)	0,157(1)	1,175(1)	458(37)
Cl31	0,224(1)	0,196(1)	1,177(1)	734(13)
C33	0,590(1)	0,188(1)	0,866(1)	510(45)
C34	0,642(1)	0,304(1)	0,789(1)	667(45)
Cl32	0,565(1)	0,363(1)	0,694(1)	910(13)
Cu41	0,985(1)	0,540(1)	0,409(1)	390(4)
O41	0,884(1)	0,399(1)	0,459(1)	439(24)
O42	0,868(1)	0,537(1)	0,612(1)	482(25)
O43	0,909(1)	0,331(1)	0,612(1)	436(25)
O44	0,839(1)	0,606(1)	0,459(1)	505(26)
O45	0,971(1)	0,609(1)	0,259(1)	564(24)
C41	0,865(1)	0,323(1)	0,549(1)	339(37)
C42	0,780(1)	0,224(1)	0,571(1)	444(36)
Cl41	0,767(1)	0,118(1)	0,691(1)	617(9)
C43	0,698(1)	0,641(1)	0,576(1)	498(38)
C44	0,814(1)	0,591(1)	0,550(1)	431(42)
Cl42	0,675(1)	0,647(1)	0,690(1)	745(11)
O91	0,986(1)	0,991(1)	0,205(1)	2531(83)
O92A	0,780(1)	0,805(1)	0,297(1)	
O92B	0,722(2)	0,749(2)	0,305(1)	
O93	0,227(1)	0,900(1)	0,821(1)	1090(38)
O94	0,923(1)	0,173(1)	0,860(1)	1412(43)
O95	0,055(1)	0,127(1)	0,009(1)	1825(65)

Tablica D17. Računate koordinate vodikovih atoma za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$ (**B**).
 $[d(\text{C}_{\text{ar}}-\text{H}) = 0,93 \text{ \AA}]$, $[d(\text{C}_{\text{metilen}}-\text{H}) = 0,96 \text{ \AA}]$, $[d(\text{C}_{\text{metil}}-\text{H}) = 0,97 \text{ \AA}]$

Atom	x	y	z
H12A	-0,066	0,692	0,704
H12B	0,063	0,652	0,675
H14A	0,322	0,384	0,851
H14B	0,298	0,287	0,958
H22A	0,583	0,333	0,240
H22B	0,714	0,293	0,240
H24A	0,821	-0,131	0,612
H24B	0,876	-0,009	0,535
H32A	0,429	0,224	1,151
H32B	0,379	0,108	1,241
H34A	0,727	0,301	0,759
H34B	0,640	0,354	0,821
H42A	0,809	0,194	0,523
H42B	0,699	0,249	0,565
H43A	0,629	0,596	0,577
H43B	0,700	0,716	0,524
H1	0,677(1)	0,019 (1)	0,606(1)
H2	0,204(2)	0,759(1)	0,959(1)

Tablica D18. Međuatomske udaljenosti (Å) za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$ (**B**).

Cu11-O11	1,957(1)	Cu31-O31	1,953(1)
Cu11-O12	1,969(1)	Cu31-O32	1,956(1)
Cu11-O13	1,952(1)	Cu31-O33	1,967(1)
Cu11-O14	1,979(1)	Cu31-O34	1,953(1)
Cu11-O15	2,113(1)	Cu31-O35	2,140(1)
O11-C11	1,249(1)	O31-C31	1,211(1)
O12-C13	1,228(1)	O32-C33	1,244(1)
C11-C12	1,479(1)	C31-C32	1,521(1)
C12-Cl11	1,757(1)	C32-Cl31	1,745(1)
C13-C14	1,530(1)	C33-C34	1,507(1)
C14-Cl12	1,749(1)	C34-Cl32	1,755(1)
Cu21-O21	1,969(1)	Cu41-O41	1,951(1)
Cu21-O22	1,953(1)	Cu41-O44	1,991(1)
Cu21-O23	1,962(1)	Cu41-O45	2,150(1)
Cu21-O25	2,155(1)	O41-C41	1,289(1)
O21-C21	1,246(1)	O42-C44	1,217(1)
O22-C23	1,280(1)	O43-C41	1,236(1)
O24-C23	1,182(1)	O44-C44	1,297(1)
C21-C22	1,519(1)	C41-C42	1,502(1)
C22-Cl22	1,765(1)	C42-Cl41	1,759(1)
Cl21-C24	1,766(1)	C43-C44	1,501(1)
C23-C24	1,531(1)	C43-Cl42	1,757(1)

Tablica D19. Anizotropni temperaturni faktori ($\times 10^4 \text{ \AA}^2$) nevodikovih atoma za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5 \text{ H}_2\text{O}$ (**B**).

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Cu11	603(7)	418(6)	332(5)	-126(5)	-32(5)	79(5)
O11	575(36)	550(34)	240(28)	-102(26)	-66(26)	141(26)
O12	623(39)	598(36)	583(36)	-199(31)	24(29)	246(31)
O13	630(37)	409(31)	303(29)	-38(26)	-22(26)	40(27)
O14	783(45)	599(39)	515(34)	-280(31)	-143(35)	314(34)
O15	1232(64)	797(55)	874(57)	-314(47)	-102(49)	-218(46)
C11	554(57)	501(57)	153(44)	-97(43)	-10(38)	151(44)
C12	511(50)	403(46)	311(42)	-77(37)	-52(37)	69(37)
Cl11	733(15)	467(12)	419(11)	-72(10)	-82(11)	27(10)
C13	766(74)	587(68)	143(39)	-13(44)	-87(46)	245(60)
C14	957(74)	622(54)	471(49)	-276(44)	-24(49)	397(52)
Cl12	687(18)	1118(20)	1168(21)	-355(17)	55(16)	261(16)
Cu21	332(6)	394(5)	351(5)	-149(4)	-46(4)	49(4)
O21	567(37)	426(32)	473(33)	-77(28)	-129(29)	27(26)
O22	301(33)	645(37)	489(34)	-288(30)	-194(28)	-35(26)
O23	463(34)	367(31)	520(32)	-131(27)	-12(26)	-20(25)
O24	360(30)	572(32)	357(28)	-257(26)	-208(24)	79(24)
O25	640(36)	683(33)	507(30)	-351(28)	-115(28)	140(28)
C21	167(39)	351(50)	386(48)	50(44)	-110(36)	-8(34)
C22	475(51)	461(48)	391(44)	35(40)	21(38)	-108(39)
Cl21	376(12)	696(13)	722(13)	-397(12)	-94(10)	153(10)
C23	270(44)	224(40)	210(39)	2(33)	19(34)	-25(33)
C24	271(42)	490(44)	367(41)	-143(36)	-50(35)	69(34)
Cl22	869(18)	477(13)	768(15)	-120(12)	-118(13)	-119(12)
Cu31	411(6)	584(6)	417(6)	-232(5)	-8(5)	86(5)
O31	517(37)	606(35)	527(34)	-362(29)	-170(29)	146(27)
O32	639(41)	470(35)	534(34)	-90(28)	-47(33)	53(32)
O33	648(39)	581(33)	406(30)	-284(27)	-80(29)	134(29)
O34	550(39)	641(38)	435(34)	-149(30)	-12(29)	122(30)
O35	553(38)	1245(46)	844(40)	-558(37)	-285(33)	243(34)
C31	482(58)	370(48)	305(46)	-86(39)	22(41)	162(43)
C32	458(49)	361(43)	515(47)	-171(39)	-93(39)	151(36)
Cl31	764(16)	840(15)	592(13)	-364(12)	-77(12)	398(12)
C33	652(68)	498(63)	334(51)	-264(49)	134(50)	-56(54)
C34	787(65)	510(54)	590(54)	-297(48)	168(49)	-65(47)
Cl32	1040(21)	578(15)	764(16)	-51(13)	-46(15)	49(14)
Cu41	400(6)	394(5)	350(5)	-166(5)	-32(4)	35(4)
O41	446(33)	408(31)	452(31)	-218(27)	-18(26)	-53(24)
O42	394(34)	526(34)	459(32)	-178(28)	-61(27)	158(26)
O43	503(33)	358(29)	497(32)	-235(26)	-109(27)	-37(24)
O44	445(33)	467(32)	544(33)	-230(28)	-2(27)	173(24)
O45	742(39)	530(31)	428(30)	-198(26)	-176(28)	95(27)
C41	212(41)	441(51)	397(48)	-288(44)	86(37)	-79(36)
C42	290(43)	526(48)	544(48)	-288(42)	-27(37)	-98(37)
Cl41	747(15)	489(12)	471(12)	-137(10)	-2(11)	-149(11)
C43	296(45)	623(50)	614(50)	-349(43)	-26(39)	116(39)
C44	328(51)	386(50)	627(59)	-330(47)	19(45)	-67(39)
Cl42	585(15)	897(16)	783(15)	-495(13)	28(12)	157(12)
O91	2468(122)	3300(116)	2391(101)	-1573(94)	-982(94)	669(95)
O93	1129(54)	1199(49)	839(42)	-558(39)	220(39)	-405(41)
O94	1405(66)	989(49)	1395(59)	-165(44)	-180(52)	-133(44)
O95	1146(66)	1880(74)	2826(103)	-1444(75)	-354(69)	349(56)

Tablica D20. Valentni kutovi (°) za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5 \text{H}_2\text{O}$ (B).

O11–Cu11–O12	89,6(2)	C41–C42–Cl41	111,9(5)
O11–Cu11–O13	167,4(2)	C44–C43–Cl42	112,8(5)
O11–Cu11–O14	89,0(2)	O42–C44–O44	127,1(8)
O11–Cu11–O15	95,9(3)	O42–C44–C43	121,6(7)
O12–Cu11–O13	90,3(2)	O44–C44–C43	111,2(7)
O12–Cu11–O14	167,9(3)	O21–C21–C22	119,5(6)
O12–Cu11–O15	93,7(3)	C21–C22–Cl22	113,8(5)
O13–Cu11–O14	88,5(2)	O22–C23–O24	126,2(7)
O13–Cu11–O15	96,8(3)	O22–C23–C24	109,8(6)
O14–Cu11–O15	98,4(3)	O24–C23–C24	124,0(6)
Cu11–O11–C11	126,5(4)	Cl21–C24–C23	111,2(5)
Cu11–O12–C13	125,7(6)	O31–Cu31–O32	88,4(2)
O11–C11–C12	121,3(6)	O31–Cu31–O33	167,7(2)
C11–C12–Cl11	113,9(5)	O31–Cu31–O34	91,4(2)
O12–C13–C14	120,6(9)	O31–Cu31–O35	96,2(2)
C13–C14–Cl12	112,4(6)	O32–Cu31–O33	89,1(2)
O21–Cu21–O22	89,6(2)	O32–Cu31–O34	167,8(2)
O21–Cu21–O23	167,8(2)	O32–Cu31–O35	95,6(2)
O21–Cu21–O25	97,5(2)	O33–Cu31–O34	88,5(2)
O22–Cu21–O23	88,5(2)	O33–Cu31–O35	96,1(2)
O22–Cu21–O25	99,9(2)	O34–Cu31–O35	96,6(2)
O23–Cu21–O25	94,7(2)	Cu31–O31–C31	126,5(5)
Cu21–O21–C21	124,4(5)	Cu31–O32–C33	123,9(6)
Cu21–O22–C23	124,2(5)	O31–C31–C32	123,7(7)
O44–Cu41–O45	96,0(2)	C31–C32–Cl31	112,3(5)
Cu41–O41–C41	123,5(5)	O32–C33–C34	117,5(8)
Cu41–O44–C44	118,5(5)	C33–C34–Cl32	115,0(6)
O41–C41–O43	123,6(7)	O41–Cu41–O44	88,9(2)
O41–C41–C42	113,7(6)	O41–Cu41–O45	98,5(2)
O43–C41–C42	122,8(7)		

Tablica D21. Torzijski kutovi (°) za $[\text{Cu}_2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_8\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2,5 \text{H}_2\text{O}$ (B).

O12–Cu11–O11–C11	79,1(6)	O32–Cu31–O31–C31	–81,4(7)
O13–Cu11–O11–C11	–10,6(1,3)	O33–Cu31–O31–C31	–3,2(1,4)
O14–Cu11–O11–C11	–88,9(6)	O34–Cu31–O31–C31	86,4(7)
O15–Cu11–O11–C11	172,7(6)	O35–Cu31–O31–C31	–176,9(6)
O11–Cu11–O12–C13	–81,8(7)	O31–Cu31–O32–C33	81,8(7)
O13–Cu11–O12–C13	85,5(7)	O33–Cu31–O32–C33	–86,1(7)
O14–Cu11–O12–C13	1,5(1,6)	O34–Cu31–O32–C33	–7,5(1,5)
O15–Cu11–O12–C13	–177,7(7)	O35–Cu31–O32–C33	177,8(7)
Cu11–O11–C11–C12	–178,9(5)	Cu31–O31–C31–C32	176,9(5)
Cu11–O12–C13–C14	178,4(6)	Cu31–O32–C33–C34	–176,3(5)
O11–C11–C12–Cl11	–3,1(1,0)	O31–C31–C32–Cl31	3,6(1,0)
O12–C13–C14–Cl12	14,0(1,1)	O32–C33–C34–Cl32	–16,1(1,1)
O22–Cu21–O21–C21	81,7(6)	O44–Cu41–O41–C41	–85,6(6)
O23–Cu21–O21–C21	1,0(1,3)	O45–Cu41–O41–C41	178,5(5)
O25–Cu21–O21–C21	–178,4(6)	O41–Cu41–O44–C44	85,2(6)
O21–Cu21–O22–C23	–81,9(6)	O45–Cu41–O44–C44	–176,3(5)
O23–Cu21–O22–C23	86,0(6)	Cu41–O41–C41–O43	–1,1(1,0)
O25–Cu21–O22–C23	–179,5(5)	Cu41–O41–C41–C42	177,4(4)
Cu21–O21–C21–C22	–179,6(5)	Cu41–O44–C44–O42	–1,8(1,1)
Cu21–O22–C23–O24	0,2(1,0)	Cu41–O44–C44–C43	–176,9(5)
Cu21–O22–C23–C24	–179,1(4)	O41–C41–C42–Cl41	174,5(5)
O21–C21–C22–Cl22	11,9(9)	O43–C41–C42–Cl41	–7,1(9)
O22–C23–C24–Cl21	–176,5(5)	Cl42–C43–C44–O42	16,4(1,0)
O24–C23–C24–Cl21	4,1(9)	Cl42–C43–C44–O44	–168,2(5)

§ 11. ŽIVOTOPIS

Osobni podatci

Ime i prezime: Ivana Pavličić

Datum rođenja: 30. studenoga 1989.

Mjesto rođenja: Zagreb

Obrazovanje

1996–2004 Osnovna škola Lovre pl. Matačića, Zagreb

2004–2008 Gornjogradska gimnazija, Zagreb

2010–2018 Integrirani studij biologije i kemije, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Nagrade i priznanja

2016 Rektorova nagrada za akademsku godinu 2015./2016. za timski, znanstveni i umjetnički rad opere "*Agrippina*"; zajednički projekt studenata Sveučilišta u Zagrebu

Sudjelovanja u popularizaciji znanosti

2014 Noć biologije

2015 i 2016 Otvoreni dan kemije

Sudjelovanja na znanstvenim skupovima

I. Pavličić, R. Biba, N. Smrečki, I. Pulić, D. Matković-Čalogović, Z. Popović, Kompleksi Co(III), Ni(II) i Cu(II) s *N*-cikloheksiliminodiacetamidom, XXIV. Hrvatski skup kemičara i kemijskih inženjera, Zagreb, 2015, Knjiga sažetaka str. 98.

Ostalo

Tijekom studija, pod mentorstvom izv. prof. dr. sc. Nenada Judaša, počela je voditi radionice *E*-škole kemije koje su održavane u Varaždinu, Čakovcu, Križevcima i Pazinu. Sudjelovala je u praktikumskoj nastavi studijskog smjera *Znanosti o okolišu* pod vodstvom doc. dr. sc. Ivice Đilovića i izv. prof. dr. sc. Nenada Judaša.

Osim toga, radila je i kao edukator u Zoološkom vrtu grada Zagreba.