

Praktikum iz primene računara u hemiji

Miloš Milčić

Goran Janjić

Beograd, 2014.

Autori teksta

dr Miloš Milčić, docent, Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu

dr Goran Janjić, naučni saradnik, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu

Praktikum iz primene računara u hemiji

Prvo izdanje

Recenzenti

dr Snežana Zarić, redovni profesor, Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu

dr Ivana Vasiljević, docent, Rudarsko-geološki fakultet, Univerzitet u Beogradu

dr Miloš Mojović, vanredni profesor, Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu

Ovaj praktikum je odlukom Nastavno-naučnog veća Hemijskog fakulteta u Beogradu od 13. februara 2014. godine prihvaćen kao pomoćni udžbenik.

Izdavač: Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu

Tiraž 300 primeraka

Štampa: Štamparija Goragraf, Beograd

ISBN 978-86-7220-061-4

Računari su postali sastavni deo naših života. Jedno kratko istraživanje, koje su sproveli autori ovog praktikuma, je pokazalo da se u svakoj laboratoriji našeg fakulteta nalazi po barem jedan računar. Tako da, kada ulazite u neku hemijsku laboratoriju, možete biti sigurni da ćete u njoj naći rešo, vodeno kupatilo, plamenik, stakleno posuđe i računar. Hemičari koriste računare na najrazličitije načine: vode inventar posuđa i hemikalija u laboratoriji, komuniciraju sa kolegama iz celog sveta, razmenjuju znanja i iskustva na forumima, informišu se o najnovijim naučnim dostignućima iz hemijskih časopisa, pripremaju dokumenta sa svojim rezultatima za objavljivanje u časopisima, obrađuju rezultate merenja itd.

Neki hemičari, među kojima su i autori ovog praktikuma, su potpuno zamenili laboratoriju računarima. Takvi hemičari se zovu teorijski ili računarski hemičari. Računarski hemičari koriste veoma složene računarske proračune da bi simulirali ponašanje atoma, molekula ili jona u realnim sistemima. Godine 2013. je drugi put Nobelova nagrada iz hemije dodeljena za istraživanja u oblasti teorijske i računarske hemije.

Cilj predmeta Osnovi primene računara u hemiji je da, prvenstveno, obučiti studente prve godine da koriste računar za uspešno rešavanje zadatka sa kojima će se sretati tokom studija.

Na ovom kursu ćete naučiti kako da napravite neki dokument iz hemije (seminarski rad, esej, završni rad), kako da ubacite jednačine reakcija i dijagrame u taj rad, kako da nacrtate strukturu hemijskih jedinjenja, mehanizam hemijske reakcije i još mnogo drugih stvari. Takođe, ćete naučiti kako da sredite i grafički prikazete rezultate svojih eksperimenata, kako da rešavate zadatke i vršite proračune pomoću programa za tabelarne kalkulacije, gde na Internetu da nađete relevantne informacije o nekoj temi iz hemije, kako se pretražuju hemijske banke podataka i šta sve možete naći u njima. Na kraju, daćemo vam samo nagoveštaj mogućnosti računarske hemije, da Vas zainteresujemo za kurseve koje ćete slušati na višim godinama.

Veliku zahvalnost dugujemo recenzentima na korisnim sugestijama. Posebno želimo da se zahvalimo dr Snežani Zarić koja je svojim znanjem i iskustvom iz oblasti Računarske hemije značajno doprinela popravljajući kvaliteta teksta.

Hvala i našem dragom kolegi, dr Milanu Nikoliću koji je strpljivo pročitao ceo praktikum i ukazao na greške u tekstu. Takođe, zahvaljujemo se Dubravki, Vesni, Jeleni, Draganu, Peđi, Dušanu M., Ivani i Dušanu V. na pomoći prilikom pisanja ovog praktikuma.

SADRŽAJ

Vežba 1. Računari, delovi računara i operativni sistemi	1
Vežba 2. <i>Microsoft Word</i> - osnovni pojmovi	15
Vežba 3. <i>Microsoft Word</i> - unos i formatiranje teksta	27
Vežba 4. <i>Microsoft Word</i> - rad sa tabelama, slikama, umetanje simbola i formula	53
Vežba 5. <i>Microsoft Word</i> - dodaci za hemičare	75
Vežba 6. <i>Microsoft Excel</i> - osnovni pojmovi	87
Vežba 7. <i>Microsoft Excel</i> - rad sa formulama	103
Vežba 8. <i>Microsoft Excel</i> - izrada dijagrama	121
Vežba 9. Hemijske baze podataka	135
Vežba 10. Crtanje strukturnih formula - <i>ACD/ChemSketch</i>	153
Vežba 11. <i>ACD/ChemSketch</i> - režim <i>Draw</i>	171
Vežba 12. <i>ArgusLab</i> - crtanje strukturnih formula i optimizacija geometrije	183
Vežba 13. <i>ArgusLab</i> - energije izomera, konformaciona analiza, međumolekulske interakcije	201
Vežba 14. Baze podataka sa strukturama molekula	213
Dodatak 1 Pravila pisanja teksta na računaru	225
Dodatak 2. Prečice koje se koriste u programu <i>Word</i>	227
Dodatak 3. <i>Unicode</i> kodovi nekih najčešće korišćenih simbola	230
Dodatak 4. Funkcije programa <i>Excel</i> iz kategorije <i>Math & Trig</i>	232
Dodatak 5. Funkcije programa <i>Excel</i> iz podkategorije <i>Statistical</i>	234
Literatura	237

Vežba 1.

Računari, delovi računara i operativni sistemi

Većina korisnika danas koristi računar kao crnu kutiju, startuju programe, koriste ih, a da pritom, nemaju predstavu šta se zaista dešava u toj kutiji. Pogrešno korišćenje računara je veoma česta pojava. Zbog toga broj opsanih virusa koji mogu da vam unište mesece i godine rada virtoglavo raste, a prevare preko Interneta su postale redovna pojava. Naravno ne mora svako ko koristi računar da bude programer ili stručnjak za mikročipove, ali neko elementarno znanje o načinu rada, konstrukciji računara i operativnim sistemima koji ih pokreću je poželjno i potrebno.

Istorija računarstva

Tabela 1.1 Bitni datumi u razvoju računara.

Godina	Izumitelj / Izum	Opis događaja
1936	Konrad Zuse / Z1 računar	Prvi računar koji je mogao da se programira
1942	John Atanasoff i Clifford Berry / ABC računar	Prvi elektronski-digitalni računar
1944	Howard Aiken i Grace Hopper / Harvard Mark I računar	Težina 5 tona. Koristio vakumske cevi. Množio dva broja 5 sekundi.
1946	John Presper Eckert & John W. Mauchly / ENIAC 1 računar	Prvi komercijalni računar napravljen za vojsku. Koristio vakumske cevi umesto elektromagnetnih prekidača. Težina 30 tona. Kada je prvi put uključen izazvao pad napona u celom regionu.
1947/48	John Bardeen, Walter Brattain i Wiliam Shockley / Tranzistor	Nije računar, ali je ovaj izum veoma značajan za računare.
1953	International Business Machines (IBM) / IBM 701 EDPM računar	IBM se pojavljuje na tržištu računara.
1954	John Backus i IBM / FORTRAN	Razvijen prvi uspešan programski jezik visokog nivoa. U upotrebi i danas.

1958	<i>Jack Kilby i Robert Noyce /</i> Integrirano kolo	Poznatije kao "čip".
1962	<i>Steve Russell & MIT /</i> Svemirski rat	Prva igra na računaru.
1969	ARPAnet	Internet.
1970	Intel 1103 memorija	Dinamička RAM memorija.
1971	<i>Faggin, Hoff i Mazor /</i> Intel 4004 Mikroprocesor	Prvi mikroprocesor.
1974/75	Scelbi, Mark-8 Altair i IBM 5100	Prvi jeftiniji računari za manje korisnike.
1976/77	Apple I, II i TRS-80 i Commodore Pet	Nova generacija "jeftinih" računara.
1978	<i>Dan Bricklin & Bob Frankston /</i> VisiCalc Spreadsheet program	Prvi program za tabelarne kalkulacije.
1979	<i>Seymour Rubenstein & Rob Barnaby /</i> WordStar program	Prvi program za obradu teksta.
1981	<i>IBM /</i> IBM PC	Prvi personalni računar.
1981	<i>Microsoft /</i> MS-DOS operativni sistem	Prvi operativni sistem za koji nije potrebna diploma iz računarstva da bi se koristio.
1983	Apple Lisa računar	Prvi kućni računar sa grafikom.
1984	Apple Macintosh	Još jeftiniji kućni računar sa grafikom.
1985	Microsoft Windows	Prvi operativni sistem za svakoga.

U tabeli 1.1 su prikazani bitni datumi u razvoju računara. Ako bolje pogledate tabelu 1.1 videćete da su se u početku razvijali samo fizički delovi računara odnosno hardver (engl. *Hardware*). Kako je harver postajao jeftiniji tako su počeli da se razvijaju i računarski programi (engl. *Software*). U početku su se razvijali samo operativni sistemi koji su kontrolisali procese u samom računaru. Nešto kasnije počeli su da se razvijaju i aplikativni programi, kao što su programi za tabelarne kalkulacije i obradu teksta.

Zanimljivost: Godine 1962. proizvođač računara DEC je poklonio Masačuseckom tehnološkom institutu (MIT) jedan od svojih računara u nadi da će stručnjaci sa instituta uspeti da naprave neke odlične programe koji bi povećali prodaju računara. Umesto toga, programer Stiv Rasel (*Steve Russell*) je na tom računaru napravio prvu računarsku igru "*Spacewar*". Stiv Rasel je bio hemičar! Repliku ove igre možete igrati i danas na:

http://inventors.about.com/od/sstartinventions/a/Spacewar_2.htm.

Delovi računara

Modemi računari se sastoje od sistemske jedinice (kutija u kojoj se nalazi matična ploča) i periferije. Periferiju čine svi delovi računara koji nisu u sistemske jedinici kao što su: monitor, tastatura, miš, štampač, zvučnici.

Mikroprocesor

Centralni deo svakog računara čini centralna procesorska jedinica (engl. *Central Processing Unit, CPU*) ili skraćeno procesor. Procesor je veoma složen spoj elektronskih kola koji izvršava programske instrukcije. Svaki procesor se sastoji iz dva dela:

- Kontrolne jedinice - pomoću električnih signala daje instrukcije celom sistemu da izvršava programske instrukcije. Kontrolnu jedinicu možemo zamisliti kao dirigenta koji diriguje orkestru kad i kako da svira. Kontrolna jedinica stalno komunicira sa aritmetičko-logičkom jedinicom i sa memorijom računara.
- Aritmetičko-logičke jedinice - sadrži električna kola koja izvršavaju sva aritmetička i logička izračunavanja. Ona može da izvršava samo četiri vrste aritmetičkih izračunavanja (sabiranje, oduzimanje, množenje i deljenje) i tri vrste logičkih poređenja (manje od, veće od i jednako). Aritmetičko-logička jedinica je jedini deo računara koji zaista može da računa. Svi programi koji se izvršavaju, izvršavaju se preko proračuna koje obavlja ova jedinica.

U procesoru se nalaze i specijalne memorijske jedinice - registri. Registri su veoma brza memorija malog kapaciteta (svaki registar može da primi samo jednu računarsku reč podataka od 32 ili 64 bita). Aritmetičko-logička jedinica radi proračune sa podacima koji su smešteni u registre i izračunate vrednosti zapisuje nazad u registre. Kontrolna jedinica određuje koji će se podaci zapisivati u registre i računati u aritmetičko-logičkoj jedinici.

Memorija

Češći izraz za primarnu memoriju je RAM memorija (engl. *Random Access Memory*). Ova memorija čuva podatke i instrukcije pre i nakon obrade u procesoru. Ovo je prilično brza memorija (mada znatno sporija od registra) tako da podaci sa nje mogu veoma brzo da se pošalju

procesoru na obradu. Podaci iz RAM memorije se prvo smeštaju u registre a zatim obrađuju u aritmetičko-logičkoj jedinici. RAM memorija je memorija velikog kapaciteta. Ova memorija nije stalna memorija, kada se isključi računar svi podaci iz RAM memorije se brišu.

Kod modernih računara postoji još jedna vrsta memorije - predmemorija odnosno keš memorija (engl. *Cash*). Keš memorija je veća i sporija od registra i manja i brža od RAM memorije. Uloga keš memorije je da ubrza računar. Računar predviđa naš naredni korak i onda podatke i instrukcije potrebne za izvršavanje tog koraka smešta iz RAM u keš memoriju. Pošto je keš memorija znatno brža od RAM memorije, ukoliko je računar ispravno predvideo naš sledeći korak, ta instrukcija će se izvršiti veoma brzo. Na primer, na mom računaru je trenutno otvoren program za obradu teksta preko koga ja unosim ovaj tekst. Svi potrebni podaci i instrukcije za rad ovog programa se nalaze u RAM memoriji. Računar predviđa da će moj sledeći potez biti unos nekog slova ili znaka sa tastature pa je sve instrukcije za unos podataka sa tastature prebacio u keš memoriju. Na taj način ceo sistem brže radi. Kada bih ja sada uradio nešto što računar nije očekivao, na primer pomerio miša, instrukcije za to bi računar morao da potraži u RAM memoriji i to bi trajalo nešto duže. Naravno, produženo vreme koje je potrebno računaru da iz RAM memorije dobije podatke za pomeranje miša ja neću ni primetiti. Programi koji rade ogromne i veoma zahtevne proračune su specijalno optimizovani da što bolje koriste keš memoriju.

Sekundarna memorija je najsporija memorija ali zato najvećeg kapaciteta. Za razliku od primarne memorije sekundarna memorija je stalna, odnosno podaci zapisani u njoj ostaju i nakon gašenja računara. Najčešći oblik sekundarne memorije je tvrdi disk (engl. *Hard Disc*) mada se i svi optički diskovi (CD i DVD) kao i kartice (USB) svrstavaju u sekundarnu memoriju. U sekundarnoj memoriji se nalazi operativni sistem, svi programi i datoteke koje imate na računaru. Kada se pokrene neki program glavne instrukcije tog programa se iz sekundarne memorije prebacuju u RAM memoriju. Što je veća RAM memorija više instrukcija će moći da se smesti u nju. Idealno je da se sve programske instrukcije jednog programa smeste u RAM memoriju. Kada procesor zatraži neku instrukciju ili podatak koji se ne nalazi u RAM memoriji, tada se prvo ta instrukcija ili podatak prebacuju sa sekundarne memorije u RAM memoriju, pa iz nje u procesor. Pošto je sekundarna memorija veoma spora doći će do zastoja u radu računara.

Instrukcije i podaci svih otvorenih programa se smeštaju u RAM memoriju, tako da, ako je otvoreno previše programa u jednom trenutku, računar će usporiti rad. Pošto nema dovoljno RAM memorije za smeštanje svih programa, deo instrukcija svakog programa će biti na sekundarnoj memoriji i računaru će trebati vremena da ih prebaci u RAM memoriju kada mu zatrebaju.

Svi delovi računara su povezani preko matične ploče. Procesor, keš i RAM memorija su direktno uključeni u matičnu ploču čime se ostvaruje veoma brza komunikacija. Disk i ostale jedinice sekundarne memorije su kablom povezane na matičnu ploču. Na matičnoj ploči se takođe nalaze i priključci za periferne uređaje.

Kako radi računar?

Ilustrovaćemo jednom slikovitom analogijom kako instrukcije i podaci putuju kroz računar:

Ako hoćemo da napravimo salatu biće nam potrebni:

- frižider u kome držimo povrće;
- radna ploča na koju ćemo smestiti povrće pre nego ga iseckamo;
- daska za sečenje na kojoj ćemo seckati povrće;
- ivica daske za sečenje na kojoj ćemo privremeno odlagati delove iseckanog povrća dok ga ne prebacimo u činiju;
- recept za salatu kako bi znali koje povrće da seckamo;
- činija u koju stavljamo iseckano povrće;
- mesto u frižideru da stavimo salatu kada je napravimo.

Salatu pravimo na sledeći način: uzmemo povrće iz frižidera i stavimo ga na radnu ploču; pročitamo recept i na osnovu njega odredimo koje ćemo povrće prvo seckati; stavimo to povrće na dasku za sečenje; seckamo povrće i ono nasečeno privremeno ostavljamo na ivicu daske za sečenje; kada završimo sečenje jedne vrste povrća prebacimo ga sa ivice daske za sečenje u činiju. Kada iseckamo svo povrće i napravimo salatu stavimo činiju sa salatam nazad u frižider i/ili direktno na sto.

Frižider je ekvivalent sekundarne memorije, može da čuva puno povrća dugo vremena. Radna ploča je ekvivalent matične ploče, sve što se radi radi se na njoj. Daska za sečenje i nož su aritmetičko-logička jedinica, oni obavljaju sav posao. Recept je kontrolna jedinica - diriguje kako će posao biti obavljen. Prostor na radnoj ploči je RAM memorija, povrće smo prebacili tu pre početka sečenja. Naravno, mnogo brže ćemo uzimati povrće sa radne ploče nego da svaki put idemo do frižidera, ali na radnu ploču može da stane mala količina povrća i to veoma kratko vreme. Ivica daske za sečenje na koju smeštamo delove povrća tokom sečenja je registar, možemo mu veoma brzo pristupiti ali mu je kapacitet mali. Činija je privremeni registar, u njoj se nalazi salata dok se ne vrati nazad u frižider (snimi se na disk) ili prebaci na sto (pošalje na neku izlaznu jedinicu, na primer monitor).

Šta se dešava u računaru kada otvorimo program i počnemo da ga koristimo?

Kada dva puta pritisnemo levim dugmetom miša na prečicu nekog programa, u računaru počinju da se dešavaju veoma zanimljive stvari:

- Programske instrukcije i podaci se prebacuju sa diska u RAM (i mali deo u keš) memoriju. Ovo obično traje neko vreme i moraćete da sačekate par sekundi.

- Jednom kada su neophodne instrukcije i podaci u RAM memoriji procesor počinje da izvršava ciklus od četiri koraka za svaku instrukciju:
 1. kontrolna jedinica uzima instrukcije iz memorije;
 2. kontrolna jedinica dekodira (čita) preuzete instrukcije i određuje da se potrebni podaci prebace iz RAM memorije u registre pa u aritmetičko-logičku jedinicu; ova prva dva koraka se zovu instrukciono vreme ili I-vreme;
 3. aritmetičko-logička jedinica obrađuje podatke (sabira, oduzima, deli, množi ili upoređuje) i dobija odgovarajuće rezultate;
 4. aritmetičko-logička jedinica skladišti izračunate rezultate u registar ili u RAM memoriju; koraci 3 i 4 se zovu izvršno vreme ili E-vreme.
- Kontrolna jedinica na osnovu instrukcija šalje rezultate iz RAM memorije na izlaznu jedinicu (monitor) ili ih snima na disk.

Kombinacija I-vremena i E-vremena se zove mašinski ciklus.

Još nekoliko napomena o hardveru

Ukoliko ste kupovali računar primetili ste da se brzine procesora izražavaju u hercima (Hz).

Jedinica herc je $\frac{1}{\text{sec}}$ i njom se izražava broj operacija koje procesor može da obavi u sekundi.

Moderni računari imaju brzine procesora oko 3 GHz, što znači da procesor može da izvrši 3 milijarde operacija u sekundi. Naravno, brzina računara ne zavisi samo od brzine procesora. Već ste videli da se svi podaci pre obrade u procesoru moraju smesti u RAM memoriju, a pošto procesor veoma brzo obrađuje podatke, u slučaju da računar ima malo RAM memorije može se desiti da procesor "čeka" da podaci sa diska stignu do njega. Savet: ukoliko kupujete računar nemojte samo da gledate broj GHz procesora, jer ukoliko su vam ostale komponente spore ili malog kapaciteta može se lako desiti da vaš veoma skupi ultrabrzi procesor radi samo 50% vremena, a ostalo vreme da provede čekajući na podatke iz periferije.

Operativni sistemi

Najjednostavniji odgovor na pitanje šta je operativni sistem je: operativni sistem je apsolutni šef u računaru. To je program koji upravlja hardverom računara i omogućava ostalim programima da rade na takav način da su resursi računara maksimalno iskorišćeni. Operativni sistem je najvažniji program u računaru, bez njega ostali programi (nazvani aplikativni programi) ne bi mogli da rade. Danas skoro svi računari imaju operativni sistem (izuzev veoma jednostavnih računara u već mašinama i mikrotalasnim pećnicama koji su specijalizovani za izvršavanje veoma jednostavnih programa).

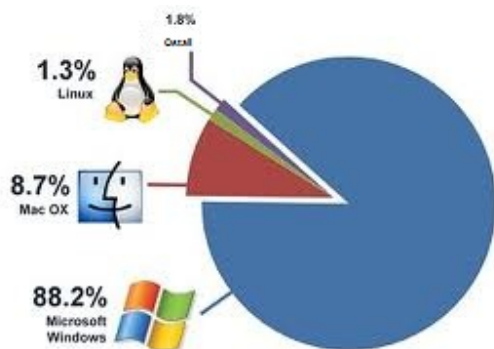
Tipovi operativnih sistema

Na osnovu vrste računara koje kontrolišu i vrsti aplikacija koje podržavaju operativni sistemi se mogu podeliti u četiri tipa:

- Operativni sistemi koji rade u realnom vremenu (engl. *Real-time operating systems*) se koriste da kontrolišu procese u složenim mašinama, naučnim instrumentima ili industrijskim sistemima. Ovi operativni sistemi obično imaju veoma skromne mogućnosti komunikacije sa korisnikom i često su potpuno "zatvoreni" za bilo kakve izmene. Sa ovim tipom operativnih sistema ćete se veoma retko sretati.
- Jedan korisnik, jedan zadatak (engl. *Single-user, single task*) operativni sistemi su podešeni tako da jedan korisnik može u jednom trenutku da obavlja samo jedan zadatak na računaru. Ovakvi operativni sistemi se nalaze u mobilnim telefonima koji su bili u upotrebi pre pojave telefona sa ekranom osetljivim na dodir.
- Jedan korisnik, više zadataka (*Single-user, multi-tasking*) operativni sistemi su danas najzastupljeniji operativni sistemi na stonim (engl. *Desktop*), prenosnim (engl. *Laptop*) računarima i mobilnim telefonima ("Smart" telefonima). *Microsoft Windows, MacOS* i *Android* su primeri ovakvih operativnih sistema. Oni dozvoljavaju jednom korisniku da u isto vreme izvršava više programa. Na primer, trenutno se na računaru koji koristim prebacuje jedna datoteka sa Interneta, izvršava se program za puštanje muzike i ja ukucavam ovaj tekst u programu za unos teksta.
- Operativni sistemi za više korisnika (*Multi-user*), dozvoljavaju da resurse računara istovremeno koristi više korisnika. Ovi operativni sistemi se nalaze na velikim i jakim računarskim sistemima kao što su super-računari. U jednom trenutku na ovakvim računarima može raditi i po više stotina korisnika, a operativni sistem mora da se postara da svaki svaki korisnik ima na raspolaganju potrebnu količinu računarskih resursa. Računarski klasteri koje koriste istraživači Hemijskog fakulteta koji se bave računarskom hemijom rade pod operativnim sistemima za više korisnika. Takođe, serverski računar na kome se nalaze smešteni vaši studentski portali je primer takvog računara i operativnog sistema. *Unix* i *Linux* su najpoznatiji operativni sistemi za više korisnika.

Danas najveći deo tržišta operativnih sistema pokriva operativni sistem kompanije *Microsoft - Windows* (slika 1.1). Ovaj operativni sistem se nalazi i na računaru ispred vas. Drugi po zastupljenosti je operativni sistem kompanije *Apple - MacOX* koji se ugrađuje u računare koje proizvodi ova kompanija. Tek na trećem mestu se nalazi besplatan operativni sistem *Linux*, koji je, po mišljenju autora ovog praktikuma, najbolji operativni sistem trenutno na tržištu.

Pre nego što se detaljnije upoznamo sa *Windows* operativnim sistemom, pogledajmo šta operativni sistemi rade i koja su njihova glavna zaduženja.



Slika 1.1 Zastupljenost operativnih sistema na tržištu.

Kada se uključi računar, prvo se startuje program koji se sastoji od niza instrukcija koje se čuvaju u stalnoj memoriji računara (*Read Only Memory*, ROM). Ovaj program (često se zove *BIOS* ili *Firmware*) proverava da li su sve hardverske komponente računara prisutne i da li sve rade. Prvo se proverava procesor, zatim RAM memorija i osnovni ulazno/izlazni sistemi (*Basic Input-Output Systems*, BIOS). Rezultati ove provere se ispisuju na monitoru (slika 1.2).



Slika 1.2 Učitavanje programa za proveru sistema iz ROM memorije.

Ukoliko su sve komponente prisutne i ispravne počinje se sa aktiviranjem tvrdog diska. Odmah nakon aktiviranja diska, računar na specijalnom mestu na disku pronalazi prvi deo operativnog sistema, mali program koji se zove *Bootstrap Loader*. Uloga ovog programa je da učita osnovne komponente operativnog sistema u RAM memoriju i da mu omogući da započne sa radom. Za to je potrebno da uspostavi komunikaciju sa perifernim uređajima, što se postiže učitavanjem osnovnih programa za komunikaciju procesora sa perifernim uređajima - drajverima (engl. *drivers*). Takođe, određuje se deo memorije u kome će biti smešten operativni sistem i

podešavaju se još neki bitni parametri. Nakon toga, operativni sistem preuzima kontrolu nad računarom.

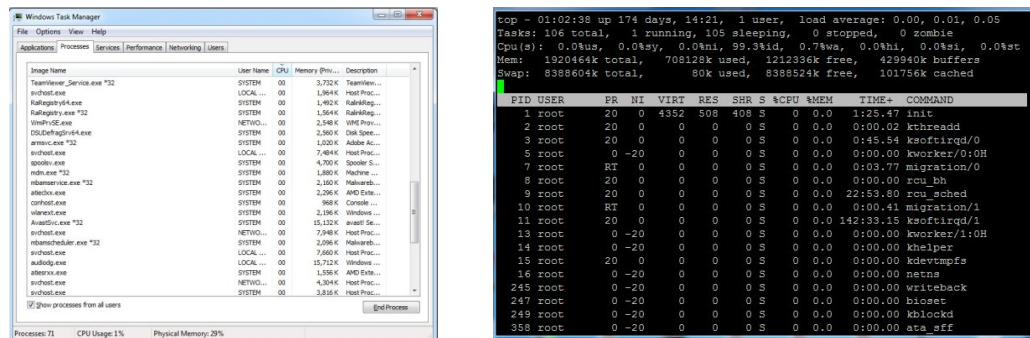
Zadaci operativnog sistema su podeljeni u šest kategorija:

1. upravljanje procesorom;
2. upravljanje primarnom memorijom (RAM);
3. upravljanje uređajima (periferijom);
4. omogućavanje rada aplikativnim programima (engl. *Application Program Interface*);
5. upravljanje sekundarnom memorijom;
6. omogućavanje komunikacije između korisnika i računara (engl. *User Interface*).

Upravljanje procesorom

Operativni sistem bi trebalo da obezbedi da svaki proces i aplikativni program dobiju dovoljno procesorskog vremena da bi normalno radili i da iskorišćenost procesora bude što veća.

Osnovna jedinica kojoj se dodeljuje procesorsko vreme je proces. Ukoliko se izvršava neki program to nije jedan proces, već se izvršavanje tog programa sastoji od velikog broja procesa, koji uključuju: stvarno računanje potrebno programu, komunikaciju sa monitorom radi ispisivanja rezultata, komunikaciju sa diskom radi snimanja rezultata itd. Takođe, nevezano od programa koji se trenutno izvršava u pozadini radi još veliki broj procesa kojih korisnici nisu ni svesni (upravljanje diskom, memorijom, anti-virusna zaštita, komunikacija sa tastaturom, mišem...). Na slici 1.3 prikazani su procesi koji se desavaju u pozadini na *Windows* i *Linux* operativnim sistemima. Ove procese možete videti ako pritisnete Ctrl+Alt+Del na računarima sa *Windows* operativnim sistemom odnosno komandu **top** pod *Linux* operativnim sistemom.



Slika 1.3 Mali deo procesa koji se izvršavaju pod *Windows* i *Linux* operativnim sistemom kada ne radi nijedan aplikativni program.

U principu, operativni sistem kontroliše procese a ne programe. Kod operativnih sistema koji mogu da izvršavaju samo jedan zadatak (*single task*) upravljanje procesima je prilično jednostavno. Uvek najveći prioritet imaju procesi programa koji se izvršava i oni se jedino

privremeno suspenduju ukoliko dođe do prekida od strane nekog drugog programa ili dela hardvera ili ukoliko sam korisnik prekine izvršavanje. Ukoliko neki drugi program ili deo hardvera pošalje poruku da mu je potrebna asistencija procesora, operativni sistem određuje prioritet i odlučuje da li će zaustaviti izvršavanje glavnog programa ili ne. Na primer, ukoliko neki program prijavi da postoji nadogradnja (*Update*) za njega na Internetu, dobar operativni sistem sigurno neće zaustaviti izvršavanje glavnog programa zbog toga, ali ukoliko memorija prijavi da ima problem sa upisom ili čitanjem podataka, svi procesi se zaustavljaju i procesor se potpuno posvećuje rešavanju tog problema.

Operativni sistemi koji mogu da izvršavaju više zadataka (*multitasks*) imaju znatno teži posao. Oni moraju da upravljaju procesima na takav način da se stekne utisak da svi programi rade istovremeno. Procesor može da izvršava samo jedan proces u jednom trenutku (računari sa više procesora mogu, naravno, da izvršavaju više procesa). Zato operativni sistem mora više hiljada puta u sekundi da prebacuje procese u i iz procesora kako bi se dobio utisak paralelnog izvršavanja programa. Ukoliko je potrebno da se dva procesa izvršavaju istovremeno, operativni sistem prvo dodeli prvom procesu nekoliko mašinskih ciklusa. Nakon toga, operativni sistem zaustavlja taj proces, pravi kopije svih registra, i beleži dokle se stiglo sa izvršavanjem procesa. Sve to prebacuje u RAM memoriju a iz nje u procesor (registre) prebacuje instrukcije i podatke potrebne za izvršavanje drugog procesa. Zatim se drugi proces izvršava određeni broj ciklusa, zaustavlja i prebacuje u RAM memoriju i nastavlja sa izvršavanjem prvog procesa. I tako nekoliko hiljada puta u sekundi.

Naravno, ovo prebacivanje između dva procesa zahteva vreme. Ključna stvar kod dobrih operativnih sistema je da na takav način postave procese i dodele cikluse procesima da se što je moguće manje vremena gubi u prebacivanju. Ipak, bez obzira na operativni sistem, ako otvorite 10 aplikacija, operativni sistem će se truditi da svih 10 radi istovremeno (jer će misliti da vam svih 10 aplikacija treba, što je nemoguće!) i prečesto će prebacivati sa procesa na proces. Veći deo vremena će se trošiti na prebacivanje podataka (prazan hod) nego na stvaran rad procesora pa će izgledati kao da računar sporo radi. Zatvorite pet nepotrebnih aplikacija i videćete da će računar znatno ubrzati.

Upravljanje memorijom

Zadatak operativnog sistema je da se postara da svaki program koji se izvršava ima dovoljno memorije, da se memorijske adrese dva programa ne preklapaju, kao i da optimizuje različite memorije računara za najefikasniji rad. Takođe, sam operativni sistem ne sme da zauzima puno memorije. Kvalitet operativnog sistema se ocenjuje na osnovu toga kako upravlja memorijom i procesorom. Na računarima sa puno RAM memorije, pri normalnom radu, verovatno nećete videti razliku između dobrih i loših operativnih sistema zato što će svi procesi imati dovoljno memorije. Međutim, na računarima sa malo memorije brzina računara će zavisiti od načina na

koji operativni sistem upravlja memorijom. Jedan dobar trik kojim se koriste svi operativni sistemi kada im ponestane memorije je da upotrebe virtualnu memoriju. Virtualna memorija je specijalno dodeljen prostor na disku koji simulira RAM memoriju. Operativni sistem u ovu memoriju smešta sve instrukcije i podatke koji se ne koriste i za koje predviđa da se neće uskoro koristiti. Na primer, ako radite u jednom programu a drugi program je otvoren ali se ne koristi tada se instrukcije i podaci drugog programa smeštaju u virtuelnu memoriju na disku. Međutim kada pozovete taj drugi program operativni sistem će početi da prebacuje podatke iz virtuelne memorije u RAM. Pošto je disk veoma spor to prebacivanje će potrajati neko vreme a vama će se činiti da je računar usporio. Pojedini proizvođači operativnih sistema su, lukavo, smislili da animiraju pojavljivanje drugog programa (kao da se postepeno širi po ekranu, ili da doleće sa dna ekrana) kako bi maskirali ovaj zastoj u radu.

Upravljanje uređajima

Operativni sistem komunicira sa uređajima koji nisu na matičnoj ploči preko specijalnih programa koji se zovu drajveri. Drajveri služe kao prevodioci koji prevode električne signale sa uređaja u programske instrukcije koje operativni sistem razume. Prilikom instalacije, operativni sistemi sadrže samo osnovne drajvere koji su dovoljni da se pokrene uređaj. Međutim, da bi dobili maksimalne performanse uređaja, potrebno je instalirati njegove originalne drajvere. Prilikom upravljanja uređajima, operativni sistem odlučuje kada će se koji proces izvršavati, primati sa ulaznog uređaja i slati na izlazni uređaj. Na primer, ako ja pritisam tipke na tastaturi, informacija o tome se ne može odmah proslediti procesoru i obraditi ukoliko je procesor zauzet. Operativni sistem tu informaciju zapisuje u specijalnu datoteku koja se zove *Buffer* i zaustavlja procese koji se rade u procesoru. Zatim, šalje podatke iz datoteke *Buffer* procesoru i nakon obrade slova se ispisuju na ekranu.

Omogućavanje aplikativnim programima da rade (*Application Program Interface, API*)

Već smo pomenuli da operativni sistem stoji između aplikativnog programa i hardvera. Aplikativni program ne zna koji se hardver nalazi u računaru, operativni sistem je zadužen da prevede instrukcije i podatke aplikativnog programa na jezik hardvera. Verovatno ste primetili da ne postoje programi koji rade samo na *Intel* ili samo *AMD* procesorima. Ali zato postoje programi za *Windows*, *Linux*, *MacOS* operativni sistem. Ako pokušate program napisan za *Windows* operativni sistem da instalirate na *MacOS* nećete uspeti.

Upravljanje sekundarnom memorijom

Kada radite na nekom dokumentu i izaberete komandu za snimanje rezultat će biti da se datoteka snimila na disku. Međutim operativni sistem je morao da uradi puno toga bi se ova, naizgled, jednostavna komanda sprovela u delo. Prvo je morao da pretraži disk da bi našao slobodno mesto za snimanje datoteka. Zatim je morao da unese poziciju nove datoteke, njeno ime, tip datoteke, ko ima pravo pristupa datoteci i vreme nastanka ili izmene datoteke u sistem datoteka računara kako bi sledeći put mogao brzo da pronađe datoteku. Na kraju je upisao na početak datoteke informacije koje će služiti za njenu identifikaciju i tek onda dozvolio podacima da budu upisani na disk. Od načina na koji operativni sistem upravlja sekundarnom memorijom zavisi brzina računara.

Komunikacija sa korisnikom (*User Interface*)

Delovi operativnog sistema zaduženi za komunikaciju sa korisnikom ne spadaju u samu srž operativnog sistema (srž operativnog sistema se zove *Kernel*) već se nalaze u sloju iznad. To je set programa preko koga korisnik izdaje naredbe operativnom sistemu. Operativni sistem te naredbe prosleđuje kernelu, koji ih prosleđuje hardveru na izvršavanje.

U poslednje dve decenije najzastupljeniji operativni sistemi su potpuno prešli na grafički način komunikacije sa korisnikom (*Graphical User Interface*, GUI). Ovakav način komunikacije sa korisnikom je znatno olakšao rad sa računarima zato što korisnik više nije morao da pamti komande i argumente kojima bi pokretao programe i izvodio druge operacije. Za nešto što je u početku razvoja personalnih računara trebalo otkucati tri reda komandi, danas je dovoljno samo dva pritiska levog dugmeta miša. Grafički način komunikacije sa korisnikom je podjednako zaslužan za pojavu masovne upotrebe računara kao i drastičan pad cena hardvera.

Windows operativni sistem

Windows operativni sistem je najzastupljeniji operativni sistem na personalnim računarima, sa preko 80% tržišta (podaci variraju u zavisnosti od izvora). Tajna uspeha ovog operativnog sistema je da je bio prvi operativni sistem za ljude koji nisu računarski stručnjaci. Glavna osobina ovog operativnog sistema je njegova jednostavnost i preglednost. Većina stvari u *Windows* operativnom sistemu se može uraditi samo pomoću miša. Za korišćenje ovog operativnog sistema nije potrebno nikakvo predznanje iz računarstva. Takođe, za računare pod *Windows* operativnim sistemom postoji odlična programska podrška zato što svaka kompanija koja želi da opstane na tržištu programa mora da pravi programe za ovaj operativni sistem. Mane

ovog operativnog sistema su što ima dosta propusta u zaštiti podataka, veliki broj virusa koji mogu prilično da naškode podacima na disku, nestabilnost u radu, količina memorije koju zauzima i veliki harverski zahtevi.

Sve vežbe na ovom kursu ćete raditi na računarima sa Windows operativnim sistemom. Još od 1995. godine i Windows 95 operativnog sistema, rad u ovom operativnom sistemu započinje pritiskom na dugme Start (slika 1.4).



Slika 1.4 Windows operativni sistem.

Upoznajmo se malo sa mogućnostima ovog operativnog sistema. Sa gornje desne strane liste koja se pojavljuje nakon pritiska na dugme Start nalaze se opcije za brzi pristup direktorijumima u kojima ćete čuvati većinu podataka. Izborom opcije *My Computer* moći ćete da vidite sve jedinice sekundarne memorije na vašem računaru.

Pomoću opcije *Control Panel* možete podešavati parametre rada vašeg računara. S obzirom da na računarima u Računarskoj laboratoriji imate ograničen pristup parametrima operativnog sistema, ova opcija vam neće puno koristiti.

Izborom opcije *All Programs* otvara se nova lista na kojoj se nalaze svi programi koji su instalirani na računaru. Programi samog operativnog sistema nalaze se u okviru direktorijuma *Accessories*. Ovde ćete naći program za crtanje i grafičku obradu slika *Paint*, program za unos teksta *Notepad*, kalkulator itd.

Ovde se takođe nalazi i opcija *Command Promt* pomoću koje možete zanemariti grafički korisnički interfejs i komunicirati sa operativnim sistemom pomoću tastature.

Zadatak 1: S obzirom da je ovo prvi termin vežbi red je da se upoznamo kao i da se podsetimo onoga što znamo o radu u *Windows* operativnom sistemu. Potrebno je da u okviru direktorijuma *My Documents* napravite novi direktorijum sa vašim imenom i prezimenom. U ovom direktorijumu ćete čuvati sve datoteke koje napravite na ovim vežbama, zato je potrebno da na svakom terminu sedite za istim računarom. Zatim je potrebno da u programu *Notepad* otkucate u nekoliko rečenica zašto ste se odlučili da studirate hemiju. Snimite dokument koji ste napravili u datoteku koja će se zvati *zasto_studiram.txt*

Zadatak 2: Veoma važna stvar pri radu sa računarima je korišćenje miša. Kao i sve ostalo, spretnost u korišćenju miša se postiže vežbanjem. Dobar način da vežbate korišćenje miša je crtanje slika u programu *Paint*. U okviru ovog zadatka potrebno je da u programu *Paint* nacrtate kuću ili zgradu. Crtež koji ste napravili snimite kao datoteku *kuca.jpg* u svom direktorijumu.

Datum

Potpis asistenta

Vežba 2.

Microsoft Word - osnovni pojmovi

Microsoft Word je program za unošenje i obradu teksta. Microsoft Word je deo mnogo većeg programskog paketa firme Microsoft - Microsoft Office. Programski paket Microsoft Office radi na računarima sa Windows operativnim sistemom i sastoji se iz više programa koji omogućavaju rad sa poslovnim i ličnim informacijama. Postoji osam različitih verzija Microsoft Office paketa (razlikuju se po programima koji su sadržani u paketu i ceni). Sve verzije obavezno sadrže programe Word i Excel, a najčešće i PowerPoint, Access i Outlook.



Word je program iz Microsoft Office paketa koji se najviše koristi. Program služi za unošenje i obradu teksta. Osim rada sa tekстом Word nudi brojne napredne opcije, kao što su rad sa tabelama, slikama, grafikonima i grafcima i različite načine uređivanja (formatiranja) teksta. Microsoft tvrdi da je danas preko 90% dokumenata u celom svetu otkucano u programu Word. Ukoliko je potrebno da nekome pošaljete dokument elektronskom poštom najsigurnije vam je da taj dokument otkucate u programu Word jer je najveća verovatnoća da će moći da ga otvori i pročita. Program Word, takođe, ima širok opus formata u kojima tekst može biti zapamćen, što omogućava njegovu veliku kompaktilnost i sa drugim računarima koji nemaju Microsoft Office paket. Ovaj praktikum je otkucan u programu Word.



Excel je program koji se se koristi za tabelarna izračunavanja i numeričku obradu podataka. Složeni proračuni sa velikim brojem podataka se mogu uraditi za nekoliko sekundi u programu Excel. Veoma lako se mogu napraviti formule, u kojima se definišu vrednosti i matematički operatori potrebni za razne vrste izračunavanja. Sam program sadrži i veliki broj unapred definisanih funkcija koje se mogu primeniti na unete podatke. Takođe, dobijeni rezultati se mogu veoma lako i pregledno grafički predstaviti pomoću dijagrama i grafika.



PowerPoint je grafički program koji služi za izradu prezentacija, kako poslovnih, tako i onih neformalnih. Skoro svi profesori Hemijskog fakulteta svoja predavanja imaju u obliku PowerPoint prezentacija. Osnovna karakteristika ovog programa je da je veoma jednostavan za korišćenje, a da kao rezultat daje vizuelno lepe i praktične prezentacije. U svoju prezentaciju možete jednostavno ubaciti slike, tabele i dijagrame. Takođe, u svoje slajdove možete ubaciti i razne animacije, tako da se određeni tekst ili slika pojavljuju na slajdu na poseban način (na primer, da uleću tokom prezentacije).



Access je program za upravljanje bazama podataka i služi za čuvanje i obradu velike količine podataka (na primer, inventara posuđa i hemikalija u nekoj instituciji, liste uplata i isplata, datoteka sa trodimenzionalnim strukturama molekula). U Računarskom centru


Hemijskog fakulteta se nalazi jedna velika baza podataka u kojoj se nalaze podaci o svim studentima Hemijskog fakulteta. Kada položite ispit iz na primer, Osnova primene računara u hemiji, profesor preko svog portala unese broj poena i ocenu na ispitu i ti podaci se direktno upisuju u banku podataka, što se odmah vidi i na vašem studentskom nalogu. *Access* omogućava da veoma lako i jednostavno upisujete nove podatke u već postojeću bazu podataka, kao i da pomoću posebnih upita izdvajate iz baze skup podataka koji vam je potreban (na primer, sve ocene jednog studenta ili ocene svih studenata iz jednog predmeta).

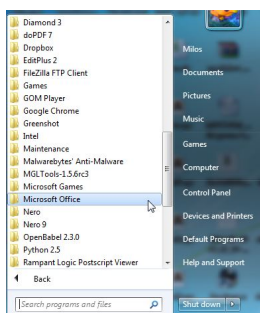


Outlook je program čija je prevashodna namena primanje i slanje elektronske pošte. Ovaj program vam omogućava i da na određeni način uređujete i grupišete svoje kontakte (na primer, možete kontakte svrstati u grupe, kao što su kolege sa fakulteta, ekipa za fudbal) i time olakšate slanje elektronske poruke na više adresa. Pomoću ovog programa, takođe, možete se zaštititi od prijema neželjenih poruka (engl. *SPAM*), kao i od poruka koje sadrže viruse koji mogu da naškode vašem računaru. Osim svega navedenog, *Outlook* može da vodi i evidencije o sastancima, listama zaduženja i da dopunjava informacije o postojećim kontaktima.

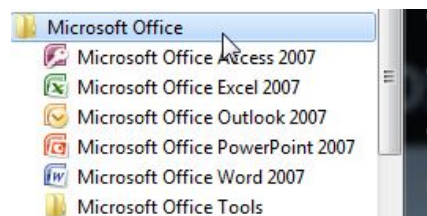
Svi programi *Microsoft Office* paketa su međusobno kompatibilni tako da se podaci između programa mogu izmenjivati. Tako možete dijagram napravljen u programu *Excel* prebaciti u dokument koji unosite u programu *Word* ili u *PowerPoint* prezentaciju. Upravo ova međusobna kompatibilnost čini *Microsoft Office* paket jednim od najrasprostranjenijih programskih paketa na današnjim računarima.

Pokretanje programa iz *Microsoft Office* paketa

Pre upotrebe bilo kog programa potrebno je da se prvo taj program i sve njegove alatke učitaju u radnu memoriju računara (RAM memorija), odnosno da se program pokrene. Za pokretanje programa u *Windows* operativnom sistemu potrebno je pritisnuti dugme **Start**  koje se nalazi na levoj strani *Windows* palete poslova. Nakon toga, pritisnite **All Programs** da bi se prikazala lista svih dostupnih programa. Na listi dostupnih programa pronađite fasciklu **Microsoft Office** programskog paketa i odaberite je (slika 2.1). U novom prozoru odaberite program iz *Microsoft Office* paketa koji želite da pokrenete (slika 2.2).

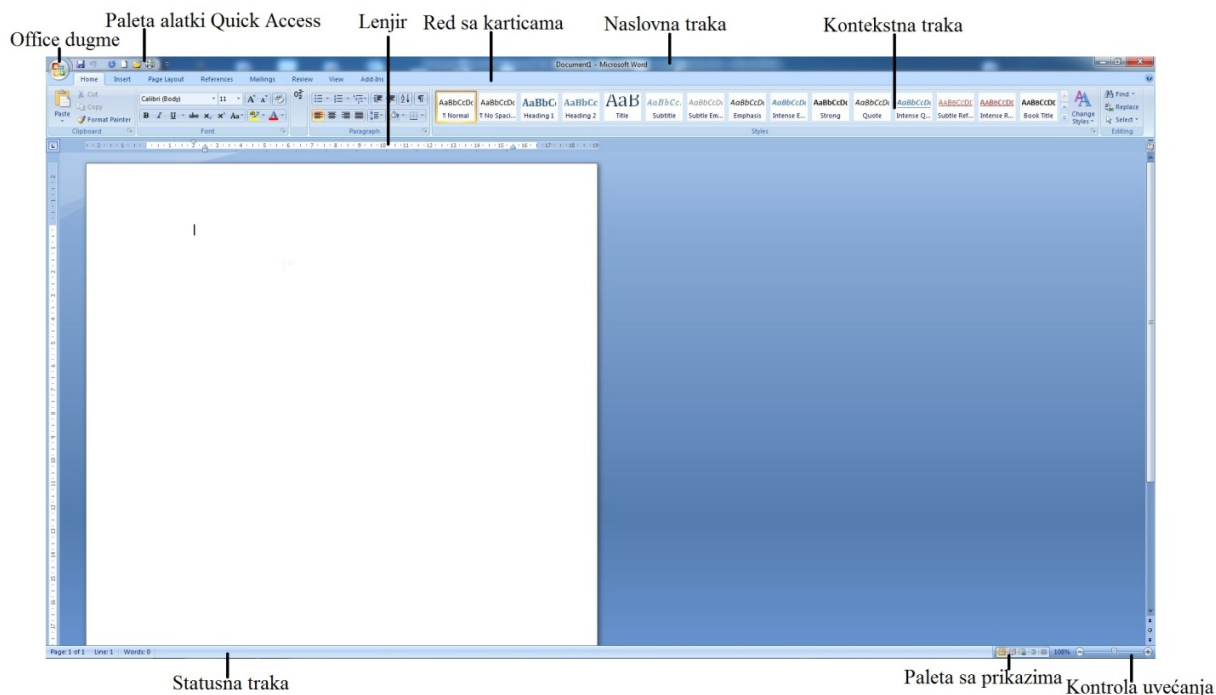


Slika 2.1 *Windows Start* komanda.



Slika 2.2 *Microsoft Office* paket.

Kada otvorite program *Word* pojavice se ekran sa praznim novim dokumentom u koji možete odmah početi da unosite tekst. Pre toga pogledajmo šta sve sadrži prozor programa *Word* i obeležimo pojedine delova ovoga prozora (slika 2.3). Nazive pojedinih delova prozora koji su prikazani na slici 2.3 ćemo koristiti u daljem tekstu praktikuma, tako da bi bilo dobro da ih zapamtite.



Slika 2.3 Prozor programa Word.

Na samom vrhu ekrana nalazi se: **Office dugme**, **paleta alatki Quick Access**, **naslovna traka**, ispod nje **red sa karticama**, a ispod njega **kontekstna traka**. Ispod kontekstne trake nalazi se **lenjir** (slika 2.3).

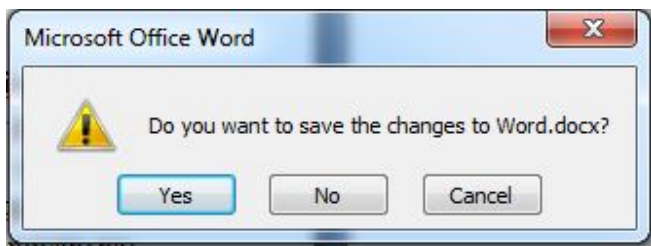
Office dugme

U gornjem levom uglu nalazi se Office dugme,  kojim se može pristupiti opcijama kao što su:

- *New* - za otvaranje novog praznog dokumenta;
- *Open* - za otvaranje već postojećeg dokumenta koje se nalazi na disku računara ili na spoljašnjoj memorijskoj jedinici;
- *Save* - za snimanje izmena koje ste uneli u trenutno aktivan dokument;
- *Save as* - za snimanje trenutno aktivnog dokumenta ukoliko se prvi put snima ili za snimanje dokumenta pod drugačijim imenom ili u drugačijem formatu. Verzije programa Word iz 2007. godine i novije će vam ponuditi više formata za snimanje dokumenta.

Najkorišćenije format je **.docx** format, koji je znatno izmenjen u odnosu na format ranijih izdanja *Word* programa (**.doc**). Ovaj format je zasnovan na standardu *eXtensible Markup Language* (XML), što je metoda za snimanje podataka namenjena lakšem deljenju podataka na različitim sistemima. Dokumenti snimljeni u **.docx** formatu se mogu lakše popraviti u slučaju oštećenja datoteke i zauzimaju manje prostora na disku računara od dokumenata snimljenih u **.doc** formatu. U okviru komande *Save as*, *Word* će vam ponuditi da snimate dokument i u drugim formatima kao što su **.docm** (koristi se za snimanje dokumenta koji sadrži makroe), **.doc** (ukoliko želite da otvarate dokument na računaru koji ima stariju verziju programa *Word*), **.txt** (običan tekstualni format bez ikakvih formatiranja);


- *Print* - za štampanje aktivnog dokumenta. U okviru ove opcije možete odabrati *Print Preview* opciju koja će vam dati umanjen prikaz kako će vaš dokument izgledati odštampan na papiru;
- *Prepare* - malo korišćena opcija za pripremu dokumenta za finalnu distribuciju. Takođe, ovde se nalaze korisne opcije za zaštitu dokumenta: dokument možemo zaštititi šifrom tako da niko ko nema šifru neće moći da ga otvori, opcijom *Encrypt Document*; opcija *Restrict Permission* će omogućiti svima da pročitaju dokument, ali neće moći da ga kopiraju, štampaju i menjaju;
- *Send* - opcija da jednim klikom pošaljete dokument kao elektronsku poštu (preko programa *Outlook*) ili kao faks (ukoliko je računar priključen na telefonsku mrežu).
- *Publish* - opcija da sadržaj iz vašeg dokumenta direktno objavite na mreži, na primer, kao Internet dnevnik (*Blog*). Podržane su opcije za objavljivanje na serverima: *MSN Spaces*, *SharePoint 2007*, *Blogger* i *Community Server*;
- *Close* - za zatvaranje aktivnog dokumenta. Ukoliko niste sačuvali izmene u dokumentu *Word* će vas na to upozoriti (slika 2.4).









Slika 2.4 Dijalog prozora za snimanje izmena.

Osim ovih opcija, pritiskom na *Office* dugme dobijate i opciju *Word Options* gde možete podesiti sve parametre izgleda i funkcionalnosti programa *Word*, kao i opciju *Exit Word* za zatvaranje programa. Sa desne strane prozora koji se pojavi kada odaberete *Office* dugme nalazi se spisak dokumenata koje ste otvarali u skorije vreme (*Recent Documents*).


Naslovna traka

Gornja traka u aktivnom prozoru programa *Word* (i svakog drugog programa iz *Office* paketa) se zove naslovna traka (engl. *title bar*) i na levoj strani sadrži paletu alatki za brzi pristup (*Quick Access*). Alatke u *Quick Access* paleti možete sami postavljati ili menjati (pritiskom na dugme  sa desne strane palete), ali ova paleta najčešće sadrži: *Save*, *UnDo*, *ReDo*, *New*, *Open* i *Print* opcije.


- *UnDo* opcija  poništava izmene koje ste poslednje uneli u vaš dokument. *Word* pamti poslednjih 100 izmena u dokumentu. Pritiskom na strelicu na dole pored *UnDo* alatke dobijate spisak poslednjih izmena tako da možete odjednom poništiti više izmena;
- *ReDo* opcija  poništava izmene koje ste učinili korišćenjem *UnDo* opcije. Ova opcija će biti aktivna samo ukoliko ste prethodno koristili *UnDo* opciju;
- Ukoliko niste koristili *UnDo* opciju na *Quick Access* paleti će se pojaviti *Repeat* opcija  koja ponavlja poslednju radnju koju ste učinili. Na primer, ukoliko ste seletovali jedan pasus teksta i formatirali ga u **masna slova** (engl. *Bold*), možete selektovati neki drugi pasus teksta i samo pomoću opcije *Repeat* formatirati ga u **masna slova**.

Centralni deo naslovne trake prikazuje ime aktivnog dokumenta, dok se sa desne strane naslovne trake nalaze tri dugmeta: za smanjenje aktivnog prozora i njegova sklanjanje na *Windows* paletu ; za promenu veličine aktivnog prozora  i za zatvaranje programa .

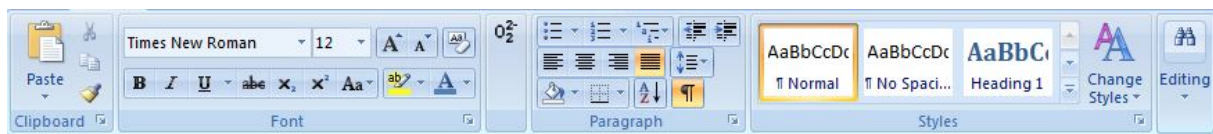
Red sa karticama

Red sa karticama se nalazi odmah ispod naslovne trake i sadrži kartice: *Home*, *Insert*, *Page Layout*, *References*, *Mailings*, *Review*, *View* i *Add-Ins*. Pritiskom na svaku od pomenutih kartica otvara se odgovarajuća kontekstna traka. Na desnoj strani reda sa karticama nalazi se alatka za pomoć (engl. *Help*)  koja otvara prozor u kome možete naći pomoć pri korišćenju programa *Word*.

Kontekstne trake

Pritiskom na neku od kartica iz reda sa karticama otvara se odgovarajuća kontekstna traka (engl. *ribbon*). Svaka kontekstna traka sastoji se od više grupa, a u svakoj od grupa nalazi se jedna ili više alatki. Na slici 2.5 prikazana je kontekstna traka koja se dobije kada se izabere kartica *Home*. Ova kontekstna traka se sastoji iz šest grupa: *Clipboard*, *Font*, *Paragraph*, *Styles*, *Editing* i jedna neimenovana grupa sa alatkom . Ovu alatku ćemo detaljno objasniti kasnije.

Šta će se sve videti na kontekstnoj traci određuje veći broj faktora, kao što su veličina monitora, rezolucija ekrana, veličina aktivnog prozora programa *Word*, kao i parametri prikaza na ekranu. Zbog toga, ono što vidite na ekranu možda neće uvek biti isto kao na slikama u ovom Praktikumumu.



Slika 2.5 Kontekstna traka kartice *Home* na monitoru male rezolucije.

Kontekstna traka kartice *Home* na velikom ekranu visoke rezolucije izgleda kao na slici 2.6. Sve prikazane grupe su iste kao i sve alatke u njima, jedino što je na monitoru sa većom rezolucijom prikazano više primera stilova u grupi *Styles*.



Slika 2.6 Kontekstna traka kartice *Home* na monitoru velike rezolucije.

Ukoliko smatrate da vam kontekstna traka zauzima previše prostora na ekranu i smeta prilikom unosa i obrade teksta možete je ukloniti i ponovo prikazati kombinacijom tastera **Ctrl+F1** (pritisnite i držite taster **Ctrl** i dok ga držite pritisnutog, pritisnite taster **F1**; pustite oba tastera).

Lenjiri (engl. *Rulers*)

U programu *Word* postoje dva lenjira: horizontalni i vertikalni. Ukoliko lenjiri nisu vidljivi u vašem prozoru možete ih učiniti vidljivim (ili ih ukloniti ukoliko su vidljivi) pritiskom na alatku *View Ruler*, koja se nalazi ispod kontekstne trake sa desne strane. Lenjiri su veoma korisni ukoliko želite da imate uvid u širinu i visinu teksta koji kucate ili u položaj određenih pasusa, tabela, slika i dijagrama. Podeoci na lenjirima mogu biti u različitim jedinicama (centimetri, milimetri, tačke ili inči). Jedinice lenjira možete menjati preko: *Office* dugme ⇒ *Word Options* ⇒ *Advanced* ⇒ *Display* ⇒ *Show measurements in units of*.

Osim podeoka sa jedinicama, na horizontalnom lenjiru se nalaze i pokazivači položaja teksta, takozvane uvlake. Postoje tri različite uvlake (slika 2.7):

- uvlaka prvog reda - određuje mesto sa kog će početi tekst u novom pasusu;
- leva uvlaka - određuje levu ivicu teksta (osim prvog reda);
- desna uvlaka - određuje desnu ivicu teksta.








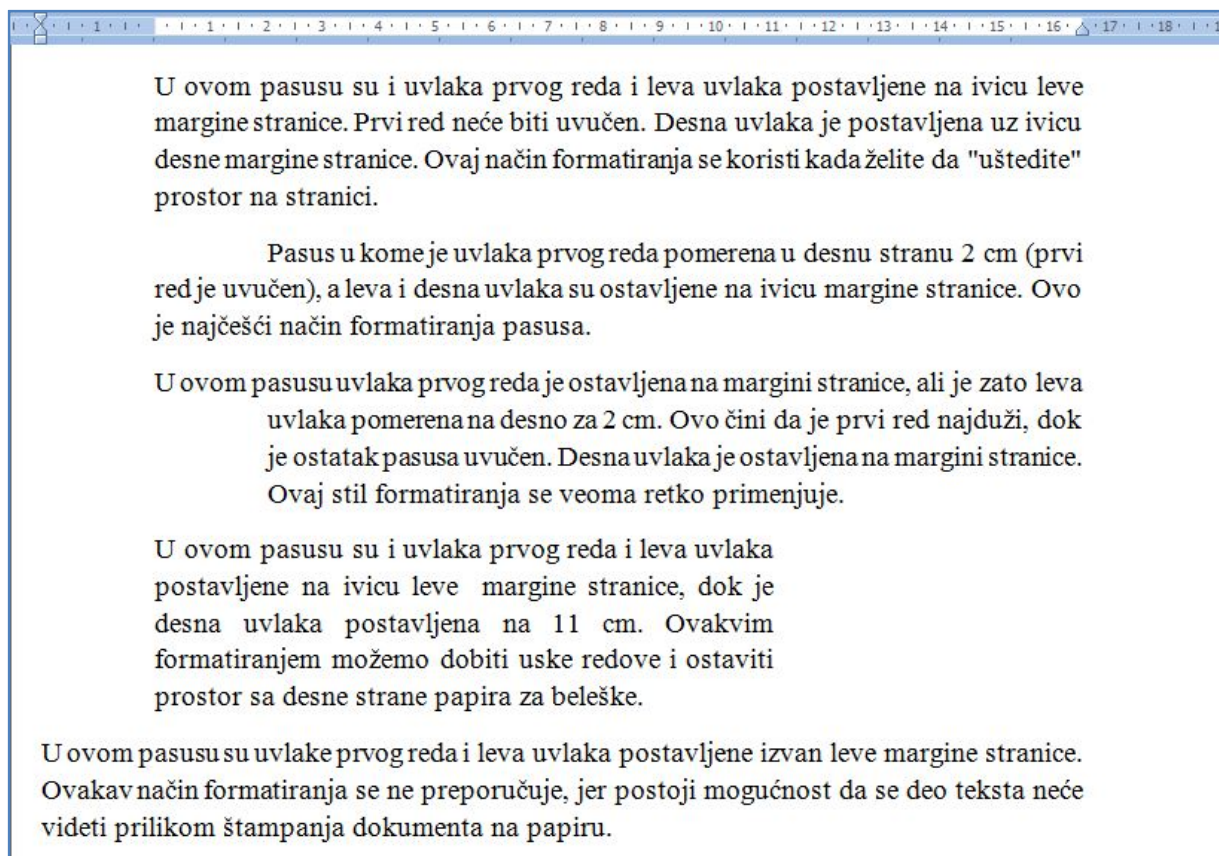
Slika 2.7. Lenjir sa uvlakama.

Pomeranjem uvlaka može se dobiti različiti oblik teksta. Svaki paragraf može imati posebno podešene uvlake, tako da se može dobiti tekst koji izgleda kao na slici 2.8, gde sva četiri pasusa imaju posebno formatiranje. Deo horizontalnog lenjira sa leve i desne strane, koji je obojen


plavom bojom, predstavlja margine stranice. Margine se ubacuju u tekst da bi tekst izgledao uredno, kao i zbog toga što većina štampača ne može da štampa po celoj širini papira. Uvlake možete postavljati izvan margina stranice (peti pasus na slici 2.8), ali tada postoji opasnost da deo teksta neće biti odštampan.

Ukoliko stanete na početak novog reda i pritisnete taster *Tab* na tastaturi, pokazivač početka unosa teksta (kursor) će se pomeriti za određeni broj mesta u desno. Pritisnite taster *Tab* nekoliko puta i posmatrajte kako se kursor pomera. Mesta na koja će se pomeriti kursor prilikom pritiskanja tastera *Tab* se određuju tabulatorima. Postoji pet vrsta tabulatora:

-  levi tabulator definiše početnu poziciju teksta;
-  centralni tabulator centrira tekst na zadatu poziciju;
-  desni tabulator definiše krajnju poziciju teksta;
-  decimalni tabulator poravna sve brojeve u odnosu na decimalnu tačku;
-  vertikalni tabulator umeće vertikalnu liniju na lokaciju tabulatora.




Slika 2.8 Pasusi sa različito postavljenim uvlakama.

Tabulatori se mogu postaviti i pomerati direktno na horizontalnom lenjiru. Potrebno je najpre odrediti tip tabulatora pritiskanjem dugmeta kontrole tabulatora, predstavljenog alatom , koja se nalazi na levom kraju horizontalnog lenjira (ili iznad vertikanog lenjira). Kada odaberete tip tabulatora koji želite, pritisnite donji deo horizontalnog lenjira (plava linija sa zarezima) da biste definisali položaj tabulatora. Da biste postavili drugi tabulator ponovo pritisnite donji deo horizontalnog lenjira na nekom drugom mestu. Jednom postavljene tabulatore možete pomerati po lenjiru povlačenjem pomoću miša.

Tabulatori se koriste ako želite da prikazete određenje podatke pomoću stubaca, mada za ovo možete koristiti i tabele. Na slici 2.9a je prikazano kako se pomoću tabulatora u dva stubca može prikazati uspeh studenata na ispitu. Prvi levi tabulator je postavljen na 3 cm a drugi na 8 cm od margine stranice.

Na slici 2.9b prvi stubac je formatiran pomoću desnog tabulatora postavljenog na 6 cm a drugi stubac pomoću levog tabulatora postavljenog na 8 cm. Time je obezbeđeno 2 cm razmaka između stubaca bez obzira na dužinu teksta u njima. Obratite pažnju na položaje i izgled tabulatora prikazanih na gornjem delu slike 2.9. U jednom tekstu svaki pasus može imati svoj raspored tabulatora.



Student	Ocena	Student	Ocena
Petar Petrović	8 (osam)	Petar Petrović	8 (osam)
Jovan Jovanović	9 (devet)	Jovan Jovanović	9 (devet)
Dragan Draganić	7 (sedam)	Dragan Draganić	7 (sedam)
Goran Gogić	10 (deset)	Goran Gogić	10 (deset)
Miloš Milošević	10 (deset)	Miloš Milošević	10 (deset)

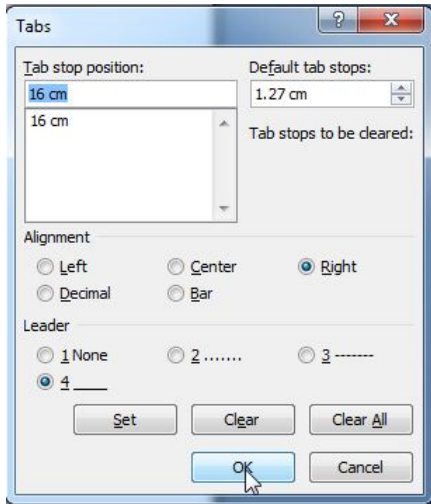
a) b)

Slika 2.9 Pravljenje stubaca pomoću tabulatora.

Pravljenje sadržaja pomoću tabulatora

Svaki dokument koji ima više poglavlja (seminarski rad, završni rad), trebalo bi da na početku ima sadržaj, kako bi se čitaocu omogućilo lakše kretanje kroz dokument. Korišćenjem tabulatora možete brzo i jednostavno napraviti sadržaj.

Otvorite novi dokument i podesite lenjire da budu vidljivi. Pomoću dugmeta kontrole tabulatora izaberite desni tabulator i postavite ga na lenjir na polažaj 16 cm od leve margine. Levim dugmetom miša dva puta brzo pritisnite tabulator koji ste upravo postavili. Otvoriće se prozor *Tabs* (slika 2.10). U oblasti *Leader* (podvlačenje linijom), prozora *Tabs* izaberite četvrtu opciju i pritisnite *OK*.




Slika 2.10 Dijalog prozora *Tabs*.

Otkucajte naslov prvog poglavlja (na primer, Prva vežba), pritisnite taster *Tab* i otkucajte broj strane na kojoj počinje to poglavlje. Pritisnite taster *Enter* na tastaturi da biste prešli u novi red, otkucajte naslov drugog poglavlja, pritisnite taster *Tab* i ukucajte stranu na kojoj počinje drugo poglavlje. Uradite tako i za treće i četvrto poglavlje. Trebalo bi da dobijete sadržaj kako je prikazan na slici 2.11.

Prva vežba _____	1
Druga vežba _____	12
Treća vežba _____	23
Četvrta vežba _____	31

Slika 2.11 Sadržaja praktikuma napravljen pomoću tabulatora.

Delitelj prozora

Ukoliko je potrebno da gledate u neku tabelu ili sliku iz dokumenta, dok u drugom delu dokumenta pišete o njoj, opcija delitelj prozora će vam biti veoma korisna. Pomoću ove opcije možete podeliti prozor dokumenta na dva nezavisna dela i u svakom od njih prikazati različite strane aktivnog dokumenta. Alatka delitelja prozora se nalazi odmah iznad alatke za prikazivanje lenjira i teško je uočljiva (izgleda kao znak **—**). Kada pokazivačem miša stanete na alatku delitelja prozora, ona će se izmeniti u . Ukoliko sada dva puta pritisnete levo dugme miša, prozor će biti podeljen na dva jednaka dela. Možete prelaziti iz jednog dela u drugi prebacivanjem pokazivača miša ili izborom odgovarajućeg dela. Podelu možete ukloniti ako razdelnu liniju povučete na gore ili na dole ili ako dva puta pritisnete bilo koje mesto na razdelnoj liniji.

Vertikalna traka za pomeranje sadržaja (klizač) se nalazi na desnoj strani ekrana i pomoću nje se možete brzo kretati kroz dokument. Ispod ove trake nalaze se alatke *Previous Page* (Prethodna strana) i *Next Page* (Naredna strana), pomoću kojih možete prelaziti sa strane na stranu.

Statusna traka

Statusna traka (engl. *Status Bar*) se nalazi na dnu prozora programa Word. Na levoj strani statusne trake se nalazi niz informacija o aktivnom dokumentu. Ukoliko desnim tasterom miša pritisnete statusnu traku, otvoriće se prozor za podešavanje statusne trake (engl. *Customize Status Bar*). U ovom prozoru možete podesiti koje informacije će biti prikazane na statusnoj traci. Posebno su korisne informacije o broju strane na kojoj se nalazite i o ukupnom broju strana u dokumentu, o broju reči (engl. *Word Count*), kao i signal da vam je uključen taster *Caps Lock* (ispisivanje velikih slova).

Sa desne strane statusne trake nalazi se paleta sa prikazima (engl. *Views*), pomoću koje možete menjati način kako se vaš dokument prikazuje na ekranu (slika 2.12). U ovoj paleti se nalazi pet osnovnih prikaza: *Print Layout*, *Full Screen Reading*, *Web Layout*, *Outline* i *Draft*.

Prikaz *Print Layout* je osnovni prikaz za rad u programu Word. Ovaj prikaz vam pokazuje dokument onako kako će on izgledati kada se odštampa na papiru. Sve slike, tabele i dijagrami su vidljivi. Takođe u ovom prikazu možete unositi novi i formatirati već postojeći tekst, tabele, slike i dijagrame.

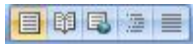
Prikaz *Full Screen Reading* se koristi kada želite samo da čitate tekst, ali ne i da unosite izmene u njega. U ovom prikazu naslovna traka, red sa karticama, kontekstna i statusna traka se ne vide i dokument zauzima veći deo ekrana. U ovom prikazu ne možete menjati, brisati ili dodavati tekst, već samo možete snimiti ili štampati dokument, podvlačiti određene delove teksta i ubacivati komentare. Alatke za ove opcije se nalaze u gornjem levom uglu ekrana. Pritiskom na taster *Esc*

ili preko alatke zatvori (engl. *Close*), koja se nalazi u gornjem desnom uglu ekrana, vraćate se u *Print Layout* prikaz.


Prikaz *Web Layout* prikazuje dokument onako kako će on izgledati u prozoru Internet pretraživača. U ovom prikazu radite ukoliko želite da svoj dokument objavite na Internetu.

Prikaz *Outline* se koristi za lakše organizovanje i uređivanje velikih dokumenata. O ovom prikazu postoje razne moćne alatke za premeštanje čitavih odeljaka dokumenta sa jednog mesta na drugo, a da se on pri tom ne mora isecati, kopirati i prenositi.

Prikaz *Draft* se koristi kada želite da brzo izmenite deo ili format teksta. U ovom prikazu pojedini delovi dokumenta, kao što su zaglavlje i podnožje (engl. *Header* i *Footer*), neće biti vidljivi.



Slika 2.12 Paleta sa prikazima.

Pored palete sa prikazima, na statusnoj traci se nalaze alatke za kontrolu uvećanja prikaza dokumenta na ekranu (zumiranje). Pritiskom na ikonu **100%** otvoriće se poseban prozor (*Zoom Dialog Box*) u kome možete precizno podesiti uvećenje prikaza dokumenta. Prikaz dokumenta možete povećati ili smanjiti i pomeranjem klizača na alatki . Korišćenjem ovih opcija ne menja se format dokumenta, već samo način njegovog prikazivanja na ekranu.

Zadatak 1: Korišćenjem uvlaka napravite tekst kao na slici 2.8. Dokument sa tako formatiranim tekstom snimite u posebnu datotetku - uvlake.docx.

Zadatak 2. Korišćenjem tabulatora i različitog formata teksta da napraviti sadržaj sa donje slike. Napravljene sadržaj snimite u datoteku sadrzaj.docx. Detaljno objasnite koje ste sve opcije koristili prilikom pravljenja ovog dokumenta.

SADRŽAJ

Prva vežba _____	1
<i>zadatak 1</i>	4
<i>zadatak 2</i>	7
<i>zadatak 3</i>	10
<i>test</i>	11
Druga vežba _____	12
Treća vežba _____	23
Četvrta vežba _____	31

Opis: _____

Datum

Potpis asistenta

Vežba 3.

Microsoft Word - unos i formatiranje teksta


U ovoj vežbi pozabavićemo se načinima unosa teksta, kao i alatkama koje nam pruža program *Word* za uređivanje izgleda teksta. Veoma je važno da svaki dokument koji napravite izgleda uredno, pregledno i vizuelno lepo. U programu *Word* postoje brojni načini na koje možete urediti dokument koji ste napravili. U računarskom jeziku ovo uređivanje dokumenta se zove formatiranje, tako da ćemo ovaj izraz koristiti nadalje u praktikumu. Formatiranje se može izvoditi na više nivoa:

- Formatiranje pojedinačnih slova i znakova. Ovom vrstom formatiranja određuje se izgled slova i znakova, kao i njihovi međusobni odnosi. Ovo je najniži nivo formatiranja;
- Formatiranje pasusa. Ovom vrstom formatiranja određuje se izgled celih pasusa, kao i način na koji će pasusi biti prikazani u dokumentu;
- Formatiranje segmenata. Primenuje se samo na dokumente koji se sastoje iz više segmenata, na primer, naslovna strana, sadržaj, uvod, rezultati i diskusija i zaključak;
- Formatiranje celog dokumenta. Ovo je najviši nivo formatiranja i podrazumeva određivanje izgleda strana, veličine papira na kome će dokument biti odštampan, orijentacije papira itd.

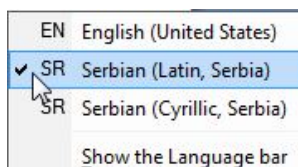
Unos teksta

Tekst u dokument možete unositi direktno sa tastature ili kopiranjem (engl. *Copy*) i prenošenjem (engl. *Paste*) iz nekog drugog dokumenta ili sa Interneta (opcija koja se nikako ne preporučuje prilikom pravljenja seminarskih i diplomskih radova).

Jezik unosa teksta

Prilikom instaliranja *Windows* operativnog sistema podrazumevano se instalira verzija na engleskom jeziku. U kontrolnom panelu ovog operativnog sistema (engl. *Control Panel*) mogu se dodati i drugi jezici kao i instalirati definicije za unos teksta sa tastature sa simbolima drugih jezika (*Start* ⇒ *Control Panel* ⇒ *Region and Language* ⇒ *Keyboards and Languages* ⇒ *Install/Uninstall languages*). Za srpski jezik postoje dve dodatne definicije za unos teksta sa tastature: latinična i ćirilična. Na računarima na kojima postoji više definisanih jezika za unos teksta sa tastature, sa desne strane *Windows* palete poslova biće prikazana paleta jezika (engl. *Language Toolbar*) . Pritiskom na ovu paletu dobićete spisak svih instaliranih jezika (slika 3.1) i možete izabrati željeni jezik unosa teksta sa tastature. Posle ovoga, izgled palete jezika će se promeniti i na njoj će biti upisana skraćenica jezika, koji je trenutno izabran za unos teksta sa

tastature. Ako ste izabrali srpski jezik paleta jezika će izgledati ovako **SR**. Napomena: studenti često ne znaju da promene jezik unosa teksta pa predaju seminarske radove na srpskom jeziku bez slova š, č, ć, đ, ž (zamene ih slovima s, c, dj, z). Iako ovakav seminarski rad može da se pročitati, to daje veoma lošu sliku o studentu i njegovoj računarskoj pismenosti, pa je i ocena na seminarskom niža. Zato vam savetujem da na ovim vežbama uvežbate promenu jezika za unos teksta.



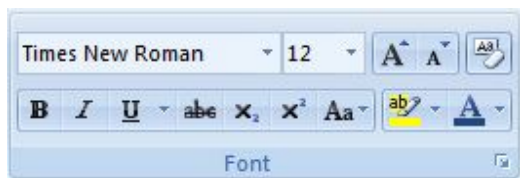
Slika 3.1 Paleta jezika.

Formatiranje slova i znakova

Tipografska pisma (fontovi)

Izgled slova i znakova je najvažniji za budući izgled celog dokumenta. U programu *Word* podrazumevano je instaliran veliki broj različitih tipografskih pisama, odnosno fontova (engl. *Font*). Fontovi se međusobno razlikuju po izgledu, ali i po jasnoći, tako da i o tome morate voditi računa prilikom izbora fonta u kome će biti vaš dokument. Dokumenti otkucani u pojedinim fontovima veoma su teški za čitanje. Najčešće korišćeni fontovi su *Times New Roman* (u tom fontu je otkucan i ovaj praktikum) i *Arial*, koji su i vizuelno prihvatljivi i laki za čitanje. Nije preporučljivo da u istom dokumentu koristite više različitih fontova, osim ukoliko želite da naglasite pojedine delove dokumenta. Na primer, ako pravite neki dokument iz hemije možete jednačine hemijskih reakcija kucati u jednom fontu, a ostatak teksta u drugom.

Najpoželjnije je da font u kome će biti vaš dokument izaberete pre početka unosa teksta u dokument. Izbor fonta se vrši pomoću alatke *Font*, koja se nalazi u gornjem levom uglu grupe *Font* (slika 3.2) na kontekstnoj traci kartice *Home*. Pritiskom na strelicu na dole ove alatke pojavice se spisak svih fontova instaliranih na računaru (slika 3.3). Potrebno je samo da izaberete željeni font i započnete kucanje.



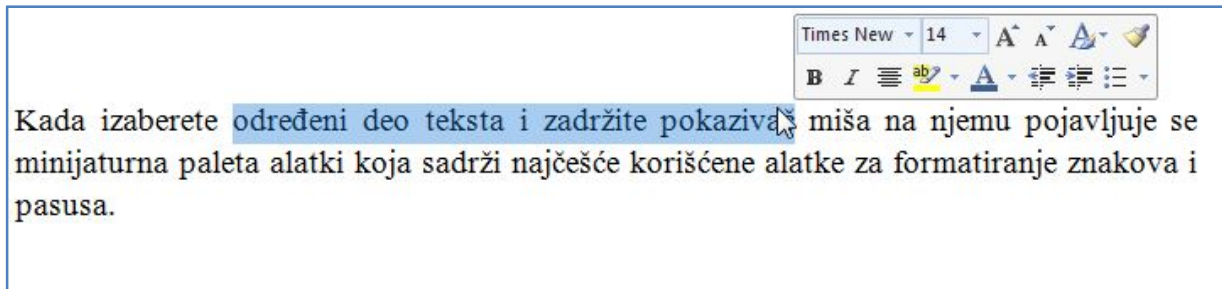
Slika 3.2 Grupa *Font*.



Slika 3.3 Izbor fonta pomoću alatke *Font*.

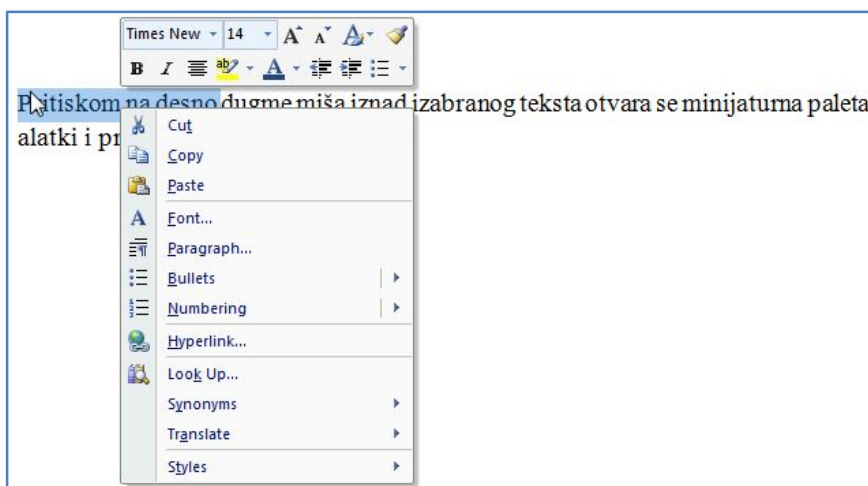
Ukoliko ste nakon unosa teksta odlučili da promenite font, koji ste koristili u celom dokumentu ili samo jednom njegovom delu, to možete učiniti tako što ćete pokazivačem miša izabrati odgovarajući deo teksta i pomoću alatke *Font* dodeliti neki drugi font izabranom tekstu.

Ovu operaciju možete i brže izvesti pomoću minijature palete alatki, koja će se pojaviti ukoliko zadržite pokazivač miša na izabranom delu teksta (slika 3.4). Odaberite alatku *Font* (nalazi se u gornjem levom uglu) iz minijature palete alatki i dodelite novi tip fonta izabranom tekstu.




Slika 3.4 Minijaturna paleta alatki će se pojaviti iznad izabranog teksta, ako zadržite pokazivač miša na izabranom tekstu.

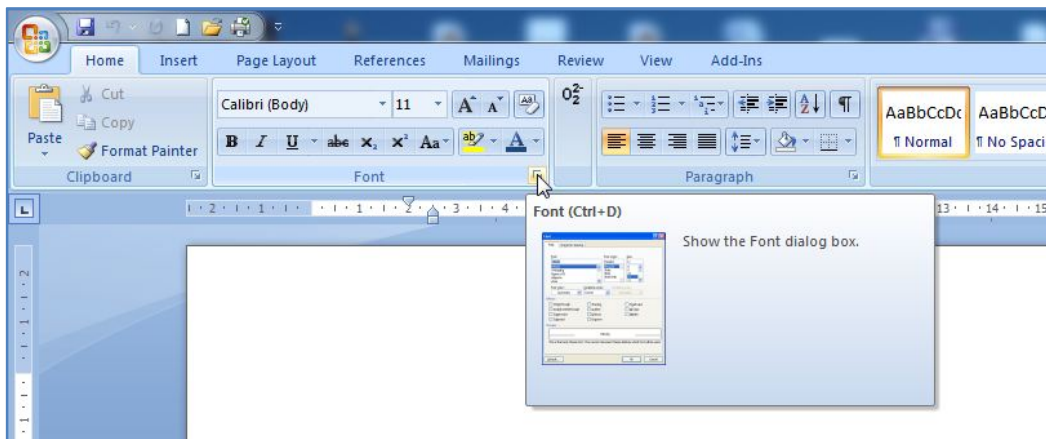
Minijaturna paleta alatki i prozor sa dodatnim opcijama će se pojaviti i kada zadržite pokazivač miša na izabranom delu teksta i pritisnete desno dugme miša (slika 3.5). U prozoru sa dodatnim opcijama između ostalog će se pojaviti opcije da isečete **Cut** ili kopirate **Copy** deo teksta, prenesete prethodno kopiran tekst **Paste**, kao i opcije za otvaranje dijalog prozora *Font* **Font...** i dijalog prozora *Paragraph* **Paragraph...**.



Slika 3.5 Minijaturna paleta alatki i prozor sa dodatnim opcijama će se pojaviti ako pritisnete desno dugme miša.

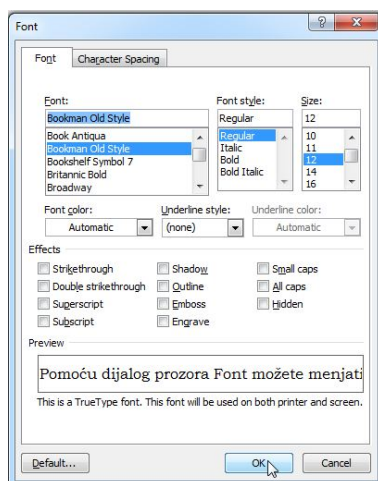
Dijalog prozor *Font*

Treći način da promenite font jeste pomoću dijaloga prozora *Font*. Ovaj dijalog prozor možete otvoriti prvo pritiskom na desno dugme miša na izabranom tekstu (ili bilo gde u tekstu), a zatim u prozoru sa dodatnim opcijama izborom opcije **A** *Font...*. Dijalog prozor *Font*, takođe, možete otvoriti i pritiskom na pokretač okvira za dijalog , koji se nalazi u donjem desnom uglu grupe *Font* na kontekstnoj traci kartice *Home* (slika 3.6) ili direktno sa tastature pomoću kombinacije tastera Ctrl+D.



Slika 3.6 Otvaranje dijaloga prozora *Font* pomoću pokretača okvira za dijalog.

Kada otvorite dijalog prozor *Font* (slika 3.7) dobićete brojne opcije za formatiranje slova i znakova, od kojih ćemo neke obrađivati kasnije. Alatka za promenu fonta nalazi se sa leve strane i iznad nje je napisano *Font:*. Izaberite željeni font i pritisnite dugme *OK* kako biste izašli iz dijaloga prozora *Font*.



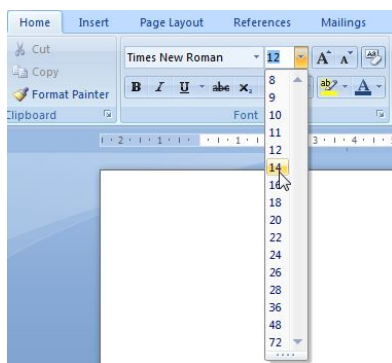
Slika 3.7 Izgled dijaloga prozora *Font* sa otvorenom karticom *Font*. U ovom dijalogu prozoru nalaze se brojne opcije za formatiranje slova i znakova.

Već ste videli da se ista operacija, na primer, dodeljivanje fonta izabranom tekstu, može uraditi na više različitih načina (preko alatke *Font* koja se nalazi u grupi *Font* na kontekstnoj traci; preko alatke *Font* iz minijaturene palete alatki; preko dijalog prozora *Font*). Skoro svaku operaciju u programu *Word* možete izvesti na više načina. U daljem tekstu ovog Praktikumuma ćemo se truditi da pokažemo samo najjednostavniji ili najuniverzalniji način da izvedete određenu operaciju. Svesni smo da izbor načina za izvođenje pojedinih operacija formatiranja u mnogome zavisi od ličnih preferenci, tako da ukoliko ste navikli da operaciju izvodite na drugačiji način od opisanog u ovom Praktikumumu, slobodno nastavite tako da radite.

Veličina slova i znakova

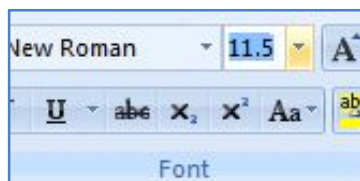
Veličina slova, u stvari, predstavlja visinu slova i odnosi se na vertikalnu udaljenost od vrha do dna slova. Veličina slova se izražava u tačkama. Dimenzija jedne tačke je $\frac{1}{72}$ inča (odnosno 0,35 mm) tako da će slova veličine 12 tačaka biti visoka 4,2 mm. Program *Word* može da prikaže slova od veličine jedne tačke do 1638 tačaka. Veličinu slova možete definisati u podeocima od 0,5 tačaka tako da je, na primer, veličina od 11,5 tačaka potpuno prihvatljiva. Ukoliko u samom tekstu koristite različite veličine slova, dokument može izgledati neuredno. Sa druge strane, poželjno je da naslovi budu otkucani većim slovima nego ostatak teksta.

Veličinu slova možete menjati pomoću alatke *Font size* koja se nalazi u grupi *Font* na kontekstnoj traci kartice *Home*, desno od alatke za izbor vrste fonta. Pritiskom na strelicu na dole ove alatke pojaviće se lista sa različitim veličinama slova (slika 3.8), sa koje možete izabrati željenu vrednost. Na ovoj listi nisu date sve moguće veličine slova, već samo one koje se najčešće koriste.




Slika 3.8 Izbor veličine slova pomoću alatke *Font Size*.


Ukoliko želite da postavite veličinu slova, koja se ne nalazi na listi alatke *Font Size*, možete željenu veličinu upisati direktno u prostor koji prikazuje veličinu slova na ovoj alatki i pritisnuti taster *Enter* (slika 3.9). Alatku za promenu veličine slova možete naći i u minijaturenoj paleti alatki i dijalog prozoru *Font*.



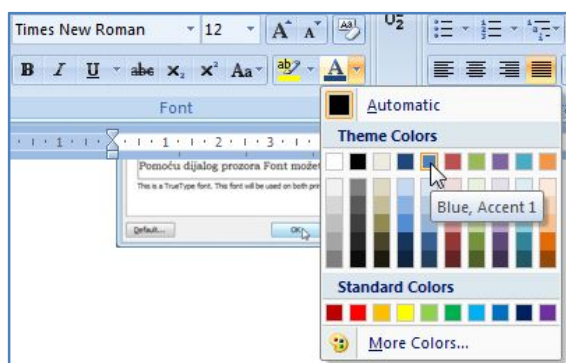
Slika 3.9 U alatku *Font Size* se može upisati željena veličina slova. Nakon upisivanja potrebno je pritisnuti taster *Enter* kako bi program prihvatio novu veličinu slova.

Desno od alatke *Font Size* u grupi *Font* se nalaze alatke *Grow Font* (povećaj veličinu fonta) i *Shrink Font* (smanji veličinu fonta) . Pritiskom na ove alatke automatski će se povećavati ili smanjivati veličina slova.

Boja slova i znakova



Ponekad kada je potrebno naglasiti pojedine delove teksta, rečenice ili reči, dobra je opcija da se promeni boja slova u tim delovima teksta. Alatka za promenu boje slova, *Font Color*  se nalazi na desnoj strani grupe *Font* kontekstne trake kartice *Home*. Pritiskom na strelicu na dole ove alatke pojavice se paleta sa ponuđenim bojama slova (slika 3.10). Ukoliko ste pre izbora ove alatke izabrali deo teksta, boja slova izabranog teksta će se promeniti. Ukoliko niste izabrali deo teksta pre izbora ove alatke, novi tekst koji unesete u dokument će biti promenjene boje.

Boja u paleti sa bojama, koja je označena kao *Automatic*, se prilagođava boji pozadine. Ukoliko osenčite pozadinu iza dela teksta ili celog paragrafa [opcija senčenje (*Shading*)] u neku tamnu boju, *Automatic* će postati bela kako bi se tekst bolje video. Sve dok je pozadina bele boje, boja *Automatic* je crna.




Slika 3.10 Alatka *Font Color* i paleta sa bojama

Masna slova (engl *Bold*)

Pojedine reči ili delove teksta možemo naglasiti upotrebom masnih slova (engl. *Bold*). Alatka za pisanje masnih slova, *Bold*  se nalazi na levoj strani grupe *Font* kontekstne trake kartice *Home*. Ukoliko pritisnete ovu alatku, ona će promeniti boju  i sav tekst koji kucate biće


obeležen masnim slovima. Za obelažavanje već otkucanog teksta masnim slovima, izaberite tekst i pritisnite alatku *Bold*. Ukoliko ste greškom deo teksta obeležili masnim slovima, možete ga vratiti u normalna slova tako što ćete ga izabrati i pritisnuti alatku *Bold*.

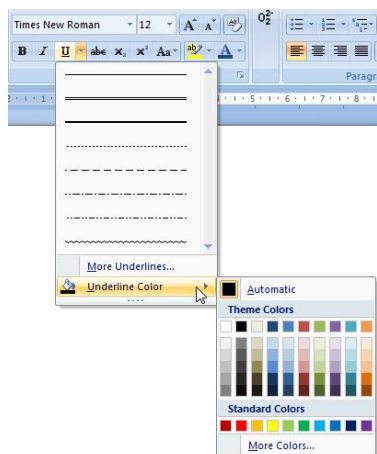
Kurzivni ispis (engl. *Italic*)

Alatka za ispisivanje teksta zakošenim slovima odnosno kurzivnim ispisom  (engl. *Italic*) se nalazi odmah pored alatke za masna slova u grupi *Font* kontekstne trake kartice *Home*. Ova alatka se upotrebljava na isti način kao i alatka za masna slova.



Napomena: Jednu reč ili deo teksta možete obeležiti i masnim slovima i kurzivnim ispisom, tada otkucana reč izgleda *ovako*.

Podvlačenje dela teksta



Izabrane reči ili delove teksta možete podvući upotrebom alatke za podvlačenje dela teksta  (engl. *Underline*), koja se nalazi u grupi *Font* kontekstne trake kartice *Home*. Pritiskom na strelicu na dole ove alatke pojaviće se lista sa koje možete izabrati tip linije kojom će biti podvučen tekst, kao i opcija da izaberete boju linije (slika 3.11). Tekst podvučen upotrebom alatke *Underline* izgleda ovako.





Slika 3.11 Alatka Underline sa tipovima linija i paletom boja.

Alatke za precrtavanje dela teksta, *Strikethrough*  i promenu slova iz malih u velika i obrnuto, *Change Case*  se takođe nalaze u grupi *Font* kontekstne trake kartice *Home*, ali se znatno ređe koriste. pa ih nećemo detaljnije objašnjavati.


Indeks i eksponent




Alatke za upisivanje indeksa, *Subscript*  i eksponenata, *Superscript*  se takođe nalaze u grupi *Font* kontekstne trake kartice *Home* i veoma su važne za hemičare. Hemičari koriste ove alatke kada je potrebno da unesu formule molekula ili jona, kao što su H_2O , Ca^{2+} i SO_4^{2-} .

Da biste uneli molekulsku formulu molekula vode potrebno je da prvo otkucate slovo H, zatim pritisnite alatku *Subscript*  da biste uključili pisanje indeksa i otkucajte broj 2. Tokom ovog postupka alatka *Subscript* će promeniti boju što znači da će sav uneti tekst biti u obliku indeksa. Pritisnite ponovo alatku *Subscript* da biste isključili pisanje indeksa i otkucajte slovo O.

Formulu kalcijum(II)-jona možete uneti tako što ćete prvo otkucati slova Ca, zatim pritisnite alatku *Superscript* , da biste uključili pisanje eksponenata, i otkucajte 2+. Ponovo pritisnite alatku *Superscript* da biste isključili pisanje eksponenata.


Isticanje dela teksta

Ukoliko ste navikli da, dok spremate ispit, markerom podvlačite najznačajnije delove teksta, veoma lako ćete razumeti upotrebu opcije isticanja delova teksta (engl. *Text Highlight Color*). Upotrebom ove opcije možete naglasiti delove teksta, kao da su podvučeni markerom. Alatka za isticanje delova teksta *Text Highlight Color*  se nalazi na desnoj strani grupe *Font* kontekstne trake kartice *Home*. Pritiskom na strelicu na dole ove alatke pojaviće se paleta sa ponuđenim bojama markera. Alatku isticanja delova teksta možete koristiti na dva načina:

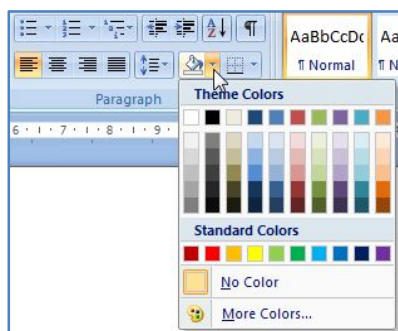
1. Izaberite deo teksta koji želite da istaknete i pritisnite alatku za isticanje delova teksta *Text Highlight Color* ;
2. Pritisnite alatku za isticanje delova teksta *Text Highlight Color* . Pokazivač miša će se promeniti u oblik markera . Stanite pokazivačem miša na početak teksta koji želite da istaknete i pritisnite levo dugme miša. Držite dugme pritisnuto i prevlačite pokazivačem miša preko teksta koji želite da istaknete. Pokazivač miša ostaje u obliku markera sve dok ne pritisnete taster *Esc*.

Napomena: ukoliko štampate tekst u kome su pojedini delovi istaknuti, to će se videti i na papiru. Ukoliko štampate na crno-beliom štampaču, a izabrali ste isuviše tamnu boju markera, može se desiti da se istaknuti tekst ne vidi u štampanoj verziji dokumenta.

Senčenje

Ukoliko želite da deo teksta ili ceo pasus ima drugačiju pozadinu od ostatka teksta to možete postići pomoću opcije senčenja (engl. *Shading*). Alatka opcije senčenja, *Shading*  se nalazi na desnoj strani grupe *Paragraph* kontekstne trake kartice *Home*. Pritiskom na strelicu na dole ove alatke pojavieće se paleta sa ponuđenim bojama senčenja (slika 3.12).

Pomoću ove alatke možete osenčiti pozadinu jedne izabrane reči ili izabranog dela teksta. Ukoliko ništa nije označeno, pritiskom na alatku senčenja biće osenčen ceo aktivni pasus. Zbog toga se alatka *Shading* nalazi u grupi *Paragraph* (pasus). Izbor boje senčenja automatski utiče i na boju slova, ukoliko osenčite tekst tamnom bojom, boja slova će se automatski promeniti u belu.

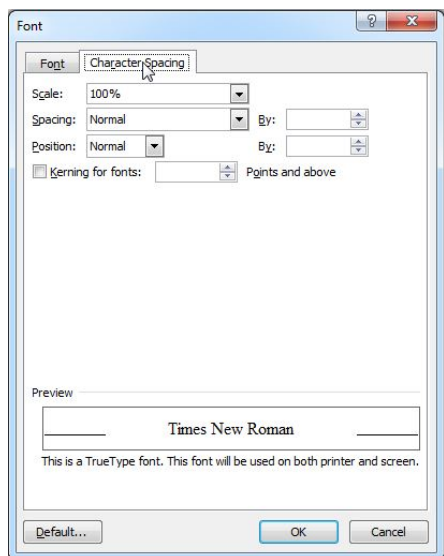


Slika 3.12 Alatka *Shading* i paleta sa bojama.

Dijalog prozora *Font*

Većina alatki koje smo do sada obradili se nalaze i u dijalogu prozora *Font* (slika 3.7) i možete im pristupiti preko ovog prozora. Međutim u dijalogu prozora *Font* se nalaze i neke dodatne opcije kojih nema u grupi *Font* kontekstne trake kartice *Home*. Tu se prvenstveno nalaze dodatni efekti za promenu izgleda slova kao što su: dodavanje senke na slova (engl. *Shadow*), ispisivanje samo ivice slova (engl. *Outline*), izgled kao da su slova uklesana (engl. *Emboss*) ili kao da su slova ugravirana (engl. *Engrave*).

Na kartici *Character Spacing* dijaloga prozora *Font* (slika 3.13) nalaze se opcije za razvlačenje ili komprimovanje znakova (opcija *Scale*) ili za povećavanje odnosno smanjivanje rastojanja između slova (opcija *Spacing*). Dok opcije *Scale* i *Spacing* pomeraju tekst horizontalno, opcija *Position* se koristi da bi se izabrani znakovi pomerili vertikalno (naviše ili naniže) za zadati broj tačaka. Rezultat primene ovih opcija možete videti na narednoj strani.



Slika 3.13 Dijalog prozora *Font* sa otvorenom karticom *Character Spacing*.

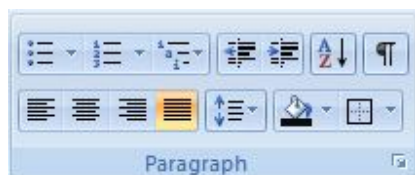
Ovaj tekst je razvučen na 150% opcijom *Scale*

U ovom tekstu je povećano rastoranje između slova opcijom *Spacing* na 2.8 pt

Reči i slova u ovom tekstu su pomerane opcijom *Position*

Formatiranje pasusa (engl. *Paragraph*)

Program *Word* definiše pasus (engl. *Paragraph*) kao sve ono što se nalazi između dve oznake pasusa ¶. Da biste videli oznake pasusa u svom dokumentu, potrebno je da aktivirate alatku za prikazivanje znakova koji se ne štampaju ¶, a koja se nalazi u gornjem desnom uglu grupe *Paragraph* kontekstne trake kartice *Home* (Slika 3.14).







Slika 3.14 Grupa *Paragraph* kontekstne trake kartice *Home*.

Kada aktivirate ovu alatku u vašem dokumentu će se pojaviti "čudni" znakovi: na mestima gde ste pritisnuli taster *Enter* pojaviće se oznake pasusa ¶, između reči (ili na mestima gde ste pritisnuli razmaknicu) će se pojaviti oznake razmaka ·, a na mestima gde ste pritisnuli taster *tab*

pojaviće se oznake za tabulatore → . Preporučujemo vam da uvek držite ovu alatku aktiviranu, kako biste uvek imali uvid u to šta se dešava u dokumentu u kome trenutno radite.

Poravnavanje pasusa

Postoje četiri opcije za horizontalno poravnavanje pasusa:

-  levo (*Left*) - svi redovi su poravnati sa leve strane (osim prvog ukoliko je postavljena uvlaka prvog reda);
-  centrirano (*Center*) - svi redovi su centrirani oko sredine stranice;
-  desno (*Right*) - svi redovi su poravnati sa desne strane;
-  obostrano poravnato (*Justify*) - svi redovi su poravnati i sa leve i sa desne strane (osim prvog ukoliko je postavljena uvlaka prvog reda).


Alatke za poravnavanje pasusa se nalaze u donjem levom uglu grupe *Paragraph* kontekstne trake kartice *Home* (slika 3.14). U tekstu se najčešće koristi levo ili obostrano poravnanje, zato što tako tekst izgleda najurednije. Centrirano poravnanje se koristi kada želite da vam se tekst nađe na centru stranice, na primer, kod naslova, podnaslova, jednačina hemijskih reakcija, formula itd.

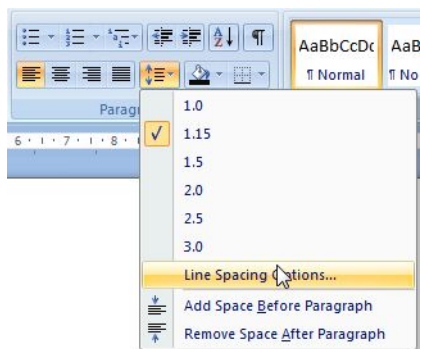
Jedan pasus možete poravnavati tako što ćete stati na bilo koje mesto u tom pasusu i odabrati odgovarajuću alatku za poravnavanje pasusa iz grupe *Paragraph*. Više pasusa možete poravnavati tako što ćete izabrati te pasuse i odabrati odgovarajuću alatku za poravnavanje pasusa.

Razmaci između redova

U programu *Word* postoji dve vrste razmaka između redova:

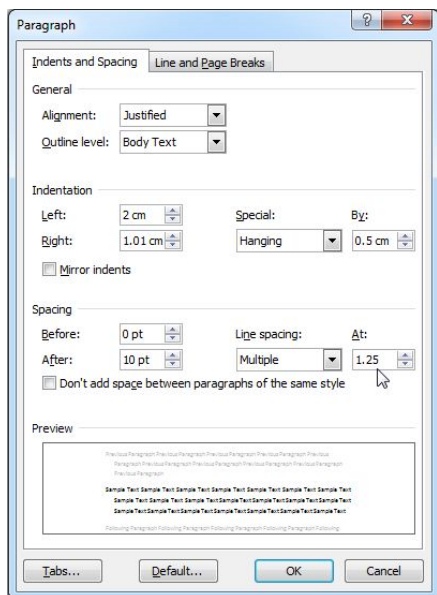
- razmaci između redova koji su u istom pasusu;
- razmaci između redova dva susedna pasusa.

Razmaci između redova se mogu podešavati pomoću *Line Spacing* alatke , koja se nalazi na sredini grupe *Paragraph* kontekstne trake kartice *Home* (slika 3.14). Pritiskom na strelicu na dole ove alatke pojaviće se lista sa definisanim razmacima redova, koji pripadaju istom pasusu (slika 3.15).



Slika 3.15 Alatka *Line Spacing* i paleta sa definisanim razmacima.

Odaberite željeni razmak između redova i ova opcija će biti primenjena na sve redove aktivnog pasusa ili više izabranih pasusa. Ukoliko želite da primenite razmak između redova, koji se ne nalazi na list sa definisanim razmacima, izaberite *Line Spacing Options...* da biste otvorili dijalog prozora *Paragraph* (slika 3.16).



Slika 3.16 Dijalog prozora *Paragraph* sa otvorenom karticom *Indents and Spacing*.

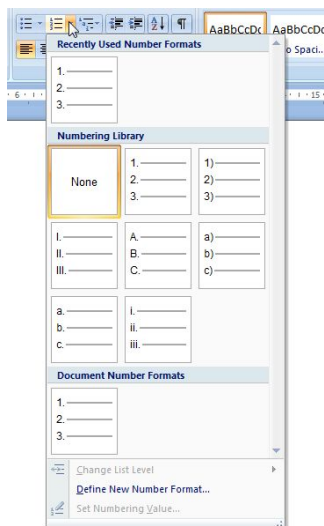
U okviru ovog dijaloga prozora sa desne strane nalazi se opcija *Line spacing* u koju možete uneti željeni razmak između redova (1.25 na slici 3.16). U okviru jednog pasusa ne možete imati definisano više različitih razmaka između redova.

U dijalogu prozora *Paragraph* možete podesiti i razmake između pasusa, pomoću opcije *Spacing*. Opcijom *Before* se definiše razmak između izabranog ili aktivnog pasusa i prethodnog pasusa, a opcijom *After* se definiše razmak između izabranog ili aktivnog pasusa i narednog pasusa. Opcija *Spacing* za definisanje razmaka između pasusa se nalazi i u grupi *Paragraph* kontekstne trake kartice *Page Layout*.

Liste

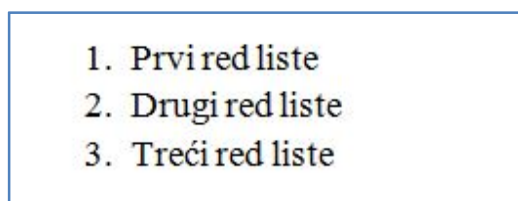
U programu *Word* možete kreirati liste različitog oblika i namene. Alatke za kreiranje listi nalaze se u gornjem levom uglu grupe *Paragraph* kontekstne trake kartice *Home*. Prve dve alatke (*Bullets* i *Numbering*) služe za kreiranje jednostavnih listi u kojima redovi počinju brojevima, slovima ili specijalnim simbolima.

Da biste kreirali listu u kojoj redovi počinju brojevima, pređite u novi red i pritisnite strelicu na dole alatke *Numbering*. Otvoriće se novi prozor u kome možete izabrati željeni format liste (slika 3.17). Izaberite format sa brojevima i na ekranu će vam se pojaviti prvi red liste sa brojem 1. Ukucajte neki tekst, na primer prvi red liste i pritisnite taster *Enter*. Program će vas automatski prebaciti u sledeći red liste koji počinje brojem 2. Ukucajte ponovo neki tekst i pritisnite taster *Enter*. Prebačeni ste u treći red liste. Da biste završili listu i vratili se na normalni način unosa teksta potrebno je da dva puta pritisnete taster *Enter*.



Slika 3.17 Alatka *Numbering* za kreiranje lista

Ukoliko ste sve uradili ispravno vaša lista bi trebala da izgleda kao na slici 3.18.




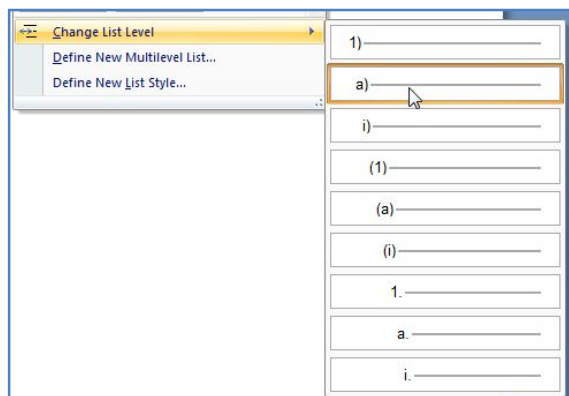
Slika 3.18 Primer liste kreirane u Word-u pomoću alatke *Numbering*.

Ukoliko kreirate listu pomoću alatke *Bullets* tada, umesto brojeva ili slova, redovi vaše liste mogu počinjati specijalnim simbolima kao što su tačka, kružić, kvadrat, strelica, *Office* logo itd.

Napomena: položaj brojeva, slova ili simbola kojima počinje lista, kao i mesto početka teksta u svakom redu, možete sami definisati pomoću uvalaka na lenjiru.

Liste sa više nivoa

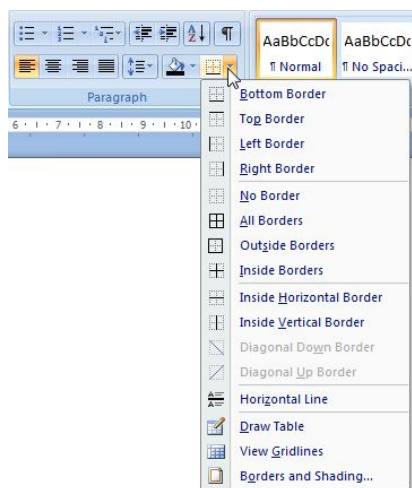
Liste sa više nivoa možete kreirati pomoću alatke *Multilevel List* . Prilikom kreiranja ovakvih listi kada želite da promenite nivo u kome se nalazite potrebno je da izaberete opciju *Change List Level*, koja se nalazi u okviru alatke *Multilevel List* i odaberete nivo u koji želite da pređete (slika 3.19). Sve ostale opcije za kreiranje listi sa više nivoa su iste, kao i prilikom kreiranja jednostavnih lista.




Slika 3.19 Opcija za promenu nivoa prilikom pravljenja liste sa više nivoa.

Alatka za postavljanje ivica i okvira oko pasusa

Vaš dokument možete značajno ulepšati, ukoliko oko nekih veoma bitnih pasusa postavite okvir ili ivicu. Alatka kojom možete ovo uraditi nalazi se u donjem desnom uglu grupe *Paragraph* kontekstne trake kartice *Home*. Ova alatka menja svoj izgled u zavisnosti od opcije koju ste poslednju izabrali. Pritiskom na strelicu na dole ove alatke pojaviće se lista sa opcijama okvira i ivica koje možete postaviti uz izabrani pasus (slika 3.20).



Slika 3.20 Alatka za postavljanje okvira i ivica.

Ukoliko želite da uokvirite izabrani pasus izaberite opciju  *Outside Borders*.

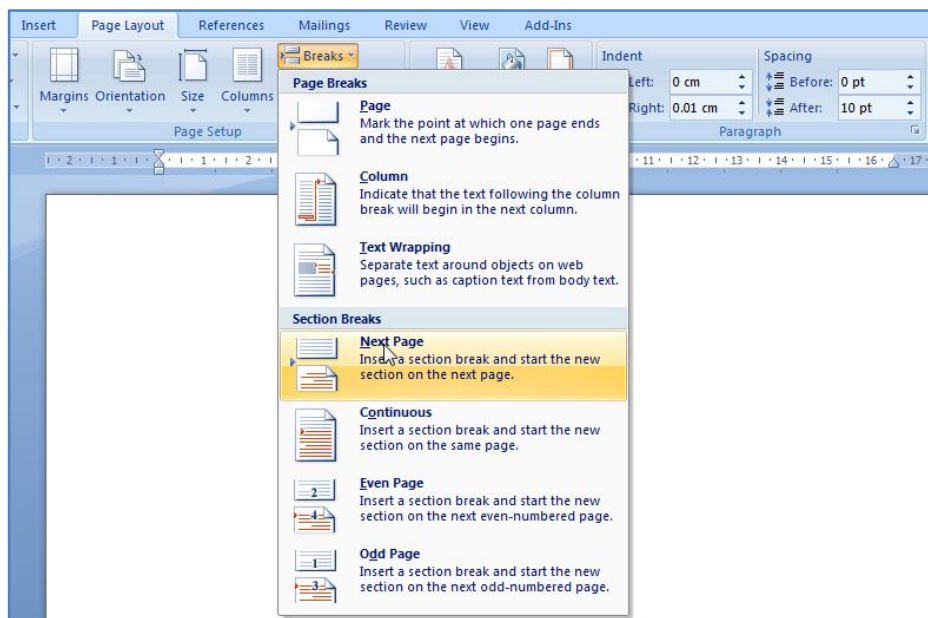
Formatiranje odeljaka i strana

Word koristi prelome odeljaka (engl. *Section*) da bi razdvojio različito formatirane delove dokumenta. Većina dokumenata ima samo jedan odeljak, a dokumente sa više odeljaka treba praviti samo onda kada se u istom dokumentu javi potreba za različito formatiranim delovima. Dobar primer dokumenta u kome je potrebno imati više odeljaka je seminarski rad. Seminarski rad se uobičajeno sastoji iz šest delova: naslovna strana, sadržaj, uvod, rezultati i diskusija, zaključak i literatura. Svaki od ovih delova može biti poseban odeljak. Svaki od odeljaka može imati različita zaglavlja i podnožja, margine, numeraciju strana, orijentaciju papira.


Da biste razdvojili odeljke morate umetnuti prelom odeljka (engl. *Section Brake*) između dva odeljka. Postoji četiri vrste preloma odeljaka (slika 3.21):

- *Next Page* - novi odeljak započinje na novoj strani. Ovo je najčešće korišćeni prelom odeljka;
- *Continuous* - novi odeljak se nalazi na istoj strani kao i prethodni odeljak;
- *Even Page* - novi odeljak započinje na narednoj parnoj strani. Ukoliko je naredna strana neparna, ona će ostati prazna;
- *Odd Page* - novi odeljak započinje na narednoj neparnoj strani. Ukoliko je naredna strana parna, ona će ostati prazna.

Da biste umetnuli prelom odeljka aktivirajte karticu *Page Layout* iz reda sa karticama i u grupi *Page Setup* pritisnite strelicu na dole alatke *Breaks* (slika 3.21).



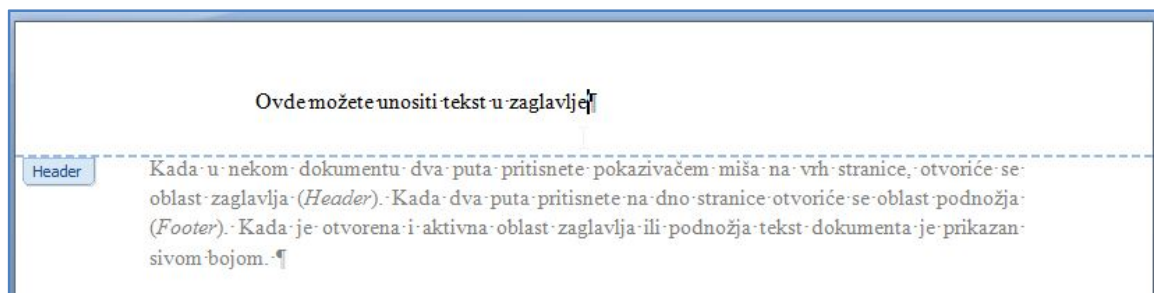
Slika 3.21 Alatka *Breaks*.

Sa liste koja će se pojaviti biće prikazani različiti tipovi preloma, uključujući i četiri tipa preloma odeljka (*Section Breaks*). Pritisnite na željeni tip preloma odeljka da biste ga primenili. Ukoliko vam je uključena alatka za prikazivanje znakova koji se ne štampaju  na ekranu će se prikazati oznaka preloma odeljka.

¶Section Break (Next Page)

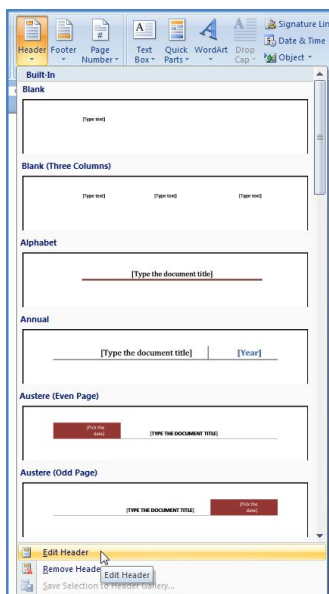
Zaglavlja i podnožja

Zaglavlja (engl. *Header*) i podnožja (engl. *Footer*) su oblasti na gornjoj i donjoj margini stranice. Zaglavlja i podnožja, između ostalog, mogu da sadrže i naslove, brojeve strana, imena autora, datume, slike i vodene žigove. Svaka strana u dokumentu programa *Word* ima zaglavlje i podnožje, samo su ona prazna kada otvorite novi dokument. Jedan način da otvorite zaglavlje ili podnožje je da dva puta pritisnete mišem na vrh (ili dno) strane. Ovo izvlači oblast zaglavlja ili podnožja na površinu (slika 3.22). Kada je aktivna oblast zaglavlja ili podnožja, tekst dokumenta je prikazan sivom bojom. U otvoreno zaglavlje ili podnožje možete direktno unositi tekst, slike, vodene žigove itd. Tekst u zaglavlju ili podnožju možete formatirati (menjati font, boju slova...) na isti način kao i tekst u ostalom delu dokumenta. Pritiskom na taster *Esc* zatvarate zaglavlje ili podnožje i vraćate se u normalni režim rada. Napomena: zaglavlje ili podnožje možete otvoriti na ovaj način samo kada se nalazite u prikazu *Print Layout*. U ostalim prikazima (izuzev *Full Screen Reading*) zaglavlja i podnožja neće biti vidljiva na ekranu.



Slika 3.22 Otvoreno zaglavlje u dokumentu.

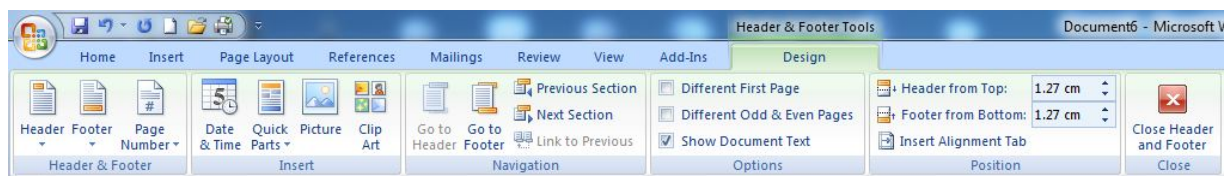
Drugi način da otvorite zaglavlje ili podnožje je da pritisnete na karticu *Insert* u redu sa karticama, a zatim na alatku *Header* ili *Footer* na kontekstnoj traci. Otvoriće se novi prozor sa unapred pripremljenim stilovima zaglavlja ili podnožja (slika 3.23), koje možete odmah koristiti. Ukoliko vam se ne sviđa nijedan od ovih stilova, možete otvoriti prazno zaglavlje i podnožje pomoću opcije *Edit Header* (ili *Edit Footer*). Umetnuto zaglavlje ili podnožje možete ukloniti opcijom *Remove Header* ili *Remove Footer*.



Slika 3.23 Prozor sa unapred pripremljenim stilovima zaglavlja.

Kada otvorite zaglavlje ili podnožje, u redu sa karticama će se pojaviti nova kartica *Design*. Ako pritisnete tu karticu pojavice se nova kontekstna traka, koja je prikazana na slici 3.24.

Na ovoj kontekstnoj traci u grupi *Insert* nalaze se alatke za umetanje datuma ili vremena, brzog teksta (sa imenom autora, naslovom dokumenta, abstraktom), slika ili *Clip Art*-ova.



Slika 3.24 Kontekstna traka kartice *Design*.

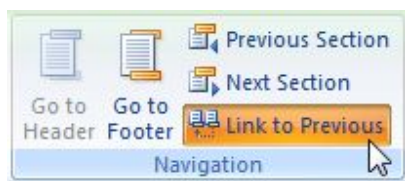
Kada jednom ubacite tekst ili sliku u zaglavlje ili podnožje, isti taj tekst ili slika će se pojaviti u zaglavlju ili podnožju na svakoj strani u dokumentu, odnosno u odeljku (umetanje zaglavlja ili podnožja u dokument sa više odeljaka biće obrađeno kasnije). Obično se prva strana dokumenta (naslovna strana) razlikuje po formatu od ostalih strana i na nju nije potrebno umetati zaglavlje ili podnožje. Da bi ste uklonili zaglavlje ili podnožje sa prve strane dokumenta označite opciju *Different First Page* u grupi *Options* kontekstne trake kartice *Design* (slika 3.24).

Zaglavlja ili podnožja, takođe, mogu biti drugačija na parnim ili neparnim stranicama. Ovo možete postići označavanjem opcije *Different Odd & Even Pages* u grupi *Options* kontekstne trake kartice *Design*. Nakon toga potrebno je da definišete izgled zaglavlja ili podnožja na parnim i neparnim stranama dokumenta.

Pomoću alatki, koje se nalaze u grupi *Position* kontekstne trake kartice *Design*, možete definisati položaj zaglavlja i podnožja u odnosu na ivicu papira. Alatkom *Go to Footer (Header)*, koja se nalazi u grupi *Navigation*, možete se prebacivati iz zaglavlja u podnožje i obrnuto. Alatkom *Close Header and Footer* zatvarate zaglavlje ili podnožje i vraćate se u normalni režim rada (isto to postizete pritiskom na taster *Esc*).

Često ste u knjigama videli da u zaglavlju svake strane stoji ime poglavlja kome ta strana pripada. Takođe, ukoliko želite da u vašem seminarskom radu (koji ima šest delova) svaki deo ima drugačije zaglavlje, a profesor traži da mu seminarski rad pošaljete kao jedan dokument moraćete da naučite da koristite prelome odeljaka. U dokumentu koji se sastoji od više odeljaka, svaki odeljak može imati drugačije zaglavlje i podnožje.

Kada otvorite zaglavlje ili podnožje bilo kog odeljka (osim prvog) u dokumentu sa više odeljaka, grupa *Navigation* kontekstne trake kartice *Design* će izgledati kao na slici 3.25. Obratite pažnju da je alatka *Link to Previous* aktivirana što znači da je zaglavlje ili podnožje tog odeljka povezano sa zaglavljem ili podnožjem prethodnog odeljka. Pritisnite (deaktivirajte) ovu alatku da biste prekinuli tu povezanost. Sada ova dva odeljka mogu imati drugačija zaglavlja ili podnožja.



Slika 3.25 Grupa *Navigation* kontekstne trake kartice *Design* dokumenta sa više odeljaka.

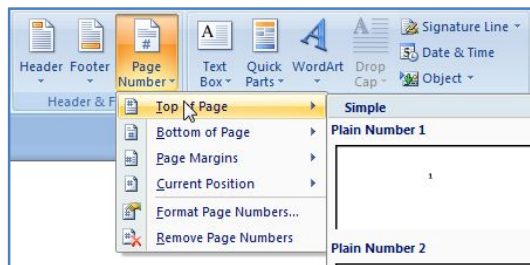
Ukoliko imate više od dva odeljka u dokumentu, potrebno je da prekinete povezanost svakog odeljka sa prethodnim. Između odeljaka se možete kretati pomoću alatki *Previous Section* i *Next Section* koje se nalaze u grupi *Navigation* (slika 3.25). Sada možete urediti zaglavlje i podnožje svakog odeljka posebno. Napomena: kada pokidate vezu između zaglavlja dva odeljka time niste automatski pokidali vezu i između podnožja ta dva odeljka. Da biste pokidali vezu i između podnožja dva odeljka potrebno je da se prebacite u podnožje jednog odeljka i deaktivirate alatku *Link to Previous*.

Umetanje brojeva strana

Umetanje brojeva strana u dokument je veoma jednostavno u programu *Word*. U grupi *Header & Footer*, koja se nalazi na kontekstnoj traci kartice *Insert*, nalazi se alatka *Page Number*. Ukoliko pritisnete ovu alatku otvoriće vam se novi prozor kao što je to prikazano na slici 3.26.

U ovom prozoru možete prvo izabrati poziciju na kojoj će biti umetnut broj strane: u zaglavlju na vrhu strane (*Top of Page*), u podnožju na dnu strane (*Bottom of Page*), na bočnim marginama strane (*Page Margins*) ili na poziciji na kojoj se trenutno nalazi pokazivač (*Current Position*); ova opcija ima smisla jedino ako vam se pokazivač nalazi negde u zaglavlju ili podnožju. Izborom bilo koje od ovih opcija otvoriće se nova lista sa unapred definisanim stilovima i

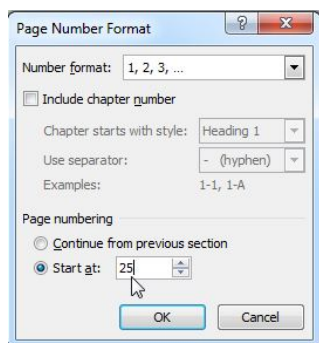
pozicijama brojeva strana. Odaberite opciju koju želite i brojevi strana biće umetnuti u ceo dokument.



Slika 3.26 Alatka *Page Number*

Ukoliko odaberete opciju *Format Page Numbers*, pojaviće se novi dijalog prozora (slika 3.27), u kome možete definisati format brojeva (*Number Format*), odnosno da li će strane biti obeležene arapskim ili rimskim brojevima ili čak slovima.

U ovom dijalogu prozora možete odrediti i od kog broja će početi brojevi strana u vašem dokumentu aktiviranjem *Start At* opcije i unošenjem željenog broja strane u prozor sa desne strane. Na slici 3.27 je prikazano podešavanje brojeva strana za dokument, u kome će prva strana biti označena brojem 25, druga brojem 26 itd. Ova opcija je veoma korisna, ukoliko pišete knjigu ili praktikum, tako da je svako poglavlje jedan dokument.



Slika 3.27 Dijalog prozora *Page Number Format*.

Ukoliko ne želite da se na prvoj strani pojavi broj strane to možete uraditi pomoću alatke *Different First Page* koja se nalazi u grupi *Options* kontekstne trake kartice *Design*, koja će se pojaviti kada otvorite zaglavlje ili podnožje. Primenom ove opcije, prva strana dokumenta neće imati broj dok će druga strana dokumenta biti obeležena brojem 2.

Vratimo se sada našem seminarskom radu. Prva strana dokumenta je naslovna strana, na drugoj strani dokumenta nalazi se sadržaj, a uvod počinje na trećoj strani. Ukoliko umetnemo brojeve strana na prethodno opisan način uvod će počinjati na strani obeleženoj brojem 3. Mi ipak želimo da nam uvod počinje na strani obeleženoj brojem 1, pošto se naslovna strana i sadržaj ne broje, kada se određuje ukupan broj strana nekog seminarskog rada.

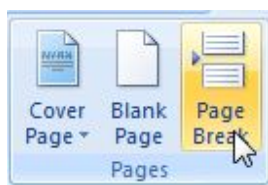
Da bi ovo postigli, potrebno je da naš dokument sa seminarskim radom podelimo u odeljke. Recimo, jedan odeljak mogu biti prve dve strane (naslovna strana i sadržaj), a ostatak dokumenta može biti drugi odeljak (ukoliko ne želimo različita zaglavlja i podnožja u ostalim delovima dokumenta). Zatim je potrebno da prekinemo povezanost zaglavlja i podnožja ova dva segmenta deaktiviranjem alatke *Link to Previous* kako je to objašnjeno ranije. Nakon toga postavite pokazivač na bilo koju stranu drugog odeljka i otvorite prozor dijaloga *Page Number Format*. Aktivirajte opciju *Start At*, uneste broj 1 u prozor sa desne strane i pritisnite *OK*. Izaberite karticu *Insert* iz trake sa karticama i pomoću alatke *Page Numbers* umetnite brojeve strana na željeno mesto. Naslovna strana i sadržaj neće biti obeležene, dok će prva strana uvoda biti obeležena brojem 1.

Formatiranje strana

Formatiranje strana je najviši nivo formatiranja i podrazumeva određivanje izgleda strana, veličine papira na kome će dokument biti odštampan, orijentacije papira itd.

Umetanje preloma strane

Ukoliko završavate neki deo teksta vašeg dokumenta i želite da sledeći deo započnete na novoj strani, možete pritiskati taster *Enter* sve dok kursor ne pređe na sledeću stranu. Ovakav način otvaranja nove strane smatra se računarski nepismenim i ukoliko nekome pošaljete takav dokument, rizikujete da ostavite nepovoljan utisak. Mnogo jednostavniji način za otvaranje nove strane je umetanjem preloma strane u dokument. Alatka za umetanje preloma strane (*Page Break*) nalazi se u grupi *Pages* kontekstne trake kartice *Insert* (slika 3.28). Izborom ove alatku otvara se nova strana na mestu na kome se nalazio kursor.



Slika 3.28 Grupa *Pages* kontekstne trake kartice *Insert* i alatka *Page Break*.

U okviru grupe *Pages* nalazi se još i alatka *Blank Page*, koja umeće praznu stranu između dve strane dokumenta i alatka *Cover Page*, koja sadrži veliki broj unapred definisanih stilova naslovnih strana.

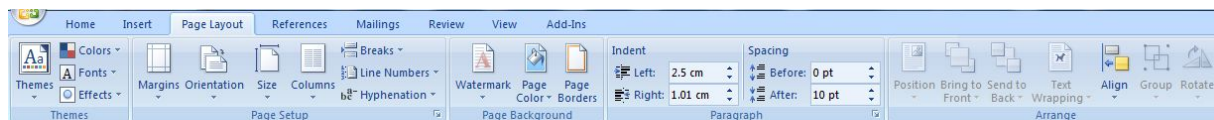
Margine

Većina alatki koje se koriste za formatiranje strana nalaze se na kontekstnoj traci kartice *Page Layout* (slika 3.29). Prva alatka sa leve strane grupe *Page Setup* ove kontekstne trake se zove *Margins* i koristi se za uređivanje margina stranica. Pritiskom na alatku *Margins* otvoriće se novi prozor sa listom unapred definisanih margina. Ukoliko želite neki poseban format margina možete izabrati opciju *Custom Margins* i otvoriće se dijalog prozora *Page Setup* u kome možete postaviti željeni format margina.

Orijentacija i format strane

Postoje dve moguće orijentacije strane - portretna (engl. *Portrait*) i pejzažna (engl. *Landscape*). Program *Word* podrazumevano otvara novi dokument sa portretnom orijentacijom strane, koja se češće koristi u dokumentima. Pejzažna orijentacije se uglavnom koristi kada se prikazuje tabela sa velikim brojem kolona, koja ne može da stane na jednu stranu portretne orijentacije. Ukoliko želite da promenite orijentaciju strane u pejzažnu to možete učiniti pomoću alatke *Orientation*, koja se nalazi u grupi *Page Setup* kontekstne trake kartice *Page Layout* (slika 3.29). Pažnja: promenom orijentacije jedne strane menja se orijentacija svih strana aktivnog dokumenta.

Ukoliko u istom dokumentu želite da imate strane i portretne i pejzažne orijentacije morate dokument podeliti u odeljke i zatim određenim odeljcima dodeliti pejzažnu orijentaciju. Sve strane jednog odeljka će imati istu orijentaciju strane.

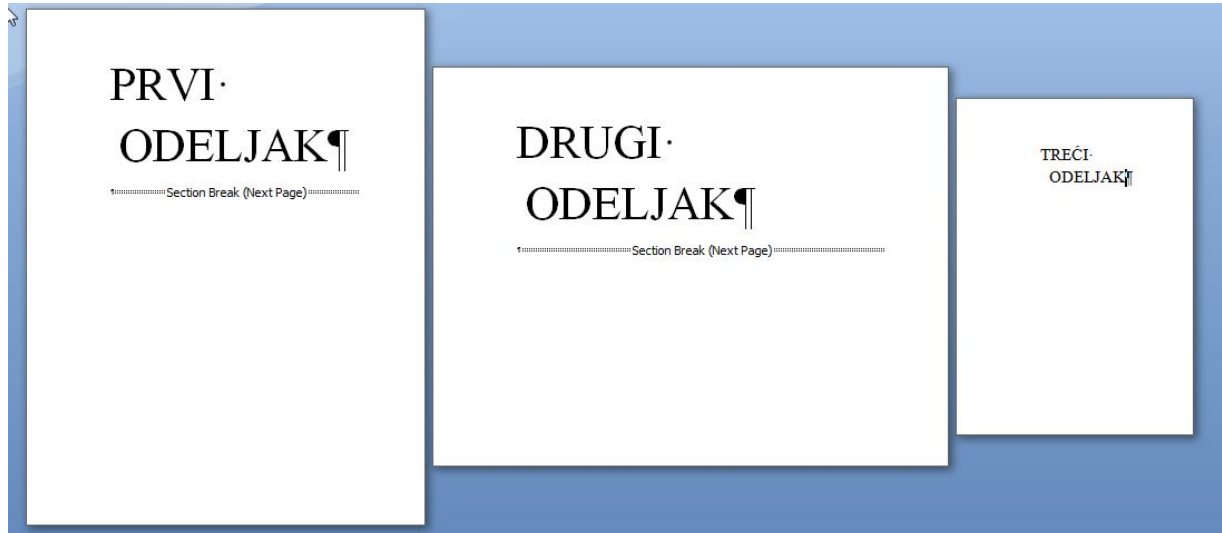


Slika 3.29 Kontekstna traka kartice *Page Layout*.

Format (veličinu) strane možete podešavati pomoću alatke *Size* koja se nalazi u grupi *Page Setup* kontekstne trake kartice *Page Layout* (slika 3.29). Pritiskom na ovu alatku dobićete listu sa velikim brojem unapred definisanih i standardizovanih formata strana. Pritiskom na opciju *More Paper Sizes* otvoriće se dijalog prozora *Page Setup* u kome možete postaviti željeni format strane. Napomena: prilikom izbora formata strane razmislite o tome da li će se dokument štampati na papiru. Ukoliko se dokument štampa, izaberite format strane koji podržava vaš štampač.

Sve strane u istom odeljku imaju istu format. Kad promenite format jedne strane, sve strane u istom odeljku će promeniti format. Ukoliko želite da napravite dokument u kome će biti strane različitih formata, morate dokument podeliti u odeljke. Na slici 3.30 dat je prikaz dokumenta u kome su prve dve strane formata A4, a treća strana formata B6. Prva i treća strana su u

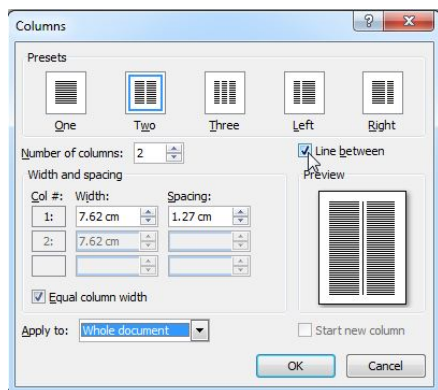
portretnoj, dok je druga u pejzažnoj orijentaciji. Ovakav dokument je moguće napraviti jedino ukoliko je svaka strana poseban odeljak.



Slika. 3.30 Dokument u kome su primenjene različite orijentacije i formati strana.

Stubci

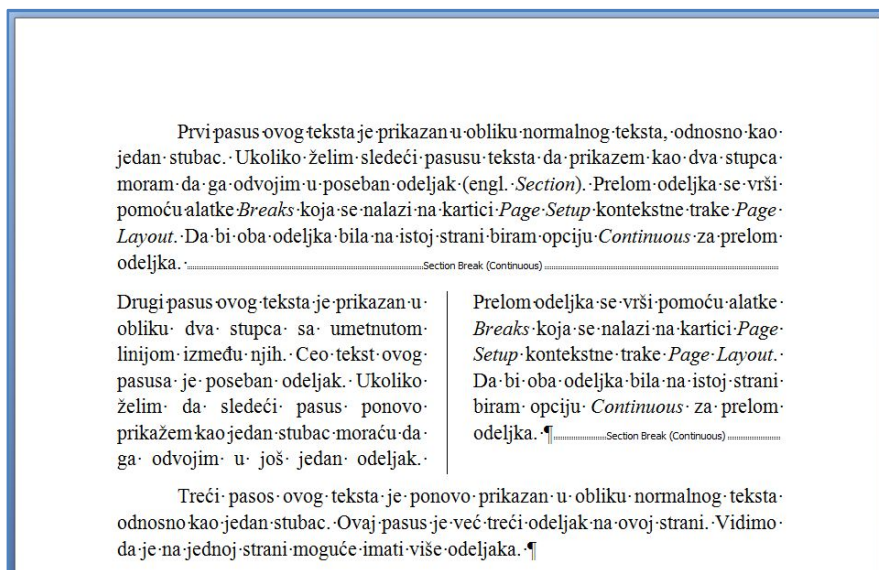
Tekst dokumenta može biti podeljen u dva ili više stubaca. Većina dnevnih novina i naučnih časopisa na ovakav način objavljuje tekstove. Alatka za deljenje teksta u stubce - *Columns* se nalazi u grupi *Page Setup* kontekstne trake kartice *Page Layout* (slika 3.29). Pritiskom na ovu karticu dobićete listu opcija da podelite tekst u dva ili tri jednaka stubca, kao i opcije da desni ili levi stubac budu veći. Ukoliko izaberete opciju *More Columns* sa dna liste pojaviće se dijalog prozora *Columns* (slika 3.31).



Slika 3.31 Dijalog prozora *Columns*.

U ovom prozoru dijaloga možete odrediti broj stubaca koje želite, umetnuti liniju između stubaca (*Line between*), definisati širinu stubaca i rastojanje između stubaca.

I kod stubaca važi pravilo odeljaka, odnosno ukoliko izaberete da prikazete samo deo teksta u obliku stubaca, taj deo mora biti poseban odeljak (slika 3.32).



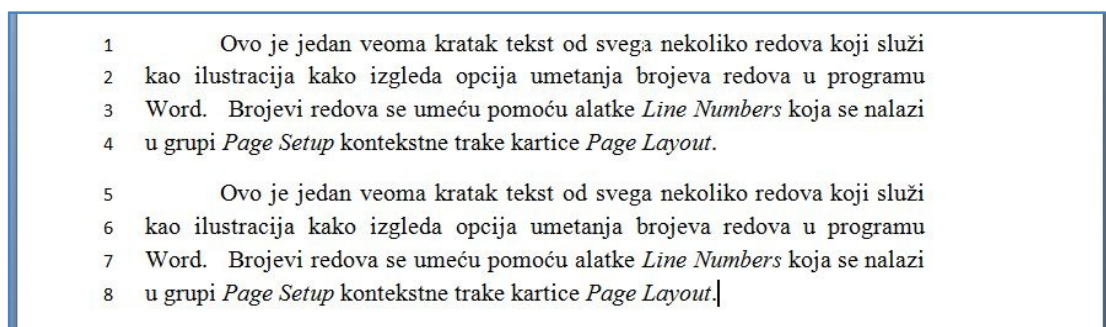
Slika 3.32 Na istoj strani se mogu prikazati različiti formati teksta samo ukoliko je tekst podeljen u odeljke.

Umetanje brojeva redova

Ponekad je korisno da se na stranici vide brojevi redova, naročito ukoliko više ljudi radi na istom dokumentu. To znatno olakšava komunikaciju između korisnika, zato što možete reći da ste pronašli grešku u osmom redu pete stranice. U dokument koji pravite u programu *Word* možete lako umetnuti brojeve redova pomoću alatke *Line Numbers* koja se nalazi u grupi *Page Setup* kontekstne trake kartice *Page Layout* (slika 3.29). Izborom ove alatke dobićete listu sa četiri načina unošenja brojeva redova:

- *Continuous* - neprekidni, brojevi redova se umeću neprekidno počevši od prvog reda prve strane;
- *Restart Each Page* - brojevi redova počinju od broja 1 na početku svake strane;
- *Restart Each Section* - brojevi redova počinju od broja 1 na početku svakog odeljka;
- *Suppress for Current Paragraph* - brojevi redova se ne prikazuju za izabrani pasus.

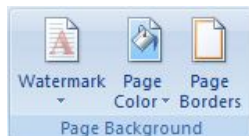
Kako izgleda tekst sa umetnutim brojevima redova možete videti na slici 3.33.



Slika 3.33 Prikaz teksta sa umetnutim brojevima redova.

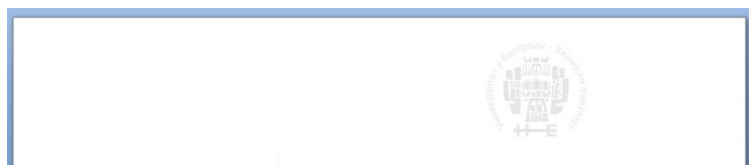
Umetanje vodenog žiga, boje pozadine i okvira strane

U grupi *Page Background* kontekstne trake kartice *Page Layout* (slika 3.34) se nalaze tri alatke koje prvenstveno služe za vizuelno "ulepšavanje" strane.



Slika 3.34 Grupa *Page Background* kontekstne trake kartice *Page Layout*.

Verovatno ste u špijunskim filmovima videli veoma tajna dokumenta na kojima je vodenim žigom u pozadini teksta umetnut napis poverljivo (engl. *Confidential*). U programu Word možete alatkom vodenog žiga (engl. *Watermark*) umetnuti simulirani vodeni žig na stranu dokumenta. Pritiskom na alatku *Watermark* otvoriće se prozor sa unapred definisanim vodenim žigovima. Izborom opcije *Custom Watermark* možete definisati tekst vodenog žiga ili čak staviti neku sliku kao vodeni žig. Ova alatka vam uglavnom neće koristiti (osim ukoliko zaista ne pravite strogo poverljiva dokumenta), jer vodeni žig uglavnom kvari izgled dokumenta. Vodeni žig se može umetnuti i u zaglavlje dokumenta i takav dokument može da izgleda veoma lepo. Primer dela jedne strane gde je u zaglavlje umetnut grb Hemijskog fakulteta kao vodeni žig možete videti na slici 3.35.



Slika 3.35 Zaglavlje sa grbom HF kao vodenim žigom.

Alatkom *Page Color* možete promeniti boju cele strane. Opcijom *Fill Effect* možete postići razne efekte kao što su gradijenti, teksture, obrasci ili čak umetati slike. Oprez: ukoliko promenite boju strane dokumenta i taj dokument štampate, potrošićete veoma puno mastila i dobiti dokument koji se veoma teško čita. Ova opcija vam može poslužiti da vidite kako će izgledati odštampan dokument, ukoliko planirate da ga štampate na papiru u boji. Napomena: molimo vas da seminarske radove iz Osnova primene računara u hemiji predajete isključivo na neobojenim stranama.

Alatkom *Page Border* možete umetati okvir oko strane. Ova alatka vam nudi veliki izbor linija okvira različitih stilova i debljina. Takođe, opcijom *Art* možete umetati okvire različitih tekstura.

Zadatak 1. Korišćenjem alatki *Subscript* i *Superscript* otkucajte formulu sledećih molekula i jona:

H_2O ; $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$; $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$; NaHCO_3 ; Ca^{2+} ; SO_4^{2-} ; H_2PO_4^- ; $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$

Zadatak 2. Na osnovu svega što ste naučili o formatiranju slova i znakova, formatiranju pasusa i kreiranja listi, pokušajte da napravite dokument kao na slici ispod.

Kada napravite dokument, možete i da rešite zadatke iz njega.

KOLOKVIJUM IZ HEMIJE

23. januar 2011. godine Ime i prezime: _____

1) Predvidite koje su reakcije moguće, dovršite ih i obrazložite odgovor:

- a) $\text{Zn} + \text{CuSO}_4 \rightarrow$
- b) $\text{HCl} + \text{NaNO}_2 \rightarrow$
- c) $\text{Al}(\text{OH})_3 + \text{NaOH} \rightarrow$

2) Nađite empirijsku formulu kristalohidrata koji sadrži 18,40 % natrijuma, 12,80 % sumpora, 25,60 % kiseonika (ne računajući onaj iz kristalne vode) i 43,20 % vode.

3) Za molekule BeF_2 , BF_3 , NH_3 , SF_4 , ClF_5 predvidite hibridizaciju centralnog atoma i geometriju molekula.

Zadatak 3. Napravite stranicu sa tri pasusa u kojoj će prvi pasus biti u jednom, drugi u dva a treći u tri stubca.

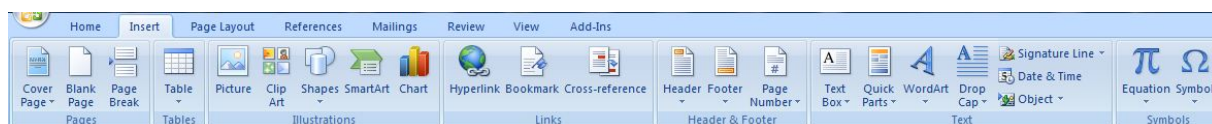
Datum

Potpis asistenta

Vežba 4.

Microsoft Word - rad sa tabelama, slikama, umetanje simbola i formula

Kartica Insert (umetni) je druga kartica u redu sa karticama. Pritiskom na ovu karticu otvoriće se kontekstna traka sa sedam grupa (slika 4.1). Neke od ovih grupa, kao što su *Pages* i *Header & Footer* smo već obradili u prethodnoj vežbi. Danas ćemo se pozabaviti mogućnostima programa *Word* za umetanje i formatiranje tabela i slika. Nakon toga ćemo naučiti kako se mogu ispisivati simboli, koji se veoma često koriste prilikom pravljenja tekstova iz hemije, kao i način za umetanje matematičkih formula u dokument.

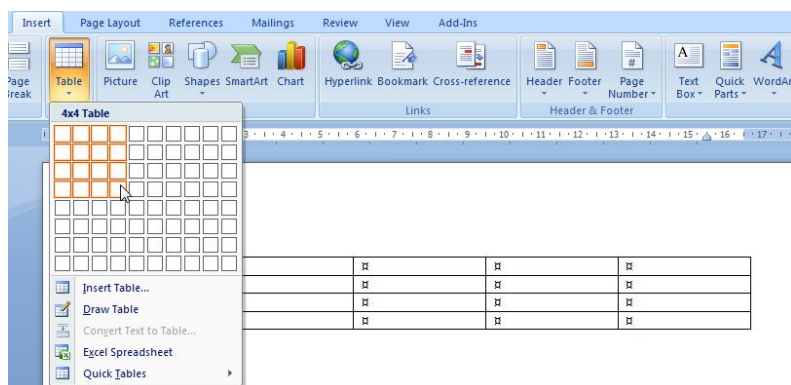


Slika 4.1 Kontekstna traka kartice *Insert*.

Tabele

Tabelarni prikaz je sistematičan i pregledan način da se prikaže velika količina podataka. Hemičari često koriste tabele, kada žele da prikažu rezultate svojih eksperimenata, proračuna, neke pravilnosti u serijama jedinjenja itd. Velika je verovatnoća da ćete u svakom seminarskom radu koji budete radili tokom studija, imati po nekoliko tabela.





Program *Word* nudi više načina za umetanje tabela u dokument i svi oni će biti prikazani ako pritisnete alatku *Table*, koja se nalazi u grupi *Tables* kontekstne trake kartice *Insert*. Pritiskom na ovu alatku otvoriće se novi prozor, kao što je to prikazano na slici 4.2.

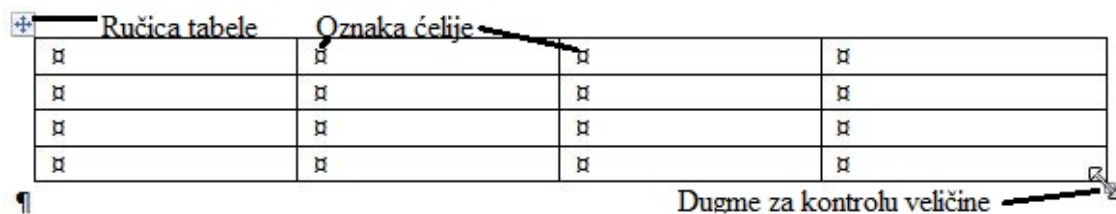


Slika 4.2 Unošenje tabele u dokument preko alatke *Table*.


Gornji deo ovog prozora se sastoji od mreže tabele. Prevlačenjem pokazivača miša preko mreže možete odabrati željeni broj kolona i redova u novoj tabeli. Obratite pažnju kako se, dok povlačite pokazivač miša po mreži, tabela u realnom vremenu iscrtava u prozoru dokumenta.

Ovo je prikaz uživo (*Live Preview*), još jedna nova opcija *Word 2007* programa, pomoću koje, pre nego što primenite neku opciju možete dobiti prikaz kako će ta opcija izgledati u dokumentu. Na slici 4.2 je prikazan način kako se u dokument može umetnuti tabela sa četiri kolone i četiri reda (4x4 tabela). Umetnuta tabela će se, bez obzira na broj kolona, protezati od leve do desne margine stranice i sve kolone će biti iste širine.

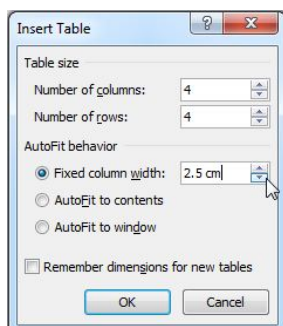
Pogledajmo sada malo bolje tabelu koju smo uneli. Napomena: da biste videli sve karakteristike tabele potrebno je da bude uključena opcija za prikazivanje znakova koji se ne štampaju . U svakoj ćeliji tabele nalazi se oznaka ćelije  koja pokazuje položaj ćelije. Ovo je veoma korisno ukoliko pravite tabelu bez okvira u kojoj same ćelije nisu vidljive. Ukoliko postavite pokazivač miša na oznaku ćelije i pritisnete levi taster, moći ćete da počnete sa unosom teksta u ćeliju. U gornjem levom uglu tabele nalazi se ručica tabele  pomoću koje možete izabrati celu tabelu i pomerati je po ekranu. U donjem desnom uglu tabele nalazi se dugme za kontrolu veličine tabele . Ukoliko postavite pokazivača miša na ovo dugme, pokazivač će se promeniti u dvostruku iskošenu strelicu (Slika 4.3), pomoću koje možete menjati veličinu prikaza tabele u dokumentu.



Slika 4.3 Prikaz tabele na ekranu.

Širine kolona i visine redova tabele možete menjati pomeranjem ivica tabele. Kada stanete pokazivačem miša na neku od ivica tabele on će promeniti oblik u dvostruku strelicu . Povlačenjem ove strelice može se menjati visina reda ili širina kolone.

Drugi način za umetanje tabele je preko opcije *Insert Table* koja se nalazi u donjem delu prozora alatke *Tables* (slika 4.2). Ovaj način umetanja tabele vam nudi više kontrole nad konačnim izgledom umetnute tabele. Izborom opcije *Insert Table* otvoriće se dijalog prozora *Insert Table* kako je to prikazano na slici 4.4.



Slika 4.4. Dijalog prozora *Insert Table*.

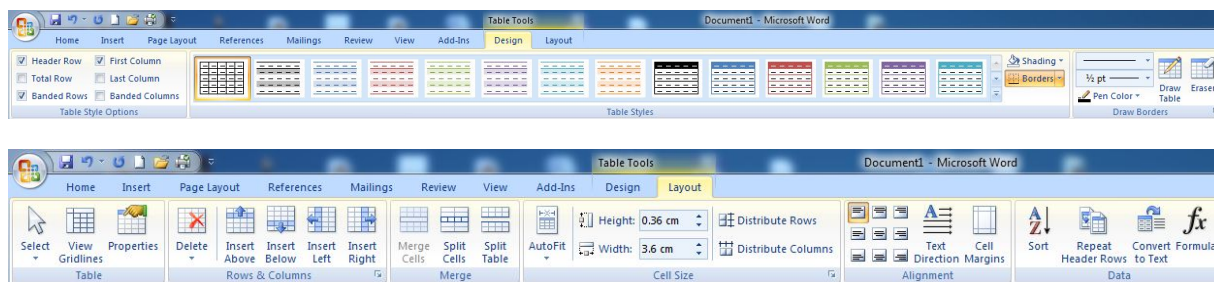
U ovom prozoru možete podesiti broj kolona i redova kao i način ponašanja *AutoFit* funkcije. *AutoFit* funkcija određuje širinu kolona tabele i postoje tri načina na koji se ova funkcija može podesiti:

- Možete sami zadati željenu širinu kolna pomoću *Fixed column width* opcije;
- *AutoFit to contents* opcija podešava širinu kolone tako da odgovara unetom sadržaju. U početku, dok je tabela prazna kolone će biti veoma uske. Kako počnete da unosite podatke u tabelu tako će se širina kolona menjati u zavisnosti od veličine unetog sadržaja;
- *AutoFit to Window* podešava širinu kolona tako da se umetnuta tabela, bez obzira na broj kolona, proteže od leve do desne margine stranice. Sve kolone će biti iste širine.

Treći način unošenja tabele je preko opcije *Draw Table*, gde možete sami nacrtati tabelu kakvu želite. Crtanje tabele je prilično naporno i najčešće potpuno uzaludno tako da ovu opciju nećemo detaljnije obrađivati. Ako izaberete opciju *Quick Tables* pojaviće vam se prozor sa unapred pripremljenim oblicima i formatima tabela.

Rad sa tabelama


Rad sa tabelama u programu Word je prilično jednostavan. Kada jednom umetnete tabelu na naslovnoj traci programa *Word* pojaviće se natpis *Table Tools* a u redu sa karticama pojaviće se dve nove kartice *Design* i *Layout* (slika 4.5). Ove dve kartice će se pojaviti svaki put kada izaberete tabelu ili neki njen deo. Na kontekstnim trakama ove dve kartice nalaze se sve alatke koje ćete koristiti u radu sa tabelama.



Slika 4.5. Kontekstne trake kartica *Design* i *Layout* koje se pojavljuju nakon umetanja tabele ili izabiranja nekog dela umetnute tabele.

Kontekstna traka kartice *Design* (slika 4.5 gore) uglavnom sadrži alatke za vizuelno ulepšavanje tabele. Veći deo ove trake zauzima grupa *Table Styles* u kojoj se nalaze unapred definisani načini formatiranja tabela. Na desnoj strani ove grupe nalaze se dve korisne alatke *Shading* i *Borders*. Alatkom *Shading* možete umetati različite boje pozadina u izabrani deo tabele. Ukoliko želite da obojite pozadinu samo jedne ćelije, izaberite tu ćeliju i pomoću alatke *Shading* izaberite željenu boju pozadine. Ukoliko želite da obojite pozadinu celog jednog reda (npr. naslovnog reda) ili

kolone izaberite željeni red ili kolonu i primenite opciju *Shading*. Pozadinu cele tabele možete obojiti tako što ćete izabrati celu tabelu pritiskom na ručicu tabele i primeniti opciju *Shading*.

Pomoću alatke *Borders* možete iscrtavati ili učiniti nevidljivim ivice tabele. I ova opcija se primenjuje samo na izabrane delove tabele. Napomena: ukoliko ivice neke ćelije učinite nevidljivim to ne znači da je ta ćelija izbrisana. Ona je i dalje tu samo su joj ivice nevidljive. Zato je korisno da uvek držite uključenu opciju za prikazivanje znakova koji se ne štampaju  kako biste pomoću oznaka ćelije znali gde se koja ćelija nalazi (slika 4.6)

☒	☒	☒	☒
☒	☒	☒	☒
☒	☒	☒	☒
☒	☒	☒	☒

Slika 4.6 Prazna tabela u kojoj su prikazane samo ivice tabele i ivice prvog reda. Samo pomoću oznaka ćelija ☒ možemo videti gde se koja ćelija nalazi.


U okviru grupe *Draw Borders* se nalaze alatke za izbor stila, debljine i boje linija kojima su iscrtane ivice tabele, kao i alatke za ručno crtanje tabele.

U okviru grupe *Table Style Options* koja se nalazi na kontekstnoj traci kartice *Design*, se nalaze opcije za dodeljivanje drugačijeg formata prvom redu tabele (često se zove i naslovni red tabele) ili prvoj koloni tabele.

Kartica *Layout*

Kontekstna traka kartice *Layout* (slika 4.5 dole) sadrži brojne korisne alatke koje ćete koristiti pri radu sa tabelama, pa ćemo ove alatke detaljnije objasniti.

Sa leve strane ove kontekstne trake nalazi se grupa *Table* sa tri alatke. Pomoću alatke *Select* možete izabrati samo ćeliju u kojoj se trenutno nalazi pokazivač (*Select Cell*), celu kolonu (*Select Column*), red (*Select Row*) ili celu tabelu (*Select Table*). Izabrani delovi tabele će biti označeni svetlo plavom bojom.

Napomena: delove tabele možete izabrati i na brži način. Ukoliko želite da izaberete jednu ćeliju, postavite pokazivač miša sa leve strane oznake te ćelije i sačekajte dok se pokazivač ne pretvori u iskošenu crnu strelicu (slika 4.7a). Pritisnite levo dugme miša i željena ćelija će biti izabrana. Ukoliko želite da izaberete više ćelija, držite pritisnuto levo dugme miša i pomerajte miša preko ostalih ćelija. Da biste izabrali jednu kolonu postavite pokazivač miša iznad prve ćelije te kolone i sačekajte dok se pokazivač ne pretvori u crnu vertikalnu strelicu (slika 4.7b). Pritisnite levo dugme miša i sve ćelije kolone će biti izabrane. Ukoliko želite da izaberete ceo red, postavite pokazivač miša sa leve strane prve ćelije u tom redu. Pokazivač će se pretvoriti u belu iskošenu strelicu (slika 4.7c). Pritisnite levo dugme miša. Kao što smo već naučili, celu tabelu možete izabrati pritiskom na ručicu tabele , koja se nalazi u gornjem levom uglu tabele.

	☒	☒
☒	☒	☒
	☒	☒

a)

	☒	☒	☒
☒	☒	☒	☒
☒	☒	☒	☒
☒	☒	☒	☒

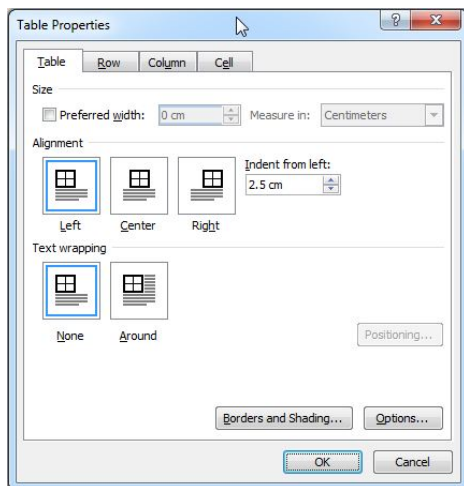
b)

	☒	☒	☒
☒	☒	☒	☒
	☒	☒	☒

c)

Slika 4.7 Načini za brzi izbor: a) ćelije, b) kolone i c) reda.

Izborom alatke *Properties* iz grupe *Table* kontekstne trake kartice *Layout* otvoriće se dijalog prozora *Table Properties* u kojem se nalaze četiri kartice; *Table*, *Row*, *Column* i *Cell* (slika 4.8).



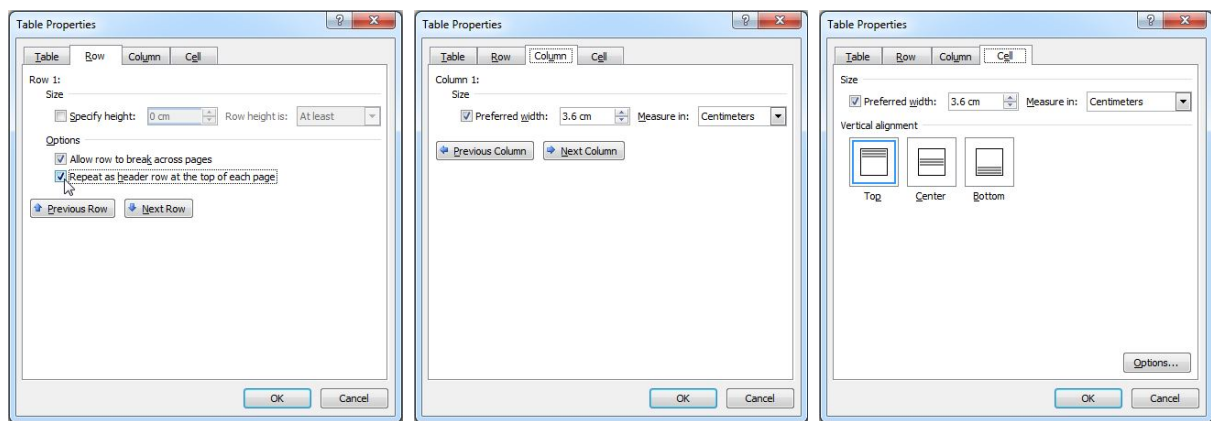
Slika 4.8 Dijalog prozora *Table Properties* sa otvorenom karticom *Table*.

U okviru kartice *Table* prva opcija (*Size*) služi za ručno postavljanje širine **cele** **tabele**, tako što ćete upisati željenu širinu tabele u kućicu sa desne strane. Opcija *Alignment* služi za horizontalno poravnavanje **cele** **tabele**. Tabela može biti postavljena uz levu marginu (*Left*), na centar (*Center*) ili uz desnu marginu stranice (*Right*). Ukoliko je tabela poravnata uz levu marginu stranice, možete je odvojiti od margine pomoću *Indent from left* opcije. Opcija *Text Wrapping* vam omogućava da tabelu okružite tekстом. Word podrazumevano ostavlja celu širinu stranice za tabelu i ne dozvoljava da se tekst nađe sa leve ili desne strane tabele. Ukoliko želite da umetnete tekst sa leve ili desne (ili obe) strane tabele izaberite podešavanje *Around* u okviru opcije *Text Wrapping*. Napomena: ova opcija će imati smisla samo ukoliko vam je tabela znatno uža od širine stranice.

Kartica *Row* dijaloga prozora *Table Properties* (slika 4.9a) sadrži opcije za umetanje željene visine reda (*Size*). Napomena: ukoliko je izabran samo jedan red tabele ili se pokazivač nalazi u

jednoj ćeliji (aktivna ćelija) tada će se promena visine reda primenjivati samo na taj red (red u kome se nalazi aktivna ćelija). Prelazak iz reda u red možete vršiti pomoću *Previous Row* i *Next Row* komandi. Ukoliko je izabrana cela tabela tada će se promeniti visina svih redova u tabeli.

Takođe, na ovoj kartici se nalazi opcija da se redovi tabele prenesu na narednu stranicu ukoliko je to potrebno (*Allow row to break across pages*) kao i opcija da se izabrani red pojavi na početku svake strane na kojoj je tabela (*Repeat as header row at the top of each page*).



a)

b)

c)

Slika 4.9 Dijalog prozora *Table Properties* sa otvorenom karticom: a) *Row*, b) *Column*, i c) *Cell*.

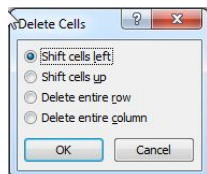
Kartica *Column* dijaloga prozora *Table Properties* (slika 4.9b) sadrži opcije za umetanje željene širine kolone (*Size*). Širina će se menjati samo za izabranu kolonu ili kolonu u kojoj se nalazi aktivna ćelija. Ukoliko želite da promenite širine svih kolona u tabeli potrebno je da izaberete celu tabelu pre otvaranja dijaloga prozora *Table Properties*.

Opcijom *Size* koja se nalazi na kartici *Cell* (slika 4.9c) možete menjati širinu kolone u kojoj se nalazi izabrana ili aktivna ćelija. Pomoću opcije *Vertical Alignment* možete vertikalno poravnavati tekst u svakoj ćeliji. Ukoliko izaberete celu tabelu, vertikalno poravnanje će se odnositi na tekst u svim ćelijama. Na slici 4.10 je prikazan primer tabele u kojoj je u ćeliji A tekst vertikalno poravnat na vrhu (*Top*), u ćeliji B na sredini (*Center*) a u ćelijama C i D na dnu (*Bottom*) ćelije.

A	B
C	D

Slika 4.10 Različiti načini vertikalnog poravnavanja teksta u ćelijama.

Grupa *Rows & Columns* se sastoji od pet alatki. Alatkom *Delete* može se brisati jedna (ili više) izabrana ćelija (*Delete Cells*), kolona (*Delete Columns*), red (*Delete Rows*) ili cela tabela (*Delete Table*). Kada brišete jednu ili više ćelija, programu su potrebne dodatne informacije kako da pomeri ćelije koje se graniče sa izbrisanim ćelijama, pa će se pojaviti prozor kao na slici 4.11.



Slika 4.11 *Delete Cells* prozor.

Ovde možete izabrati opciju da pomerite sve ćelije sa desne strane od izbrisane ćelije na levo ili da ćelije ispod obrisane ćelije pomerite na gore. Na ovaj način možete dobiti tabelu nepravilnog izgleda kao što je to prikazano na slici 4.12.

⌘	⌘	⌘	⌘
⌘	⌘	⌘	⌘
⌘	⌘	⌘	
⌘	⌘	⌘	

Slika 4.12 Tabela nepravilnog izgleda: prva dva reda imaju po četiri ćelije a poslednja dva po tri. Ova tabela je dobijena iz tabele 4x4 gde je u trećem i četvrtom redu izbrisana po jedna ćelija.

Napomena: ćelije, redove, kolone i celu tabelu možete izbrisati i tako što ćete ih izabrati i pritisnuti taster *Backspace* na tastaturi. Taster *Delete* ne briše izabrane ćelije, redove, kolone i tabelu već samo njihov sadržaj.

Preostale četiri alatke u grupi *Rows & Columns* služe za umetanje novih redova i kolona u već postojeću tabelu. Redovi se mogu umetati iznad ili ispod izabranog reda ili reda u kome se nalazi aktivna ćelija, a kolone sa leve ili desne strane izabrane kolone ili kolone u kojoj se nalazi aktivna ćelija. Napomena: novi red možete umetnuti nakon poslednjeg reda u tabeli tako što ćete aktivirati ili izabrati poslednju ćeliju tabele i pritisnuti taster *Tab*.

Alatke koje se nalaze u grupi *Merge* služe za spajanje ili deljenje ćelija ili cele tebele. Dve ili više ćelija možete spojiti u jednu tako što ćete ih izabrati i zatim aktivirati alatku *Merge Cells*. Ukoliko su ćelije koje se spajaju sadržavale tekst, taj tekst će se naći i u spojenoj ćeliji.

Alatkom *Split Cells* možete podeliti izabranu ćeliju na više ćelija. Potrebno je prvo izabrati ćeliju koju želite da podelite i aktivirati alatku *Split Cells*. Pojaviće se prozor sa opcijom za izbor broja ćelija na koliko će se podeliti izabrana ćelija. Posledice primene alatke *Merge Cells* i *Split Cells* možete videti na slici 4.13.

O funkciji *AutoFit*, kao i o alatkama za podešavanje visine redova i širine kolona koje se nalaze u grupi *Cell Size*, smo već govorili ranije u tekstu tako da ih ovde nećemo ponovo obrađivati. Alatka *Distribute Rows* izjednačava visinu svih redova u tabeli uz zadržavanje originalne visine cele tabele, a alatka *Distribute Columns* izjednačava širinu svih kolona u tabeli uz zadržavanje originalne širine tabele.

⌘		
⌘	⌘	⌘
⌘	⌘	⌘

⌘	⌘	⌘	⌘
⌘	⌘	⌘	⌘
⌘	⌘	⌘	⌘

Slika 4.13 a) 3x3 tabela u kojoj su sve tri ćelije prvog reda spojene u jednu; b) 3x3 tabela u kojoj je prva ćelija podeljena na četiri nove ćelije.

Prvih devet alatki u grupi *Alignment* služe za vertikalno i horizontalno poravnavanje teksta u ćelijama tabele. Alatom *Text Direction* možete menjati smer ispisivanja teksta u ćelijama. Moguća su tri smera:

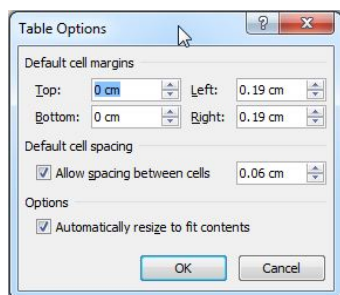
- horizontalno sa leva na desno;
- vertikalno odozgo na dole;
- vertikalno odozdo na gore.

Primer jedne tabele gde su upotrebljena sva tri smera ispisivanja teksta možete videti na slici 4.14. Vertikalno ispisivanje teksta se primenjuje u velikim tabelama, koje se nalaze na stranama pejzažne orijentacije.

Prva	Druga	Treća
------	-------	-------

Slika 4.14 Tri načina ispisivanja teksta u ćelijama tabele.

Selektovanjem alatke *Cell Margins* pojavice se novi prozor (slika 4.15a) u kome možete odrediti margine unutar ćelija. Veoma je zanimljiva opcija *Allow spacing between cells* koja ubacuje razmake između ćelija. Primenom ove alatke dobija se interesantan izgled tabele kao što je prikazano na slici 4.15b.



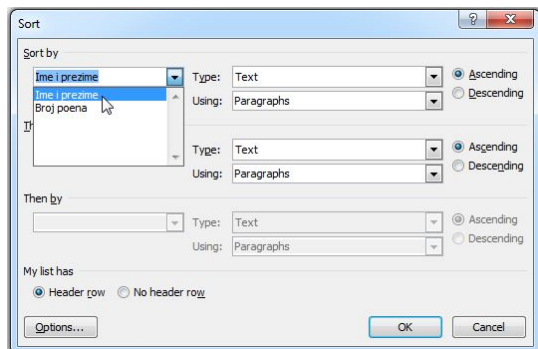
A	B	C
D	E	F
G	H	I

a)

b)

Slika 4.15 a) Dijalog prozora *Table Options*, koji se dobija izborom alatke *Cell Margins*; b) izgled tabele nakon primene opcije *Allow spacing between cells* sa razmakom od 0,06 cm.

Alatka *Sort* u grupi *Data* kontekstne trake kartice *Layout* služi za uređivanje podataka u tabeli. Ukoliko se u nekoj koloni tabele nalaze tekstualni podaci, oni se mogu urediti po abecednom redu, a ukoliko se nalaze brojevi, oni se mogu urediti po vrednosti. Izborom alatke *Sort* pojaviće se dijalog prozora *Sort* (slika 4.16). Ukoliko svaka kolona tabele ima zaglavlje, odnosno ukoliko tabela ima naslovni red, izborom opcije *Header Row* omogućićete sledeće: prikazivaće se odgovarajuće stavke u padajućoj listi *Sort By* i podaci iz naslovog reda neće biti uključeni u sortiranje.



Slika 4.16 Dijalog prozora *Sort*.

Upotrebu alatke *Sort* ćemo najlakše objasniti na konkretnom primeru. Predpostavimo da imamo tabelu sa imenima studenata i njihovom uspehu na ispitu (slika 4.17a). Ukoliko želimo da tabelu sortiramo po prvom slovu prezimena studenta (radi lakšeg unošenja bodova u bazu podataka), izabraćemo alatku *Sort*, u dijalogu prozora *Sort* aktiviraćemo opciju *Header Row* i iz padajuće liste *Sort By* izabrati *Ime i prezime*. Sa desne strane ćemo aktivirati opciju *Ascending* kako bi se sortiranje izvršilo od slova A ka slovu Š. Sortirana tabela je prikazna na slici 4.17b. Ukoliko pak želimo da sortiramo tabelu na osnovu uspeha na ispitu, sa padajuće liste *Sort By* ćemo odabrati opciju *Broj poena*, u polju *Type* izabrati opciju *Number* i aktivirati opciju *Descending* kako bi studenti sa najvećim brojem poena bili na vrhu liste (slika 4.17c).

Ime i prezime	Broj poena
Petrović Petar	58,5
Jovanović Jovan	63,7
Marković Marko	45,0
Antonić Ana	73,5
Zoranić Zorana	68,9

a)

Ime i prezime	Broj poena
Antonić Ana	73,5
Jovanović Jovan	63,7
Marković Marko	45,0
Petrović Petar	58,5
Zoranić Zorana	68,9

b)

Ime i prezime	Broj poena
Antonić Ana	73,5
Zoranić Zorana	68,9
Jovanović Jovan	63,7
Petrović Petar	58,5
Marković Marko	45,0

c)

Slika 4.17 a) nesortirana tabela; b) tabela sortirana po imenima studenata; c) tabela sortirana po uspehu studenata na ispitu.

Umetanje slika

Veoma često, dokumenta koja pravite će sadržati veliki broj slika i ilustracija. Slike u dokument koji pravite u programu *Word* možete umetati na više načina. Ukoliko je slika već otvorena u nekom drugom programu, možete je kopirati iz tog programa i preneti u *Word* (*Copy - Paste*). Ukoliko se slika nalazi na disku vašeg računara, možete je umetnuti pomoću alatke *Picture*, koja se nalazi u grupi *Illustrations* kontekstne trake kartice *Insert*. Izborom ove alatke pojaviće vam se novi prozor *Insert Picture*, u kome možete pronaći mesto gde se nalazi slika na disku i odabrati sliku koju želite da unesete. Sa desne strane prozora *Insert Picture* nalazi se padajuća lista sa opcijama formata slika koje možete uneti. Ispod ove liste nalazi se dugme *Insert*, koje je potrebno pritisnuti da bi završili sa umetanjem slike. Dugme *Insert* ima sa desne strane strelicu na dole, što ukazuje na postojanje više mogućnosti za primenu ove opcije. Pritiskom na ovu strelicu pojavljuje se lista sa opcijama za umetanje slike (slika 4.18).



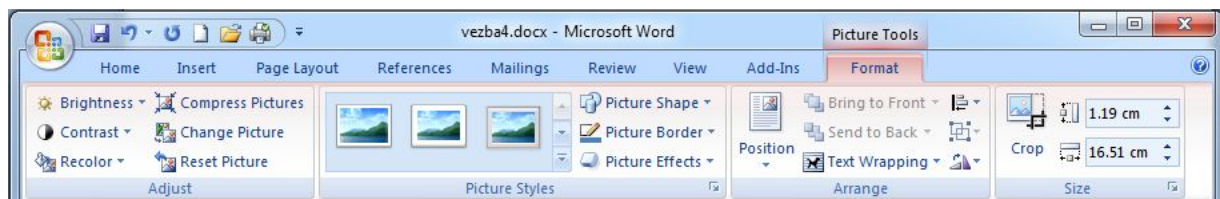
Slika 4.18. Opcije za umetanje slike u dokument.

Ukoliko izaberete opciju *Insert*, tada će se cela slika ugraditi u aktivni dokument. Ukoliko se originalna slika obriše sa diska ili premesti u drugi direktorijum, slika će ostati u dokumentu. Ukoliko se originalna slika promeni te promene se neće videti u dokumentu već ćete morati da ponovo umetnete promenjenu sliku. Ovakvim načinom umetanja slike drastično se povećava veličina datoteke vašeg dokumenta.

Opcijom *Link to File* slika se ne ugrađuje u dokument već samo adresa lokacije na kojoj se slika nalazi. Ukoliko promenite originalnu sliku, ta promena će se automatski ažurirati u dokumentu. Veličina datoteke se neće povećati, zato što slika nije ugrađena u dokument. Međutim ukoliko obrišete, preimenujete ili promenite mesto originalnoj slici, nestaće i slika iz dokumenta. Ako koristite ovu opciju i želite da snimate svoj dokument na neku spoljnu memoriju ili ga pošaljete elektronskom poštom, obavezno morate snimiti ili poslati i sve datoteke sa slikama.

Opcija *Insert and Link* ugrađuje sliku u dokument i ažurira sve izmene na originalnoj slici. Ukoliko vam nije bitna veličina datoteke, ovo je najbolja opcija.

Kada jednom umetnete sliku u dokument, na naslovnoj traci programa *Word* pojaviće se natpis *Picture Tools*, a u redu sa karticama pojaviće se nova kartica *Format* (slika 4.19). Na kontekstnoj traci kartice *Format* nalaze se sve alatke za formatiranje slike.



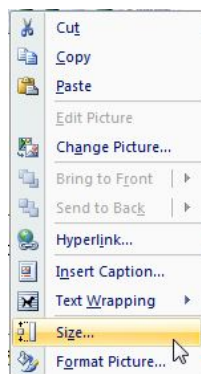
Slika 4.19 Kontekstna traka kartice *Format*

Formatiranje slike

Postoje brojne alatke za formatiranje slika i brojni efekti koji se mogu primeniti na slikama. U svakodnevnom radu najčešće ćete koristiti samo dve: podešavanje veličine slike i podešavanje načina na koji se tekst prelama oko slike.

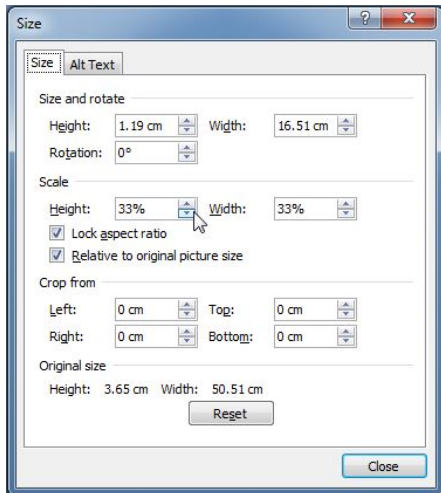
Veličinu slike možete podesiti pomoću miša ili pomoću prozora *Size*. Kada izaberete umetnutu sliku (postavite pokazivač miša na sliku i pritisnete levo dugme miša) na uglovima slike pojaviće se kružići, a na sredinama stranica kvadratići pomoću kojih možete podešavati veličinu slike. Iznad slike pojaviće se zeleni kružić. Ukoliko postavite pokazivača miša iznad kružića na uglovima slike, pokazivač će se promeniti u kosu dvostruku strelicu. Pritisnite i dok držite pritisnuto levo dugme miša, pomerajte miša po podlozi. Veličina slike će se proporcionalno smanjivati ili povećavati, pri čemu će ostati isti odnos visine i širine slike. Ukoliko stanete pokazivačem miša na kvadratić sa leve ili desne strane slike, pokazivač će se promeniti u horizontalnu dvostruku strelicu. Na ovaj način možete menjati samo širinu slike. Preko kvadratića na gornjoj i donjoj ivici slike možete menjati samo visinu slike. Pomoću zelenog kružića iznad slike možete rotirati sliku u ravni papira.

Ukoliko stanete pokazivačem miša na izabranu sliku i pritisnete desno dugme miša, pojaviće se lista kao na slici 4.20. Sa ove liste izaberite opciju *Size*, da bi se pojavio dijalog prozora *Size*. Preko ovoga dijalog prozora možete mnogo preciznije menjati veličinu ili rotirati sliku, kao i iseći njene delove (Slika 4.21).



Slika 4.20 Lista koja se pojavljuje nakon pritiska na desno dugme miša iznad izabrane slike.

Veličinu slike preko prozora *Size* možete menjati ili u realnim jednicama (na primer, cm) ili je skalirati u odnosu na originalnu sliku. Ukoliko aktivirate opciju *Lock aspect ratio*, tada će se sa promenom visine slike, širina slike automatski prilagođavati, kako ne bi došlo do distorzije same slike. Sliku možete rotirati za željeni broj stepeni (od 0 do 359) pomoću opcije *Rotate*.

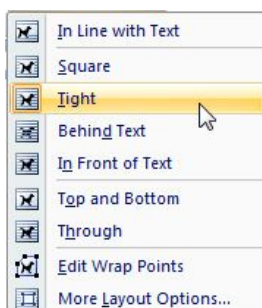


Slika 4.21 Dijalog prozora *Size*.

Isecanje delova slike se radi pomoću opcije *Crop*. Pomoću ove opcije možete isecati delove sa leve strane, desne strane, vrha ili dna slike. Isecanje delova slike se mnogo lakše izvodi pomoću miša nego pomoću dijaloga *Crop from* iz prozora *Size*. Alatka *Crop* za isecanje delova slike pomoću miša se nalazi u grupi *Size* kontekstne trake kartice *Format* (slika 4.19).

Prelamanje teksta oko slike

Način na koji se tekst prelama oko slike možete odrediti pomoću opcije *Text Wrapping* koja se nalazi na listi, koja se prikazuje nakon pritiska na desno dugme miša (slika 4.20) ili u grupi *Arrange* kontekstne trake kartice *Format* (slika 4.19). Izborom ove opcije pojaviće se lista sa različitim stilovima prelamanja teksta oko slike (slika 4.22).



Slika 4.22 Stilovi prelamanja teksta oko slike (*Text Wrapping*)

Mogući stilovi za prelamanje teksta oko slike su:

- *In line with text* - cela širina stranice je ostavljena za sliku. Ne može se umetati tekst sa leve ili desne strane slike. Sliku možete povlačiti mišem, ali samo od jedne oznake pasusa do druge;
- *Square* - pravi se kvadratni otvor u tekstu na mestu gde će se umetnuti slika. Tekst se prelama sa leve i desne strane slike ali ostaje mala praznina između teksta i slike. Sliku možete povlačiti mišem na bilo koje mesto u dokumentu;
- *Tight* - pravi se kvadratni otvor u tekstu na mestu gde će se umetnuti slika, ali bez praznine između teksta i slike. Sliku možete povlačiti mišem na bilo koje mesto u dokumentu;
- *Behind text* - slika se umeće ispod teksta i delimično je zaklonjena tekстом. Sliku možete povlačiti mišem na bilo koje mesto u dokumentu;
- *In front of text* - slika se umeće iznad teksta. Tekst je delimično zaklonjen slikom. Sliku možete povlačiti mišem na bilo koje mesto u dokumentu;
- *Top and Bottom* - slika se umeće u pravougaoni otvor u tekstu iste širine kao i margina stranice. Tekst teče iznad i ispod slike ali ne i pored nje. Sliku možete povlačiti mišem na bilo koje mesto u dokumentu. Razlika između ove opcije i opcije *In line with text* je u tome što se slika sa *In line with text* prelomom može postavljati samo kod oznake pasusa, a slika sa *Top and Bottom* prelomom bilo gde u tekstu;
- *Through* - tekst bi trebalo da teče oko tačaka preloma koje se mogu podešavati. Ova opcija ne radi kako treba na računarima na kojima smo je isprobali.

Slike možete pomerati na bilo koje mesto u dokumentu u svim prelomima osim *In line with text*. Sliku možete pomerati pomoću miša ili pomoću kursorskih tastera (strelica) sa tastature. Da biste pomerili sliku pomoću kursorskih tastera, prethodno je morate izabrati.

Ostale opcije za formatiranje slika

U grupi *Adjust* kontekstne trake kartice *Format* (slika 4.19) nalaze se alatke za promenu osvetljenja (*Brightness*), kontrasta (*Contrast*) i tonova (*Recolor*) slike. Rezoluciju slike i veličinu, koju će ona zauzimati u datoteci, možete smanjiti alatkom *Compress Pictures*. Sva formatiranja koja ste sprovedeli na slici možete poništiti alatkom *Reset Picture*.

Veći deo grupe *Picture Styles* kontekstne trake kartice *Format* (slika 4.19) zauzimaju brojni unapred definisani stilovi formatiranja slika. Sa desne strane ove grupe nalazi se opcija *Picture Shape* kojom možete promeniti oblik slike, odnosno iseći sliku po nekom od unapred definisanih oblika. Pomoću alatke *Picture Border* možete umetnuti ivicu oko slike, a alatkom *Picture Effects* možete dodavati razne vizuelne efekte slici kao što su: dodavanje senke, odraza, sjaja ili rotacije slike kao 3D objekta.

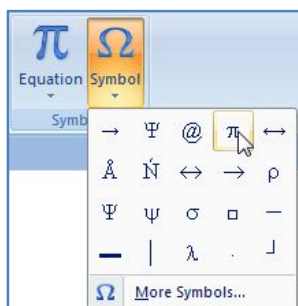
Osim alatke za umetanje slika, u grupi *Illustrations* kontekstne trake kartice *Insert* nalaze se još i alatke za umetanje gotovih sličica (*Clip Arts*), oblika (*Shapes*), *Smart Art* dijagrama i grafika (*Charts*). Gotove sličice (*Clip Arts*) su male jednostavne sličice, koje služe za ukrašavanje dokumenta. Ove sličice se isporučuju zajedno sa instalacijom *Office* paketa programa. U zavisnosti od toga koju ste verziju *Office* paketa instalirali, možete imati i do 100 000 *Clip Art* sličica. Oblicima (*Shapes*) se takođe može ukrasiti dokument. Broj raspoloživih oblika takođe zavisi od paketa koji je instaliran. U većinu oblika se može unositi tekst.

Smart Art dijagrami su novina u programu Word. Ovo su unapred pripremljeni dijagrami i algoritmi koje možete prilagođavati prema potrebi. Po rečima marketing službe kompanije *Microsoft*, prilagođavanje *Smart Art* dijagrama je veoma lako i intuitivno. Autori ovog Praktikumuma nisu stekli takav utisak.

Umetanje simbola

Prilikom pravljenja dokumenata iz hemije često se javlja potreba za ispisivanjem posebnih simbola. Na primer, molekulske orbitale se obeležavaju mali grčkim slovima σ (sigma) i π (pi), talasna funkcija velikim slovom Ψ (psi), gustina ρ (ro), dužina angstromima Å, reaktanti i proizvodi se u jednačini hemijske reakcije odvajaju simbolom \rightarrow (strelica) ili ukoliko je reakcija povratna simbolom \rightleftharpoons (dvostruka strelica).

Umetanje simbola u dokument vrši se preko alatke *Symbol*, koja se nalazi u grupi *Symbols* kontekstne trake kartice *Insert*. Pritiskom na ovu alatku otvara se prozor u kome se nalazi prikaz poslednjih 20 simbola koje ste umetnuli i dodatna opcija *More Symbols...* (slika 4.23).




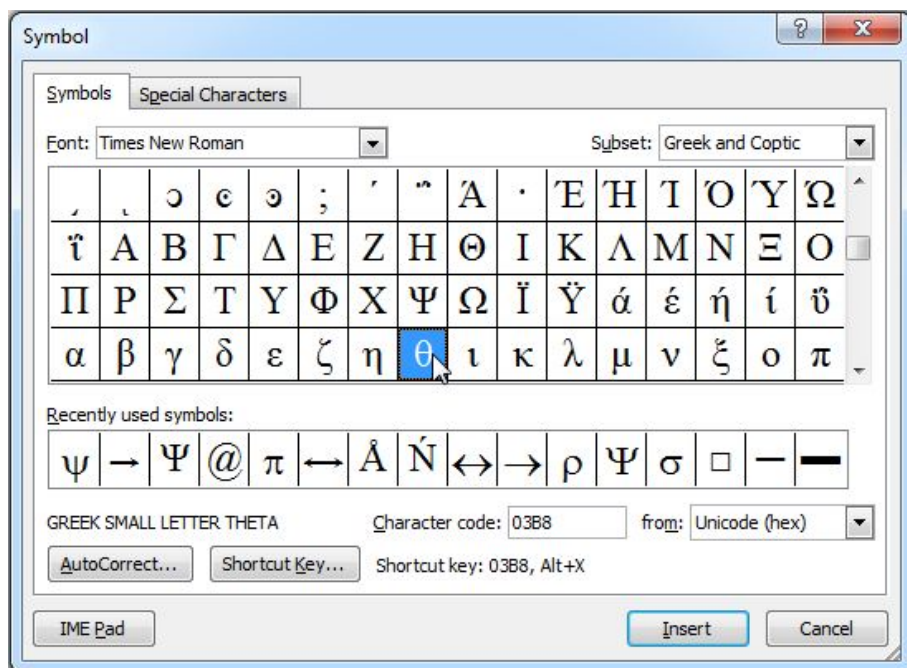
Slika 4.23 Prozor za umetanje simbola u dokument.

Ukoliko se simbol koji želite da umetnete nalazi na listi u gornjem delu prozora, dovoljno je samo da ga izaberete i on će automatski biti ubačen u dokument na mestu na kome se nalazio pokazivač. S obzirom da se u hemijskim tekstovima ne koristi mnogo više od 20 simbola, ovakav način umetanja simbola ćete najviše koristiti.

Rad sa umetnutim simbolima je isti kao i sa svim ostalim slovima i znakovima u dokumentu. Umetnute simbole možete kopirati i prenositi (*Copy - Paste*), možete ih podebljavati π , ispisivati

kurzivom π , podvlačiti $\underline{\pi}$, ispisivati kao indekse i eksponente π^π ili π_π , menjati veličinu pomoću Font Size alatke π , itd.

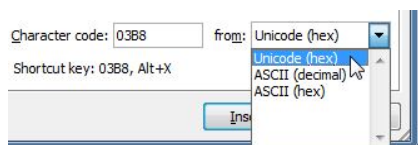
Ukoliko se željeni simbol ne nalazi na listi 20 poslednjih umetnutih simbola morate ga potražiti izborom  [More Symbols...](#) opcije (slika 4.23). Izborom ove opcije otvara se dijalog prozora *Symbol*, kao što je to prikazano na slici 4.24.



Slika 4.24 Dijalog prozora *Symbol*.

Razmotrimo malo detaljnije ovaj dijalog prozora. U samom vrhu vidimo da postoje dve kartice *Symbols* i *Special Characters*. Za sada će nas interesovati samo kartica *Symbols*. Na vrhu ove kartice sa leve strane nalazi se opcija za izbor fonta. Pritiskom na strelicu na dole pored imena aktivnog fonta pojavice se padajuća lista sa imenima svih instaliranih fontova, sa koje možete izabrati željeni font. Ukoliko ste ceo tekst dokumenta kucali jednim fontom, ima smisla i da simbole umećete u tom istom fontu, ukoliko je u tom fontu definisan traženi simbol. Pronađite i izaberite *Times New Roman* font, kako bi se u centralnom delu prozora pojavili simboli koji pripadaju ovom fontu.

Pogledajmo sada donji desni deo dijaloga prozora *Symbol* u kojem se nalazi polje *Character code* i *from*. Izborom strelice na dole sa desne strane polja *from* pojavice se nova padajuća lista sa tri opcije: *Unicode(hex)*, *ASCII(decimal)* i *ASCII(hex)* (Slika 4.25). Izaberite opciju *Unicode(hex)*.



Slika 4.25 Izbor koda

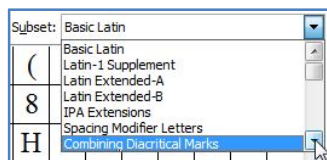
Zanimljivost iz istorije računarstva

Prvi kod za razmenu informacija između računarskih mašina je razvijen 1968. godine i nazvan ASCII (*American Standard Code for Information Interchange*). U ASCII kodu je svakom karakteru dodeljen numerički kod. Tako je velikom latiničnom slovu A dodeljena vrednost koda 65. Slovu B 66, C 67 itd. Ukupno je dodeljeno 128 numeričkih kodova. Pošto je ASCII kod razvijan u Americi samo su velika i mala latinična slova, kao i znakovi interpunkcije bili kodirani. Specijalni karakteri koje su koristili drugi jezici (npr. ü u nemačkom ili é u francuskom) se nisu mogli koristiti. Početkom 1980-tih godina većina računara je bilo osmобitno, što znači da je bajt mogao da ima $2^8=256$ vrednosti, tako da su u određenim zemljama dodeljivali numeričke kodove od 128 do 255 specijalnim karakterima iz njihovog jezika (u Sovjetskom Savezu se koristio KOI8 kod sa ćirilničnim slovima u poljima od 128 do 255, u Francuskoj Latin1 kod itd). Ovo je stvaralo dosta problema kada su datoteke pravljene u jednoj zemlji bile otvarane u drugoj zemlji sa drugačijim kodom. Takođe, 256 kodova nije dovoljno da bi se pokrili svi znaci koji se u svetu koriste (na primer, samo mandarinski jezik ima oko 3000 najčešće korišćenih znakova - ukupno oko 30000).

Zato je započeo projekat *Unicode* standardizacije. U početku *Unicode* se zasnivao na 16-to bitnim karakterima. Ovo je omogućilo smeštanje $2^{16}=65\ 536$ simbola. Međutim i ovaj broj se uskoro pokazao nedovoljnim, tako da je 1996. godine objavljena *Unicode* verzija 2 sa ukupno 1 114 112 kodnih mesta (27-mo bitno kodiranje). Većina ovih mesta je još uvek nedodeljena.

Danas se svakom simbolu dodeljuje odgovarajući karakter kod u *Unicode* sistemu i svi fontovi moraju da poštuju taj sistem. Tako, na primer, veliko ćirilnično slovo Љ ima karakter kod 0409, a slovo ЈI kod 041B u svakom fontu. Na prvih 128 mesta u *Unicode* kodu nalaze se slova i znakovi interpunkcije iz ASCII koda. Tabele sa svim dodeljenim *Unicode* kodovima možete pronaći da internet adresi: <http://www.ssec.wisc.edu/~tomw/java/unicode.html#x0400>.

Izborom *Unicode(hex)* opcije dobićete sve simbole koji se nalaze u izabranom fontu, i možete ih videti povlačenjem bočnog klizača u dijalogu prozora *Symbol*. Postoji mnogo različitih simbola unutar *Times New Roman* fonta, tako da je veoma naporno povlačiti klizač i tražiti željeni simbol. Zato su simboli podeljeni u podgrupe, kao što su: latinični simboli, ćirilnični simboli, grčki i koptski simboli, strelice, matematički operatori, itd. Spisak podgrupa može se videti ako pritisnete strelicu na dole pored opcije *Subset* (slika 4.26).



Slika 4.26. Opcija *Subset* služi za brzo pronalaženje željenog simbola.

Ukoliko želite da unesete malo grčko slovo teta, izaberite podgrupu *Greek and Coptic* i izaberite simbol θ iz centralnog dela prozora. Pritisnite dugme *Insert* i završili ste sa unošenjem simbola. Ukoliko želite da unesete neku strelicu izaberite podgrupu *Arrows* i pronađite željenu strelicu.

Otvorite ponovo dijalog prozora *Symbol* i izaberite slovo θ iz *Times New Roman* fonta (slika 4.24). Obratite pažnju na donji deo prozora gde piše da je karakter kod simbola θ - 03B8 i da je prečica za unošenje ovog simbola 03B8, Alt+X. Ovo znači da simbol θ možete uneti preko tastature i to tako što ćete otkucati 03B8 i pritisnuti taster Alt i dok ga držite pritisnutog pritisnuti taster X. Napomena: slovo B u karakter kodu 03B8 možete otkucati i malim slovom, odnosno možete otkucati 03b8, rezultat će biti isti.

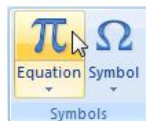
U *Unicode* sistemu svaki simbol ima svoj karakter kod i možete ga unositi preko tastature. Ovo može biti korisno ukoliko se neki simbol često javlja u tekstu koji kucate, tada je lakše da mu zapamtite kod i unosite ga preko tastature, nego da svaki put podižete ruke sa tastature, uzimate miša i unosite simbol preko alatke *Symbol*. Savet: verovatno je najjednostavnije da taj simbol prekopirate u memoriju računara (Ctrl+C) i zatim ga prenesete na željeno mesto (Ctrl+V). Spisak simbola koji se najčešće koriste u hemiji, zajedno sa njihovim *Unicode* kodovima dat je u dodatku 3.

U hemijskom tekstovima se najčešće koriste grčka slova (podgrupa *Greek and Coptic*), strelice (podgrupa *Arrows*) i matematički operatori (podgrupa *Mathematical Operators*). Još ćete koristiti oznaku Å (kod 00C5, podgrupa *Latin-1 Supplement*) za izražavanje rastojanja između atoma u molekulu i oznaku za stepen ° (kod 00B0, podgrupa *Latin-1 Supplement*).

Nisu svi simboli definisani u svim fontovima. Koliko će simbola biti definisano u fontu zavisi prvenstveno od namene fonta. Na primer, font Arial Unicode MS, koji je namenjen za pisanje naučnih radova i knjiga, ima nekoliko hiljada simbola, jer su programeri pretpostavili da će svi ti simboli biti potrebni korisnicima. Sa druge strane ukrasni font Broadway, koji se koristi za pravljenje pozivnica za rođendane i zabave, ima jedva par stotina simbola.

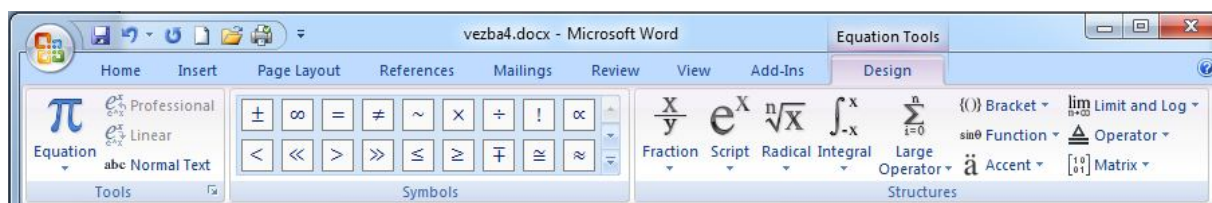
Umetanje matematičkih formula

Sigurno ćete tokom svojih studija više puta morati da ukucate nešto poput oznake izotopa ugljenika $^{12}_6\text{C}$ ili način za rešavanje kvadratne jednačine $x_{1/2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$ ili funkcije kao $y = \frac{x^2}{2x}$. Ovo sve (i još mnogo toga) možete postići pomoću alatke za unošenje formula - *Equations*, koja se nalazi u grupi *Symbols* kontekstne trake kartice *Insert* (slika 4.27).



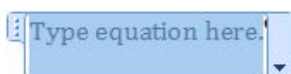
Slika 4.27 Grupa *Symbols* sadrži alatke za umetanje simbola i formula.

Izborom ove alatke na naslovnoj traci će se pojaviti natpis *Equation Tools*, a u redu sa karticama će se pojaviti nova kartica *Design*. Kontekstna traka kartice *Design* izgleda kao na slici 4.28.



Slika 4.28 Kontekstna traka kartice *Design*.

U samom dokumentu na mestu na kome je bio pokazivač će se pojaviti polje za umetanje formule (slika 4.29).

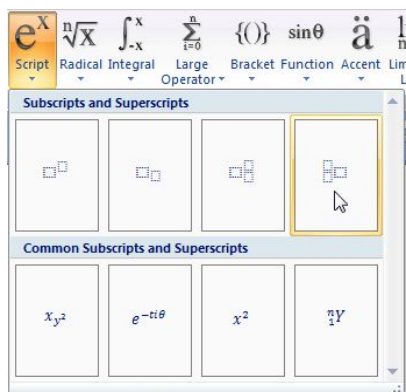


Slika 4.29 Polje za umetanje formule.

U ovom polju možemo ili odmah početi da kucamo ili izabrati neku od definisanih struktura matematičkih formula iz grupe *Structures* sa kontekstne trake. Način upotrebe alatke *Equations* ćemo najlakše objasniti kroz par primera.


Primer 1. Potrebno je da u naš dokument umetnemo oznaku za izotop ugljenika $^{12}_6\text{C}$.

1. Izaberite alatku *Equations*.
2. Iz grupe *Structures* izaberite opciju *Script* i sa liste koja se pojavila odaberite četvrtu opciju (slika 4.30).





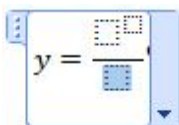
Slika 4.30 Opcija *Script*.

Polje za umetanje formule će izgledati ovako 

3. Kroz polje za umetanje formule se možete kretati pomoću miša ili kursorskih tastera sa tastature. Ukucajte brojeve 12 i 6 i slovo C na odgovarajuća mesta. Polje za umetanje formule će izgledati ovako .
4. Pritisnite levi taster miša bilo gde na dokumentu da biste zatvorili polje za umetanje formule. Jednom zatvoreno polje možete ponovo aktivirati, da biste uneli eventualne исправke, tako što ćete staviti pokazivač miša na formulu i pritisnuti levi taster.


Primer 2. Umetnite u dokument sledeću funkciju $y = \frac{x^2}{2 \sin x}$

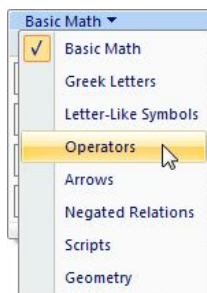
1. Izaberite alatku *Equations*. Odmah ukucajte $y=$ u polje za umetanje formule.
2. Iz grupe *Structures* izaberite opciju *Fractions* (razlomci) i sa liste koja se pojavila odaberite prvu opciju .
3. Izaberite (pomoću miša ili kursorskih tastera) gornju kućicu (brojilac) razlomka, otvorite opciju *Script* i izaberite prvu od ponuđenih opcija . Vaše polje za umetanje formule će izgledati kao:



4. Unesite odgovarajuće vrednosti u kućice (x i 2 u brojilac i 2 sin x u imenilac razlomka) i zatvorite polje za umetanje formule.

U grupi *Structures* postoje brojne unapred definisane strukture matematičkih formula. Upoznajte se sa njima, jer je velika verovatnoća da će vam trebati tokom studija.

Levo od grupe *Structures* na kontekstnoj traci kartice *Design* nalazi se grupa *Symbols*. Ova grupa služi za umetanje simbola, mada simbole možete umetati u formule na isti način kao i u tekst (preko alatke *Symbols*). Ako pritisnete strelicu  u desnom donjem uglu grupe *Symbols*, a zatim naslovnu traku ove grupe, pojaviće se padajuća lista sa osam kategorija simbola (slika 4.31). Izaberite odgovarajuću kategoriju i u njoj izaberite željeni simbol. Na ovaj način možete umetnuti simbol \pm koji će vam trebati da uradite zadatak 1 sa kraja ove vežbe.



Slika 4.31 Kategorija simbola grupe *Symbols*.

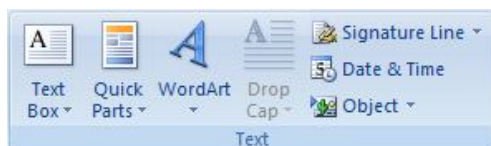
Prilikom umetanja formula, program *Word* automatski koristi font *Cambria Math* i to kurzivni ispis. Da biste mogli da promenite font ispisa formule, morate aktivirati alatku *Normal Text*, koja se nalazi u grupi *Tools*, kontekstne trake kartice *Design* (slika 4.32).



Slika 4.32 Grupa *Tools*.

Još neke alatke kartice *Insert*

Opcija programa *Word*, koja se često koristi, je umetanje polja sa tekstem (engl. *Text Box*). Polja sa tekstem se koriste kada je potrebno naglasiti pojedine delove teksta ili odvojiti neka zanimljiva opažanja ili zaključke od glavnog teksta dokumenta. Alatka za umetanje polja sa tekstem (*Text Box*) se nalazi u grupi *Text* kontekstne trake kartice *Insert* (slika 4.33).



Slika 4.33 Grupa *Text* kontekstne trake kartice *Insert*.

Izborom ove alatke pojaviće se lista sa nekoliko unepred definisanih i formatiranih polja sa tekstovima. Izborom nekog od ponuđenih formata, polje sa tekstem će biti umetnuto u dokument, a na kontekstnoj traci će se pojaviti veliki broj alatki za formatiranje polja sa tekstem. Prednost rada sa ovim poljima je što ih možete postavljati bilo gde na strani, iznad ili ispod teksta, bojiti, rotirati, dodavati efekte itd. Oprez: ukoliko postavite polje sa tekstem uz samu ivicu stranice može se desiti da deo polja ne bude odštampan, zbog nemogućnosti štampača da štampa na celoj površini stranice. Prikaz jedne strane sa umetnutim poljima sa tekstem možete videti na slici 4.34.

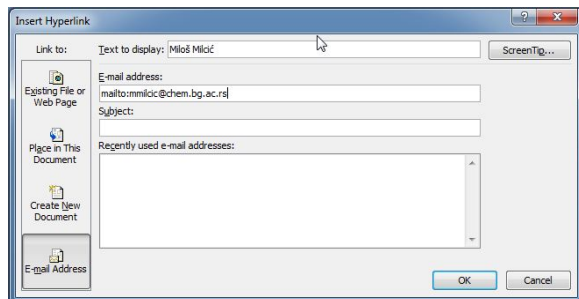


Slika 4.34 Stranica sa dva umetnuta polja za tekst.

U grupi *Text* se nalazi još i alatka *WordArt* za umetanje specijalno formatiranog teksta, kao i alatka *DropCap* za posebno formatiranje prvog slova paragrafa. Prvi paragraf svake vežbe u ovom Praktikumu je formatiran pomoću *DropCap* alatke.

Izabrani deo teksta možete povezati sa drugim delom teksta iz istog dokumenta, sa drugim dokumentom ili datotekom, sa nekom stranicom na Internetu ili sa adresom elektronske pošte pomoću *Hyperlink* alatke, koja se nalazi u grupi *Links* kontekstne trake kartice *Insert*. Potrebno je prvo izabrati deo teksta koji će biti povezan, a zatim izabrati alatku *Hyperlink* da bi se pojavio prozor koji je prikazan na slici 4.35. U ovom prozoru sa leve strane možete izabrati da li želite da tekst bude povezan sa postojećom datotekom ili internet stranom (*Existing File or Web Page*), nekim mestom u istom dokumentu (*Place in This Document*), novim dokumentom (*Create New Document*) ili adresom elektronske pošte (*E-mail Address*). Nakon povezivanja, izabrani deo teksta će promeniti izgled, biće obojen i podvučen. Da biste otvorili povezani dokument ili

povezanu Internet stranu u pretraživaču, potrebno je da pritisnete taster Ctrl i levo dugme miša na delu teksta sa vezom.



Slika 4.35 Prozor *Insert Hyperlink*.

Do sada smo proučili neke opcije programa *Word*. Međutim, to je samo mali deo onoga što ovaj program nudi. Cilj ovog predmeta nije da naučite sve opcije programa, već samo one koje ćete koristiti kao računarski pismeni studenti hemije i budući hemičari.

Kada pregledate neki dokument, korisna je mogućnost da ostavljate komentare na pojedine delove dokumenta. Komentari se mogu umetnuti pomoću alatke *New Comment* koja se nalazi u grupi *Comments* kontekstne trake kartice *Review*. Izaberite deo teksta koji želite da komentarišete a zatim izaberite alatku *New Comment*. Izabrani deo teksta će promeniti boju, a na margini stranice će se pojaviti polje za unos komentara (slika 4.36). U polje za unos komentara možete ukucati svoj komentar, koji će biti vidljiv i u štampanoj verziji dokumenta. Umetnuti komentar se uklanja iz konačne verzije dokumenta alatkom *Delete* iz grupe *Comments*.



Slika 4.36 Umetanje komentara.

Veoma korisna opcija, kada više ljudi radi na jednom dokumentu, je *Track Changes* koja se nalazi u grupi *Tracking* kontekstne trake kartice *Review*. Kada uključite opciju *Track Changes*, sve izmene koje unesete biće obeležene na poseban način. Tekst koji izbrisate neće nestati iz dokumenta, već će samo biti precrtan linijom. Dodati tekst će biti obojen crveno i podvučen. Na taj način ćete moći da pratite koje su sve izmene unete u dokument. Ukoliko želite da prihvatite izmenu postavite pokazivač na nju i izaberite alatku *Accept* (prihvati), koja se nalazi u grupi *Changes* kontekstne trake kartice *Review* i stari tekst će biti trajno obrisan, a novi sačuvan. Ukoliko ne želite da prihvatite izmenu postavite pokazivač na nju i izaberite alatku *Reject* (odbaci) i izmene će biti izbrisane, a stari tekst vraćen.

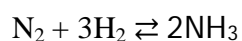
Sada kada smo naučili kako da ukucavamo molekulske i jonske formule, kao i da umećemo tabele, slike, simbole, strelice, polja sa tekstom i pravimo matematičke formule, može se reći da smo dobro opremljeni za kucanje hemijskih tekstova. Podsetimo se svega što smo naučili kroz nekoliko zadataka.

Zadatak 1. Umetnite u dokument formulu za rešavanje kvadratne jednačine:

$$x_{1/2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Zadatak:2. Otkucajte sledeći tekst:

Vodonik i azot reaguju na visokoj temperaturi u prisustvu katalizatora po jednačini:



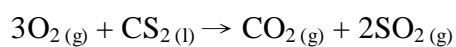
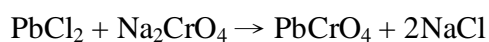
Izraz za ravnotežu ove reakcije je:

$$K = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{H}_2]^3 [\text{N}_2]}$$

Zadatak 3. Otkucajte Arenijusovu jednačinu za izračunavanje konstante brzine hemijske reakcije:

$$k = A e^{\frac{-E_a}{RT}}$$

Zadatak 4. Otkucajte sledeće jednačine hemijskih reakcija:



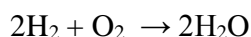
Datum

Potpis asistenta

Vežba 5.

Microsoft Word - dodaci za hemičare

U prethodnim vežbama smo naučili kako da unesemo formule molekula (na primer, H₂O) ili jona (na primer, SO₄²⁻) pomoću indeksa i eksponenata. Takođe smo naučili da unosimo razne simbole, a među njima i hemičarima veoma potrebne, strelice za ireverzibilnu (→) ili povratnu (⇌) reakciju. Sada imamo svo potrebno znanje da otkucamo jednu jednačinu hemijske reakcije. Počnimo sa jednim jednostavnijim primerom - sinteza vode iz elemenata.



Koliko vam je vremena trebalo da otkucate ovu jednačinu? Pretpostavljam dosta, prvo ste otkucali 2H pa sklonili ruke sa tastature, uzeli miša, izabrali alatku *Subscript* (pod uslovom da vam je bila aktivna kartica *Home*, ukoliko nije i nju ste morali prvo da aktivirate), pustili miša, uneli broj 2, ponovo uzeli miša, isključili alatku *Subscript*, pustili miša, ukucali razmak. Svi ovi pokreti samo da bi se ukucalo 2H₂. Još gore je kada ste hteli da unesete simbol strelice. Uzeli ste miša, izabrali karticu *Insert*, zatim alatku *Symbol*, ukoliko imate sreće simbol strelice je bio vidljiv na listi nedavno korišćenih simbola, ukoliko nije potrošili ste par minuta da ga nađete (jer mu, naravno, niste zapamtili kod - 2192, Alt+X), uneli ste simbol, pustili miša... Već vam je jasno da je za unošenje i najjednostavnijih jednačina reakcija, poput reakcije sinteze vode iz elemenata, potrebno puno vremena.

Unesite sada jednu složeniju jednačinu reakcije oksidacije hlorovodonika kalijum-permanganatom, ali ovaj put merite vreme koje vam je potrebno da otkucate celu jednačinu.



Ukoliko ste spretni sa radom na računaru, bilo vam je potrebno dva minuta, ukoliko se ne snalazite baš najbolje i čitavih pet. Pri tom u ovoj jednačini reakcije nismo imali formule jona, pa da moramo da koristimo i alatku *Superscript*, ili nekih drugih čudnih hemijskih vrsta (na primer, radikala kao što je ·CH₃). Ukoliko morate da otkucate 15 ili 20 ovakvih jednačina reakcija u jednom seminarskom radu, to zna da bude zaista težak i dugotrajan posao.

Na sreću, ima načina da se ovaj posao uradi znatno brže i jednostavnije. Postoje specijalni programi koji se mogu dodati programu *Word (Add-Ins)*, koji nam mogu pomoći da brzo otkucamo jednačine reakcija. Danas ćemo naučiti način upotrebe dva takva dodatna programa:

- *Chemistry Formater for Microsoft Word*;
- *EquPixy*.

Chemistry Formater for Microsoft Word je dodatak za brzo kucanje formula molekula, jona, radikala i jednačina reakcija u programu *Word*. Ovaj dodatak je napravio prof. Kristofer King sa Univerziteta Troy, SAD. Program je besplatan i možete ga naći na internet stranici <http://christopherking.name/ChemFormat/index.html>. Program se distribuira kao jedna datoteka sa .dotm ekstenzijom. Instalira se veoma lako, potrebno je samo da datoteku prekopirate u STARTUP direktorijum programa *Word*.

Opres: datoteke sa .docm ili dotm ekstenzijom u sebi sadrže makroe. Makroi su mali programi koji automatski ponavljaju niz unapred zadatih koraka. Makroi mogu sadržati viruse, tako da nemojte nikada instalirati na svoj računar neproverene .docm ili .dotm datoteke.

Nakon instalacije, program *Chemistry Formater for Microsoft Word* pravi novu bezimenu grupu na kontekstnoj traci kartice *Home*. Ova grupa sadrži samo jednu alatku koja je prikazana na slici 5.1.



Slika 5.1 Alatka programa *Chemistry Formater for Microsoft Word*.

Program *Chemistry Formater for Microsoft Word* primenjuje jednostavna pravila formatiranja pomoću kojih otkucani tekst pretvara u hemijske simbole i jednačine.

Počnimo sa jednim jednostavnim primerom, otkucajte molekulsku formulu vode, ali bez formatiranja broja 2 u indeks - otkucajte samo H₂O i izaberite alatku O_2^+ . Dobićete ispravno napisanu molekulsku formulu vode - H₂O. Program je prepoznao da je potrebno broj dva formatirati u indeks i upravo to i učinio.

Ali da li će program prepoznati da je broj dva potrebno formatirati u eksponent ukoliko želimo da otkucamo formulu Ca²⁺ jona? Otkucajte Ca₂+ i izaberite alatku O_2^+ . Dobićete ispravno napisanu formulu Ca²⁺.

Pokušajmo jedan još teži primer, otkucajte SO₄²⁻ i izaberite alatku O_2^+ . Dobićete ispravno napisanu formulu sulfatnog anjona - SO₄²⁻.

Program *Chemistry Formater for Microsoft Word* formatira brojeve na osnovu nekoliko jednostavnih pravila:

- ukoliko se broj nalazi iza slova formatira broj u indeks H₂ ⇒ H₂;
- Ukoliko se broj nalazi ispred slova ili je razmakom odvojen od slova ne formatira ga 2 Fe ⇒ 2 Fe;
- Ukoliko se broj nalazi iza slova a iza tog broja stoji znak + ili -, formatira i broj i znak + ili - u eksponent Mg₂+ ⇒ Mg²⁺. Izuzetak od ovoga načina formatiranja su formule koje se završavaju sa O₃⁻ i O₄⁻. Očekivali bi da će se NO₃⁻ formatirati u NO³⁻, što je pogrešno napisan nitratni anjon. Međutim, program prepoznaje da su poslednja tri

simbola O3- i pravilno formatira u NO₃⁻. Ista je situacija i sa hidrogensulfatnim anjonom HSO₄⁻ ⇒ HSO₄⁻;

- Ukoliko se dva broja i znak + ili - nalaze iza slova, prvi broj se formatira u indeks, a drugi broj i znak + ili - u eksponent HPO₄²⁻ ⇒ HPO₄²⁻;
- Znak + ili - uvek se formatira u eksponent Na⁺ ⇒ Na⁺.

Oprez: zbog navedenih principa formatiranja, moguće je da ne dobijete željeni rezultat kada su u pitanju jedanput naelektrisani katjoni i anjoni. Na primer, ako ukucate nitritni anjon kao NO₂- dobićete pogrešnu formulu NO²⁻, umesto NO₂⁻. Zato je potrebno uvek proveriti rezultate formatiranja.

Savet: dobar način da otkucate nitritni anjon je da ukucate NO₂¹⁻. Kada izaberete alatku 0_2^{\pm} dobićete NO₂¹⁻, zatim se možete vratiti i izbrisati broj 1 iz eksponenta da bi dobili ispravno napisanu formulu anjona.

Prilikom formatiranja formula kompleksa prelaznih metala program uglavine i zakrivljene zagrade tretira kao slova i primenjuje već pomenute principe formatiranja [Co(NO₂)₄(NH₃)₂]²⁻ ⇒ [Co(NO₂)₄(NH₃)₂]²⁻.

Sledeći primer koji ćemo uraditi je formula jednog kristalohidrata, na primer CuSO₄·5H₂O. Tačka između formule bakar(II)-sulfata i pet molekula vode označava način na koji su molekuli vode vezani u ovom jedinjenju (kristalna voda). Ovu tačku možete uneti u tekst kao simbol. Ali ukoliko ukucate CuSO₄*5H₂O i izaberete alatku 0_2^{\pm} , dobićete CuSO₄·5H₂O. Znači program automatski pretvara zvezdicu * (asteriks) u tačku. Napomena: zvezdicu možete uneti preko numeričke tastature, samo prvo proverite da li uključena (ukoliko nije pritisnute taster *Num Lock*).

Istu tačku možemo koristiti za označavanje nesporenog elektrona u radikalima. Formula metil radikala se može dobiti tako što otkucate *CH₃ i izaberete alatku 0_2^{\pm} . Dobićete ·CH₃.

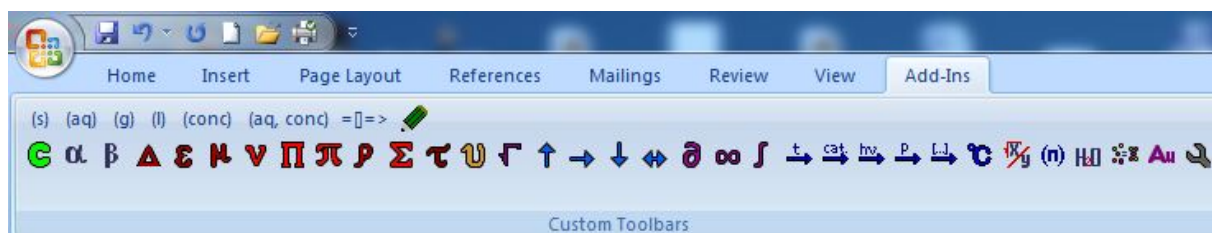
Program formatira sledeći niz karaktera --> (dva minusa i znak veće) u →. Dvostruka strelica za obeležavanje povratnih reakcija se ne može dobiti pomoću ovog programa, već se mora uneti preko opcije *Symbol*.

Ukoliko pišete o termohemijskim jednačinama, često morate da koristite eksponencijalni zapis pri pisanju entalpija reakcija, na primer, ΔH=3.2 × 10³ J/mol. Da biste dobili ovakav zapis dovoljno je da otkucate ΔH=3.2E3 J/mol i izaberete alatku 0_2^{\pm} .


Otkucajte ponovo jednačinu reakcije oksidacije hlorovodonika sa početka vežbe, ali sada kucajte 2KMnO₄ + 16HCl --> 2KCl + 2MnCl₂ + 5Cl₂ + 8H₂O i izaberite alatku 0_2^{\pm} . Dobićete ispravno napisanu jednačinu reakcije sa mnogo manje utrošenog vremena.

Program *EquPixy* (verzija 3.0) je dodatak za *Word*, koji znatno ubrzava unošenje hemijskih formula i jednačina reakcija, kao i matematičkih formula. Program je besplatan i može se preuzeti sa internet adrese <http://www.equpixy.com>. Instalacija programa se vrši pokretanjem datoteke *Install.exe* i program se automatski umeće kao dodatak programu *Word*.


Alatke programa *EquPixy* se smeštaju na kontekstnu traku kartice *Add-Ins* (slika 5.2).




Slika 5.2 Kontekstna traka kartice *Add-Ins* sa alatka programa *EquPixy*.

Za hemičare najvažnija alatka programa *EquPixy* je alatka za pretvaranje teksta u molekulske ili jonske formule .

Pisanje molekulskih formula

Pravilno napisanu molekulsku formulu možete dobiti tako što ćete ukucati molekulsku formulu bez formatiranja brojeva atoma u indeks i izabrati alatku . Na primer:


Otkucajte NH_4NO_3 i izaberite alatku , dobićete NH_4NO_3


Možete koristiti i zagrade, otkucajte $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ i izaberite alatku , dobićete $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$

Naravno, formatiraju se samo brojevi koji stoje iza slova, brojevi ispred slova ostaju neformatirani $2(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{NH}$ se formatira u $2(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{NH}$

Pisanje formula jona ili formula sa umetnutim oksidacionim stanjima atoma

Da bi neki broj ili znak (+ ili -) bio formatiran u eksponent potrebno je to naglasiti uglastim zagradama [] ili iskrivljenim zagradama ().

Tako, na primer, formulu sulfatnog anjona ćete dobiti ako otkucate $\text{SO}_4[2-]$ ili $\text{SO}_4(2-)$ i pritisnete alatku  → SO_4^{2-} .

Ovakav način formatiranja brojeva i znakova u eksponent može biti koristan kada želite da naglasite oksidacione brojeve pojedinih atoma u molekulu. Napomena: setite se da se oksidaciona stanja pišu prvo znak (+ ili -) a zatim broj (na primer **-2**), dok se naelektrisanja jona pišu prvo broj a zatim znak (na primer **2-**). Da biste napisali formulu arsen(III)-sulfida sa oksidacionim brojevima atoma kiseonika i arsena otkucajte $\text{As}[+3]_2\text{S}[-2]_3$ ili $\text{As}(+3)_2\text{S}(-2)_3$ izaberite alatku . Tekst će biti preformatiran u $\text{As}^{+3}_2\text{S}^{-2}_3$.

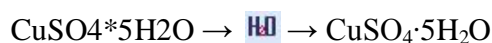
Tekst u zagradama će biti formatiran u eksponent samo ukoliko se sastoji od brojeva i/ili znakova + i -. Ukoliko se u zagradama nalazi tekst sa slovima takav tekst neće biti formatiran u eksponent. Tako se formule kompleksnih molekula mogu uneti:



ili formule jona kompleksa prelaznih metala

$[\text{Co}(\text{NO}_2)_6][3+] \rightarrow \text{H}_2\text{O} \rightarrow [\text{Co}(\text{NO}_2)_6]^{3+}$. Primitite kako je u ovoj formuli deo [3+] formatiran u eksponent, jer sadrži samo broj i znak +, a deo [Co(NO₂)₆] nije formatiran u eksponent jer sadrži slova.

Za molekulske formule kristalohidrata i radikale koristi se zvezdica (*).

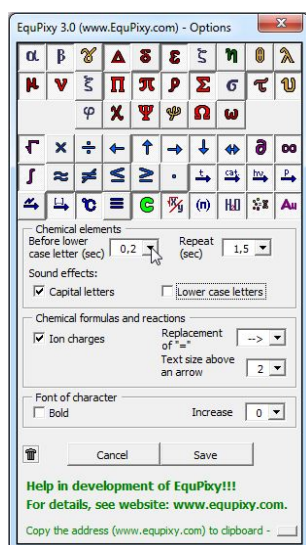


Opcija za brzo pisanje simbola hemijskih elemenata

Hemijski elementi se predstavljaju jednoslovnim ili dvoslovnim simbolima (izuzev još uvek neotkrivenih elemenata koji imaju troslovne simbole, na primer, element rednog broja 115 se zove **ununpentijum** i ima simbol Uup). Prvo slovo dvoslovnih simbola je veliko a drugo malo. Ovo može da uspori kucanje jer je potrebno često pritiskati taster *Shift*. U programu *EquPixy* nalazi se opcija za brzo kucanje simbola elemenata, koja se aktivira izborom alatke **Au** sa kontekstne trake. Kada se uključi ova opcija velika slova se kucaju pritiskom i brzim poštanjem tastera slova. Ukoliko pritisnete taster slova i držite ga neko vreme biće otkucano malo slovo.

Primer: Aktivirajte alatku za brzo kucanje simbola elemenata (alatka će promeniti boju kada je aktivirana **Au**). Pritisnite taster C i brzo ga pustite (kao kad normalno hocete da otkucate slovo C). Pojaviće se veliko slovo C. Pritisnite taster L i držite ga oko pola sekunde. Pojaviće se malo slovo l. Otkucali se simbol elementa hlora.




Vreme koje je potrebno držati taster pritisnutim je podrazumevano podešeno na 0,15 sekundi, ali se može promeniti u podešavanjima programa. Dijalog prozora za podešavanje opcija *EquPixy* programa (slika 5.3) će se aktivirati izborom alatke *Options* sa kontekstne trake kartice *Add-Ins*. Unutar sekcije *Chemical elements* nalazi se polje *Before lower case letter (sec)*, sa poljem u koje možete uneti vreme za koje je potrebno držati taster pritisnutim da bi se otkucalo malo slovo. Za početnike, preporučena vrednost je od 0,2 do 0,4 sekunde. Napomena: nemojte zaboraviti da deaktivirate alatku za brzo kucanje simbola elemenata, kada završite sa unošenjem jednačina reakcija i vratite se kucanju redovnog teksta.




Slika 5.3 Dijalog prozora *Options* u kome možete menjati podešavanja programa *EquPixy*.

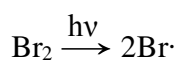
Umetanje strelica

Jedna od najvećih prednosti programa EquPixy je rad sa strelicama u jednačinama hemijskih reakcija. U dijalogu prozora *Options*, u okviru segmenta *Chemical formulas and reactions*, nalazi se polje *Replacement of "="*. U ovom polju možete izabrati jednu od tri opcije kojim će biti zamenjen znak = prilikom formatiranja jednačine reakcije. Prva opcija je NO, odnosno znak = neće biti zamenjen strelicom (ostaće =). Izborom druge opcije (→) znak = će biti zamenjen strelicom →, a izborom treće opcije strelicom ↔. Sada možemo da otkucamo celu jednačinu reakcije sinteze vode.

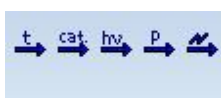
- Prvo, u dijalog prozoru *Options* (otvara se izborom alatke ) postavite da se znak = zamenjuje strelicom →, pritisnite dugme *Save*;
- Zatim, aktivirajte alatku za brzo kucanje simbola elemenata  (mada nije neophodno);
- Otkucajte: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$;
- Izaberite alatku ;
- Dobili ste: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$.

Za unošenje reakcije sinteze amonijaka potrebno je da u dijalogu prozora *Options* postavite da se znak = zamenjuje sa ↔, zato što je reakcija sinteze amonijaka povratna reakcija. Zatim otkucajte $3\text{H}_2 + \text{N}_2 = 2\text{NH}_3$, izaberite  i dobili ste $3\text{H}_2 + \text{N}_2 \leftrightarrow 2\text{NH}_3$.

Ponekad se na strelicama u jednačinama reakcija nalaze upisani uslovi pod kojima se reakcija dešava. Na primer, molekuli broma će se pod uticajem svetlosti razložiti na atome. Jednačinu ove reakcije možemo napisati kao:




U programu *EquPixy* postoje unapred definisane strelice kojima se mogu opisati reakcije pri povišenoj temperaturi (\xrightarrow{t}), pritisku (\xrightarrow{p}), u prisustvu katalizatora ($\xrightarrow{\text{cat.}}$), svetlosti ($\xrightarrow{h\nu}$) ili struje ($\xrightarrow{\text{⚡}}$). Alatke za umetanje ovakvih strelica nalaze se na kontekstnoj traci (slika 5.4). Dovoljno je izabrati željenu alatku i u dokumentu će se pojaviti odgovarajuća strelica.




Slika 5.4 Alatke za unošenje strelica sa reakcionim uslovima.

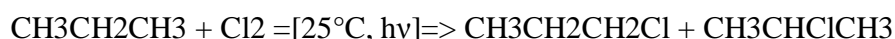
Međutim, pet unapred definisanih strelica sa reakcionim uslovima nisu ni približno dovoljne da bi pokrile sve potrebe hemičara za ovakvim strelicama. Strelice sa reakcionim uslovima možete praviti sami.


Ukoliko se neka reakcija dešava na 25°C i bitni je naglasiti tu temperaturu tada će vam trebati strelica $\xrightarrow{25^\circ\text{C}}$. Ovu strelicu možete napraviti tako što prvo otkucate znak =, zatim u uglaste zagrade [] unesete 25°C i nakon toga završite sa znakom jednako i znakom veće =>. Nakon toga izaberite alatku za formatiranje strelice  sa kontekstne trake.




Šablon za pravljenje strelica ne morate pamtiiti. Izborom alatke  sa kontekstne trake u dokument će biti umetnuto =[]=> i potrebno je samo da ukucate željeni tekst između uglastih zagrada.

Primer: potrebno je da u dokument umetnemo jednačinu reakcije hlorovanja propana na 25°C u prisustvu svetlosti. Ovom reakcijom dobijaju se dva proizvoda: 1-hlorpropan i 2-hlorpropan. Ukucajte celu reakciju:



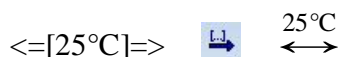
zatim izaberite alatku za formatiranje strelice  i dobićete:



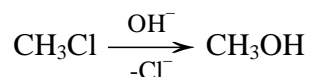
zatim izaberite alatku za pretvaranje teksta u formule  i dobićete ispravno napisanu jednačinu reakcije hlorovanja propana.



Ukoliko želite da na dvostruku strelicu upišete reakcione uslove potrebno je da pre prvog znaka = upišete znak <

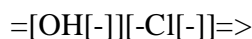


Ponekad se sa gornje strane strelice upisuju pojedini reaktanti, a sa donje strane proizvodi reakcije koji, najčešće, napuštaju reakcionu smešu. Dobar primer takve reakcije je supstitucija hloridnog anjona hidroksidnim da bi se dobio metanol.




Strelica iz gornje jednačine je napravljena pomoću dve uglaste zagrade. Tekst iz prve uglaste zagrade se nakon formatiranja nalazi iznad strelice, a tekst iz druge uglaste zagrade ispod strelice.

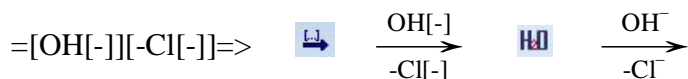
Vežba: napravimo samo strelicu iz gornje jednačine. Na početku ukucajte sledeće:



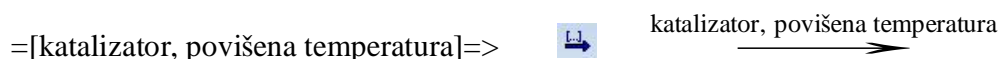
i izaberite alatku za formatiranje strelice . Dobićete:



Obratite pažnju da naelektrisanja anjona nisu pravilno prikazana. Potrebno je izabrati i alatku za pretvaranje teksta u formule  da bi se naelektrisanja prikazala u eksponentu.

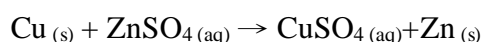



Napomena: strelice imaju svoju maksimalnu veličinu, tako da je potrebno osmisliti tekst koji će se naći na strelicama. Nemojte stavljati previše dugačak tekst na strelice:





Ukoliko je potrebno možete smanjiti veličinu slova teksta na strelici pomoću polja *Text size above an arrow* u dijalogu prozora *Options*.

U jednačinama hemijskih reakcija često je potrebno naglasiti agregatno stanje reaktanata ili proizvoda reakcije. Za supstance u čvrstom agregatnom stanju koristi se oznaka (s), u tečnom (l), u gasovitom (g), a za supstance rastvorene u vodi (aq). Ove oznake se smeštaju u indeks pored formule supstance.

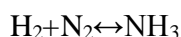



Program *EquPixy* ne može pravilno da formatira ove oznake u index, tako da ako otkucate $\text{ZnSO}_4(\text{aq})$ i izaberete alatku  dobićete formulu $\text{ZnSO}_4(\text{aq})$ u kojoj oznaka (aq) nije pravilno

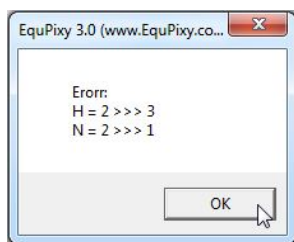
formatirana u indeks. Na kontekstnoj traci nalaze se alatke čijim izborom možete automatski umetnuti odgovarajuću oznaku agregatnog stanja u indeks (s) (aq) (g) (l) (conc) (aq, conc) tokom kucanja jednačine reakcije. Izborom alatke u obliku olovke  dobićete listu, sa koje možete odabrati koje će od ovih alatki biti prikazane na kontekstnoj traci.

Alatka koju studenti hemije najviše vole u programu *EquPixy*, je alatka koja proverava da li su jednačine reakcija ispravno sređene .

Primer: napravite u dokumentu nesređenu jednačinu reakcije sinteze amonijaka, kako je to prikazano niže




i izaberite alatku za proveru . Pojaviće se prozor sa porukom o grešci (slika 5.5). U ovom prozoru je prikazano da sa leve strane jednačine ima dva atoma vodonika i azota, a sa desne tri atoma vodonika i jedan atom azota.



Slika 5.5 Prozor sa porukom da jednačina nije sređena.


Ukucajte koeficijent tri ispred vodonika i dva ispred amonijaka i ponovo izaberite alatku za proveru. Program će javiti da je jednačina reakcije sređena.


Formatiranje matematičkih formula

Pored formatiranja jednačina hemijskih reakcija, program *EquPixy* može da pretvara matematičke formule napisane u jednom redu u veoma rigorozne matematičke izraze. Alatka kojom se vrši ovo pretvaranje  nalazi se u kontekstnoj traci kartice *Add-Ins*. Počnimo od jednostavnijih primera.

Razlomak možete napraviti pomoću znaka /. Otkucajte $7/5 + 4/5 = 11/5$ i izaberite alatku .

Dobićete $\frac{7}{5} + \frac{4}{5} = \frac{11}{5}$.

Razmak određuje gde će biti smešten simbol. Ako otkucate $a=b/c+d$ (bez razmaka u formuli) i izaberete alatku  dobićete $a = \frac{b}{c + d}$. Ako otkucate $a=b/c + d$ (između slova c i znaka + postoji

razmak kao i između znaka + i slova d) i izaberete alatku  dobićete $a = \frac{b}{c} + d$.

Broj iza slova se formatira kao eksponent, ispred slova se ne formatira:

$$A=2\alpha d^2/4 \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow A = \frac{2\alpha d^2}{4}$$

$$V=1/3 \pi R^2 h \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow V = \frac{1}{3} \pi R^2 h$$

Množenje se može naglasiti zvezdicom, biće formatirana kao centralna tačka :

$$a^2=b^2*c^2 \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow a^2 = b^2 \cdot c^2$$

$$a*2=2a \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow a \cdot 2 = 2a$$

Stepenovanje se označava simbolom ^ (*Shift* + 6 na engleskoj tastaturi):

$$a^{-x}=1/a^x \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow a^{-x} = \frac{1}{a^x}$$

$$(a^x)^y=a^x*y \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow (a^x)^y = a^{x*y}$$

Korenovanje se označava simbolom √ (nalazi se na kontekstnoj traci):

$$\sqrt{(a+b/c)}=\sqrt{a+b}/\sqrt{c} \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow \sqrt{\frac{a+b}{c}} = \frac{\sqrt{a+b}}{\sqrt{c}}$$

$$x=3\sqrt[3]{y^2+z^2} \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow x = 3\sqrt[3]{y^2+z^2}$$

Oznaka ^ na kraju reda označava da svi brojevi iza slova se formatiraju u indeks umesto u eksponent:

$$X=X_1+X_2+X_3 \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow X = X^1 + X^2 + X^3$$

$$X=X_1+X_2+X_3^{\wedge} \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow X = X_1 + X_2 + X_3$$

$$C=A_1^{\wedge}2 + B_1^{\wedge}2 \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow C = A_1^2 + B_1^2$$

Simbol za sumu se nalazi na kontekstnoj traci. Opseg sumiranja se stavlja u zagradu ispred simbola za sumu i razdvaja se sa ;

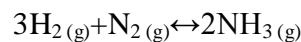
$$(n=0;\infty)\Sigma(1/n^2)=\pi^2/6 \rightarrow \text{[Formatiranje]} \rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$$


Simbol za integral se nalazi na kontekstnoj traci. Opseg integrala se unosi isto kao i opseg sume:

$$A=(V1;V2)\int p \cdot dV \rightarrow \int_{V_1}^{V_2} p \cdot dV$$

Hemičari najčešće koriste matematičke formule, kada hoće da predstave jednačine za izračunavanje konstante ravnoteže na osnovu koncentracije učesnika u reakciji i jednačine za izračunavanje brzine hemijske reakcije.

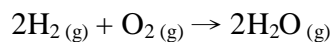
Primer: Predstavimo izraz za izračunavanje konstante ravnoteže reakcije:



Rešenje: otkucajte $K = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3}$ i izaberite alatku . Dobićete izraz:


$$K = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2] \cdot [\text{H}_2]^3}$$

Primer: Predstavimo izraz za izračunavanje brzine direktne reakcije:





Rešenje: otkucajte $v = k \cdot [\text{H}_2]^2 \cdot [\text{O}_2]$ i izaberite alatku . Dobićete izraz: $v = k \cdot [\text{H}_2]^2 \cdot [\text{O}_2]$

Dodatne opcije programa EquPixy

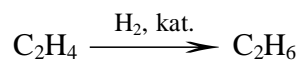
Na kontekstnoj traci kartice *Add-Ins* se nalaze još neke korisne alatke programa *EquPixy*. Često je, prilikom kucanja matematičkih formula, potrebno umetnuti grčka slova ili simbole matematičkih operatora. Već smo naučili kako se to radi pomoću alatke *Symbol* na kontekstnoj traci kartice *Insert*. Program *EquPixy* nudi direktnu prečicu do dijaloga prozora *Symbol* izborom alatke . Prečice za direktan unos nekih najčešće korišćenih grčkih slova (α , β , Δ , ϵ , μ , ν , Π , π , ρ , Σ , τ , υ) se takođe nalaze na kontekstnoj traci.



Osim prečica za unošenje grčkih slova na kontekstnoj traci se nalaze prečice za unošenje strelica (\uparrow , \rightarrow , \downarrow , \leftrightarrow)  i matematičkih operatora ($\sqrt{\quad}$, ∂ , ∞ , \int) .

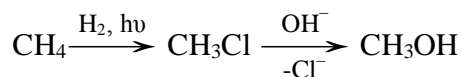
Koje alatke programa *EquPixy* će biti vidljive na kontekstnoj traci kartice *Add-Ins*, možete podesiti u gornjem delu dijaloga prozora *Options* (slika 5.3).

Zadatak 1. Reakcija hidrogenizacije etena u knjizi iz organske hemije je prikazana kao:



Napravite u svom dokumentu istu ovakvu jednačinu reakcije.

Zadatak 2. Otkucajte u svom dokumentu jednačinu sledeće reakcije:



Zadatak 3. Unesite u dokument izraz za konstantu potpune disocijacije fosforne kiseline. Upišite formulu u jednom redu, koju je potrebno uneti u dokument, da bi se dobio izraz za konstantu potpune disocijacije fosforne kiseline.

Formula u jednom redu: _____

Zadatak 4. Unesite u dokument sledeći izraz i upišite formulu u jednom redu koju ste uneli.

$$A = \frac{R}{2\alpha\pi C} \int_0^{\infty} \int_0^R \int_0^C \frac{dV}{\sqrt{x^3 + y^3 + z^3} \sqrt{\frac{x^2}{a^4} + \frac{y^2}{b^4} + \frac{z^2}{c^4}}}$$

Formula u jednom redu: _____

_____ Datum

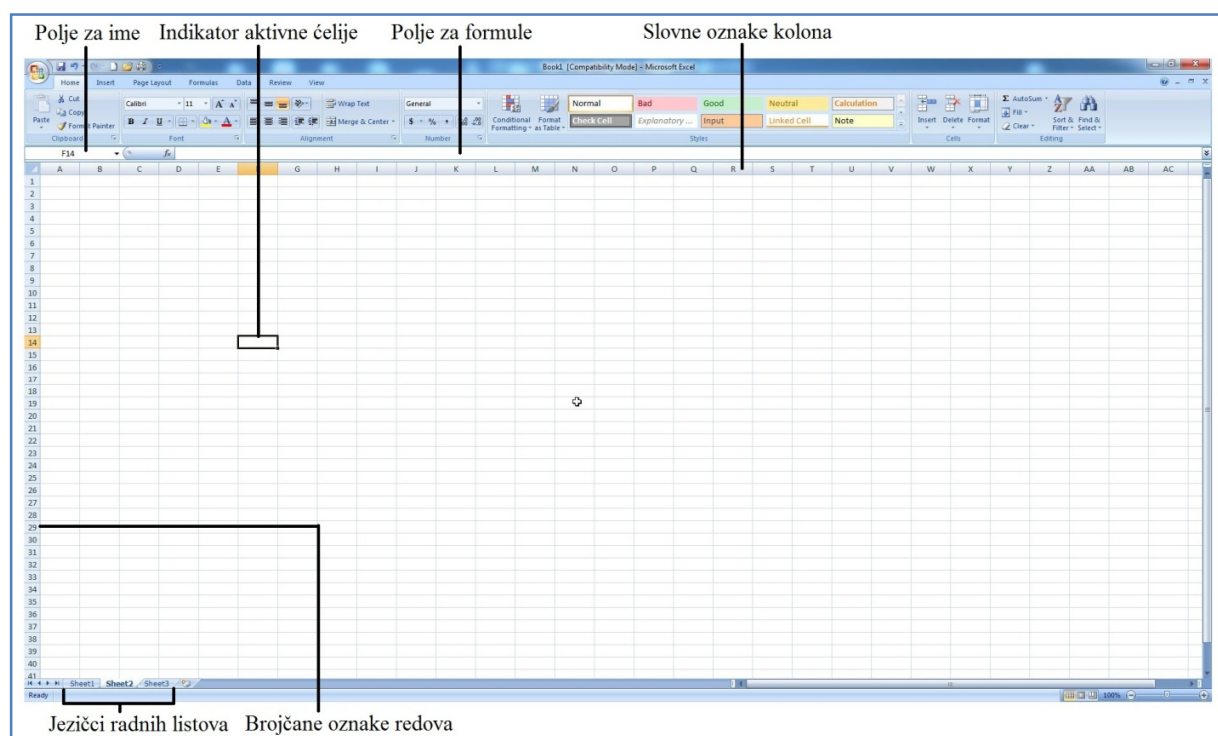
_____ Potpis asistenta

Vežba 6.

Microsoft Excel - osnovni pojmovi

Program *Excel* iz *Microsoft Office* paketa je verovatno najkorišćeniji program za tabelarne proračune na svetu. Osim numeričkih proračuna, u programu *Excel* se mogu izvoditi i mnoge druge operacije, kao što su: obrada brojeva, izrada grafikona, organizovanje lista podataka, crtanje grafičkih elemenata i dijagrama, automatizacija složenih procesa itd. Hemičari uglavnom koriste *Excel* za obradu rezultata merenja, statističku obradu eksperimentalnih podataka, izvođenje komplikovanih proračuna sa velikim brojem podataka i crtanje dijagrama.

Datoteke ranijih verzija programa *Excel* su imale .xls ekstenziju, ali je ona od verzije *Excel 2007* promenjena u .xlsx ekstenziju. Ova ekstenzija je znatno lakša i jednostavnija za rad, jer je napisana u XML jeziku. Sve novije verzije programa *Excel* imaju ugrađen konverter za učitavanje starih datoteka i njihovo pretvaranje u novi format. Takođe, sve verzije *Excel* programa nude mogućnost snimanja datoteke u .xls formatu, što jedino ima smisla ukoliko je datoteku potrebno otvoriti na nekom računaru sa starijom verzijom programa. Po startovanju programa *Excel* otvoriće se glavni prozor programa kao na slici 6.1.



Slika 6.1 Glavni prozor programa Excel.

Odmah upada u oči da postoji dosta sličnosti između glavnog prozora ovog programa i programa *Word*. U gornjem delu prozora se nalazi naslovna traka, sa *Office* dugmetom i *Quick Access* paletom alatki, traka sa karticama i kontekstna traka. Sa desne strane se nalazi klizač za kretanje kroz dokument, a na dnu statusna traka. Kao i kod programa *Word*, većina alatki koje su potrebne pri radu u programu *Excel*, nalazi se na kontekstnim trakama različitih kartica.

Postoji i dosta razlika u izgledu dva programa. Ispod kontekstne trake programa *Excel* nalaze se polje za ime i polje za formule, ispod njih su slovne oznake kolona, a sa leve strane brojčane oznake redova. Pri dnu prozora, sa leve strane se nalaze jezičci radnih listova. Naravno, najveća razlika između dva programa je u izgledu samog dokumenta. Kod programa *Word*, dokument je bio prazan list papira, dok je kod programa *Excel* dokument podeljen na ćelije. U dokumentu se, takođe, ne vide ivice papira niti broj strana koji dokument sadrži. *Excel* ima potpuno drugačiju filozofiju smeštanja podataka.

Cela datoteka programa *Excel* se zove radna sveska (engl. *Workbook*). Kao i svaka druga sveska i ova sveska se sastoji od listova, koji se zovu radni listovi (engl. *Worksheets*). Kada se otvori nova datoteka, odnosno radna sveska, ona će imati tri radna lista. Tokom rada po potrebi mogu se dodavati novi ili brisati stari radni listovi. Sa jednog na drugi radni list može se prelaziti pomoću jezičaka radnih listova, koji se nalaze pri dnu prozora sa leve strane (slika 6.1). Svaki radni list ima svoje ime, u početku se zovu *Sheet1*, *Sheet2* i *Sheet3*, ali im se tokom rada može promeniti ime.

Ako se pomoću horizontalnog ili vertikalnog klizača pomerate kroz radni list, učiniće vam se da je on beskonačan. To, međutim, nije istina; svaki radni list ima 1.048.576 redova i 16.384 kolona. To znači da u svakom radnom listu ima preko 17 milijardi ćelija. Verovali ili ne, postoje korisnici koji misle da je to malo i zahtevaju da se poveća broj redova i kolona. Naravno, na današnjim kućnim računarima ne možete popuniti sve ćelije jednog radnog lista, ponestaće vam memorije računara mnogo pre toga.

Svaka od preko sedamnaest milijardi ćelija u radnoj svesci ima svoje ime. Ime ćelije se sastoji od slovne oznake kolone i broja reda u kojima se nalazi ćelija. Prva ćelija u radnom listu ima ime A1, ćelija desno od nje B1 itd. Prvih 26 kolona je označeno slovima od A do Z, zatim ide kolona AA, AB do ZZ. Posle ZZ kolone idu AAA, AAB itd. Poslednja kolona na radnom listu ima oznaku XFD.

Ćelija koja je uokvirena podebljanim crnim okvirom naziva se aktivna ćelija. Ime te ćelije je ispisano u polju za ime, a njen sadržaj (ukoliko ga ima) u polju za formule. Zaglavlja reda i kolone aktivne ćelije prikazana su drugom bojom, radi lakšeg uočavanja. Da biste promenili aktivnu ćeliju, postavite pokazivač miša na neku drugu ćeliju, pritisnite levi taster miša i ta ćelija će postati aktivna. Kroz radni list se možete kretati kursorskim tasterima sa tastature (ili *Page Up*, *Page Down* tasterima) i menjati aktivne ćelije. Ukoliko se krećete kroz radni list pomoću horizontalnog ili vertikalnog klizača, aktivna ćelija se neće menjati.

U programu *Excel* ima nekoliko vrsta prikaza radnog lista. Prikazi se mogu menjati preko palete sa prikazima, koja se nalazi na desnoj strani statusne trake ili preko alatke iz grupe *WorkBook Views* sa kontekstne trake kartice *View*. Prikaz koji se najviše koristi je *Normal*, jer je u njemu vidljiv veliki deo radnog lista, ali i alatke sa kontekstne trake. U prikazu *Page Layout*, radni list je izdvojen na strane, pa možete videti kako će dokument izgledati prikom štampanja. Margine stranice, orijentaciju i veličinu papira možete podešavati pomoću alatke kartice *Page Layout* isto kao u programu *Word*. U ovom prikazu, takođe, možete videti i lenjire, ali bez uvlaka i tabulatora. Radni list zauzima većinu ekrana u prikazu *Full Screen*, pa je ovaj prikaz pogodan za čitanje i proveravanje sadržaja radnog lista.

Unošenje podataka u ćelije

Ćelija može da sadrži tri vrste podataka:

- numeričke vrednosti (brojeve);
- tekst;
- formule.

Brojevi predstavljaju količinu. Sa brojevima se mogu izvoditi matematičke operacije poput sabiranja, množenja itd. U programu *Excel* brojevima se prikazuju i datumi (na primer, 20.12.2012) i vreme (18:35). Program *Excel* može da upisuje i pamti brojeve do 15 cifara. Ako upišete broj 123 456 789 012 345 678 (ima 18 cifara) *Excel* će ga zapamtiti kao 123 456 789 012 345 000. Ukoliko želite da upišete neki broj koji ima više od 15 cifara jedini način je da ga predstavite kao tekst. Nevolja sa ovakvim načinom upisivanja brojeva sa više od 15 cifara je što ih ne možete koristiti u matematičkim izračunavanjima (ne možete ih, na primer, sabirati sa drugim brojevima). *Excel* u jednoj ćeliji može da prikaže tekst od 32 000 znakova. Najveći pozitivan broj koji *Excel* može da prikaže je $9.9 \times 10^{+307}$, a najmanji negativan -9.9×10^{-307} . Najmanji pozitivan broj koji može da prikaže je 1.0×10^{-307} , a najveći negativan -1.0×10^{-307} .

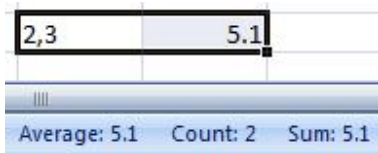
Tekst je svaki niz znakova koji u sebi sadrži slova ili simbole (osim u specijalno formatiranim ćelijama). Tekst koji počinje brojem i dalje se formatira kao tekst. Na primer, ako u ćeliju upišete 20 kJ/mol, *Excel* će taj podatak obrađivati kao tekst, a ne kao numeričku vrednost. Shodno tome, ovu ćeliju ne možete da koristite za numeričke operacije. Ovaj problem se može rešiti tako što ćete u prvu ćeliju upisati broj 20, a u ćeliju desno od nje kJ/mol.

Svi tabelami proračuni se vrše pomoću **formula**. Formule u programu *Excel* se mogu prepoznati tako što uvek počinju znakom =. *Excel* omogućava unos formula u kojima se za izračunavanje rezultata koriste podaci iz drugih ćelija radnog lista ili radne sveske. Kada u ćeliju upišete formulu, njen rezultat će se pojaviti u ćeliji. Koja je formula upisana u ćeliji možete videti u polju za formule kada izaberete tu ćeliju. Formule mogu biti jednostavni matematički izrazi, a mogu da se koriste i komplikovane funkcije ugrađene u program *Excel*.

Da biste uneli neki broj u ćeliju, aktivirajte tu ćeliju, upišite broj i pritisnite taster *Enter* ili neki od kursorskih tastera. Vrednost broja će biti prikazana i u ćeliji i u polju za formule, dok je ćelija aktivna. Uz broj možete da upišete decimalnu tačku (ili zapeću), oznaku valute (na primer, \$), plus ili minus. Ukoliko upišete neki drugi simbol, osim navedenih, *Excel* će upis tretirati kao tekst.

Napomena: postoje dva načina pisanja decimalnih brojeva. U SAD i Engleskoj decimani brojevi se pišu sa tačkom. U Srbiji (i mnogim drugim zemljama, na primer, Nemačkoj) decimalni brojevi se pišu sa zapećom. *Excel* će preuzeti format pisanja brojeva iz *Region and Language* podešavanja *Windows* operativnog sistema. Ukoliko je *Windows* podešen na američki format, brojevi će biti sa tačkama, a ukoliko je podešen na srpski, sa zapećama. Način pisanja decimalnih brojeva možete podesiti u *Excel options* meniju (*Office* dugme ⇒ *Excel Options* ⇒ *Advanced* ⇒ *Use system separators*).

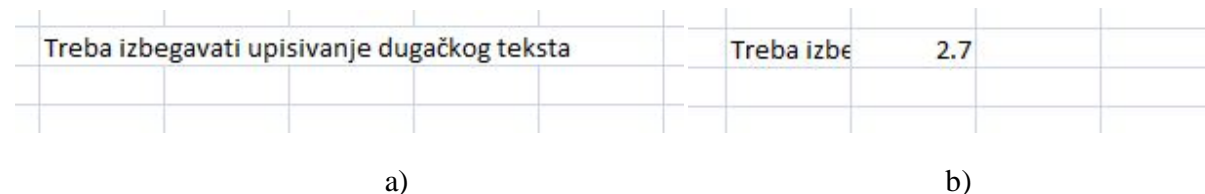
Način da otkrijete na koji je format podešen vaš računar je da otvorite radni list programa *Excel* i u jednu ćeliju upišete broj sa zapećom, na primer 2,3. U ćeliju pored upišite drugi broj sa tačkom, na primer 5.1. Pomoću miša izaberite obe ćelije i pogledajte statusnu traku (slika 6.2). Na statusnoj traci *Excel* ispisuje sumu brojeva u ćelijama, njihovu prosečnu vrednost, kao i broj izabranih ćelija sa podacima (ukoliko se ovi podaci ne prikazuju na statusnoj traci, možete ih aktivirati na listi koja će se pojaviti kada postavite pokazivač miša na statusnu traku i pritisnete desno dugme). Ukoliko je suma ove dve ćelije 5.1 (kao na slici 6.2) tada je operativni sistem podešen na američki format brojeva, a ukoliko je suma 2,3, tada je podešen na srpski.



Slika 6.2 Na statusnoj traci se ispisuje suma, prosečna vrednost i broj izabranih ćelija.

Drugi način da otkrijete format brojeva je da pogledate kako je koji broj formatiran u ćeliji. *Excel* brojeve formatira uz desnu ivicu ćelije (broj 5.1 na slici 6.2) a tekst uz levu (2,3, slika 6.2).

Tekst se u ćeliju upisuje na isti način kao i brojevi. U jednu ćeliju može da stane 32 000 karaktera teksta, ali kad god je to moguće, izbegavajte upisivanje dugačkog teksta u ćelije. Ako upišete dugačak tekst u ćeliju, tekst će se prelivati u susednu ćeliju ukoliko je ona prazna i biti vidljiv na ekranu (slika 6.3a). Ukoliko je susedna ćelija popunjena, biće vidljiv samo deo teksta koji staje u ćeliju (slika 6.3b).



Slika 6.3 Izgled ćelije sa upisanim dugačkim tekstom

Iako se u ćeliji vidi samo deo teksta, ostatak teksta nije izbrisan. Ukoliko aktivirate ćeliju sa dugačkim tekstom, ceo tekst će biti vidljiv u polju za formule. Ukoliko želite da se ceo tekst vidi u ćeliji, jedina opcija je da proširite ćeliju ili smanjite font teksta.

Sadržaj ćelije je najlakše obrisati tako što ćete izabrati ćeliju i pritisnuti taster *Delete*. Međutim, ovakav način brisanja briše samo sadržaj, ali ne i formatiranja unutar ćelije. Sva formatiranja koja ste primenili u ćeliji (format brojeva, masna slova, kurziv itd) će ostati zapamćena i primenjena na novi sadržaj, ukoliko ga unesete u ćeliju. Mnogo bolju kontrolu onoga što se briše u ćeliji možete ostvariti pomoću alatke *Clear*, koja se nalazi u grupi *Editing* kontekstne trake kartice *Home*. Izborom ove alatke pojaviće se padajuća lista sa četiri opcije:

- *Clear All* - briše se sve - sadržaj, formatiranje i komentari;
- *Clear Formats* - briše se samo formatiranje - sadržaj i komentari ostaju;
- *Clear Content* - briše sa samo sadržaj;
- *Clear Comments* - brišu se samo eventualni komentar povezan sa ćelijom.

Da biste zamenili sadržaj neke ćelije drugim, aktivirajte tu ćeliju i otkucajte novi podatak. Stari sadržaj će biti automatski izbrisan, a novi ubačen. Formatiranje ćelije se neće promeniti.

Postojeći sadržaj ćelije, bez brisanja, možete izmeniti na tri načina:

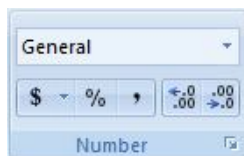
- Postavite pokazivač miša na ćeliju i dvaput pritisnite levi taster miša. U ćeliji će se pojaviti pokazivač u obliku vertikalne crte i možete početi sa dodavanjem novog sadržaja. Mesto pokazivača možete menjati kursorskim tasterima;
- Aktivirajte ćeliju i pritisnite taster F2. U ćeliji će se pojaviti pokazivač;
- Aktivirajte ćeliju i pritisnite na sadržaj u polju za formule. Na mestu gde ste pritisnuli pojaviće se pokazivač.

Kada završite sa menjanjem sadržaja pritisnite taster *Enter*.

Formatiranje brojeva

Formatiranje brojeva se odnosi na menjanje izgleda numeričkih vrednosti u ćelijama. *Excel* nudi veliki broj opcija za formatiranje brojeva, koje često znaju da zbune korisnike. Iako *Excel* ne menja vrednost broja, način na koji je taj broj prikazan na ekranu može se činiti potpuno pogrešnim. Zato je veoma bitno da, prilikom rada u ovom programu, obratite posebnu pažnju na formate brojeva u ćelijama. Ilustrujmo ovo jednim primerom.

Primer: otvorite novu radnu svesku i aktivirajte ćeliju A1. Trenutni format aktivne ćelije će biti ispisan u *Number Format* prozoru, koji se nalazi u grupi *Number* kontekstne trake kartice *Home* (slika 6.4).



Slika 6.4 U grupi *Number* kartice *Home* nalazi se prozor *Number Format* u koji je upisan trenutni format aktivne ćelije.

Podrazumevano, sve ćelije nove radne sveske imaju format *General*, osim ukoliko nije drugačije namešteno u postavkama programa. Pritiskom na strelicu na dole ovog prozora pojaviće se padajuća lista sa mogućim formatima, koji su podržani u programu. Sa ove liste odaberite opciju *Short Date*. Format aktivne ćelije će biti promenjen, tako da će *Excel* svaku vrednost unetu u tu ćeliju prikazivati kao datum. Ukucajte sada broj 41219 u aktivnu ćeliju i pritisnite taster *Enter*. U ćeliji će se pojaviti zapis 06-11-12. Ako aktivirate tu ćeliju, u polju za formule ćete videti 06-11-2012. Ovo je trenutak kada većina neiskusnih korisnika zove korisnički centar za pomoć, jer kakve veze ima broj 41219 sa zapisom 06-11-2012.

Međutim, stvari će postati još čudnije. U ćeliju B1 ukucajte broj 21413 ali ostavite format ćelije *General*. Broj 21413 se pojavljuje u ćeliji B1 onako kako smo i hteli. Ma koliko čudno to izgledalo, pokušajmo da oduzmemo vrednosti u ove dve ćelije. U ćeliju C1 unesite sledeće:

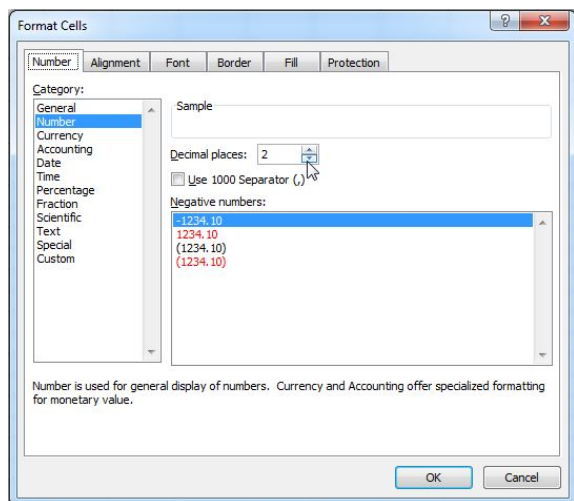
=A1-B1

i pritisnite taster *Enter*. U ćeliji C1 će se pojaviti zapis 23-03-54. Pogledajte format ćelije C1 u prozoru *Number Format*, biće *Date*.

Naravno, nije ovde *Excel* ništa pogrešio. Pošto je u ćeliji A1 format *Date*, *Excel* je broju 41219 dodelio odgovarajući datum. *Excel* podržava datume od 1. januara 1900. godine. Tom datumu je dodeljen broj 1, 2. januaru 1900. godine broj 2, itd. 6. novembar 2012. godine je broj 41219 (41219 dana je prošlo od 1. januara 1900. godine). Kada se od 6. novembra 2012. godine oduzme 21413 dana, dobija se 23. mart 1954. godine. Ukoliko promenite format ćelije C1 na *General*, prikazaće se broj 19806 što je tačna razlika brojeva 41219 i 21413.

Program *Excel* ima opciju da automatski prepozna tip podataka koji unosite i primeni odgovarajući format ćelije. U bilo koju praznu ćeliju koja ima format *General*, unesite 15-08-13 i pritisnite *Enter*. *Excel* će automatski prepoznati da unosite datum i promeniti format ćelije na *Date*. Promenite format te ćelije na *General*, i saznaćete da 15. avgust 2013. godine ima broj 41501.

Da bi se promenio format u više ćelija odjednom, potrebno je da izaberete (aktivirate) te ćelije. Osim pomoću padajuće liste prozora *Number Format*, format aktivne ćelije (ili više njih) možete promeniti i pomoću dijaloga prozora *Format Cells* (slika 6.5). Ovaj prozor možete dobiti pritiskom na desno dugme miša i izborom opcije *Format Cells* sa liste.



Slika 6.5 Dijalog prozora *Format Cells*.

U dijalogu prozora *Format Cells* možete odrediti i dodatne opcije u okviru svakog definisanog formata, kao što su broj decimalnih mesta, upotreba zapete da bi se razdvojile hiljade, itd.

Postoji 11 definsanih formata ćelija:

1. *General* - podrazumevani format, prikazuje brojeve kao celobrojne ili decimalne vrednosti. Brojevi su prikazani onako kako su uneti, bez ikakvog menjanja. Ukoliko je broj duži od širine ćelije, u ćeliji se prikazuje samo deo broja, dok se ceo broj može videti u polju za formule;
2. *Number* - omogućava da definišete broj decimalnih mesta, zapetu za odvajanje hiljada i format pisanja negativnih brojeva. Broj će uvek biti prikazan sa onoliko decimalnih mesta koliko je definisano. Na primer, ukoliko definišete dva decimalna mesta i ukucate broj 12 prikazaće se 12.00. Za prikazivanje se koriste pravila zaokruživanja, ukoliko ukucate 12.358, prikazaće se 12.36, mada će se sva izračunavanja raditi sa vrednošću 12.358;
3. *Currency* - broju se dodaje oznaka za valutu. Hiljade su uvek odvojene zapetama. Negativni brojevi su obojeni u crveno;
4. *Accounting* - isto kao i *Currency* format, samo su znak za valutu i zapeta uvek vertikalno poravnati;
5. *Date* - omogućava da izaberete jedan od nekoliko ponuđenih formata datuma;
6. *Time* - omogućava da izaberete jedan od nekoliko ponuđenih formata vremena;
7. *Percentage* - broju se dodaje znak %. Napomena: ukoliko ukucate u ćeliju formata *General* broj 0.89 i zatim promenite format ćelije u *Percentage*, biće prikazano 89.00%;
8. *Fraction* - realni brojevi će biti prikazani kao ceo broj i razlomak. Na primer, broj 12.25 će biti prikazan kao 12 1/4. Ne utiče na izgled celih brojeva;
9. *Scientific* - prikazuje brojeve u eksponencijalnom obliku. Možete definisati broj decimalnih mesta. Primer: ako ukucate broj 0.002777 i definišete dva decimalna mesta, biće prikazano 2.78E-03;

10. *Text* - broj će biti smatran tekстом, iako izgleda kao numerička vrednost. Biće formatiran uz levu ivicu ćelije;
11. *Special* - sadrži četiri dodatna formata za brojeve, koji se koriste samo u SAD.

Poslednja opcija je *Custom* u okviru koje možete sami definisati formate broja.

Napomena: ukoliko se u ćeliji pojavi niz znakova "taraba" (#####) to znači da ćelija nije dovoljno široka da bi prikazala broj u izabranom formatu. Da biste videli broj proširite kolonu ili promenite format.

Hemičari najčešće koriste format *General*, a nešto ređe *Scientific*, *Number* i *Percentage*.

Osim kartice za formatiranje brojeva, u dijalogu prozora *Format Cells* nalazi se još pet dodatnih kartica: *Alignment*, *Font*, *Border*, *Fill* i *Protection* (slika 6.5).

Na kartici *Alignment* nalaze se komande za poravnavanje sadržaja (teksta ili brojeva) u ćeliji. Sadržaj se može poravnati horizontalno i vertikalno. Poravnanje, kao uostalom i sva ostala formatiranja, se primenjuje samo na izabrane (aktivne) ćelije. Jedna zanimljiva opcija sa kartice *Alignment* je *Text Wrap*. Aktiviranjem ove opcije, tekst koji je duži od širine ćelije će se prelomiti u novi red i povećaće se visina ćelije. Ovo je jedan od načina kako možete uneti dugačak tekst u ćeliju, a da ceo tekst ostane vidljiv (slika 6.6).

	A	B
	Pomoću opcije <i>Text Wrap</i> može se videti dugačak tekst	Tekst pod uglom
1		
2		

Slika 6.6 U ćeliji A1 je primenjen format *Text Wrap* za prelamanja teksta. U ćeliju B1 je unet tekst pod uglom.

U okviru kartice *Font* nalaze se opcije za formatiranje fonta kojim je ispisan unos u ćeliji. Sve ove opcije smo već savladali u ranijim programima na ovom kursu. Pomoću kartice *Border* možete umetati okvire ćelija i birati stil i boju linija umetnutih okvira, a pomoću kartice *Fill* možete bojiti pozadinu ćelija. Na kartici *Protection* nalaze se opcije za zaštitu sadržaja ćelija od čitanja i/ili menjanja. Sve pomenute opcije nalaze se i u obliku alatki u grupama *Font* i *Alignment* kontekstne trake kartice *Home*.

Formatiranje teksta u ćelijama (osim formata brojeva) nije potrebno raditi, ukoliko ne planirate da štampate dokument. Naravno, dokumenti napravljeni u programu *Excel* se mnogo manje štampaju od onih napravljenih u programu *Word*, tako da su i alatke za uređivanje izgleda sadržaja u ćelijama manje važne.


Izbor ćelija, redova, kolona i područja

Već smo rekli da se ćelija može izabrati, odnosno aktivirati, pritiskom pokazivačem miša na nju. Aktivirana ćelija će biti obeležena podebljanim crnim okvirom. Drugi način aktiviranja ćelije je da otkucate ime ćelije (na primer, A1) u polje za ime i pritisnete Enter.

Područje pravouganog oblika, od više povezanih ćelija, možete izabrati tako što ćete postaviti pokazivač miša na jednu od ivičnih ćelija područja, pritisnuti levo dugme miša i povlačiti po ekranu. Kada izaberete željeno područje, pustite taster miša. Željeno područje će biti obeleženo podebljanim crnim okvirom. Takođe, područje možete izabrati i ako otkucate ime gomje leve i donje desne ćelije odvojene simbolom : u polje za ime. Na primer, aktiviraćete 10 ćelija od A1 do B5, ako otkucate A1:B5 u polje za ime.

Više nepovezanih područja ili ćelija možete odabrati pomoću tastera *Ctrl*. Izaberite prvo područje (ili ćeliju) i zatim pritisnite i držite taster *Ctrl* i izaberite drugo područje koje nije povezano sa prvim. Oba područja će biti aktivirana. Na ovaj način možete aktivirati i područja koja nisu na istom radnom listu.

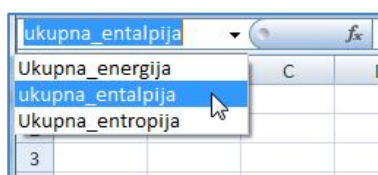
Ceo red ili kolonu možete izabrati jednostavnim pritiskom na dugme sa imenom reda ili kolone.

Sve ćelije radnog lista možete izabrati pritiskom na kosu strelicu, koja se nalazi na levom delu ekrana između oznake kolone A i reda 1 .

Ukoliko aktivirate područje, ukucate neki podatak i pritisnete taster *Enter*, taj podatak će biti smešten samo u prvu ćeliju područja. Da bi se isti podatak smestio u sve ćelije aktiviranog područja, potrebno je pritisnuti tastere *Ctrl* i *Enter*. Drugi način je da podatak prebacite u memoriju računara (komandom *Copy* ili *Cut*), a zatim ćete ga komandom *Paste* prebaciti u sve ćelije aktiviranog područja.

Imenovanje ćelija ili područja

Ćeliji ili celom području možete dodeliti ime, umesto imena koje im je podrazumevano dodeljeno (na primer, A1 ili B3). Na ovaj način možete u znatnoj meri olakšati snalaženje u velikim radnim listovima sa puno podataka. Da biste dodelili ime ćeliji ili području, potrebno je ih prvo aktivirati a zatim postavite pokazivač miša iznad polja sa imenom, pritisnete levo dugme miša, otkucate novo ime ćelije ili područja i pritisnete taster *Enter*. Napomena: u imenima ćelija ili područja ne sme biti razmaka. Ukoliko želite da date ime od dve ili više reči, reči možete razdvojiti pomoću donje crte _ (engl. *Underscore*). Ćeliju sa dodeljenim imenom možete pogledati i aktivirati, bez obzira gde se nalazite na radnom listu, izborom imena ćelije sa liste koja će se pojaviti kada pritisnete strelicu na dole sa desne strane polja sa imenom (slika 6.7). Svaki put kada aktivirate ćeliju ili područje kojima ste dodelili ime, u polju za ime će se pojaviti dodeljeno ime. Imena ćelijama ili opsezima možete dodavati, menjati ili uključivati u formule, pomoću alatki koje se nalaze u grupi *Defined Names* na kontekstnoj traci kartice *Formulas*.



Slika 6.7 Dodela imena ćelijama pomaže u snalaženju u velikim radnim listovima.

Brisanje i umetanje redova, kolona i ćelija

Već smo rekli da se tasterom *Delete* briše samo sadržaj aktivne ćelije (ili više njih). Ukoliko želite da potpuno izbrišete aktivnu ćeliju, red, kolonu ili područje, to možete učiniti na dva načina:

- postavite pokazivač miša iznad aktivne ćelije, reda, kolone ili područja, pritisnite desno dugme miša i izaberite opciju *Delete*;
- pomoću alatke *Delete*, koja se nalazi u grupi *Cells* kontekstne trake kartice *Home*.

Ukoliko brišete jednu ćeliju ili područje, pojaviće se prozor dijaloga u kome ćete moći da odaberete u kom pravcu će se pomeriti ostale ćelije. Brisanjem jedne kolone, kolone desno od nje se pomeraju za jedno mesto levo, a brisanjem reda, redovi ispod njega se pomeraju za jedno mesto na gore.

Ćelije, redovi i kolone se mogu umetati pored izabranih ćelija, redova ili kolona na dva načina:

- aktivirajte ćeliju, red ili kolonu, pritisnite desno dugme miša i izaberite opciju *Insert*;
- pomoću alatke *Insert*, koja se nalazi u grupi *Cells* kontekstne trake kartice *Home*.

Kopiranje i prenošenje ćelija

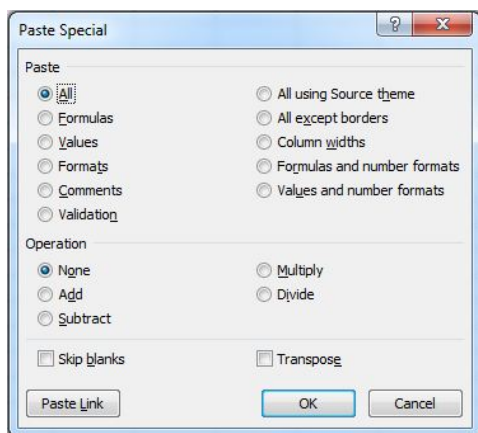
Kopiranje i prenošenje (*Copy - Paste*) se veoma često koristi pri radu u programu *Excel*. Kopirati i prenositi možete tekst, numeričke vrednosti i formule. Kao u svim ostalim programima pod *Windows* operativnim sistemom, za kopiranje i prenošenje se koriste *Ctrl+C* i *Ctrl+V* prečice sa tastature. Kada kopirate sadržaj neke ćelije (ili područja), oko te ćelije će se pojaviti okvir sa animiranom ivicom (isprekidana crna linija). Ovaj okvir će ostati i nakon prenošenja podataka u odredišnu ćeliju (ili područje), što znači da su podaci još uvek sačuvani u memoriji računara i da ih možete ponovo preneti komandom *Paste*. Pritiskom na taster *Esc*, animirani okvir će se ukloniti i podaci izbrisati iz memorije računara.

Kada kopirate područje od više ćelija, nije potrebno da odaberete odredišno područje iste veličine, već samo da aktivirate njegovu gornju levu ćeliju. Opres: prilikom kopiranja područja, ukoliko su ćelije odredišnog područja popunjene, njihov sadržaj biće obrisan i ispunjen sadržajem kopiranih ćelija bez upozorenja.

Kada kopirate ćeliju koja sadrži formulu, reference ćelija u određenoj formuli menjaju se automatski, tako da odgovaraju novom određištu. Ovo ćemo ilustrovati jednim primerom.

Primer: otvorite novi Excel-ov radni list i u ćeliji A1 upišite broj 2, a u ćeliji B1 broj 3. U ćeliji C1 upišite formulu za sabiranje vrednosti u ove dve ćelije ($=A1+B1$) i pritisnite taster *Enter*. U ćeliji C1 će se pojaviti rezultat 5. Aktivirajte ovu ćeliju i kopirajte njen sadržaj (*Copy*, Ctrl+C). Pređite u ćeliju C2 i prenesite kopiran sadržaj (*Paste*, Ctrl+V). U ćeliji C2 će se pojaviti rezultat 0. Aktivirajte ćeliju C2 i proverite njen sadržaj u polju za formule, biće $=A2+B2$. *Excel* je automatski pretpostavio da biste u ćeliji C2 želeli da vidite zbir vrednosti ćelija A2 i B2. Gde god u radnom listu da prekopirate ovu formulu, *Excel* će menjati reference ćelija u formuli tako da se sabiraju dve ćelije levo od ćelije u kojoj je formula (ako je prekopirate u polje I1, formula će biti $=G1 + H1$).

Da biste iskopirali samo rezultat formule, a ne samu formulu morate koristiti specijalne vrste prenošenja. Aktivirajte ćeliju u koju želite da prenesete podatke i pritisnite desno dugme miša. Sa liste koja se pojavila odaberite opciju *Paste Special*, kako biste otvorili istoimeni dijalog prozora (slika 6.8).



Slika 6.8 Dijalog prozor *Paste Special*.

Izaberite opciju *Values* (vrednost) u dijalogu prozora *Paste Special* i pritisnite *OK*. U ćeliji će biti broj 5, odnosno biće prekopiran samo rezultat formule.

Ostale opcije u dijalogu prozora *Paste Special* su:

- *All* - kopira sadržaj i format ćelije;
- *Formulas* - kopira formule bez formata;
- *Formats* - kopira samo format ćelije, bez sadržaja;
- *Comments* - kopira samo eventualne komentare ćelije. Ne kopira sadržaj ni format;
- *Validation* - kopira samo kriterijume za proveru podataka;
- *All using Source theme* - kopira sve ali zadržava temu koja je zadata u izvornom dokumentu, koristi se samo kada se kopira iz jedne radne sveske u drugu;
- *All Except Borders* - kopira sve osim okvira ćelije;

- *Column Widths* - kopira samo format širine kolone;
- *Formulas and Number Formats* - kopira formule i formate brojeva;
- *Values and Number formats* - kopira vrednosti i formate brojeva, ali ne i formule.

Opcije u oblasti *Operation* dijaloga prozora *Paste Special* omogućavaju vam da izvodite aritmetičke operacije. Na primer, možete da kopirate jedno područje u drugo i da izaberete opciju *Add* (saberite). *Excel* će sabrati odgovarajuće vrednosti iz izvornog i odredišnog područja, a vrednosti iz odredišnog područja zameniće novim vrednostima.

Izborom operacije *Skip Blanks* prazne ćelije iz izvornog područja neće biti kopirane u odredišno područje. Time sprečavate da sadržaj iz popunjenih ćelija odredišnog područja bude izbrisan i zamenjen praznim ćelijama iz izvornog područja.

Opcijom *Transpose* se vrši transponovanje kopiranog područja, odnosno na odredišno područje se kopira transponovano izvorno područje. Transponovano znači da su redovi i kolone zamenili mesta, odnosno ono što je bio prvi red u izvornom području je postalo prva kolona u odredišnom području, dok je prva kolona izvornog postala prvi red odredišnog područja. Prilikom transponovanja, sve formule iz kopiranog područja se podešavaju tako da normalno rade.

Automatsko popunjavanje

Excel alatka za automatsko popunjavanje, *Auto Fill*, olakšava unošenje nizova vrednosti u kolone ili redove. Ona se koristi pomoću ručice za automatsko popunjavanje (crni kvadratić u donjem desnom uglu aktivne ćelije). Povlačeći ručicu, automatski se nastavlja započeti niz brojeva.

Primer: otvorite novi radni list i u ćeliju A1 upišite broj 1, a u ćeliju A2 broj 2. Aktivirajte ove dve ćelije i povucite ručicu za automatsko popunjavanje do ćelije A15. U ćelijama od A3 do A15 biće upisani brojevi od 3 do 15 (slika 6.9). *Excel* je "shvatio" šta želite i automatski popunio ostatak niza.

Ispitajmo koliko je *Excel* "pаметan", odnosno koliko može da "shvati" šta želimo. U ćeliju B1 upišite broj 2 a u ćeliju B2 broj 4, aktivirajte ove ćelije i povucite ručicu za automatsko popunjavanje do ćelije B15. U ćelijama od B3 do B15 biće upisani parni brojevi od 6 do 30 (slika 6.9). *Excel* je "shvatio" da želimo niz parnih brojeva.

Ako u kolonu C želimo da upišimo niz brojeva koji su deljivi sa 3, dovoljno je da u ćeliju C1 upišemo broj 3, u C2 broj 6, aktiviramo ove ćelije i povučemo ručicu za automatsko popunjavanje.


Pokušajmo u kolonu D da upišemo niz sačinjen od kvadrata prirodnih brojeva. U ćeliju D1 upišite broj 1, a u ćeliju D2 broj 4. Aktivirajte ih i povucite ručicu za automatsko popunjavanje. *Excel* nije shvatio šta smo hteli, već je ispisao niz brojeva gde je svaki član niza za 3 veći od

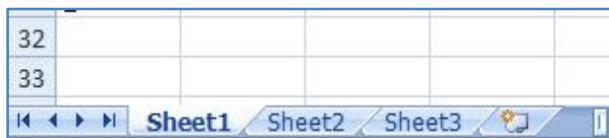
prethodnog (slika 6.9). Možda program nije imao dovoljno podataka da zaključi šta smo hteli. Popunite prvih pet ćelija kolone E brojevima 1, 4, 9, 16 i 25. Izaberite ovih pet ćelija i povucite ručicu za automatsko popunjavanje. Opet nismo dobili željeni rezultat. Funkcija za automatsko popunjavanje (*Auto Fill*) može da radi samo sa najjednostavnijim nizovima.

	A	B	C	D	E
1	1	2	3	4	5
2	2	4	6	8	10
3	3	6	9	12	15
4	4	8	12	16	20
5	5	10	15	20	25
6	6	12	18	24	30
7	7	14	21	28	35
8	8	16	24	32	40
9	9	18	27	36	45
10	10	20	30	40	50
11	11	22	33	44	55
12	12	24	36	48	60
13	13	26	39	52	65
14	14	28	42	56	70
15	15	30	45	60	75


Slika 6.9 Funkcija za automatsko popunjavanje (*Auto Fill*) služi za popunjavanje niza brojeva.

Radni listovi

Već smo rekli da nova radna sveska ima tri radna lista. Ovi radni listovi se podrazumevano zovu *Sheet1*, *Sheet2* i *Sheet3*. Iz jednog u drugi radni list možete prelaziti pritiskanjem jezičaka radnih listova, koji se nalaze na dnu prozora sa leve strane (slika 6.10). Izborom jezička nekog radnog lista, taj radni list će postati aktivan i vidljiv na ekranu. Ukoliko radna sveska ima mnogo radnih listova, možda se neće videti jezičci svih radnih listova. U tom slučaju koristite kontrole za pomeranje jezičaka radnih listova .



Slika 6.10. S leva na desno prikazano je: kontrole za pomeranje jezičaka radnih listova, jezičci radnih listova, dugme za umetanje novog radnog lista i razdelnik.

Novi radni list možete dodati pomoću dugmeta za umetanje novog radnog lista . Novi radni list će se umetnuti iza poslednjeg radnog lista.

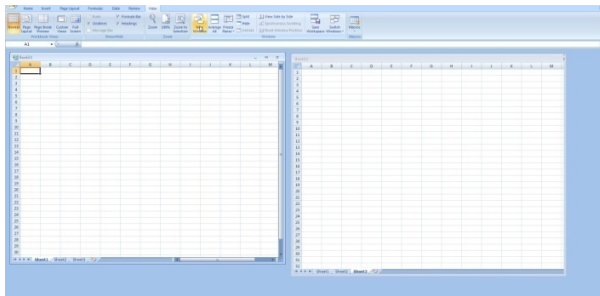
Radni list možete obrisati tako što ćete desnim dugmetom miša pritisnuti jezičak radnog lista i sa liste koja se pojavila izabrati opciju *Delete*. Ukoliko radni list nije prazan, *Excel* će tražiti da potvrdite brisanje lista.

Ukoliko radite sa više radnih listova korisno je da listovima date odgovarajuća imena, kako bi znali koji se podaci nalaze na radnom listu. Da biste promenili ime radnog lista dva puta levim dugmetom miša pritisnite njegov jezičak i ukucajte novo ime radnog lista. Napomena: imena

radnih listova mogu imati najviše 31 znak, a dozvoljeni su i razmaci. Nisu dozvoljeni znakovi :, /, \, ?, *.

Raspored radnih listova nije fiksiran i može se menjati. Da biste premestili radni list, pritisnite jezičak radnog lista i pomerite ga na odgovarajuće mesto.

Ponekad je potrebno da istovremeno vidite dva radna liste iste radne sveske ili različite delove istog radnog lista, da biste, na primer, uneli ime neke udaljene ćelije u formulu. Ovo možete postići ako otvorite nov prikaz radne sveske u dodatnom prozoru (slika 6.11), pomoću alatke *New Window*, koja se nalazi u grupi *Window* kontekstne trake kartice *View*. Sada se ista radna sveska nalazi otvorena u dva nezavisna prozora. U svakom od prozora možete postaviti vidljiv koji god deo radne sveske. Ukoliko unesete nove podatke u jedan prozor, oni će se automatski pojaviti i u drugom prozoru. Veličinu svakog prozora možete menjati postavljanjem pokazivača miša na ivicu prozora, pritiskom levog dugmeta i povlačenjem miša.



Slika 6.11 U programu Excel, pomoću alatke *New Window* mogu se otvoriti dva prozora sa prikazom iste radne sveske.

Zadatak 1. Osmislite bar dva načina kako možete brzo sabrati vrednosti iz dve 4x4 tabele, ali tako da se vrednost svake ćelije prve tabele sabira sa vrednošću odgovarajuće ćelije druge tabele. Opišite postupke koji ste primenili.

Postupak 1. _____

Postupak 2. _____

Zadatak 2. Pomoću *Copy - Paste* opcije možete sve vrednosti u jednoj tabeli pomnožiti istim brojem (ili sabrati ili podeliti sa istim brojem, odnosno oduzeti isti broj). Na slici je data tabela sa energijama u $\frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$. Pomoću Excel-a pretvorite ove vrednosti energija u $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ i upišite ih u praznu tabelu sa desne strane .

	A	B	C
1	Energija (kcal/mol)		
2	23.85	30.13	34.53
3	40.15	47.25	52.76
4	63.19	66.73	73.16

	A	B	C
1	Energija (kJ/mol)		
2			
3			
4			

Pretvaranje iz $\frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$ u $\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$ se vrši po formuli $E(\frac{\text{kcal}}{\text{mol}}) = 4.18 * E(\frac{\text{kJ}}{\text{mol}})$.

Zadatak 3. Sa datumima, odnosno brojevima koji su im dodeljeni možete izvoditi matematičke operacije, možete ih oduzimati, sabirati, množiti itd. Odredite koliko tačno dana ste stari danas.

Danas imam tačno _____ dana.

Zadatak 4. Odredite kog datuma ćete biti tačno dvostruko stariji nego danas.

Datum: _____.

Zadatak 5. Za manje od tri minuta napravite kalendar sa slike A i promenite ga u kalendar sa slike B. Detaljno objasnite kako ste to učinili. Savet - koristite automatsko popunjavanje za unos dana.

Januar 2014.						
Ponedeljak		6	13	20	27	
Utorak		7	14	21	28	
Sreda	1	8	15	22	29	
Četvrtak	2	9	16	23	30	
Petak	3	10	17	24	31	
Subota	4	11	18	25		
Nedelja	5	12	19	26		

A

Januar 2014.	Ponedelja	Utorak	Sreda	Četvrtak	Petak	Subota	Nedelja
			1	2	3	4	5
	6	7	8	9	10	11	12
	13	14	15	16	17	18	19
	20	21	22	23	24	25	26
	27	28	29	30	31		

B

Objašnjenje: _____

Zadatak 6. U jednoj radnoj svesci napravite kalendar za tekuću godinu. Na svakom radnom listu napravite jedan mesec. Radne listove imenujte po mesecima. Dane vikenda i praznika označite crvenom bojom. Dokument snimite u svom direktorijumu pod imenom kalendar.xlsx.

Datum

Potpis asistenta

Vežba 7.

Microsoft Excel - rad sa formulama

Formule čine suštinu programa za tabelarne kalkulacije. Bez mogućnosti umetanja formula, programi za tabelarne kalkulacije bi bili samo skupi programi za prikazivanje tabela i dijagrama. Formule služe za izračunavanje rezultata na osnovu podataka koji se nalaze u radnim listovima. Ukoliko se podaci u radnim listovima promene, nije potrebno ponovo unositi formulu, već uneta formula će odmah prikazati rezultate sa novim podacima. Kao studenti prve godine, hemije već ste više puta uradili zadatak tipa: kolika je pH vrednost rastvora sirćetne kiseline koncentracije $0,1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$. Kao budući hemičari, ovakvih proračuna ćete uraditi još puno. Zar ne bi bilo lepo da znate da umetnete formulu u program *Excel*, koja će ta izračunavanja raditi umesto vas? Danas ćemo naučiti kako to da uradimo.

Osnovno o formulama

Formule se upisuju u ćelije, obavljaju neka izračunavanja i rezultat tih izračunavanja prikazuju u ćeliji. U polju za formule će, umesto rezultata izračunavanja uvek biti prikazana sama formula. Formule u programu *Excel* uvek započinju znakom =, kako bi se razlikovale od teksta. Formula može da sadrži sledeće elemente:

- matematičke operatore - kao što su + (sabiranje), - (oduzimanje), * (množenje), itd;
- funkcije - kao što su SUM (za sumiranje) ili AVERAGE (za računanje srednje vrednosti);
- imena (reference) ćelija;
- numeričke vrednosti ili tekst.

Matematički operatori koji se koriste u formulama

Matematički operatori su simboli matematičkih operacija. Matematičke operacije koje *Excel* može da koristi su: sabiranje, oduzimanje, množenje, deljenje, stepenovanje, konkatencija (nadovezivanje) i logička poređenja.

Upotreba operatora u formulama je veoma jednostavna. Da biste sabrali brojeve 2 i 3, potrebno je samo da u aktivnoj ćeliji započnete formulu sa znakom = i otkucate 2+3 (=2+3). U ćeliji će se pojaviti vrednost 5, a ako aktivirate tu ćeliju videćete da je formula upisana u polju za formule. Ovakve formule nemaju puno smisla, zato što sadrže samo nepromenjive vrednosti. Lakše i jednostavnije je da u tu ćeliju ukucate broj 5. Da bi vrednost programa za tabelarne kalkulacije

došla do punog izražaja, u formule je potrebno unositi promenjive vrednosti, odnosno reference (imena) ćelija. Tako formula =A1+B1 sabira vrednosti u ćelijama A1 i B1. Ukoliko se vrednost u jednoj od ove dve ćelije promeni, rezultat formule se automatski menja.

Tabela 7.1 Simboli operatora i njihovi prioriteti u formulama programa *Excel*.

Operatori	Naziv operatora	Prioritet
^	Stepenovanje	1
*	Množenje	2
/	Deljenje	2
+	Sabiranje	3
-	Oduzimanje	3
&	Konkatencija (nadovezivanje)	4
=	Logičko poređenje-jednako	5
>	Logičko poređenje-veće od	5
<	Logičko poređenje-manje od	5
>=	Logičko poređenje-veće ili jednako	5
<=	Logičko poređenje-manje ili jednako	5
<>	Logičko poređenje-nije jednako	5

Razmotrimo sada sve matematičke operacije navedene u tabeli 7.1. Prvo što upada u oči je da imamo operaciju stepenovanja, ali nemamo operaciju korenovanja. To je zato što je korenovanje, samo recipročna opracija od stepenovanja. Podizanje broja tri na treći stepen možete izračunati formulom =3^3, a treći koren iz broja 27 formulom =27^(1/3).

Matematička operacija sa kojom se niste sretali često na časovima matematike je nadovezivanje. Ovom operacijom se sadržaji nadovezuju jedan na drugi. Na primer, ako u ćeliju A1 unesete broj 12, a u ćeliju B1 broj 34 formula =A1&B1 će dati vrednost 1234. Ova operacija se može primeniti i na ćelije sa tekstom, tako da ako u ćeliju A1 unesete Petar a u ćeliju B1 Petrović formula =A1&B1 će dati rezultat Petar Petrović. Napomena: u ćeliju B1 je potrebno uneti tekst sa razmakom pre prvog slova inače ćete dobiti PetarPetrović. Ukoliko je u ćeliji B1 već unet

tekst bez razmaka onda možete primeniti mali trik. Ukucajte =A1&" "&B1. Ovde smo zadali nadovezivanje tri stvari: teksta iz ćelije A1, teksta koji je naveden između znaka navoda (u ovom slučaju razmak) i teksta iz ćelije B1.

Funkcije logičkog poređenja kao rezultat prikazuju samo TRUE (tačno) i FALSE (netačno). Ako u ćeliju A1 uneset broj 10, a u ćeliju B1 broj 8 rezultat formule A1>B1 će biti TRUE, jer je broj 10 veći od broja 8. Operatori logičkog poređenja rade i sa tekstom poredeći abecedni redosled teksta. Na primer, formula ="Ana"<"Dragana" će dati rezultat TRUE, jer se po abecednom redu Ana nalazi pre Dragane.

U trećoj koloni tabele 7.1 prikazani su prioriteta operatora. Kod složenijih formula sa više operatora prvo se izračunavaju operacije većeg prioriteta. Tako će rezultat formule =4+3^2 biti 13. Prvo se obavlja operacija prioriteta 1 (stepenovanje), zatim prioriteta 3, sabiranje. Prioritete možemo zaobići zagradama. Zgrade imaju najveći prioritet, odnosno uvek se prvo obavlja operacija u zagradama, a zatim sve ostale. Tako će rezultat formule =(4+3)^2 biti 49, pošto se prvo obavlja sabiranje u zagradi, a zatim stepenovanje zbira.

Zgrade u formulama možete i da ugnezдите (umetnete jednu unutar druge). Kod ovih zagrada uvek se prvo izračunava izraz u najdublje ugnežđenim zagradama, pa nastavlja dalje ka spoljnim. Primer jedne takve formule, gde su tri zgrade ugneždene unutar četvrte, je:

$$=((A1+B1)*(A2+B2)*(A3+B3))/C1$$

Excel prvo računa zbirove u tri ugneždene zgrade, zatim množi te zbirove i tek na kraju dobijenu vrednost deli sa vrednošću iz ćelije C1.

Poruke o grešci

Ukoliko je upisana pogrešna formula *Excel*, će u ćeliji prikazati tekst koji počinje sa znakom #. Najčešće greške koje se javljaju pri radu u programu *Excel* su:

- *#DIV/0!* - greška zbog deljenja sa nulom;
- *#####* - greška zato što širina kolone nije dovoljna da se prikaže izračunata vrednost, proširite kolonu;
- *#NAME?* - greška zato što se u formuli koristi ime koje *Excel* ne prepoznaje, ili ako ste prilikom unošenja teksta ispustili znak navoda;
- *#REF!* - greška zato što se u formuli nalazi referenca na ćeliju koja ne postoji;
- *#NUM!* - postoji problem sa vrednošću, na primer, pojavljuje se negativan broj tamo gde se očekuje pozitivan;
- *#VALUE!* - formula sadrži argument pogrešnog tipa, na primer, ako pokušate da sabirate ćelije koje sadrže tekst.

Čest izvor greške, koja može da dovede do prekida rada *Excel* programa, su kružne reference. Kružne reference nastaju kada se formula poziva na sopstvenu vrednost. Najjednostavniji primer kružne reference je kada u ćeliju A3 ukucate formulu =A1+A2+A3. Pošto se formula poziva na ćeliju u kojoj se ona sama nalazi, ona će se stalno iznova izračunavati, zato što se vrednost u ćeliji A3 stalno menja. Excel prepoznaje kružne reference i izbacuje odgovarajući ekran sa upozorenjem da ste uneli kružnu referencu.

U nekim slučajevima, pogotovo u računarskoj hemiji, su kružne reference potrebne. Način računanja pomoću kružnih referenci se zove "Iterativni pristup" (mnogo više o ovome ćete naučiti na predmetima Teorija hemijske veze i Računarska hemija). *Excel* ima opciju da se podese izlazak iz računa, nakon što se dostigne određeni broj ciklusa računanja kružne reference, ili minimalna razlika u rezultatu između dva ciklusa računanja kružne reference.

U većini izračunavanja sa kojima ćete se sretati, kružne reference su nepotrebne i kada dobijete upozorenje o kružnoj referenci, potrebno je da prepravite formulu.

Upotreba ćelijskih referenci (imena) u formulama

Većina formula koje napišete u sebi će sadržavati imena ćelija (na primer, A1, B3 itd.). Ime ćelije upisano u formulu zove se ćelijska referenca. Ćelijske reference omogućavaju da formule rade dinamički, sa promenljivim vrednostima koje sadrže te ćelije. Na primer, ako se formula poziva na ćeliju A1, kada promenite vrednost u ćeliji A1 automatski će se promeniti i rezultat formule.

Ćelijske reference možete unositi u formulu na dva načina:

- pomoću tastature - dok unosite formulu sa tastature, unosite i ćelijske reference. Ako je potrebno da unesete područje od više ćelija, unosite samo referencu gornje leve i donje desne ćelije razdvojene znakom : (dvetačke). Na primer, A1:C3. Ćelije čije su reference umetnute u formulu će tokom kucanja formule imati obojene okvire radi lakšeg raspoznavanja;
- pomoću miša - dok unosite formulu, možete levim dugmetom miša izabrati ćeliju čiju referencu želite da umetnete u formulu. Ukoliko želite da umetnete područje od više ćelija, možete ih sve izabrati misem, tako što ćete izabrati levu gornju ćeliju, pritisnuti levo dugme i pomerati miša, dok ne izaberete željeno područje. Pri ovom načinu umetanja, ćelije čije su reference umetnute u formulu će, takođe, imati drugačije okvire tokom kucanja formule.

Već ste naučili da, kada kopirate i prenosite formulu pomoću *Copy - Paste* komande, reference ćelija u određenoj formuli se menjaju automatski, tako da odgovaraju novom odredištu.

Međutim, ovo ne mora uvek da bude slučaj, možete uneti takvu referencu ćelije, da se ona ne menja prilikom prenošenja formule. Postoji tri tipa referenci ćelija:

- Relativne reference - cela referenca ćelije u formuli (i referenca reda i referenca kolone) se menja prilikom prenošenja formule. Relativne reference se pišu, kao i ime ćelije, navođenjem slova kolone i broja reda, na primer, A1, B3, C2, D7;
- Apsolutne reference - referenca ćelije u formuli ostaje nepromenljiva prilikom prenošenja formule. Apsolutne reference se pišu umetanjem znaka za dolar \$ ispred slova kolone i ispred broja reda, na primer \$A\$1, \$B\$3, \$C\$2, \$D\$7;
- Mešovite reference - jedna referenca (reda ili kolone) je relativna, a druga apsolutna. Prilikom prenošenja formule menjaće se samo relativna referenca, dok će apsolutna ostati nepromenljiva. Primeri mešovitih referenci ćelije, gde je referenca kolone apsolutna a referenca reda relativna: \$A1, \$B3, \$C2, \$D7. Primeri mešovitih referenci ćelije, gde je referenca kolone relativna a referenca reda apsolutna: A\$1, B\$3, C\$2, D\$7.

Kada umećete reference ćelija pomoću miša, uvek se umeću relativne reference. Ukoliko želite da ih promenite u apsolutne ili mešovite, morate aktivirati ćeliju sa formulom i zatim u polju sa formulama ručno izmeniti referencu ćelije.

Prilikom izračunavanja u programu *Excel*, u formule mogu da se umeću i ćelije koje se nalaze na drugom radnom listu, pa čak i u drugoj radnoj svesci (datoteci). Kada unosite referencu ćelije, koja se nalazi na drugom radnom listu iste radne sveske, potrebno je da unesete i ime radnog lista i referencu ćelije. Tako na primer, ako ćeliju A1 želimo da saberemo sa ćelijom A1 iz drugog radnog lista (na primer, Sheet2) formula će izgledati:

=A1+Sheet2!A1

Znači, referenca ćelije iz drugog radnog lista se piše: ime tog drugog radnog lista, znak uzvika, ime ćelije. Napomena: ukoliko u imenu radnog lista postoji razmak, tada se ime radnog lista mora navesti između polunavodnika. Na primer, referenca ćelije B5, iz radnog lista koji se zove "ukupna energija", će biti 'ukupna energija!B5. Ukoliko umećete referencu pomoću miša, *Excel* će uneti ispravnu referencu umesto vas.

Referenca ćelije iz druge radne sveske (datoteke), sadrži adresu te datoteke na disku računara, ime datoteke u uglastim zagradama, ime radnog lista, znak uzvika i ime ćelije. Radi sigurnosti uvek stavljajte polunavodnike. Primer jedne takve reference je:

'C:\My Documents\excel dokumenta\[energija.xlsx]Sheet1!A5

Ukoliko ste nekoj ćeliji ili području dodelili ime, tada u formuli možete koristiti to ime umesto reference ćelije. Imena ćelija ili područja se u formuli ponašaju kao apsolutne reference, odnosno prenošenjem formule na neko drugo odredište neće se promeniti.

Funkcije

Osim matematičkih operatora, u formule možete ubacivati i funkcije. U suštini sve matematičke funkcije se mogu svesti na matematičke operacije, ali je to dug i zamoran posao. Zato se u programu *Excel* nalazi 340 unapred definisanih funkcija, koje se mogu koristiti u formulama. Jednostavan primer jedne funkcije je suma. Ukoliko želimo da saberemo brojeve, koji se nalaze u ćelijama od A1 do A10 morali bi da unesemo sledeću formulu:

```
=A1+A2+A3+A4+A5+A6+A7+A8+A9+A10
```

Međutim, isti posao možemo uraditi mnogo brže preko funkcije sume, dovoljno je da unesemo:

```
=SUM(A1:A10)
```

i dobićemo isti rezultat. Naravno, razlika u vremenu postaje još očiglednija kada treba sabrati vrednosti koje se nalaze u 100 ili 1000 ćelija.

Drugi podjednako dobar primer korišćenja funkcija je izračunavanje srednje vrednosti. Srednju vrednost možemo izračunati koristeći samo matematičke operacije kao:

```
=(A1+A2+A3+A4+A5+A6+A7+A8+A9+A10)/10
```

ili pomoću funkcije AVERAGE:

```
=AVERAGE(A1:A10).
```

Zamislite da imate niz od 100 brojeva i da je potrebno da napišete formulu koja će pronaći najveći broj niza. Verovatno bi vam trebalo puno vremena da osmislite odgovarajuću formulu koristeći samo operatore logičkog poređenja, koji su prikazani u tabeli 7.1. Na svu sreću, programeri kompanije *Microsoft* su to već uradili umesto vas i napravili funkciju MAX, koja traži najveći broj u zadatom nizu brojeva. Tako da je dovoljno samo da ukucate:

```
=MAX (A1:A100)
```

(pod uslovom da se brojevi nalaze u koloni A) i dobićete vrednost najvećeg broja.

Postoje funkcije koje rade i sa tekstualnim unosima. Tako na primer funkcija =LOWER(A1) će sva slova teksta, koji se nalazi u ćeliji A1, prepraviti u mala slova. Funkcija UPPER sva slova prepravlja u velika, a funkcija PROPER samo početno slovo svake reči prepravlja u veliko slovo, a ostala slova u mala (veoma korisna funkcija ukoliko dobijete spisak imena i prezimena 500 učesnika konferencije, gde je sve otkucano velikim slovima - lično iskustvo autora).

Argumenti funkcija

U programu *Excel* se uvek iza naziva funkcije koriste zagrade. Informacije koje se nalaze unutar zagrada, nazivaju se argumenti. Postoje funkcije koje ne koriste argumente, kao što je funkcija π , koja u ćeliju umeće vrednost broja π (naravno, samo prvih 15 cifara). Ova funkcija, iako nema argumente, mora se pisati sa zgradama. Pravilan način pisanja ove funkcije je:

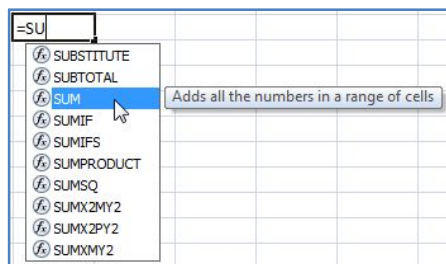
=PI()

Ukoliko funkcija ima više argumenata, argumenti se međusobno odvajaju zapetom (ovo opet zavisi od *Region And Language* podešavanja u *Windows* operativnom sistemu, računari koji su podešeni na srpske parametre koriste ; za odvajanje argumenata). U primerima koje smo do sada obrađivali, su kao argumenti korišćene ćelijske reference. Argumenti, međutim, mogu biti i brojevi, tekst, izrazi, operatori i druge funkcije.

Umetanje funkcija u formule

Kao i sve drugo u programima *Office* paketa, postoji više načina da umetnete funkciju u formulu. Od brojnih načina za umetanje funkcija, pomenućemo samo dva koji se najčešće koriste.

Prvi način za umetanje funkcije u formulu jeste preko tastature. Ovaj način umetanja koristite kada ste već dobro upoznati sa funkcijom koju koristite, kao i sa argumentima koji su potrebni da bi funkcija ispravno radila. Aktivirajte ćeliju u koju želite da umetnete formulu i ukucajte znak =, a potom počnite da kucate funkciju. Naziv funkcije se uvek sastoji od nekoliko velikih slova. Čim otkucate prvo slovo funkcije, *Excel* će vam ponuditi pomoć u vidu liste ispod ćelije u kojoj kucate (slika 7.1). Na ovoj listi će se nalaziti spisak svih funkcija koje počinju tim slovom. Ukoliko, potom, otkucate drugo slovo funkcije, spisak ponuđenih funkcija će se skratiti. Sa ove liste možete odabrati željenu funkciju ili otkucati ime funkcije do kraja.

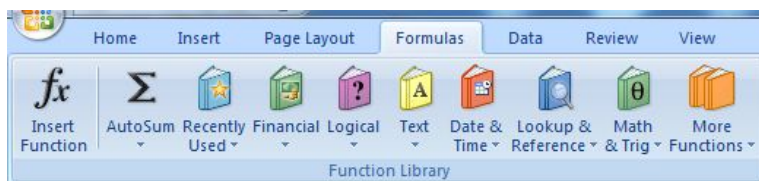


Slika 7.1 Umetanje funkcije pomoću tastature.

Kada izaberete funkciju sa liste, pojaviće se mali tekstualni prozor sa kratkim objašnjenjem funkcije. Da biste odabrali funkciju potrebno je da dva puta pritisnete levo dugme miša na naziv funkcije na listi. Nakon što ste uneli ime funkcije, potrebno je da otvorite zagradu, unesete argumente, zatvorite zagradu i pritisnete taster *Enter*. Ukoliko su argumenti funkcije ćelijske reference, možete ih umetati pomoću miša, kako je to objašnjeno ranije.

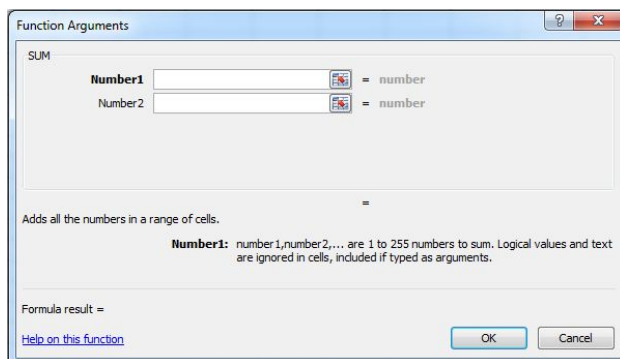
Drugi način za umetanje funkcija je pomoću *Function Arguments* dijaloga prozora. Ovaj način umetanja funkcija koristite kada niste iskusni u korisnik programa *Excel*, i niste sigurni koji su argumenti potrebni funkciji da bi radila ispravno.

Da biste otvorili dijalog prozora *Function Arguments*, prvo izaberite karticu *Formulas* sa trake sa karticama. Na kontekstnoj traci u grupi *Function Library* (slika 7.2) nalaze se sve funkcije podeljene u 7 kategorija. Kategorije su: *Financial*, *Logical*, *Text*, *Date & Time*, *Lookup & Reference*, *Math & Trig* i *More Functions*.



Slika 7.2 Grupa *Function Library* na kontekstnoj traci kartice *Formulas*.

Kada pritisnete kategoriju funkcije, pojaviće se lista svih funkcija u toj kategoriji. Izaberite željenu funkciju i pojaviće se dijalog prozora *Function Arguments* (slika 7.3) za izabranu funkciju. Napomena: svaka funkcija ima različiti dijalog prozora *Function Arguments*. U ovom dijalogu prozora nalaze se polja za unošenje argumenata, uz kratka uputstva šta koji argument predstavlja i kakve vrednosti program *Excel* očekuje za taj argument. Argumente u polja možete unositi preko tastature ili ukoliko unosite reference ćelija, možete izabrati te ćelije ili područje mišem na radnom listu. Kada završite sa unošenjem argumenata izaberite dugme *OK*.



Slika 7.3 Dijalog prozora *Function Arguments* za funkciju sume.

Ukoliko ne znate u kojoj se kategoriji nalazi funkcija koju želite da umetnete, možete izabrati alatku *Insert Function*, u kojoj možete naći spisak svih raspoloživih funkcija. U dijalogu prozora, koji će se otvoriti izborom ove alatke, nalazi se i polje *Search for a function* u koje možete uneti opis onoga što želite da uradite (na engleskom), a *Excel* će vam preporučiti koju funkciju da izaberete.

Kategorija *Auto Sum* sadrži funkcije, koje se najčešće koriste u tabelarnim kalkulacijama u računovodstvu (kao što su *SUM*, *AVERAGE*, *MAX*, *MIN* itd), a izborom alatke *Recently Used* će se pojaviti lista funkcija koje ste ranije koristili.

Upotreba funkcija

Program *Excel* ima definisanih 340 funkcija. Hemičari se u svom radu susreću sa 10, najviše 20 funkcija, tako da nije potrebno da znamo sve funkcije programa *Excel*. Pogledajmo kakve sve funkcije nudi *Excel*.

U kategoriji *Financial* nalaze se funkcije, koje se uglavnom koriste u bankarstvu i računovodstvu. Pomoću ovih funkcija mogu se računati kamate, rate, profit itd. Većina ovih funkcija je potpuno nerazumljiva hemičarima.

U kategoriji *Logical* nalaze se logičke operacije IF, AND i OR koje se često koriste u programiranju. Upotrebu funkcije IF ćemo detaljno razmotriti na nekim primerima.

Neke funkcije iz kategorije *Text* (LOWER, UPPER, PROPER) smo već objasnili. Takođe u ovoj kategoriji se nalaze i funkcije FIND i REPLACE, koje postoji u svim *Office* programima i služe za pronalaženje određenog dela teksta (funkcija FIND) i njegovu zamenu drugim tekstom (funkcija REPLACE).

Funkcije kategorije *Date & Time* služe za manipulaciju datumima, izračunavanje broja dana između dva datuma, izračunavanje broja radnih dana između dva datuma. itd. Hemičari ne koriste ove funkcije.

Funkcije iz *Lookup & Reference* kategorije uglavnom određuju referencu određene ćelije, slovo kolone, broj reda, itd. U ovoj kategoriji se, takođe, nalazi i TRANSPOSE funkcija o kojoj je već bilo reči. Veoma zanimljiva funkcija je i VLOOKUP, koju ćemo primeniti u jednom od primera koji slede.

Najčešće korišćene funkcije se nalaze u kategoriji Math & Trig (matematičke i trigonometrijske funkcije). Spisak svih funkcija iz ove kategorije sa kratkim objašnjenjem nalazi se u dodatku 4 ovog praktikuma. Hemičari najčešće koriste trigonometrijske funkcije (sinus, kosinus i tangens) kada određuju geometriju molekula, kao i logaritamsku i eksponencijalnu funkciju.

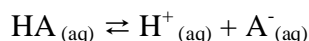
U kategoriji *More Functions* nalaze se još četiri podkategorije od kojih je zanimljiva podkategorija *Statistical*. Funkcije iz ove podkategorije se koriste za statističku obradu podataka, koje je veoma bitna u hemiji. Pomoću ovih funkcija možete odrediti disperziju rezultata merenja, standardnu devijaciju, primeniti razne testove (Studentov T test, F test, Z test), naći srednju vrednost (AVERAGE), mod, medijanu, itd. Spisak funkcija iz ove podkategorije sa kratkim objašnjenjem nalazi se u dodatku 5 ovog praktikuma.

U podkategoriji *Engineering* nalazi se dosta funkcija za rad sa inverznim brojevima. Ovakve vrste funkcija koriste jedino hemičari koji se bave računarskom hemijom.

Sada kada smo naučili kako da umećemo i koristimo funkcije, upotrebimo to znanje da rešimo nekoliko zadataka.

Primer 1. Napravite Excelovu radnu svesku u kojoj će se automatski računati pH vrednost rastvora slabe monobazne kiseline zadate koncentracije.

Rešenje: Za rešavanje ovog zadatka nam je potrebna kiselinska konstanta kiseline (K_a) i njena koncentracija (C). To su ulazni podaci. Ukoliko je koncentracija kiseline dovoljno visoka za kiselinu HA možemo primeniti formulu:



$$K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

Pošto je $[\text{H}^+] = [\text{A}^-] = x$, dok je $[\text{HA}] = C \Rightarrow K_a = \frac{x^2}{C} \Rightarrow x = \sqrt{K_a \cdot C} \Rightarrow \text{pH} = -\log x$

Napravite radni list kao na slici 7.4.

	A	B	C	D
1	Koncentracija	K_a	pH	
2	0.1	1.75E-05	2.878480976	
3				

Slika 7.4 Radni list za računanje pH vrednosti.

U ćeliju A2 se unosi koncentracija kiseline, a u ćeliju B2 njena kiselinska konstanta. Formula u ćeliji C2 je

`=-LOG(SQRT(A2*B2))`

Ukoliko želimo da računamo pH za bilo koju koncentraciju kiseline, dovoljno je samo da promenimo vrednost u ćeliji A2 i rezultat će se automatski promeniti. Snimite ovu radnu svesku, jer ćemo u nastavku još raditi u njoj.

Primer 2. Uradili smo zadatak u kome smo računali pH vrednost na osnovu koncentracije kiseline i njene kiselinske konstante. Međutim koristili smo formulu koja daje zadovoljavajuće vrednosti samo ako je koncentracija kiseline visoka. Ukoliko je koncentracija kiseline niska, odnosno ako je $\frac{C}{K_a} < 100$, tada moramo računati pH vrednost preko kvadratne jednačine:

$$K_a = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]-[H^+]} = K_a = \frac{x^2}{C-x} \Rightarrow x = \frac{-K_a + \sqrt{K_a^2 + 4K_a \cdot C}}{2} \Rightarrow \text{pH} = -\log x$$

Pokušajte sami da napišete formulu koja će računati pH vrednost na osnovu gornjeg izraza.

Ukoliko niste uspeali, formula je:

$$=-\text{LOG}((-B2+\text{SQRT}(B2^2+4*B2*A2))/2)$$

Upišite ovu formulu u ćeliju C3.

C3		fx = -LOG((-B2+SQRT(B2^2+4*B2*A2))/2)				
	A	B	C	D	E	
1	Koncentracija	K _a	pH			
2	1.00E-06	1.75E-05	5.378480976			
3			6.022924951			
4						

Proverite koliko se razlikuju pH vrednosti izračunate pomoću ove dve formule pri visokim i niskim koncentracijama kiseline i podatke upišite u tabelu.

Koncentracija kiseline ($\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$)	1.7×10^{-1}	2.5×10^{-2}	3.7×10^{-3}	2.3×10^{-4}	3.0×10^{-5}	4.2×10^{-6}
pH izračunata pomoću prve formule						
pH izračunata pomoću druge formule						
Razlika u izračunatim pH vrednostima						

pH izračunata pomoću prve formule

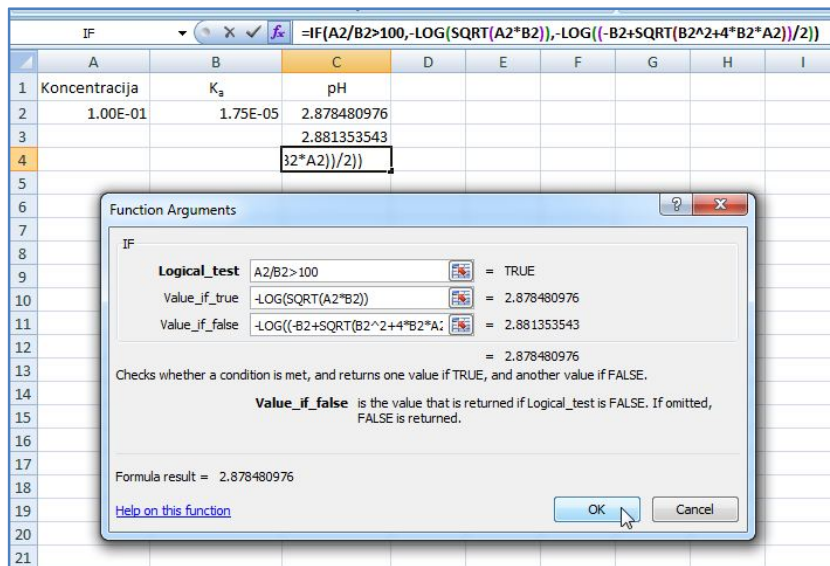
pH izračunata pomoću druge formule

Razlika u izračunatim pH vrednostima

Jasno je da se pri visokim koncentracijama kiseline, dve izračunate vrednosti ne razlikuju mnogo i da možemo koristiti jednostavniju formulu, dok se pri niskim koncentracijama kiseline mora koristiti komplikovanija formula.

Primer 3. Napravimo u ćeliji C4 takvu formulu, koja će prvo računati odnos $\frac{C}{K_a}$ i zatim, ukoliko je taj odnos veći od 100, računati pH po jednostavnijoj formuli, a ukoliko je manji od 100 po komplikovanijoj.

Za ovaj posao nam je potrebna funkcija IF. Izaberite ćeliju C4 i otvorite *Function Arguments* dijalog prozora za funkciju IF (funkcija IF se nalazi u kategoriji *Logical*). Iz dijaloga prozora (slika 7.5) se vidi, da je sintaksa funkcije IF, da se prvo unosi logički test, a zatim formula koja će se računati ukoliko je test tačan, a zatim formula koja će se računati ukoliko je test netačan.



Slika 7.5 Dijalog prozora *Function Arguments* funkcije IF.

Logički test u našem slučaju je da li je odnos $\frac{C}{K_a}$ veći od 100, tako da ćete u polje *Logical_test* uneti $A2/B2>100$ ili prvo pomoću miša izabrati ćeliju A2, zatim otkucati znak / pa izabrati ćeliju B2 i otkucati >100. Excel odmah proverava vrednosti u ćelijama A2 i B2 i u slučaju prikazanom na slici 7.5 nalazi da je test tačan. U polje *Value_if_true* unecete formulu po kojoj će se računati ukoliko je odnos $\frac{C}{K_a}$ veći od 100, odnosno jednostavniju formulu:

$$-\text{LOG}(\text{SQRT}(A2*B2)).$$

U polje *Value_if_false* ćete uneti komplikovaniju formulu, odnosno:

$$-\text{LOG}((-B2+\text{SQRT}(B2^2+4*B2*A2))/2)$$

pošto će se po njoj računati ako je odnos $\frac{C}{K_a}$ manji od 100. Napomena: kada unosite formule u ova polja ne kucate znak = da označite početak formule. Pritisnite dugme *OK* i proverite da li formula radi. Kada u ćeliju A2 upišete koncentraciju 1.0E-01 rezultati u ćelijama C2 i C4 moraju biti identični. Kada u ćeliju A2 upišete koncentraciju 1.0E-06 rezultati u ćelijama C3 i C4 moraju biti identični.

Pogledajte sada kako izgleda formula u ćeliji C4 u polju za formule:

$$=\text{IF}(A2/B2>100,-\text{LOG}(\text{SQRT}(A2*B2)),-\text{LOG}((-B2+\text{SQRT}(B2^2+4*B2*A2))/2))$$

Prvi deo formule je logički test, zatim je zapetom odvojena formula koja se računa ukoliko je logički test tačan, pa je novom zapetom odvojena formula po kojoj se računa ukoliko je netačan. Znači, sintaksa funkcije IF je:

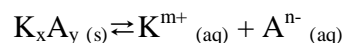
=IF(logički test, formula ukoliko je test tačan, formula ukoliko je test netačan)

Kao što smo i obećali na početku vežbe, imate veoma jednostavan radni list, koji će vam omogućiti da za svega nekoliko sekundi rešite zadatak: koliko je pH vrednost rastvora sirćetne kiseline ukoliko je koncentracija kiseline.... Naravno da bi ovaj radni list važio za neku drugu kiselinu morate promeniti kiselinu konstantu u ćeliji B2.

Već smo naučili dosta o radu sa formulama u programu *Excel*, tako da možemo da počnemo da se bavimo malo ozbiljnijim problemima. U sledećem zadatku ćemo napraviti radni list u programu *Excel*, koji može puno da nam pomogne u rešavanju realnih problema sa kojima se svakodnevno susrećemo u laboratoriji.

Primer 4. Napravite radni list u kome će se automatski računati rastvorljivost, ukoliko je zadata vrednost proizvoda rastvorljivosti i tip soli.

Prvo je potrebno da pripremimo sve formule koje su nam potrebne za računanje. Uopšteno, jednačina reakcije rastvaranja teško rastvornih supstanci se može napisati kao:



Tada je proizvod rastvorljivosti jednak:

$$K_{sp} = [K^{m+}]^x \cdot [A^{n-}]^y \quad (1)$$

Uvedimo pojam rastvorljivosti (R) i definišimo ga preko koncentracije katjona i anjona:

$$[K^{m+}] = x \cdot R \quad \text{i} \quad [A^{n-}] = y \cdot R$$

Zamenom u (1) dobijamo:

$$K_{sp} = (x \cdot R)^x \cdot (y \cdot R)^y \Rightarrow K_{sp} = x^x \cdot R^x \cdot y^y \cdot R^y \Rightarrow K_{sp} = x^x \cdot y^y \cdot R^{x+y}$$

Opšta formula po kojoj ćemo računati rastvorljivost je:

$$R = \sqrt[x+y]{\frac{K_{sp}}{x^x \cdot y^y}}$$

Za računanje rastvorljivosti nam je potrebna vrednost proizvoda rastvorljivosti (K_{sp}) i broj jona katjona (x) i anjona (y) u empirijskoj formuli teško rastvorne soli. Međutim, da ne bi morali svaki put da unosimo broj katjona i anjona, možemo unapred napraviti tabelu iz koje će *Excel*, na osnovu unete opšte formule, preuzeti broj katjona i anjona. Otvorite novi radni list i u kolonama I, J i K unesite sledeće podatke:

I	J	K
Tip soli	x	y
KA	1	1
KA2	1	2
KA3	1	3
K2A	2	1
K3A	3	1
K2A3	2	3
K3A2	3	2

Iz ove tabele će *Excel* na osnovu unete opšte formule, preuzeti broj anjona i katjona. Kada u odgovarajućoj ćeliji unesemo opštu formulu, *Excel* će u levoj koloni tabele potražiti tekst koji je identičan sa tekстом unete opšte formule, a zatim će iz tog reda preuzeti broj katjona i anjona, odnosno vrednosti za x i y. Funkcija kojom se ovo ostvaruje je VLOOKUP.

U ćeliju A1 unesite tekst Tip soli, a u ćeliju A2 neku opštu formulu, na primer KA3 (pravilna opšta formula bi bila KA_3 ali je lakše i brže kucati bez smeštanja brojeva u indekse). U ćeliju B2 upišite formulu koja će potražiti u tabeli tekst KA3 i onda iz tabele preuzeti broj katjona za taj tip soli. Formula je:

=VLOOKUP(A2,I2:K8,2)

Sintaksa funkcije VLOOKUP je: prvo se preuzima tekst iz ćelije **A2**, zatim se taj tekst traži u prvoj koloni tabele koja se prostire na području od **I2** do **K8**, kada se tekst pronađe preuzima se vrednost (ili tekst) iz ćelije koja se nalazi u istom redu kao i pronađen tekst ali u drugoj (**2**) koloni. Ukucajte ovu formulu u ćeliju B2 i dobićete vrednost 1 jer u jedinjenju opšte formule KA3 ima samo jedan jon katjona. Da bi se u ćeliji C2 dobio broj anjona potrebno je ukucati sledeću formulu:

=VLOOKUP(A2,I2:K8,3)

Formula se razlikuje od formule u ćeliji B2 jedino po tome što se preuzima vrednost iz treće kolone tabele (gde se nalaze brojevi anjona), pa se zato na kraju nalazi broj 3.

Potrebno je samo još da unesete vrednost za proizvod rastvorljivosti. Unesite 1.0E-10 u ćeliju, recimo A6.

Sada imamo sve potrebne informacije da rešimo zadatak. Zadatak možemo rešiti postupno ili odjednom. Postupno bi značilo da prvo u ćeliji D2 odredimo zbir broja katjona i anjona (x+y), jer je to broj koji stoji u korenu koji ćemo morati da računamo. U ćeliji D2 otkucajte:

=B2+C2

Potreban nam je, takođe, i imenilac razlomka ($x^x \cdot y^y$) koga ćemo izračunati u ćeliji E2 pomoću formule:

$$=B2^B2*C2^C2$$

I na kraju je ostalo da izračunamo vrednost za rastvorljivost. U ćeliji F2 otkucajte:

$$=(A6/E2)^(1/D2)$$

Napomena: u ćeliji A6 se nalazi uneta vrednost za K_{sp} .

Ceo ovaj račun za rastvorljivost smo mogli da uradimo i preko samo jedne ali komplikovanije formule. U ćeliju F4 možete otkucati:

$$=((A6/(B2^B2*C2^C2))^(1/(B2+C2)))$$

Formula u ćeliji F4 je komplikovanija i lakše je pogrešiti kada je unosite, tako da, dok se ne izveštite u radu sa programom Excel, preporučujemo vam da stvari radite postupno.

Na ovaj način smo dobili program pomoću kojeg možemo da izračunamo rastvorljivost soli na osnovu tipa soli i proizvoda rastvorljivosti (slika 7.6). Proverite da li program radi za različite tipove soli i različite vrednosti proizvoda rastvorljivosti.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	Tip Soli	x	y	x+y	$x^x \cdot y^y$	R(postupno)			Tip soli	x	y
2	KA3	1	3	4	27	1.39E-03			KA	1	1
3						R			KA2	1	2
4						1.39E-03			KA3	1	3
5	Ksp								K2A	2	1
6	1.00E-10								K3A	3	1
7									K2A3	2	3
8									K3A2	3	2
9											

Slika 7.6 Radni list za računanje proizvoda rastvorljivosti.

Primer 5. Uticaj zajedničkog jona

Često se rastvorljivost teško rastvornih soli ne određuje u čistoj vodi, već u rastvoru u kome postoji određena koncentracija jednog od jona teško rastvorne soli. Ovakve primere ste sretali u zadacima tipa: odrediti rastvorljivost Ag_2CO_3 u rastvoru $AgNO_3$ koncentracije $0.1 \frac{mol}{dm^3}$.

$K_{sp}(Ag_2CO_3) = 8.46 \times 10^{-12} \frac{mol^3}{dm^9}$. Da bi rešili ovakav tip problema moramo prvo izvesti novu opštu formulu. Koncentraciju katjona ćemo obeležiti slovom C.

$$K_{sp}=(C)^x \cdot (yR)^y \Rightarrow K_{sp}=C^x \cdot y^y \cdot R^y$$

Nova opšta formula za računanje rastvorljivosti je:

$$R = \sqrt[y]{\frac{K_{sp}}{C^x \cdot y^y}}$$

Dopunite gornji program tako što ćete u polju B6 upisati koncentraciju katjona. U polju B8 upišite sledeću formulu:

=IF(ISBLANK(B6),"",((A6/(B6^B2*C2^C2))^(1/C2)))

Novo u ovoj formuli je što smo ubacili IF(ISBLANK(B6),"", deo. Logički test nam je ISBLANK(B6), koji proverava da li je ćelija B6 prazna.

Ukoliko jeste i ćelija B8 se ostavlja prazna što se postiže sa dva znaka navoda(""). Ukoliko nije prazna onda se rastvorljivost računa po formuli

((A6/(B6^B2*C2^C2))^(1/C2)))

i rezultat upisuje u ćeliju B8.

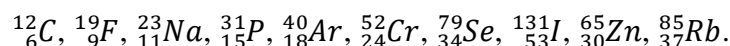
Sada ukoliko unesemo koncentraciju zajedničkog katjona, rastvorljivost će biti upisana u ćeliju B8, a ukoliko je ne unesemo, iz ćelije F2 ćemo pročitati vrednost rastvorljivosti soli u čistoj vodi (slika 7.7).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	Tip Soli	x	y	x+y	x^x*y^y	R			Tip soli	x	y
2	K2A	2	1	3	4	1.28E-04			KA	1	1
3									KA2	1	2
4						1.28E-04			KA3	1	3
5	Ksp	C (Zajednicki katjon)	C (Zajednicki anjon)						K2A	2	1
6	8.46E-12	0.1	0.2						K3A	3	1
7		R	R						K2A3	2	3
8		8.46E-10	3.25E-06						K3A2	3	2
9											
10											

Slika 7.7 Dopunjen radni list za računanje proizvoda rastvorljivosti.

Zadatak 1. Napravite radni list u kome će se u kolonu A unositi maseni broj izotopa elementa, u kolonu B redni broj elementa, dok će se u koloni C automatski računati broj neutrona.

Zadatak 2. Dopunite radni list, urađen u prethodnom zadatku, tako da za 10 navedenih izotopa računa odnos broja neutrona i protona i nalazi izotop kod koga je taj odnos najveći.



Zadatak 3. Promenite radni listi iz primera 3, tako da se računa pH vrednost rastvora slabih baza ukoliko je data koncentracija i konstanta disocijacije slabe baze K_b .

Zadatak 4. Upotpunite radni list iz primera 5, tako da računa rastvorljivost teško rastvorne soli ukoliko je u rastvoru prisutan zajednički anjon koncentracije C. Koncentracija anjona se upisuje u polje C6 a u polju C8 se ispisuje rastvorljivost ukoliko je uneta koncentracija anjona. Vaš radni list bi trebalo da izgleda kao na slici 7.7.

Zadatak 5. Iz analitičke hemije sta učili o koeficijentu aktiviteta. Da bi izračunali koeficijent aktiviteta potrebno je da prvo izračunamo jonsku silu rastvora. Jonska sila se računa po formuli:

$$I = \frac{1}{2} \sum_i^n z_i^2 \cdot C_i$$

gde z_i predstavlja naelektrisanje svakog jona koji se nalazi u rastvoru a C_i njegovu koncentraciju.

Logaritam koeficijenta aktiviteta (γ_i) za neki jon se računa po formuli:

$$\log \gamma_i = \frac{-0.509 z_i^2 \sqrt{I}}{1 + (3.29 \alpha_i \sqrt{I})}$$

gde I predstavlja jonsku silu rastvora, z_i naelektrisanje jona a α_i radijus jona u nm.

Napravite radni list u koji ćete moći da unesete samo simbol i koncentraciju jona u rastvoru a da kao rezultat dobijete koeficijent aktiviteta. Tabela sa naelektrisanjima i radijusima jona je data na sledećoj strani.

Jon	z_i	$\alpha_i(\text{nm})$	Jon	z_i	$\alpha_i(\text{nm})$	Jon	z_i	$\alpha_i(\text{nm})$
Ag	1	0.25	CN	-1	0.3	MnO ₄	-1	0.35
Al	3	0.9	Co	2	0.6	Na	1	0.4
Ba	2	0.5	Cr	3	0.9	NH ₄	1	0.25
Be	2	0.8	CrO ₄	-2	0.4	Ni	2	0.6
Br	-1	0.3	F	-1	0.35	NO ₂	-1	0.3
BrO ₃	-1	0.35	Fe	2	0.6	NO ₃	-1	0.3
CO ₃	-2	0.45	Fe	3	0.9	OH	-1	0.35
HCO ₃	-1	0.45	H	1	0.9	Pb	2	0.45
HCOO	-1	0.3	Hg	2	0.5	PO ₄	-3	0.4
C ₂ O ₄	-2	0.45	Hg ₂	2	0.4	HPO ₄	-2	0.4
CH ₃ COO	-1	0.45	I	-1	0.3	H ₂ PO ₄	-1	0.4
Ca	2	0.6	IO ₃	-1	0.4	Rb	1	0.25
Cd	2	0.5	IO ₄	-1	0.35	S	-2	0.5
Ce	3	0.9	K	1	0.3	HS	-1	0.35
Ce	4	1.1	La	3	0.9	SCN	-1	0.35
Cl	-1	0.3	Li	1	0.6	SO ₃	-2	0.45
ClO ₃	-1	0.35	Mg	2	0.8	HSO ₃	-1	0.4
ClO ₄	-1	0.35	Mn	2	0.6	SO ₄	-2	0.4

Datum

Potpis asistenta

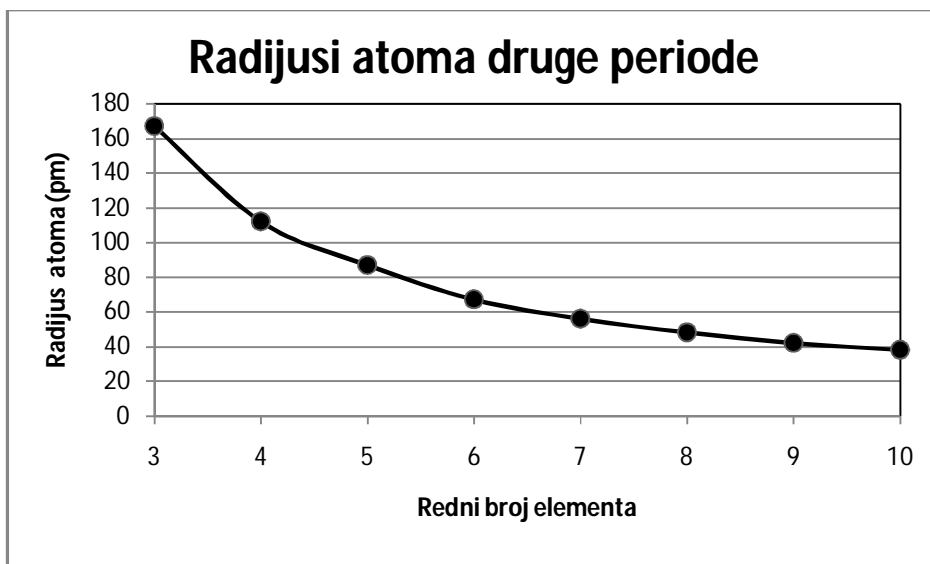
Vežba 8.

Microsoft Excel - izrada dijagrama

Slika govori više od hiljadu reči. Ova poslovice se može primeniti i na podatke. Ukoliko su podaci prikazani brojevima u tabeli, možemo odrediti zavisnost između njih, ali za to će nam biti potrebno dosta vremena. Međutim, ukoliko podatke prikažemo grafički, neke zavisnosti će nam odmah upasti u oči. U tabeli 8.1 prikazani su radijusi atoma elemenata druge periode. Pogledajte tabelu i pokušajte da ustanovite da li postoji neka pravilnost. A sada pogledajte dijagram na slici 8.1. Odmah upada u oči, da se radijusi atoma elemenata druge periode smanjuju sa porastom atomskog broja.

Tabela 8.1 Radijusi atoma elemenata druge periode.

Element	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Redni broj	3	4	5	6	7	8	9	10
Radius (<i>pm</i>)	167	112	87	67	56	48	42	38



Slika 8.1 Radijusi atoma elemenata druge periode.

Dijagram (engl. *Chart*) predstavlja grafički način za prikazivanje numeričkih podataka. Svi programi za tabelarne kalkulacije imaju opciju za pravljenje dijagrama. Program *Excel* sadrži

veliki broj unapred definisanih tipova dijagrama, kao i brojne, lako razumljive, opcije za formatiranje dijagrama. Pomoću ovog programa možete praviti veoma lepe i precizne dijagrame.

Izrada dijagrama

Da biste napravili dijagram potrebni su vam podaci koji se nalaze u ćelijama radnog lista. Podaci ne moraju biti u istom radnom listu, čak ne moraju biti ni u istoj radnoj svesci. U osnovi, dijagram je objekat koji *Excel* pravi na zahtev. Dijagram može biti prikazan na istom radnom listu na kome su i podaci ili na posebnom radnom listu. Ukoliko se dijagram prikazuje na istom radnom listu tada se on nalazi na sloju za crtanje iznad samog lista: kao da je dijagram zalepljen na providnu foliju, koja je postavljena iznad radnog lista. Dijagram možete pomerati po radnom listu a da to ne utiče na ćelije radnog lista.

Izrada dijagrama je veoma jednostavna i sastoji se iz svega tri koraka.

- Prvo je potrebno izabrati područje sa podacima;
- Izaberite tip dijagrama koji će najbolje prikazati vaše podatke. Tipove dijagrama birate u grupi *Charts*, koja se nalazi na kontekstnoj traci kartice *Insert* (slika 8.2). Kada izaberete određeni tip dijagrama, otvoriće se padajuća lista sa podtipovima dijagrama. Izaberite podtip dijagrama i grafik će biti umetnut;
- Doterajte format i izgled dijagrama pomoću alatki iz kontekstnog menija *Chart Tools*.



Slika 8.2 Grupa *Charts* sadrži tipove dijagrama koje je moguće umetnuti u *Excel*.

Razmotrimo sada svaki korak izrade dijagrama detaljnije. Cilj će nam biti da napravimo dijagram u kome će biti prikazani atomski radijusi elemenata druge periode. U prazan radni list unesite podatke koji su prikazani na slici 8.3.

Biranje podataka

Podatke koji će biti prikazani na grafiku birate tako što aktivirate odgovarajuće ćelije na radnom listu. Prilikom izbora, trebalo bi da izaberete i zaglavlja kolona ili redova, koji će služiti kao identifikatori serija podataka. Ukoliko se podaci koje želite da predstavite nalaze u dve kolone koje nisu u jednodelnom području koristite taster *Ctrl* prilikom izbora (slika 8.3).

	A	B	C	D
1	Element	Redni broj	Radius atoma (pm)	Jonizaciona energija (kJ/mol)
2	Li	3	167	513
3	Be	4	112	900
4	B	5	87	801
5	C	6	67	1086
6	N	7	56	1402
7	O	8	48	1314
8	F	9	42	1681
9	Ne	10	38	2081

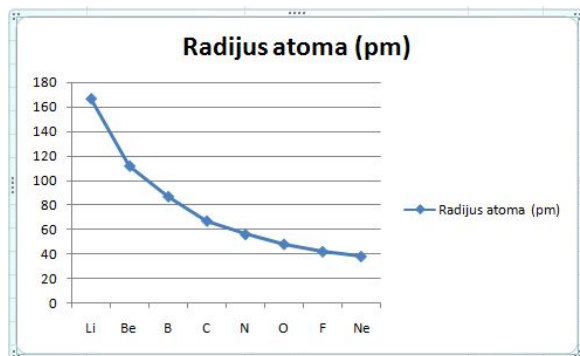
Slika 8.3 Pomoću tastera *Ctrl* mogu se izabrati podaci koji ne čine jednodelnno područje.

Biranje tipa dijagrama

Tip dijagrama se bira prema vrsti podataka koje želimo da prikazemo. U grupi *Charts* kontekstne trake kartice *Insert* je dato sedam tipova dijagrama (slika 8.2). Dobro proučite sve tipove dijagrama. Želimo da napravimo dijagram koji će biti sličan onome prikazanom na slici 8.1, samo što će na horizontalnoj osi umesto rednog broja elementa, stajati hemijski simbol elementa. Od sedam ponuđenih tipova dijagrama, samo dva odgovaraju našim zahtevima: *Line* i *Scatter*. Dijagram tipa *Scatter* je dijagram u kome obe ose (i horizontalna i vertikalna), imaju brojne vrednosti, odnosno obe ose su fizičke ose. Njega koristimo kada želimo da pokažemo zavisnost jedne fizičke veličine od druge (na primer, jačine struje od napona, pH vrednosti od koncentracije kiseline, zapreminu gasa od pritiska, itd). Pošto želimo da nam na horizontalnoj osi budu prikazani simboli elementa, izabraćemo tip *Line*.

Napomena: da želimo da prikazemo zavisnost radijusa atoma od rednog broja elementa, kao što je to prikazano na diagramu na slici 8.1, izabrali bi tip *Scatter*.

Kada aktiviramo alatku *Line* pojaviće se lista sa podtipovima dijagrama. Svaki podtip je prikazan ilustracijom, tako da unapred možete predvideti kako će izgledati dijagram. Izaberite podtip *Stacked line with Markers*, pošto želimo da nam podaci budu povezani linijom (dobro za uočavanje trendova) i da za svaku vrednost radijusa atoma, postoji marker koji je obeležava (dobro za čitanje vrednosti sa grafika). Izborom podtipa završili ste sa unosom dijagrama i na radnom listu će se pojaviti dijagram kao na slici 8.4.



Slika 8.4 Izgled dijagrama odmah nakon izbora podtipa dijagrama.

Formatiranje dijagrama

Dijagram sa slike 8.4 prikazuje ono što želimo, međutim, da bismo ga umetnuli u neki dokument potrebno je da ga još malo doteramo. Aktivirajte dijagram tako što ćete pritisnuti levim dugmetom miša bilo gde na dijagramu, na naslovnoj traci će se pojaviti kartica *Chart Tools* a ispod nje, u redu sa karticama, tri nove kartice: *Design*, *Layout* i *Format*.

Ako izaberete karticu *Design*, prikazaće se kontekstna traka kao na slici 8.5. Na ovoj kontekstnoj traci, u grupi *Chart Layouts* nalaze se unapred definisani stilovi dijagrama. Čim izaberete neki stil, dijagram će se automatski preformatirati na taj stil. Proverite kako izgledaju razni stilovi i izaberite onaj koji vam se najviše dopada.

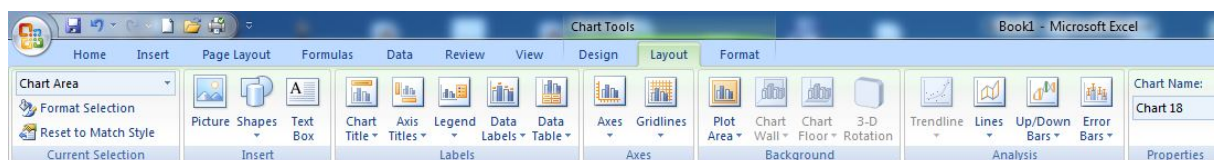


Slika 8.5 Kontekstna traka kartice *Design*.

U grupi *Chart Styles* nalaze se unapred definisani stilovi linije sa markerima.

Alatom *Move Chart* možete prebaciti dijagram na neki drugi već postojeći radni list, ili ga smestiti u novi radni list. Dijagram u novom radnom listu zauzima celu stranicu. Ukoliko planirate da štampate dijagram na celom listu papira, potrebno je da ga prebacite u novi radni list.

Kontekstna traka kartice *Layout* je prikazana na slici 8.6. Na ovoj kontekstnoj traci se nalaze veoma važne alatke za uređivanje izgleda dijagrama.



Slika 8.6 Kontekstna traka kartice *Layout*.

Alatom *Chart Title* možete odrediti položaj naslova dijagrama ili potpuno izbrisati naslov. Takođe, ako izaberete opciju *More Title Options*, otvoriće se prozor u kome možete menjati boju pozadine i okvire polja sa naslovom, dodavati 3D efekte i mnoge druge stvari. Da biste promenili tekst u naslovu dijagrama, potrebno je da postavite pokazivača miša na naslov i pritisnete levo dugme miša. U polju sa naslovom pojaviće se vertikalna linija, koja označava aktivno mesto za unos teksta (kursor). Izbrišite stari tekst naslova i unesite "Radijusi atoma druge periode". Tip fonta, veličinu i boju slova naslova možete menjati pomoću alatki iz grupe *Font* sa kontekstne trake kartice *Home*.

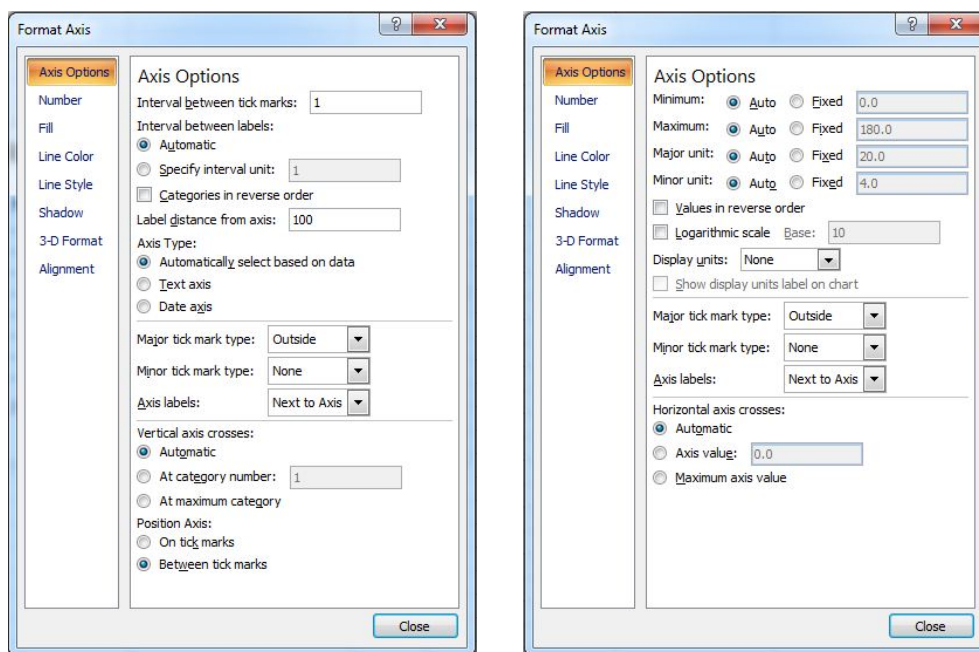
Alatom *Axis Title* možete umetati nazive osa. Podrazumevano *Excel* ne stavlja nazive osa, tako da ih je potrebno umetnuti, da bi se znalo šta koja osa predstavlja. Umetnite nazive osa na dijagramu koji pravite i to "Element" za horizontalnu osu i "Radijus atoma (pm)" za vertikalnu osu. Napomena: da naziv vertikalne ose ne bi zauzimao previše mesta na dijagramu izaberite opciju *Rotated Title* prilikom umetanja.

Alatom *Legend* možete pomerati legendu dijagrama na različita mesta. Takođe, opcijom *More Legend Options* možete legendu bojiti, uokvirivati, itd. Na dijagramu koji pravite, s obzirom da imate samo jednu seriju podataka, nije potrebna legenda pa je uklonite izborom opcije *No Legend*.

Alatom *Data Labels*, možete pored svakog markera na dijagramu upisati njegovu vrednost, odnosno radijus atoma. Postavljanje vrednosti pored markera nije uobičajeno.

Alatom *Data Table* možete postaviti tabelu sa podacima u podnožje dijagrama.

Svaku osu dijagrama možete formatirati pomoću alatke *Axes*. Ako izaberete opciju *More Axis Options* pojaviće se dijalog prozora *Format Axis*. Izgled ovoga dijaloga prozora će zavistiti od toga da li je osa fizička ili ne. Na slici 8.7a prikazan je dijalog prozora za nefizičku osu (horizontalna osa na dijagramu koji pravite), a na slici 8.7b za fizičku osu (vertikalna osa).



a)

b)

Slika 8.7 Dijalog prozora *Format Axis* za a) nefizičku, b) fizičku osu.

Na obe ose možete podešavati položaje zareza (engl. *Tick marks*), mesto preseka sa drugom osom, itd. Za fizičke ose možete podešavati minimalnu i maksimalnu vrednost (početak i kraj ose), postavljati vrednosti obrnutim redosledom, logaritamsku zavisnost, itd. Formatiranje osa je veoma bitno prilikom pravljenja dijagrama *Scatter* tipa sa obe fizičke ose, zato se dobro upoznajte sa svim opcijama u ovom dijalogu prozora.

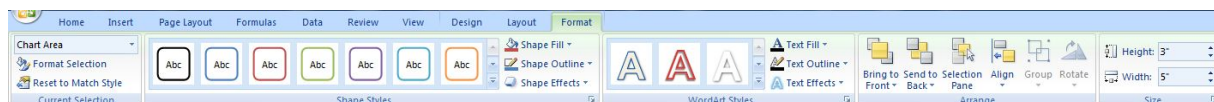
Alatom *Gridlines* možete unositi ili brisati linije mreže na dijagramu. Takođe, pomoću *More Gridline Options* možete menjati izgled linija mreže.

Svaki dijagram se sastoji iz dve oblasti:

- *Plot Area* - je oblast oivičena osama u unutrašnjosti dijagrama. U ovoj oblasti se nalazi linija sa markerima, ose, mreža i nazivi osa. Ovu oblast možete formatirati (na primer, menjati pozadinu, okvir itd) pomoću alatke *Plot Area*, opcija *More Plot Area Options*;
- *Chart Area* - je pozadina celog dijagrama. Ova oblast je smeštena ispod *Plot Area* i vidi se samo tamo gde je *Plot Area* ne prekriva. Da biste formatirali izgled ove oblasti, pritisnite desnim dugmetom miša blizu ivice dijagrama, a zatim izaberite opciju *Format Chart Area*.

Veoma važna alatka koji ćete često koristiti, kada dijagramom predstavljate rezultate merenja, je *Error Bars*. Pomoću ove alatke možete umetati margine greške vaših rezultata kao što je standardna devijacija ili standardna greška. Način kako se računaju greške merenja ćete naučiti na drugim kursevima. Na kontekstnoj traci kartice *Layout* se nalaze još i alatke za unošenje slike, oblika ili polja za tekst u dijagram.

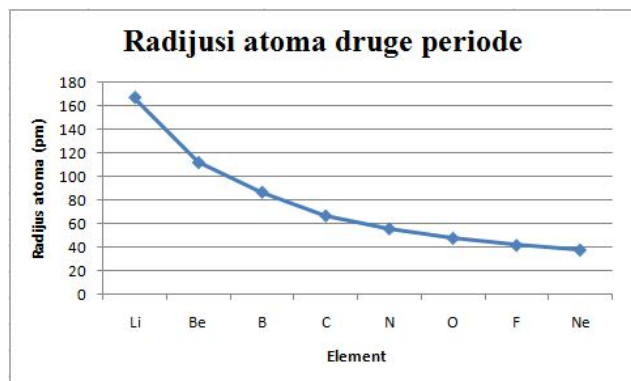
Kontekstna traka kartice *Format* je prikazana na slici 8.8. Na ovoj kontekstnoj traci nalaze se alatke za uređivanje okvira dijagrama, vrste slova, kao i alatke za vertikalno pozicioniranje objekata na dijagramu (grupa *Arrange*). Pomoću alatki iz grupe *Size*, možete podešavati veličinu dijagrama. Veličinu dijagrama ćete lakše podešeti povalčenjem miša po ivicama ili uglovima dijagrama. Na isti način možete podešavati veličinu svakog objekta u dijagramu (naslova, legende, naziva osa, *Plot Area* itd).



Slika 8.8 Kontekstna traka kartice *Format*.

Već ste zaključili da postoje brojni načini da formatirate vaš dijagram, možete umetati boje pozadine, slike, razne šare, oblike, itd. Međutim, nemojte zaboraviti glavnu namenu vašeg dijagrama, da pokaže odnos između nekih numeričkih veličina. Često, studenti toliko "nakite" dijagram da se ne vidi njegova glavna namena.

Vratimo se našem dijagramu koji pokazuje radijuse atoma. Izbrisali smo legendu, uneli nazive osa, promenili naslov. Sada dijagram izgleda kao na slici 8.9. Ovo je sasvim zadovoljavajući izgled dijagrama.



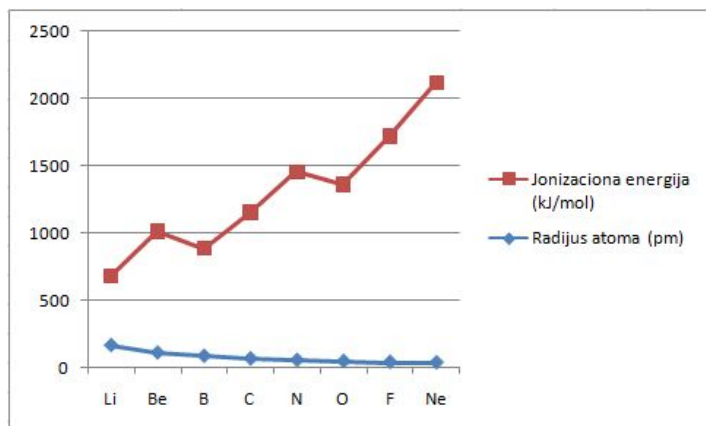
Slika 8.9 Izgled dijagrama koji se može uneti u seminarski ili završni rad.

Najlakši i najbrži način da napravljene dijagrame prenesete u program *Word* (ili bilo koji drugi program iz *Office* paketa) je pomoću *Copy-Paste* komande. Kada prenesete dijagram u program *Word* on će još uvek biti aktivan i možete ga menjati.

Dijagrami sa više serija podataka

U tabeli na slici 8.3 se osim vrednosti radijusa atoma nalaze i vrednosti za prvu energiju jonizacije svih elemenata druge periode. Da bi prikazali obe vrednosti na jednom dijagramu moramo napraviti dijagram sa više serija.

Izaberite vrednosti u kolonama A, C i D iz radnog lista i izaberite *Line* tip dijagrama. *Excel* je automatski prepoznao šta želimo i umetnuo dijagram sa dve serije (slika 8.10). Serije su ispravno obeležene u legendi dijagrama, zato što smo izabrali zaglavlja podataka u kolonama C i D.



Slika 8.10 Dijagram sa više serija.

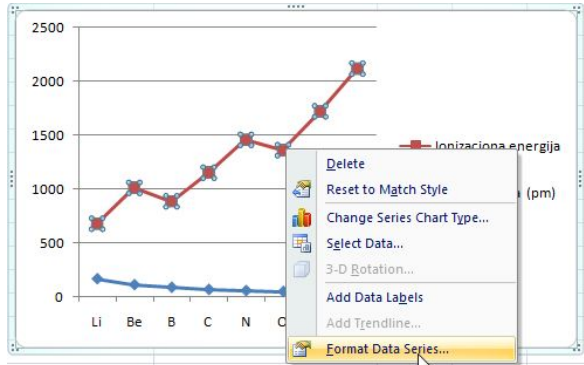
Potrebno je još samo da unesemo naslov dijagrama, nazive osa i da postavimo legendu na neko drugo mesto, gde neće zauzimati toliko prostora.

Međutim dijagram na slici 8.10 ima dve mane:

- Vertikalna osa za seriju "Radijus atoma" je u pikometrima a za seriju "Jonizaciona energija" je u kJ/mol, tako da ne možemo dati jedinstven naziv vertikalnoj osi. Ovo nije velika greška jer su jedinice za svaku seriju navedene u legendi dijagrama;
- Podela na vertikalnoj osi ide od 0 do 2500. Vrednosti radijusa atoma su smeštene od 167 do 38 pm, tako da se ta serija nalazi pri samom dnu dijagrama. Zbog toga, trend opadanja radijusa atoma po periodi nije najjasnije uočljiv na ovom dijagramu

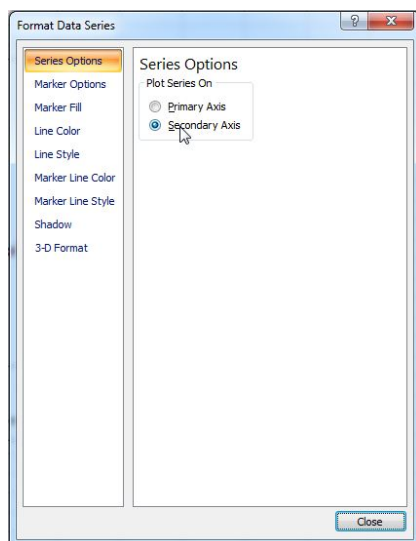
Za prikazivanje ovakvih serija podataka bolje je upotrebiti dijagram sa dve vertikalne ose. Na levoj osi će biti prikazane vrednosti za radijuse atoma a na desnoj za energiju jonizacije.

Dijagram sa dve vertikalne ose možete dobiti, ako izaberete liniju sa markerima koja pokazuje drugu seriju podataka (energija jonizacija) i pritisnete desno dugme miša. Sa liste izaberite opciju *Format Data Series*.



Slika 8.11 Izbor opcije za formatiranje serije podataka.

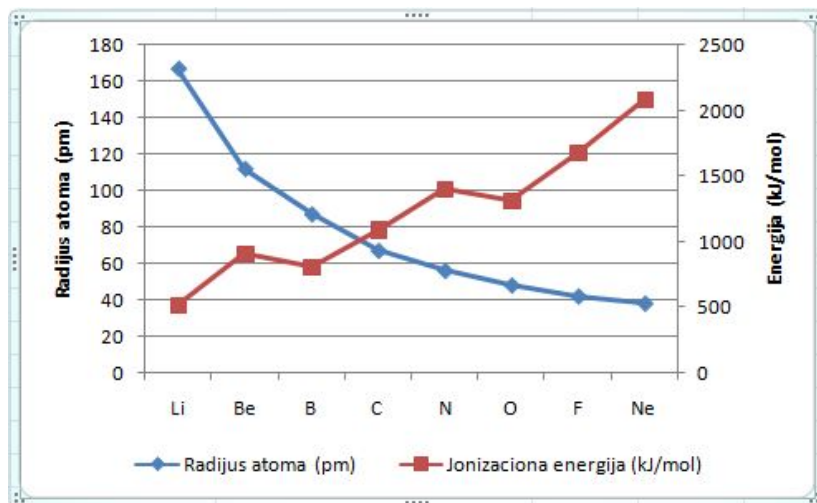
Pojaviće se dijalog prozora *Format Data Series*. U ovom dijalogu prozora podesite da se izabrana serija prikazuje na sekundarnoj osi (slika 8.11).



Slika 8.11 Dijalog prozora *Format Date Series*.

Sa desne strane *Plot Area* dijagrama pojavaće se nova osa sa podelom od 0 do 2500 (slika 8.12). Podaci iz serije "Jonizaciona energija" su prikazani u odnosu na ovu osu. U svim alatkama kojima se uređuju ose (*Axis Titles* i *Axes*) će se pojaviti opcije za uređivanje primarne i sekundarne vertikalne ose. Napomena: pojavaće se i opcije za formatiranje primarne i sekundarne horizontalne ose, ali pošto je u ovom slučaju horizontalna osa ista za obe serije podataka, jednu horizontalnu osu uvek držite ugašenom.

U dijalogu prozora *Format Data Series* možete, osim dodavanja sekundarne ose, formatirati i izgled linije i markera kojima je prikazana serija.



Slika 8.12 Dijagram sa dve vertikalne ose.

Dijagrami tipa *Scatter* i unošenje standardne krive

Osim uloge da prikažu zavisnosti između serija podataka, dijagrami se mogu koristiti i u samoj laboratoriji za određivanje, na primer, nepoznate koncentracije. Kolorimetrija je jedna od metoda u kojoj se koncentracija uzorka može odrediti očitavanjem sa dijagrama. Kolorimetrija se zasniva na činjenici da će rastvori obojenih supstanci apsorbovati svetlost u zavisnosti od koncentracije. Što je rastvor koncentrovaniji više će svetlosti apsorbovati. Kod razblaženih rastvora, ova zavisnost je linearna. Mera količine apsorbovane svetlosti zove se apsorbanca i može se meriti kolorimetrom ili spektrofotometrom.

Kolorimetrijsko određivanje koncentracije se zasniva na merenju apsorbanca niza rastvora poznate koncentracije obojene supstance i crtanju standardne krive. Nakon toga se izmeri apsorbanca rastvora nepoznate koncentracije i sa dijagrama odredi njegova koncentracija. Objasnimo ovo na jednom primeru.

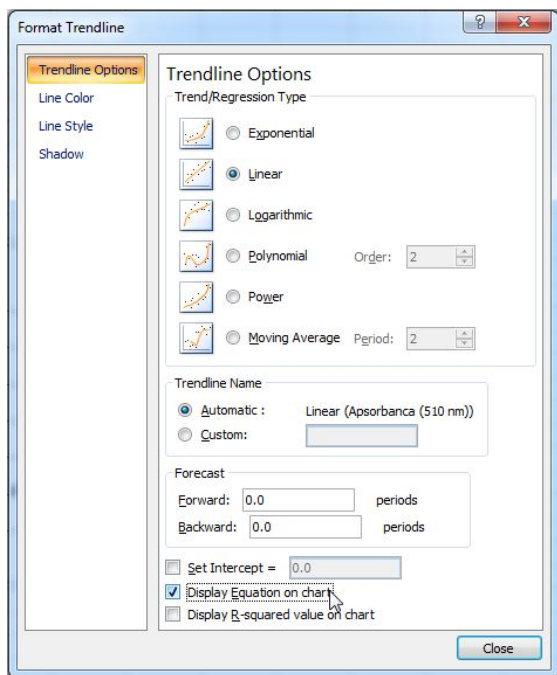
Primer 1. studenti hemije su određivali koncentraciju nepoznatog uzorka CoCl_2 kolorimetrijski. Merenja su radili na talasnoj dužini od 510 nm . Pripremili su seriju rastvora CoCl_2 koncentracije od $0.02 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$ do $0.1 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$. Izmerene apsorbanca rastvora su prikazane u tabeli. Zatim su izmerili apsorbanca rastvora nepoznate koncentracije i dobili su vrednost od 0.31.

	A	B
1	Koncentracija (mol/dm^3)	Apsorbanca (510 nm)
2	0.02	0.11
3	0.04	0.22
4	0.06	0.35
5	0.08	0.46
6	0.1	0.54

Otvorite novi radni list i upišite podatke iz tabele. Zatim umetnite grafik tipa *Scatter*, podtipa *Scatter only with Markers*. U ovom tipu grafika obe ose su fizičke ose, s tim što je na horizontalnoj osi prikazana koncentracija a na vertikalnoj apsorbance. Izborom podtipa *Scatter only with Markers* na dijagramu su samo prikazani markeri bez linije koja ih spaja. Iz samih podataka je prilično jasno da između koncentracije CoCl_2 i apsorbance postoji skoro linearna zavisnost.

Pre pojave programa za tabelarne kalkulacije studenti bi morali sami da provlače pravu liniju kroz tačke na dijagramu i zatim pomoću lenjira da određuju koncentraciju nepoznatog uzorka.

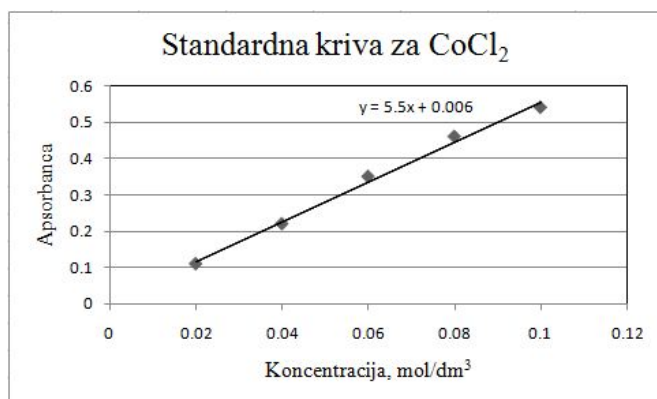
Excel ovo može uraditi umesto nas. Aktivirajte katicu *Layout* i u grupi *Analysis* izaberite alatku *Trendline*. Pomoću ove alatke, možete zadati programu da povuče najbolju krivu kroz tačke. Izaberite opciju *More Trendline Options* da bi se pojavio dijalog prozora *Format Trendline* (slika 8.13)



Slika 8.13 Dijalog prozora *Format Trendline*.

Pošto između koncentracije i apsorbance postoji linearna zavisnost izaberite linearni tip krive i potvrdite opciju *Display Equation on Chart*, da bi jednačina prave bila upisana na samom dijagramu. Pritisnite dugme *Close*. Na dijagramu će se pojaviti standardna prava provučena kroz tačke dijagrama. Takođe će se pojaviti jednačina te prave $y=5.5x + 0.006$ (slika 8.14).

Koncentraciju nepoznatog uzorka možete odrediti tako, što ćete odštampati dijagram i lenjirom odrediti kojoj koncentraciji odgovara apsorbance od 0.31, ili još jednostavnije i tačnije, tako što ćete zameniti u jednačini prave y sa 0.31 i odrediti koncentraciju (x).



Slika 8.14 Alatom *Trendline* se može povući najbolja prava kroz seriju tačaka

Još nekoliko reči o izboru najboljeg tipa dijagrama

Na pitanje kako odabrati najpogodniji tip dijagrama za prikazivanje određenih podataka, nažalost, nema preciznog odgovora. Možda bi dobar odgovor bio: odaberite onaj dijagram koji prikazuje vašu poruku na najjednostavniji način.

Na slici 8.15 prikazan je isti skup podataka na šest različitih dijagrama. Prikazani su podaci o broju pronađenih tetraedarskih kompleksa prelaznih metala sa ligandima koji sadrže sumpor.

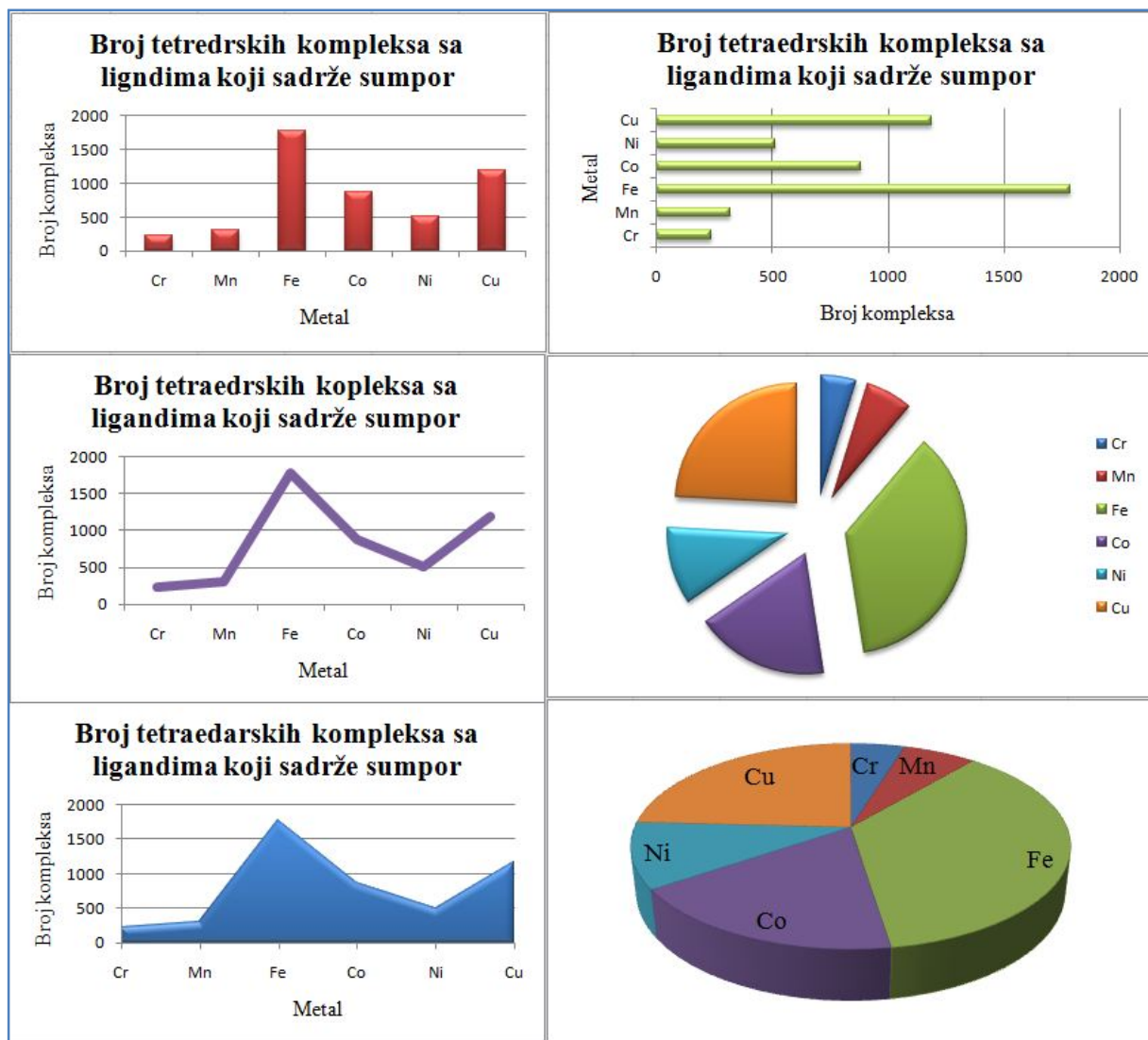
Stubičasti dijagram (gore levo), je verovatno najidealniji za ovakav tip podataka, jer se odmah uočava trend da je pronađeno najviše kompleksa sa bakrom i gvožđem.

Trakasti dijagram (gore desno), je veoma sličan stubičastom dijagramu, ali je teži za proučavanje. Pokazano je da ljudi lakše obrađuju podatke koji su poređani sa leva na desno, nego odozgo nadole.

Linijski i prostorni dijagram (sredina i dole levo), nisu odgovarajući za prikazivanje ovakve serije podataka jer su kontinualni. Izgleda kao da postoje dodatne tačke između šest stvarnih tačaka u seriji, kao i da dijagram prikazuje neki nepostojeći trend.

Kružni dijagrami (sredina i dole desno), lepo pokazuju da su kompleksi gvožđa i bakra najzastupljeniji. Jedina mana im je što ne prikazuju broj pronađenih kompleksa, tako da nemamo predstavu o koliko se kompleksa radi.

Kada se predstavlja ovakva serija podataka, verovatno je najbolje rešenje, upotrebiti stubičaste dijagrame. Na svu sreću, tipove dijagrama je veoma lako menjati u programu *Excel*, pa vam savetujemo da eksperimentišete sa različitim tipovima, dok ne pronađete onaj koji će podatke predstaviti jasno, precizno i jednostavno.



Slika 8.15 Isti skup podataka (broj pronađenih tetraedarskih kompleksa prelaznih metala sa ligandima koji sadrže sumpor) prikazan sa šest različitih dijagrama.

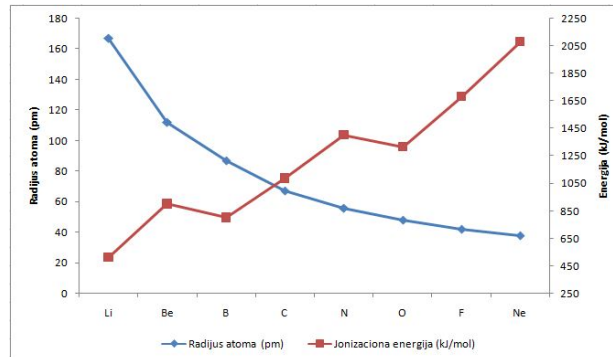
Zadatak 1. Predstavite grafički u programu Excel promenu potencijalne energije $\text{OCH}_2\text{-CH}_2\text{O}$ fragmenta, do koje dolazi promenom torzionog ugla O-C-C-O . Energije su računane molekulsko-mehaničkom metodom, poljem sila AMBER.

Torzioni ugao $\omega(^{\circ})$	Energija (kcal/mol)
0	3,6
60	0,2
120	2,9
180	1,0
240	2,9
300	0,2
360	3,6

Zadatak 2. Predstavite grafički konstante stabilnosti etilendiamminskih (en) kompleksa nekih dvovalentnih jona prelaznih metala. Odaberite najbolji tip dijagrama za ovu seriju podataka.

	$\log K_1$	$\log K_2$	$\log K_3$
Mn^{2+}	3,0	2,0	1,0
Fe^{2+}	3,8	2,8	1,8
Co^{2+}	5,0	4,0	3,0
Ni^{2+}	6,5	5,5	4,5
Cu^{2+}	11,0	9,0	-1,0
Zn^{2+}	6,0	5,0	2,0

Zadatak 3. Napravite dijagram sa dve serije da izgleda kao na slici. Obratite pažnju da je sekundarna vertikalna osa formatirana tako da počinje od vrednosti 250.



Zadatak 4. Na osnovu podataka datih u primeru 1, odredite koncentraciju nepoznatog uzorka CoCl_2 , ukoliko je apsorbanca 0.40.

Zadatak 5. Napravite radni list, u kome će biti sumulirana promena pH vrednosti prilikom titracije jake kiseline jakim bazom. Ulazni podaci su zapremina, koncentracija kiseline i koncentracija baze. *Excel* simulira titraciju u alikvotima od 0.2 cm^3 i posle svakog dodatog alikvota računa pH vrednost rastvora. Na kraju izradite dijagram koji prikazuje promenu pH vrednosti u zavisnosti od dodate zapremine baze.



Datum

Potpis asistenta

Vežba 9.

Hemijske baze podataka

Sveukupna količina podataka u hemiji je ogromna; ilustracije radi, do danas (jesen 2013. godine), je sintetisano i okarakterisano oko 80 milona neorganskih i organskih jedinjenja. Svakog dana se tom spisku doda oko 15.000 novotkrivenih supstanci, tako da se očekuje da će krajem 2017. godine, biti poznato preko 100 miliona jedinjenja. Dodajte na to i proteine, nukleinske kiseline i lipide i dobićete okvirnu sliku o količini znanja kojim raspolaže današnja hemija.

Sve te podatke treba nekako sačuvati. Danas, dominantan način čuvanja podataka iz hemije i ostalih nauka su naučni i stručni časopisi, u kojima se svakodnevno objavljuje veliki broj publikacija sa rezultatima najnovijih istraživanja.

Objasnimo ovo na jednom primeru: Vi ste hemičar koji se bavi istraživanjem novog organskog jedinjenja koje bi moglo biti inhibitor toksičnog enzima *Exotoxin-A* iz bakterije *Pseudomonas aeruginosa*. Sintetisali ste jedinjenje, prečistili, okarakterisali ga i proverili njegovu inhibitorsku sposobnost *in-vitro* (u epruveti). Sve rezultate svojih istraživanja, uključujući detaljan opis sinteze molekula, karakterizaciju i rezultate provere inhibitorskih sposobnosti, ste objavili u odgovarajućem naučnom časopisu. Time su rezultati vašeg istraživanja sačuvani i stavljeni na uvid celoj naučnoj javnosti. Ukoliko neki biohemičar ili farmaceut, iz bilo kog kraja sveta, želi da ispita efikasnost vašeg jedinjenja (potencijalnog leka) na živim organizmima zaraženim bakterijom *Pseudomonas aeruginosa*, on će pronaći vaš rad u časopisu u kome je publikovan, sintetisati molekul na osnovu vašeg opisa sinteze i uraditi svoje istraživanje. Kao "zahvalnost", u radu u kome je opisao rezultate svog istraživanja citiraće vaš rad, odnosno navešće da je sinteza urađena po metodi koju ste vi otkrili. U svetu trenutno postoji oko 800 časopisa (tabela 9.1) iz hemije i srodnih naučnih disciplina, od kojih većina izlazi na preko 5.000 strana godišnje. To čini ukupno 4 miliona strana objavljenih naučnih radova godišnje. Na koji način biohemičar ili farmaceut da pronađe vaš rad (objavljen na 10 strana) u tom mnoštvu informacija? Tu na scenu stupaju hemijske baze podataka, koje se svakodnevno dopunjuju informacijama o novo-objavljenim radovima. Naravno, u baze podataka se ne ubacuju kompletni radovi, već samo najvažniji delovi kao što su: naslov rada, imena autora i časopis u kome je rad objavljen (zajedno sa godinom, volumenom i brojem strane), ključne reči i sažetak (apstrakt) koji ukratko objašnjavaju šta je urađeno, kao i imena jedinjenja koja su korišćena ili sintetisana u radu. Podaci u bazama podataka su organizovani na takav način da ih je veoma lako pretraživati. Najčešće je dovoljno da otkucate samo ključne reči ili formulu jedinjenja koje vas interesuje i da dobijete spisak svih radova gde se to jedinjenje pominje. Biohemičar ili farmaceut će preko baze podataka veoma lako pronaći vaš rad ako otkuca prave ključne reči, na primer, *inhibitors for Exotoxin-A, Pseudomonas aeruginosa* (prilikom pretraživanja baza podataka uobičajeno se koristi engleski jezik). Ovakvom pretragom, dobiće se od nekoliko desetina do nekoliko stotina radova, među kojima će se nalaziti i vaš rad. Iz baze podataka istraživač će moći da

pročita apstrakte svih pronađenih radova i na taj način se upozna sa istraživanjima koja su u njima opisana. Verovatno će, posle čitanja apstrakta, ostati samo nekoliko desetina radova za koje će proceniti da su interesantni za njegovo istraživanje. Na kraju će te radove pronaći u časopisima u kojima su objavljeni i pročitati ih u celini. Na taj način, istraživači mogu veoma brzo i lako doći do informacija potrebnih za istraživanje.

Naravno, broj pronađenih radova zavisi od vaše veštine pretrage; ukoliko otkucate samo *inhibitors* kao kriterijum pretrage, dobićete nekoliko stotina hiljada naučnih radova.

Tabela 9.1 Broj časopisa iz svake oblasti hemije.

Oblast	Broj časopisa*
Analitička hemija	56
Primenjena hemija	28
Neorganska i nuklearna hemija	35
Medicinska hemija	31
Hemija, Multidisciplinarna	93
Organska hemija	41
Fizička hemija	104
Kristalografija	19
Elektrohemija	13
Hemijsko inženjerstvo	67
Nano nauke i nanotehnologije	30
Spektroskopija	35
Biohemijske metode	43
Biohemija i molekularna biologija	199

*Izvor: Thomson Reuters

Baze podataka u kojima su hemijske informacije povezane sa relevantnim radovima u naučnim časopisima se zovu **literaturne baze podataka**. Kao rezultat pretrage ovih baza podataka dobićete reference radova u kojima se pominju zadati kriterijumi pretrage.

Osim literaturnih baza podataka, postoje i baze podataka u kojima su uskladištene informacije o trodimenzionalnim strukturama molekula, određene primenom rendgenske ili neutronske difrakcije ili NMR spektroskopijom. Primeri takvih baza su Kembrička kristalografska banka podataka i Proteinska banka podataka. Više o ovim bazama podataka, nazvanim baze podataka sa strukturama molekula, naučićete u 14. vežbi.

Takođe, postoje i baze podataka u kojima se nalaze informacije o spektroskopskim osobinama jedinjenja. U ovim bazama su uskladišteni NMR (nuklearna magnetna rezonacija), IC (infracrvena spektroskopija), UV/VIS (ultraljubičasta/vidljiva spektroskopija) i MS (masena spektroskopija) spektri različitih jedinjenja. Pretraga ovih baza se vrši po molekulskoj ili strukturalnoj formuli jedinjenja. Posebno je interesantna mogućnost da, ukoliko imate spektar nepoznatog jedinjenja, taj spektar učitate u bazu podataka i proverite da li se vaš spektar poklapa sa spektrom nekog poznatog jedinjenja. Ovakav način pretraživanja se često koristi u forenzici. Najveće spektroskopske baze podataka su: *ACD/Labs*, *Aldrich NMR Library*, *Biological Magnetic Resonance Data Bank*, *ChemGate*, *ChemSpider* i *Spectral Database for Organic Compounds*.

Osim navedenih baza podataka, postoji još veći broj manjih baza sa uskospecijalizovanim sadržajem, kao što su baze podataka hemijskih reakcija, koje sadrže informacije o reaktantima, proizvodima, mehanizmima, intermedijerima i prelaznim stanjima hemijskih reakcija.

Literaturne baze podataka

Već smo pomenuli da je glavni cilj literaturnih baza podataka povezivanje traženih hemijskih informacija sa radovima u naučnim i stručnim časopisima u kojima se te informacije nalaze. Osim podataka o naučnim radovima, u ovim bazama podataka se nalazi uskladišten veliki broj dodatnih informacija o traženim supstancama. Na primer, ako u neku literaturnu bazu podataka unesete ime ili strukturu nekog jedinjenja, osim podataka o naučnim i stručnim radovima u kojima se to jedinjenje pominje, dobićete i čitav niz tabela sa fizičkim i hemijskim svojstvima tog jedinjenja, kao što su: molarna masa, temperatura topljenja, temperatura ključanja, gustina, rastvorljivost u raznim rastvaračima, itd. Ukoliko je traženo jedinjenje bioaktivno, i ti podaci će biti prikazani.

U okviru današnje vežbe obradićemo dve velike grupe baza podataka:

- Baze podataka kojom upravlja Američko hemijsko društvo;
- Baze podataka kojom upravlja Nacionalni institut za zdravlje.

Baze podataka Američkog hemijskog društva - CAS REGISTRY/CaPlus/CASREACT

Američko hemijsko društvo (*American Chemical Society - ACS*) je osnovalo hemijski apstraktni servis (*Chemical Abstract Service - CAS*) kao vodeći svetski servis za pronalaženje relevantnih hemijskih informacija. Cilj ovog servisa je da pronađu, objedine i organizuju sve javno dostupne informacije o hemijskim supstancama.

Ove informacije se skladište u bazu podataka **CAS REGISTRY** i mogu se jednostavno pretraživati. Svaka supstanca koja se nalazi u **CAS REGISTRY** bazi podataka ima svoj jedinstveni identifikacioni broj, takozvani **CAS broj**. Upotreba **CAS broja** je veoma korisna, pošto se time izbegavaju dvosmislenosti koje mogu nastati upotrebom trivijalnih imena supstanci. Takođe, mnogi državni autoriteti, kao što su Ministarstvo ekologije Republike Srbije, Agencija za hemikalije ili Uprava carina, insistiraju na upotrebi **CAS broja** prilikom uvoza, transporta ili stavljanja u promet određenih supstanci. Dnevno, oko 15.000 novosintetisanih supstanci dobije svoj **CAS broj**.

CaPlus baza podataka povezuje informacije o hemijskim supstancama sa naučnim radovima u kojima se ta supstanca pominje. Takođe u ovoj bazi podataka se nalaze i apstraktni radovi, pa je moguće i pretraživanje na osnovu teme ili ključne reči.

CASREACT baza podataka sadrži podatke o hemijskim reakcijama i to: o tipu reakcije, o reaktantima i proizvodima reakcije, o uslovima pri kojima se reakcija dešava, o rastvaračima, kinetici, itd.

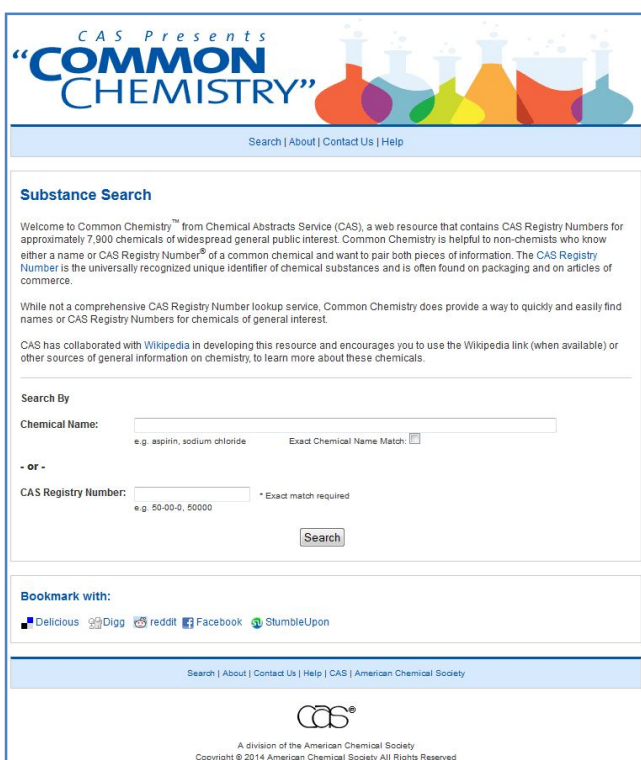
Osim ove tri najčešće korišćene baze podataka u okviru CAS servisa postoji još nekoliko manjih baza, kao na primer baza sa podacima o patentima - **MARPAT**, ili baza sa podacima o merama zaštite i bezbednosti prilikom rukovanja hemikalijama - **CHEMLIST**.

Nažalost, većina proizvoda CAS servisa nisu besplatni i zahtevaju otvaranje plaćenih naloga da biste mogli da im pristupite.

Jedini besplatan servis je *Common Chemistry*, koji nudi podatke i CAS brojeve za 7 900 jedinjenja koja se najčešće koriste. Da biste pristupili *Common Chemistry* servisu, otkucajte sledeću adresu u svom internet pretraživaču:

<http://www.commonchemistry.org/>

ili pretražite Internet stranice preko servisa www.google.com na ključne reči *Common Chemistry* i izaberite prvu ponuđenu vezu. U vašem internet pretraživaču otvoriće se stranica za pretragu servisa *Common Chemistry* kao na slici 9.1.



CAS Presents
COMMON CHEMISTRY

Search | About | Contact Us | Help

Substance Search

Welcome to Common Chemistry™ from Chemical Abstracts Service (CAS), a web resource that contains CAS Registry Numbers for approximately 7,900 chemicals of widespread general public interest. Common Chemistry is helpful to non-chemists who know either a name or CAS Registry Number® of a common chemical and want to pair both pieces of information. The CAS Registry Number is the universally recognized unique identifier of chemical substances and is often found on packaging and on articles of commerce.

While not a comprehensive CAS Registry Number lookup service, Common Chemistry does provide a way to quickly and easily find names or CAS Registry Numbers for chemicals of general interest.

CAS has collaborated with Wikipedia in developing this resource and encourages you to use the Wikipedia link (when available) or other sources of general information on chemistry, to learn more about these chemicals.

Search By

Chemical Name: e.g. aspirin, sodium chloride Exact Chemical Name Match

- or -

CAS Registry Number: e.g. 50-00-0, 50000 *Exact match required

Bookmark with:

Delicious Digg reddit Facebook StumbleUpon

Search | About | Contact Us | Help | CAS | American Chemical Society

CAS[®]

A division of the American Chemical Society
Copyright © 2014 American Chemical Society All Rights Reserved

Slika 9.1 Početna strana *Common Chemistry* servisa.

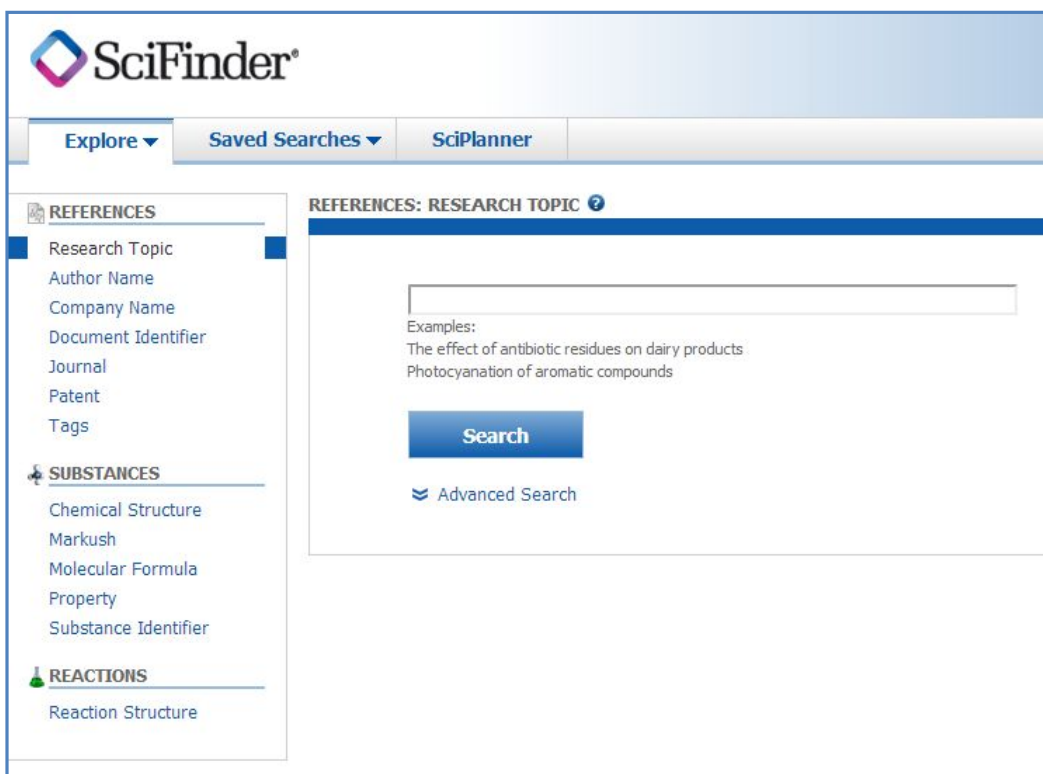
Common Chemistry servis omogućava pretragu na osnovu imena supstance (*IUPAC* nomenklatura ili trivijalno) ili na osnovu CAS broja. Kada otkucate odgovarajuće ime supstance u polje za pretraživanje (na primer, acetone) i pritisnete dugme za traženje (*Search*) prebacićete se na stranicu sa detaljima o toj supstanci. Nažalost, u okviru ovog servisa dobićete veoma mali broj datalja o traženoj supstanci: CAS broj, *IUPAC* sistemsko ime i trivijalna imena, molekulsku formulu i strukturnu formulu. Ukoliko postoji, pojavice se i veza

na stranicu servisa *Wikipedia*, na kome se nalaze dodatni podaci o traženoj supstanci. Ove stranice servisa *Wikipedia* uređuju stručnjaci iz *CAS*-a, tako da se sadržaju ovih stranica može verovati (za razliku od ostalih stranica ovog servisa koje može da uređuje ko god poželi, pa često sadrže i pogrešne podatke).

SciFinder

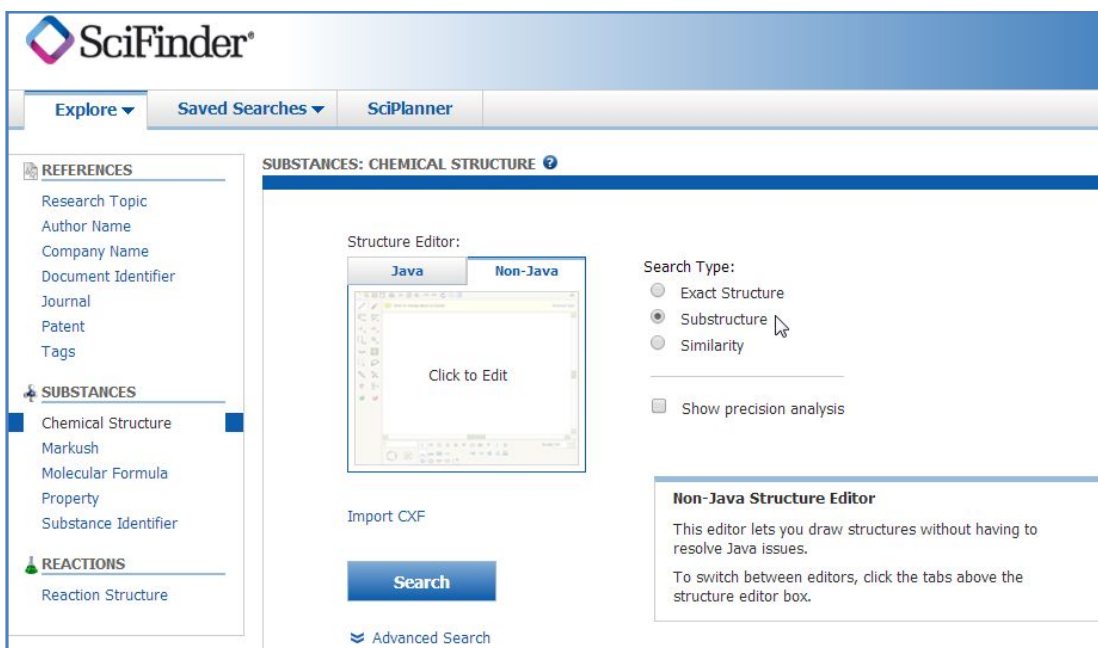
SciFinder nije baza podataka već Internet program za pretragu svih baza podataka koje uređuje *CAS*. Kada unesete traženi pojam u program *SciFinder* on pretražuje sve *CAS* baze podataka na traženi pojam i pronađene informacije prikazuje na novoj stranici vašeg internet pretraživača. U programu *SciFinder* možete pretraživati reference, supstance ili reakcije (slika 9.2). Reference možete pretraživati prema:

- cilju istraživanja (*Research Topics*);
- imenu autora;
- kompaniji (fakultetu, institutu) u kojoj autor radi;
- identifikacionom broju naučnog rada (DOI broj);
- časopisu;
- patentu.



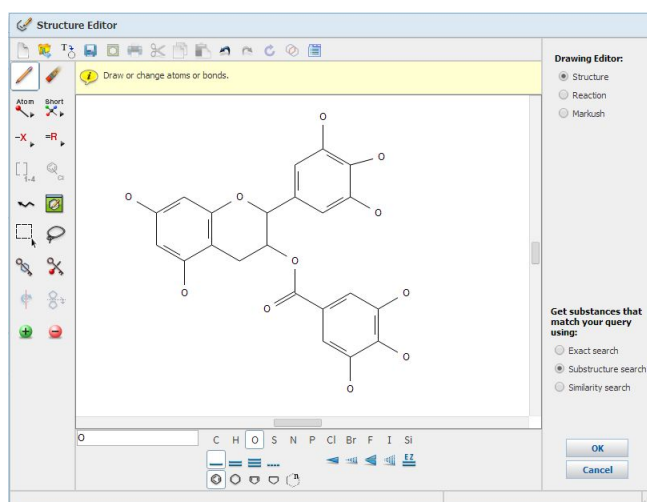
Slika 9.2 Stranica za pretraživanje programa *SciFinder*.

Supstance možete pretraživati unošenjem njihove strukturne (*Chemical Structure*) ili molekulske formule, svojstava ili CAS broja. Posebno je korisno pretraživanje supstanci na osnovu njihove strukturne formule (slika 9.3).



Slika 9.3 Pretraživanje na osnovu strukturne formule.

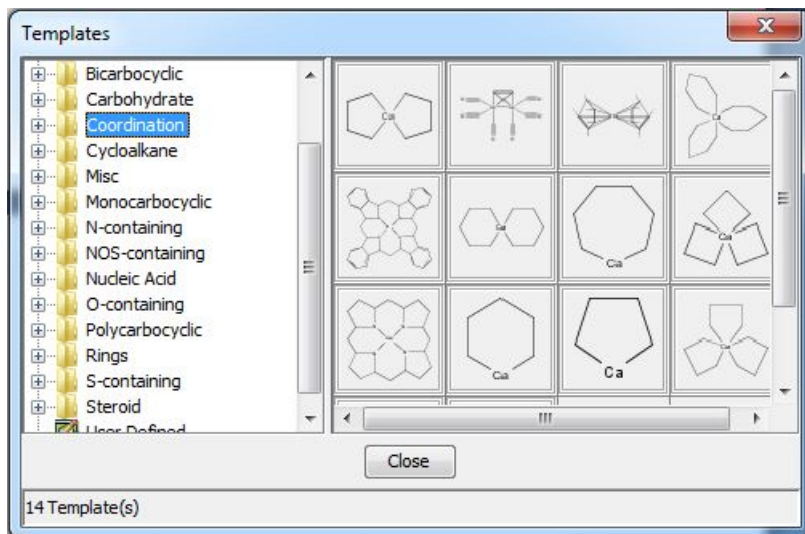
Strukturnu formulu traženog jedinjenja možete uneti pomoću specijalnog programa *CAS Structure Editor* (slika 9.4). Ovaj program možete otvoriti ili direktno na mreži ili ceo program možete besplatno preuzeti sa adrese <http://www.cas.org/products/scifinder/cas-structure-editor> i instalirati ga na svom računaru. Ukoliko ste preuzeli program sa mreže i na svom računaru nacrtali strukturu traženog molekula potrebno je da snimate strukturu u obliku .cxf datoteke, a zatim tu datoteku učitate u servis *SciFinder* pomoću *Import CXF* komande.




Slika 9.4 Program *CAS Structure Editor*.

Crtanje strukturnih formula u *CAS Structure Editor* programu je veoma jednostavno i intuitivno. U samom programu se nalazi veliki broj unapred definisanih strukturnih elementa (*Templates*) tako da se crtanje složenijih molekula sastoji iz spajanja ovih templatnih

struktura. Templatne strukture postoje za različite vrste i klase jedinjenja, od neorganskih kompleksa prelaznih metala, do steroidnih jedinjenja (slika 9.5).



Slika 9.5 Prozor sa templatnim strukturama u programu *CAS Structure Editor*. Ovaj prozor se otvara izborom alatke 

Pretraga na osnovu strukturne formule se može postaviti tako, da program traži samo jedinjenje koje potpuno odgovara strukturnoj formuli ili jedinjenja koja sadrže nacrtanu strukturnu formulu. Nakon izvršene pretrage otvoriće se nova stranica sa rezultatima pretrage. Na ovoj stranici možete naći sve informacije sadržane u *CAS* bazama podataka o traženoj supstanci.

Ministarstvo prosvete i nauke Republike Srbije je obezbedilo određen broj licenci za korišćenje programa *SciFinder* i *CAS* baza podataka za istraživače u Srbiji. Nažalost, broj obezbeđenih licenci nije dovoljan da bi svaki student imao svoju licencu i da bi se program mogao detaljnije obrađivati na vežbama iz ovog predmeta.

Baza podataka PubChem Nacionalniog instituta za zdravlje

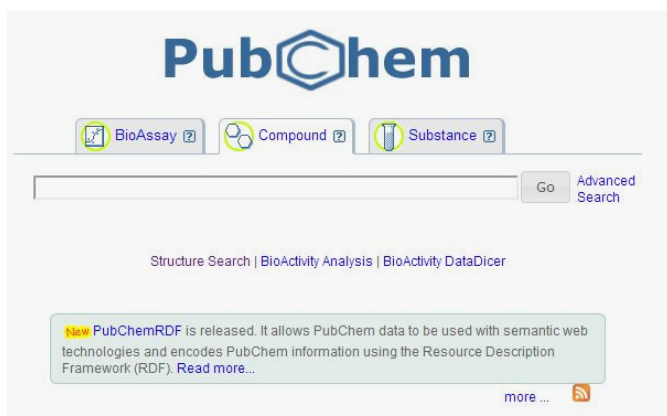
PubChem je baza podataka koja pruža informacije o hemijskim strukturama, svojstvima i biološkoj aktivnosti malih molekula (manje od 1000 atoma i 1000 veza). *PubChem* je slobodno dostupan na Internetu, a da biste pristupili *PubChem* strani otkucajte sledeću adresu u svom internet pretraživaču:

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

Baza *PubChem* je veoma slična *CAS* bazama, tako da je Američko hemijsko društvo tražilo od Američkog kongresa da ograniči *PubChem* bazu, jer je prodaja licenci za *CAS* servise glavni način finansiranja društva. Nakon pojave besplatne *PubChem* baze, broj prodatih licenci je počeo naglo da opada.

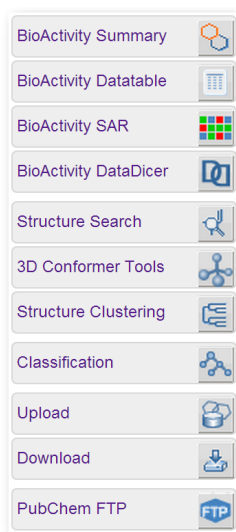
PubChem baza se sastoji od tri povezane baze podataka koje se mogu pretraživati pomoću sistema za pristup podacima Nacionalnog centra za biotehnoške informacije SAD (NCBI).

Ove tri baze podataka su: *PubChem Substance*, *PubChem Compound* i *PubChem BioAssay* (slika 9.6).



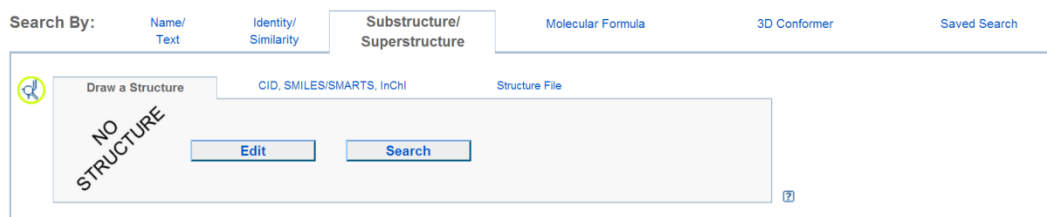
Slika 9.6 Početna strana sa *PubChem* bazama.

Baza podataka *PubChem Substance* sadrži više od 75 miliona zapisa, baza *PubChem Compound* sadrži oko 31 milion jedinstvenih hemijskih struktura, dok *PubChem BioAssay* baza sadrži 1644 bioloških testova (podatak od 7. januara 2011. godine). Pretraživanje baze podataka moguće je uz korišćenje nekih od servisa prikazanih na slici 9.7.



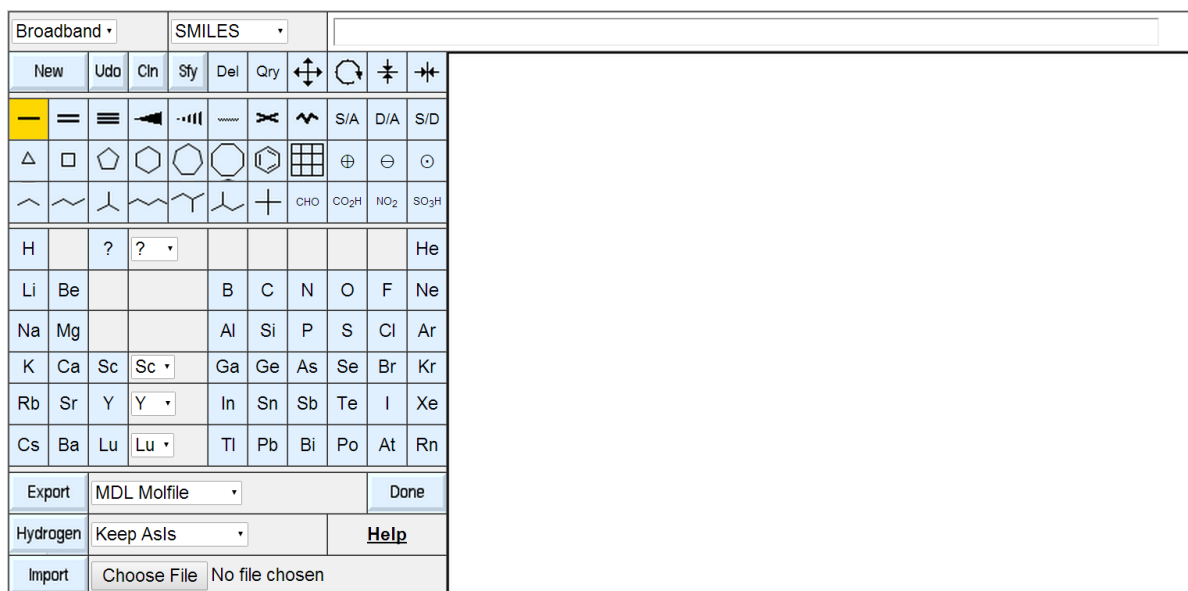
Slika 9.7 Prikaz *PubChem* servisa.

U okviru današnje vežbe naučićete da pretražujete bazu *PubChem Compound*, pomoću *Structure Search* servisa. Ova baza može se pretraživati korišćenjem imena traženog jedinjenja, hemijske strukture, naziva fragmenata, molekulske formule ili molekulske mase (slika 9.8).



Slika 9.8 Pretraga *PubChem Compound*, uz pomoć *Structure Search* servisa.

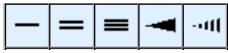



Pretraga prema strukturi se vrši preko kartice *Substructure/Superstructure*, u *Structure Search* servisu. Hemijska struktura se može nacrtati ili se pak može prikazati u obliku izomeričkog zapisa SMILES (od *Simplified Molecular Input Line Entry System*). Crtanje strukture traženog jedinjenja, ili samo jednog njegovog fragmenta, vrši se u programu *PubChem Sketcher* (slika 9.9), koji se aktivira pritiskom na dugme *Edit* (slika 9.8). Radna površina *PubChem Sketcher* programa sastoji se od površine za crtanje i alatki, organizovanih u dva polja.



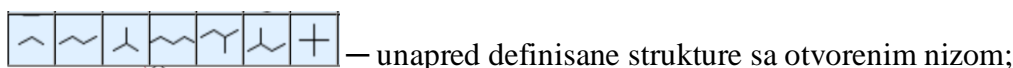
Slika 9.9 Dijalog prozor *PubChem Sketcher*.


U prvom polju su uglavnom alatke za pristup unapred definisanim strukturama, ali pored njih tu su prečice koje su namenjene za otvaranje novog prozora za crtanje (alatka *New*), za brisanje postojeće strukture (alatka *Del*), za poništavanje poslednjeg koraka (alatka *Undo*), kao i za čišćenje geometrije (alatka *Cln*), odnosno za pravilno prikazivanje strukture. Poslednja prečica biće slikovito prikazana kasnije.

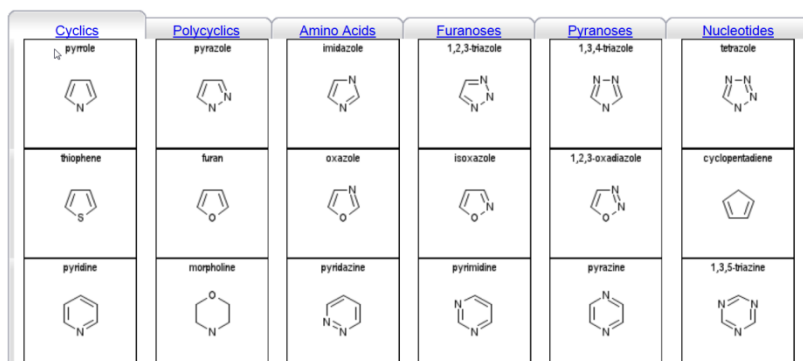


U prvom polju se nalaze alatke za različito prikazivanje hemijskih veza, , kao i alatke za dodelu naelektrisanja, . Tu su i alatke za translatorno pomeranje nacrtane strukture, , ili rotaciju iste, .

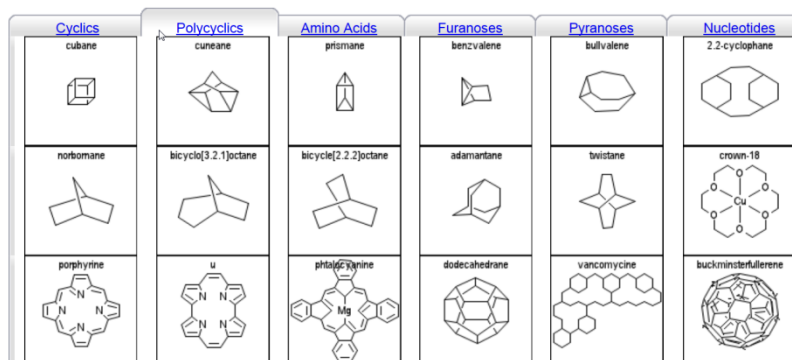
Alatke sa unapred definisanim templatnim strukturama su razvrstane u tri grupe: ciklične strukture, strukture sa otvorenim nizom i strukture funkcionalnih grupa.



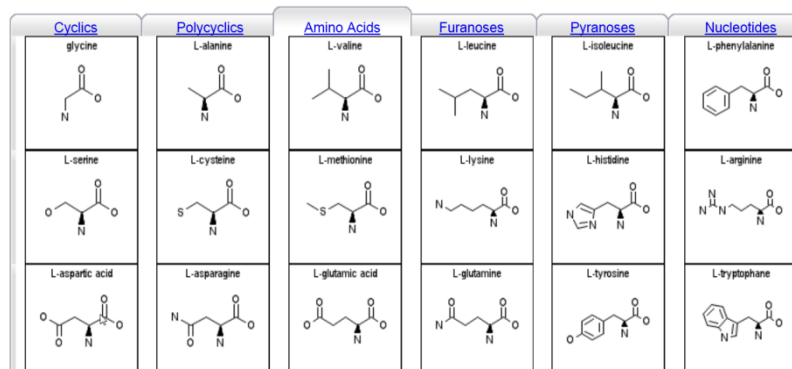
Aktiviranjem alatke  otvara se novi prozor sa templatnim strukturama još nekih cikličnih jedinjenja (slika 9.10), policikličnih struktura (slika 9.11), aminokiselina (slika 9.12), derivata furana (slika 9.13), derivata pirana (slika 9.14) i struktura nukleotida (slika 9.15).



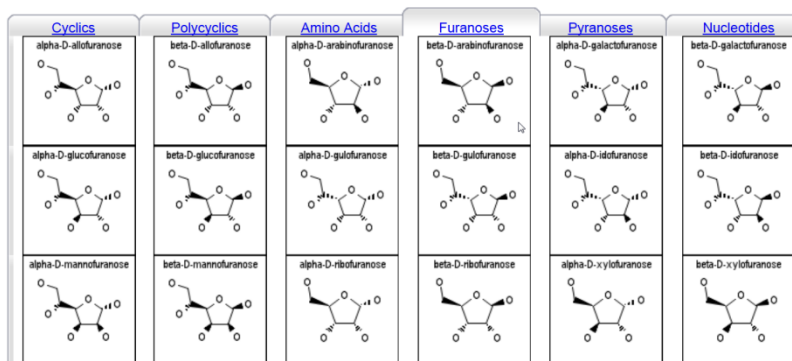
Slika 9.10 Prikaz polja sa unapred definisanim cikličnim strukturama.



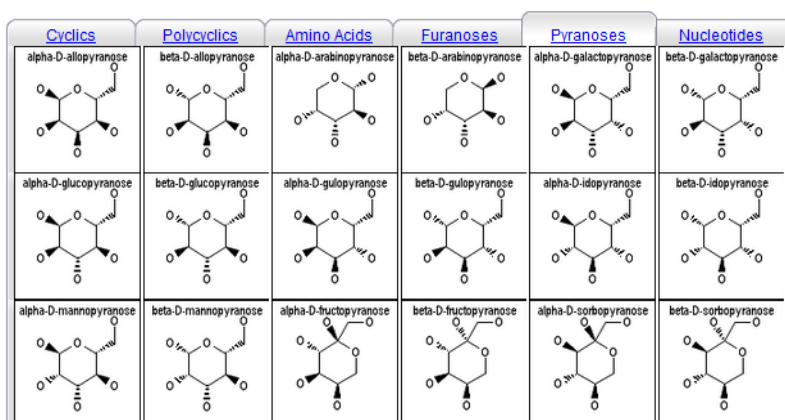
Slika 9.11 Prikaz polja sa unapred definisanim policikličnim strukturama.



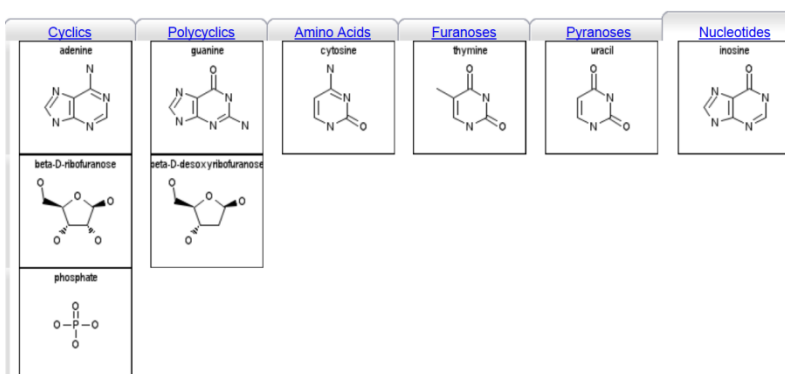
Slika 9.12 Prikaz polja sa unapred definisanim strukturama aminokiselina.



Slika 9.13 Prikaz polja sa unapred definisanim strukturama derivata furana.



Slika 9.14 Prikaz polja sa unapred definisanim strukturama derivata pirana.




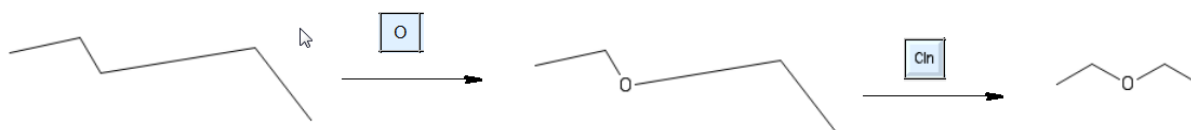
Slika 9.15 Prikaz polja sa unapred definisanim strukturama nukleotida.

U drugom polju sa prečicama, nalazi se skraćena šema periodnog sistema, u kojoj nisu prikazane prečice za prelazne metale, lantanoide i aktinoide. Međutim, do ovih elemenata dolazi se aktiviranjem polja sa crnom strelicom na dole (slika 9.16).



H		?	?						He
Li	Be			B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg			Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Sc	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Y	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Lu	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

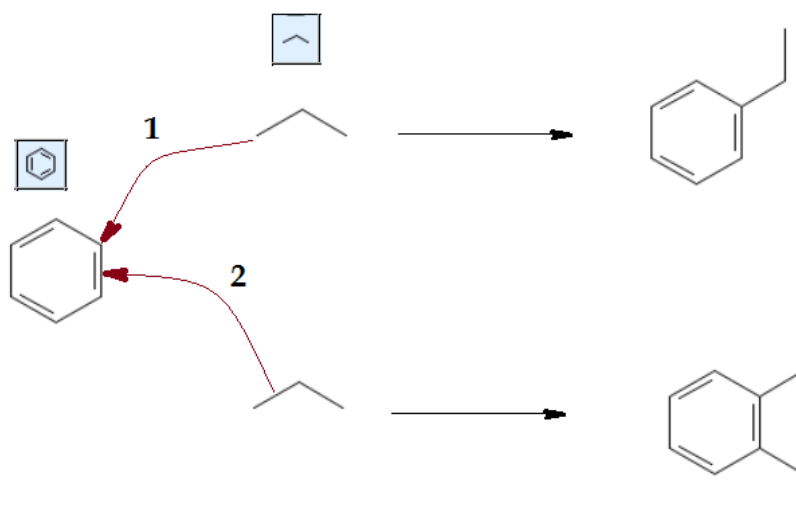
Slika 9.16 Skraćena šema periodnog sistema.

Crtanje struktura u *PubChem Sketcher* programu uglavnom se svodi na korišćenje unapred definisanih struktura, mada se jednostavniji molekuli mogu nacrtati korak po korak. Jedan takav primer, dat je na slici 9.17, na kojoj je prikazan postupak za crtanje molekula dietil etra. Levim dugmetom miša izaberemo ugljenikov atom, iz skraćene šeme periodnog sistema, a zatim, bez puštanja dugmeta, nacrtamo niz od pet ugljenikovih atoma. U drugom koraku, treći ugljenikov atom zamenimo atomom kiseonika. Korišćenjem alatke za čišćenje geometrije, , dobija se struktura sa pravilnom geometrijom.




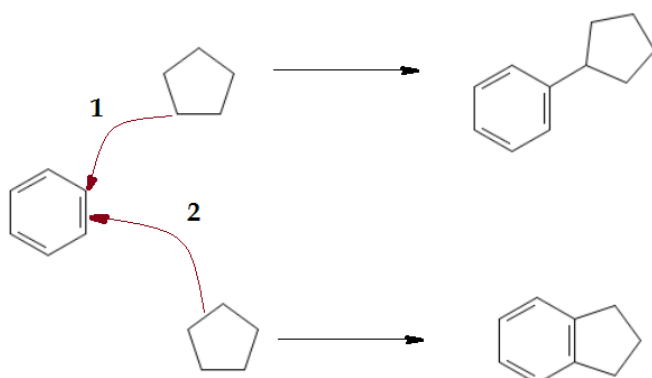
Slika 9.17 Crtanje molekula dietil etra, metodom korak po korak.

Naravno, ovu strukturu je lakše nacrtati korišćenjem alatke  i zamenom trećeg ugljenikovog atoma atomom kiseonika. Pri radu sa unapred definisanim strukturama, postoje dve stvari na koje morate obratiti pažnju, a tiču se spajanja dva fragmenta. Na slici 9.18 prikazana su dva načina spajanja fragmenata. U polje za crtanje, najpre smo uneli strukturu sa benzenovim prstenom, na koji smo želeli da prikačimo etil grupu. Kada aktiviramo alatku za niz od tri ugljenikova atoma, , neophodno je da levim dugmetom miša označimo mesto na benzenovom prstenu za koje će ovaj niz biti prikačen. Ako izaberemo ugljenikov atom benzenovog prstena (put 1), dolazi do stapanja fragmenata, odnosno izabrani ugljenikov atom benzenovog prstena se stapa sa jednim ugljenikovim atomom niza. Kao rezultat dobija se monosupstituisani derivat benzena. Ukoliko posle aktiviranja alatke za niz izaberemo vezu benzenovog prstena, dobija se disupstituisani derivat benzena (put 2).



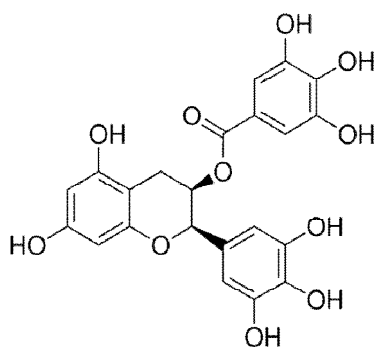
Slika 9.18 Crtanje strukture spajanjem cikličnog fragmenta sa fragmentom otvorenog niza.

Ukoliko spajamo dva ciklična fragmenta, situacija je malo drugačija. Ako posle aktiviranja alatke za unapred definisanu strukturu petočlanog prstena, , izaberemo ugljenikov atom benzena, dolazi do spajanja dva fragmenta preko veze (put 1, slika 9.19). Očigledno, u slučaju dva ciklična fragmenta, ne dolazi do stapanja dva atoma prstena, nego nastanka veze između izabranog atoma početnog prstena (u ovom slučaju benzena) i ugljenikovog atoma drugog cikličnog fragmenta. Ukoliko se selektuje veza benzena, dolazi do stapanja veza dva ciklična jedinjenja, i nastaje kondenzovano jedinjenje (put 2, slika 9.19).



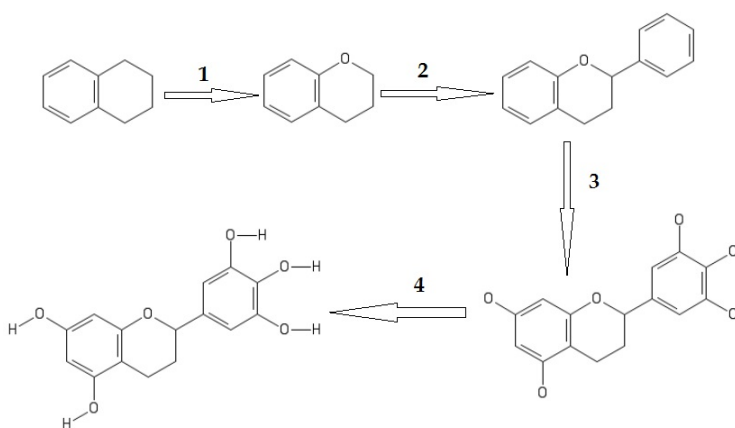
Slika 9.19 Crtanje strukture spajanjem dva ciklična fragmenta.

Pretraga *PubChem* baza podataka zasnovana je na crtanju hemijske strukture traženog jedinjenja, što ćemo ilustrovati na primeru epigalokatehin-galata. Epigalokatehin-galat je jedna od komponenti zelenog čaja, koja je u poslednje vreme predmet opsežnih istraživanja, kojima se nastoji utvrditi njegov uticaj na prevenciju razvoja ćelija tumora. Smatra se da bi ovo jedinjenje moglo inhibirati delovanje enzima koji je odgovoran za umnožavanje ćelija tumora. Strukturna formula ovog jedinjenja prikazana je na slici 9.20.




Slika 9.20 Strukturna formula epigalokatehin-galata.

Da bismo pronašli ovo jedinjenje u bazi podataka, nije potrebno da nacrtamo celu njegovu strukturnu formulu, već samo jedan njen deo. Crtanje fragmenta ovog jedinjenja, koji ćemo koristiti kao početnu strukturu za pretragu *PubChem Compound* baze podataka, ilustrovano je na slici 9.21.



Slika 9.21 Crtanje dela strukture epigalokatehin-galata.

Kada završimo sa crtanjem ovog fragmenta, pretragu otpočinjemo pritiskom na dugme . Prozor *PubChem Sketcher* programa se zatvara i vraćamo se na stranu *PubChem Compound* baze podataka. Slika fragmenta epigalokatehin-galata, koju smo nacrtali, je prikazana u polju kartice *Substructure/Superstructure*, u kome se nalazi i dugme *Search*. Pritiskom na ovo dugme, nastavlja se pretraga *PubChem Compound* baze podataka (slika 9.22).

Slika 9.22 Prikaz kartice *Substructure/Superstructure* sa slikom strukture za pretragu *PubChem Compound* baze podataka.

Pretragom baze *PubChem Compound*, pronađeno je 557 jedinjenja koja u sebi sadrže fragment koji smo nacrtali. Pronađena jedinjenja mogu u potpunosti da odgovaraju strukturi traženog fragmenta (struktura 1, slika 9.23), ili mogu biti složenija jedinjenja koja sadrže ovaj fragment (strukture 2 i 3, slika 9.23). Treće pronađeno jedinjenje (slike 9.23) je epigalokatehin-galat.

Results: 1 to 20 of 557 << First < Prev Page 1 of 28 Next > Last >>

1.  [3,3',4',5,5',7-Flavanhexol; Gallocatechol; 2-\(3,4,5-trihydroxyphenyl\)-3,4-dihydro-2H-chromene-3,5,7-triol ...](#)
 MW: 306.267460 g/mol MF: C₁₈H₁₄O₇
 IUPAC name: 2-(3,4,5-trihydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-chromene-3,5,7-tri...
 CID: 1249
[Summary](#) [Similar Compounds](#) [Same Parent Connectivity](#) [Mixture/Component Compounds](#) [PubMed \(MeSH Keyword\)](#)
 Active in 10 of 68 BioAssays
2.  [5,7-dihydroxy-2-\(3,4,5-trihydroxyphenyl\)-3,4-dihydro-2H-chromen-3-yl 3,4,5-trihydroxybenzoate; AC1L1B55; CHEMBL311663 ...](#)
 MW: 458.371720 g/mol MF: C₂₂H₁₈O₁₁
 IUPAC name: [5,7-dihydroxy-2-(3,4,5-trihydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-chr...
 CID: 1287
[Summary](#) [Similar Compounds](#) [Same Parent Connectivity](#) [Mixture/Component Compounds](#) [Active in 16 of 71 BioAssays](#)
3.  [\(-\)-Epigallocatechin gallate; EGCG; Epigallocatechin gallate ...](#)
 MW: 458.371720 g/mol MF: C₂₂H₁₈O₁₁
 IUPAC name: [(2R,3R)-5,7-dihydroxy-2-(3,4,5-trihydroxyphenyl)-3,4-dihydr...
 CID: 65064
[Summary](#) [Similar Compounds](#) [Same Parent Connectivity](#) [Mixture/Component Compounds](#) [PubMed \(MeSH Keyword\)](#)
 Active in 154 of 770 BioAssays

Slika 9.23 Rezultat pretrage *PubChem Compound* baze podataka.

Biranjem ove strukture otvara se nova strana, sa poljem za dvodimenzionalno i trodimenzionalno prikazivanje strukture, i poljem u kome se nalazi tabela sa sadržajima vezanim za ovu strukturu (slika 9.24).

U okviru ovih sadržaja pojaviće se sve informacije o izabranom jedinjenju koje se nalaze u *PubChem* bazama podataka. Podaci o fizičkim i hemijskim svojstvima će se biti u sadržaju *Chemical and Physical Properties*. Izborom opcije *Literature*, otvoriće se nova strana sa tabelom, u kojoj se nalazi spisak svih naučnih radova u kojima su prikazani rezultati ispitivanja epigalokatehin-galata (slika 9.25).

epigallocatechin gallate

Also known as: (-)-Epigallocatechin gallate, EGCG, Epigallocatechin gallate, Epigallocatechin 3-gallate, Tea catechin, 989-51-5, Epigallocatechin-3-gallate, Teavigo, Catechin deriv.

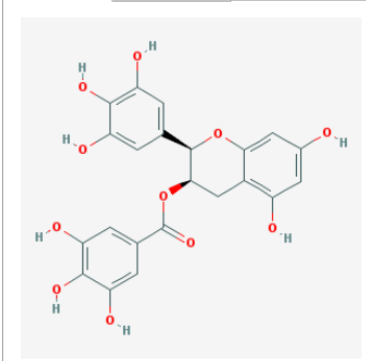
Molecular Formula: C₂₂H₁₈O₁₁ Molecular Weight: 458.37172 InChIKey: WMBWREPUVVBILR-WIYYLYMNSA-N

Table of Contents [Show subcontent titles](#)

- [Identification](#)
- [Related Records](#)
- [Pharmacology](#)
- [Biomedical Effects and Toxicity](#)
- [Literature](#)
- [Patents](#)
- [Biomolecular Interactions and Pathways](#)
- [Biological Test Results](#)
- [Classification](#)
- [Chemical and Physical Properties](#)

[Expand all sub-sections](#)

2D Structure 3D Conformer



Slika 9.24 Prikaz strane *PubChem* sa strukturom epigalokatehin-galata i podacima povezanim sa njom.

Za svaki rad pronađen u bazi podataka dat je identifikacioni broj (*PubMed ID*), datum izdavanja članka, pun naziv i časopis u kome je rad objavljen. Izborom identifikacionog broja preći ćemo na stranicu *PubMed* baze podataka, na kojoj možemo videti apstrakt izabranog rada (slika 9.26).

PubMed ID	Date	Title	Journal
23419524	7-10-2013	TGF- β 1-induced epithelial-mesenchymal transition and acetylation of Smad2 and Smad3 are negatively regulated by EGCG in human A549 lung cancer cells.	Cancer letters
23548906	5-10-2013	Epigallocatechin gallate targeting of membrane type 1 matrix metalloproteinase-mediated Src and Janus kinase/signal transducers and activators of transcription 3 signaling inhibits transcription of colony-stimulating factors 2 and 3 in mesenchymal stromal cells.	The Journal of biological chemistry
23821823	5-1-2013	Effect of epigallocatechin-3-gallate on inflammatory mediators release in LPS-induced Parkinson's disease in rats.	Indian journal of experimental biology
23380242	4-5-2013	Titanium dioxide nanoparticles increase inflammatory responses in vascular endothelial cells.	Toxicology
23345393	4-1-2013	Interaction of members of the heat shock protein-70 family with the macrophage mannose receptor.	Journal of leukocyte biology
23465614	4-1-2013	Anti-adipogenic diarylheptanoids from <i>Alnus hirsuta</i> f. <i>sibirica</i> on 3T3-L1 cells.	Bioorganic & medicinal chemistry letters
23357370	4-1-2013	The activity against Ehrlich's ascites tumors of doxorubicin contained in self assembled, cell receptor targeted nanoparticle with simultaneous oral delivery of the green tea polyphenol epigallocatechin-3-gallate.	Biomaterials

Slika 9.25 Prikaz naučnih radova koji se odnose na epigalokatehin-galat.

Na ovoj strani moguće je, ali ne uvek, preuzeti punu verziju rada (opcija *Get full text* u gornjem desnom uglu). Ukoliko opcija *Get full text* nije uključena, rad možemo pokušati da preuzmemo preko domaćeg servisa KoBSON. Pristup radu i časopisu preko servisa KoBSON će biti dozvoljen samo u slučaju da naučna zajednica Republike Srbije ima plaćenu licencu za preuzimanje radova iz tog časopisa.

NCBI Resources How To Sign in to NCBI

PubMed.gov Search

Advanced Help

Display Settings: Abstract Send to:

[J Biol Chem, 2013 May 10;288\(19\):13378-86. doi: 10.1074/jbc.M113.456533. Epub 2013 Apr 2.](#)

Epigallocatechin gallate targeting of membrane type 1 matrix metalloproteinase-mediated Src and Janus kinase/signal transducers and activators of transcription 3 signaling inhibits transcription of colony-stimulating factors 2 and 3 in mesenchymal stromal cells.

Zaheib A, Lamy S, Annabi B

Author information

Abstract

BACKGROUND: CSF-2 and CSF-3 confer proangiogenic and immunomodulatory properties to mesenchymal stromal cells (MSCs).

RESULTS: Transcriptional regulation of CSF-2 and CSF-3 in concanavalin A-activated MSCs requires MT1-MMP signaling and is inhibited by EGCG.

CONCLUSION: The chemopreventive properties of diet-derived EGCG alter MT1-MMP-mediated intracellular signaling.

SIGNIFICANCE: Pharmacological targeting of MSCs proangiogenic functions may prevent their contribution to tumor development. Epigallocatechin gallate (EGCG), a major form of tea catechins, possesses immunomodulatory and antiangiogenic effects, both of which contribute to its chemopreventive properties. In this study, we evaluated the impact of EGCG treatment on the expression of colony-stimulating factors (CSF) secreted from human bone marrow-derived mesenchymal stromal cells (MSCs), all of which also contribute to the immunomodulatory and angiogenic properties of these cells. MSCs were activated with concanavalin A (ConA), a Toll-like receptor (TLR)-2 and TLR-6 agonist as well as a membrane type 1 matrix metalloproteinase (MT1-MMP) inducer, which increased granulocyte macrophage-CSF (GM-CSF, CSF-2), granulocyte CSF (G-CSF, CSF-3), and MT1-MMP gene expression. EGCG antagonized the ConA-induced CSF-2 and CSF-3 gene expression, and this process required an MT1-MMP-mediated sequential activation of the Src and JAK/STAT pathways. Gene silencing of MT1-MMP expression further demonstrated its requirement in the phosphorylation of Src and STAT3, whereas overexpression of a nonphosphorylatable MT1-MMP mutant (Y573F) abrogated CSF-2 and CSF-3 transcriptional increases. Given that MSCs are recruited within vascularizing tumors and are believed to contribute to tumor angiogenesis, possibly through secretion of CSF-2 and CSF-3, our study suggests that diet-derived polyphenols such as EGCG may exert chemopreventive action through pharmacological targeting of the MT1-MMP intracellular signaling.

Get full text

Final Version [Biol Chem]

Save items

Add to Favorites

Related citations in PubMed

Selective JAK/STAT3 signalling regulates transcription of colony stimulatir [Cytokine. 2013]

Concanavalin-A triggers inflammatory response through JAK/STAT3 signalling [Exp Cell Res. 2012]

Green tea polyphenol (-)-epigallocatechin 3-gallate inhibits [Biochim Biophys Acta. 2002]

Toll-like receptors 2 and 4 mediate the capacity of mesenchymal stromal ce [Exp Cell Res. 2012]

Review The biology and mechanism of action of suppressor of cytokine s [Growth Factors. 2012]

See reviews... See all...

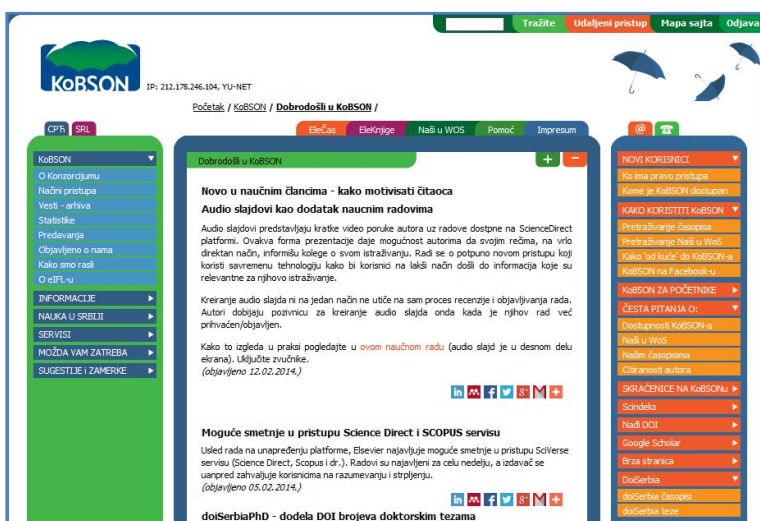
Slika 9.26 Prikaz sažetka izabranog članka.

KoBSON

Konzorcijum biblioteka Srbije za objedinjenu nabavku (**KoBSON**) je oblik organizovanja biblioteka Srbije, sa ciljem nabavke stranih naučnih radova, prelaska sa papirnih izdanja na elektronska, unapređenja pristupa elektronskim informacijama i promocije domaćeg naučnog izdavaštva. U okviru ovog Konzorcijuma napravljen je i internet portal (slika 9.27) na adresi:

<http://kobson.nb.rs/kobson.82.html>

Portal KoBSON je dostupan, bez ikakve nadoknade, svim korisnicima sa akademske mreže Srbije, a od 2004. godine omogućen je i udaljeni pristup ("od kuće", posredstvom komercijalnog provajdera). U okviru portala KoBSON omogućena je pretraga naučnih i stručnih časopisa (EleČas) i knjiga (EleKnjige).



Slika 9.27 Naslovna stranica portala KoBSON.

Pretraživanje časopisa se vrši unosom imena časopisa u okviru polja na kartici EleČas. Na stranici sa rezultatima pretrage dobijamo podatke o ISSN broju časopisa, puno ime časopisa, servisa preko kojih možete preuzeti radove iz tog časopisa, impakt faktoru časopisa i vezu za detaljnije informacije o časopisu. Da biste preuzeli rad iz časopisa potrebno je da izaberete jedan od servisa u kojima su uskladišteni radovi iz tog časopisa. Ukoliko je polje sa servisima prazno to znači da za dati časopis nije plaćena pretplata.

Da biste mogli da preuzmete naučni rad potrebno je da znate punu referencu tog naučnog rada. Puna referenca se sastoji iz naslova rada, imena autora rada, časopisa u kome je rad objavljen, godine objavljivanja, volumena i broja prve i poslednje stranice rada. Puna referenca jednog rada izgleda:

Libman, D., Huang L. "Chemistry on the Go: Review of Chemistry Apps on Smartphones" *Journal of Chemical Education*, **2013**, 90 (3), pp 320–325.

Svaki naučni rad ima i svoj *DOI (Digital Object Identifier)* broj. *DOI* broj služi za veoma lako pronalaženje rada na Internetu. Potrebno je samo da u bilo kom internet pretraživaču ukucate ovaj broj i pojaviće se stranica sa direktnom vezom na taj naučni rad.

Zadatak 1. Od asistenta ćete dobiti trivijalno ime nekog jedinjenja. Potrebno je da prvo pronađete strukturnu formulu tog jedinjenja i njegov CAS broj, zatim u *PubChem* bazi podataka pronađete neka fizička i hemijska svojstva tog jedinjenja, kao i pune reference dva naučna rada u kojima se ispituje to jedinjenje. Na kraju je potrebno da oba rada preuzmete preko KoBSON portala.

Ime jedinjenja - trivijalno _____

Ime jedinjenja - *IUPAC* _____

CAS broj _____

Temperatura topljenja _____

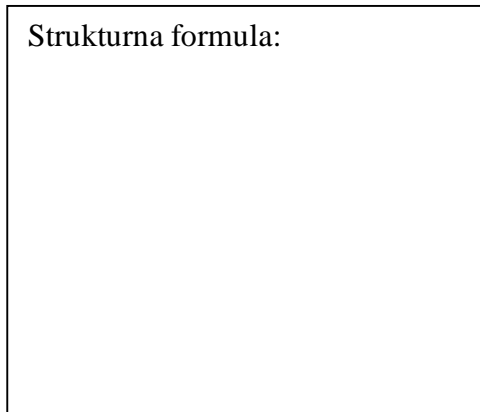
Temperatura ključanja _____

Gustina _____

Puna referenca - rad 1: _____

Puna referenca - rad 2 _____

Strukturna formula:



Zadatak 2. Pomoću portala KoBSON pronađite i preuzmite sledeći naučni rad:

Libman, D., Huang L. "Chemistry on the Go: Review of Chemistry Apps on Smartphones" *Journal of Chemical Education*, **2013**, 90 (3), pp 320–325.

Pronađite i upišite *DOI* broj ovog rada.

DOI broj: _____

Datum

Potpis asistenta

Vežba 10.

Crtanje strukturnih formula - ACD/ChemSketch

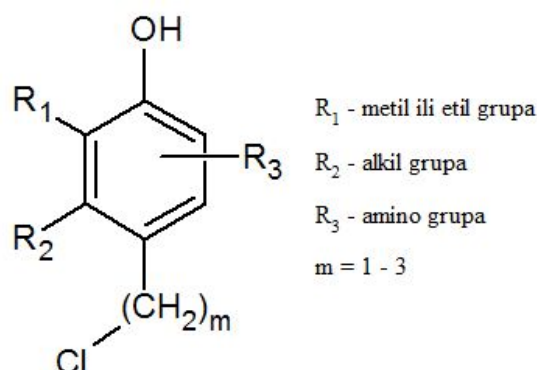
ChemSketch je programski paket, kompanije ACD/Labs, koji je, prvenstveno, namenjen za crtanje strukturnih formula molekula i jona. U ovom programu se mogu veoma lako i jednostavno prikazati strukturne formule organskih, neorganskih, organometalnih i polimernih jedinjenja. Program je, takođe, opremljen i alatkama za prikazivanje Markušovih strukturnih formula*. Postoje dve verzije ChemSketch programa: profesionalna i besplatna. Besplatna verzija sadrži kompletne opcije za crtanje dvodimenzionalnih i trodimenzionalnih strukturnih formula, dodatke za prikazivanje hemijskih reakcija, unost teksta, slika i objekata na radni list, kao i specijalni pomoćni program za izračunavanje oktanol/voda podeonog koeficijenta ($\log P$ vrednost).

Profesionalna verzija programa, osim navedenih, sadrži i dodatne opcije za povezivanje sa bazama podataka kompanije ACD/Labs. Funkcije besplatne verzije programa su sasvim dovoljne za izvršavanje svih zadataka koji su predviđeni planom i programom ovog predmeta. Verziju programa ChemSketch možete preuzeti sa Internet strane:

<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch>

*Markušove strukturne formule su specijalne formule kojima se može predstaviti grupa sličnih jedinjenja. Ove formule se često koriste prilikom prijave patenta, kako bi se patentno zaštitila cela grupa sličnih jedinjenja i sprečila moguća zloupotreba patentnih prava. Često se dešava da dva veoma slična jedinjenja imaju veoma slične ili čak iste hemijske i fizičke osobine. Prikazivanjem zaštićenog jedinjenja Markušovom strukturnom formulom, sprečava se da neko, uz veoma male izmene zaštićenog jedinjenja (na primer, promena položaja metil grupe) dobije jedinjenje sličnih ili istih karakteristika. Primer jedne Markušove strukturne formule dat je na slici

10.1. Uz ovakvu strukturnu formulu obavezno se mora navesti značenje simbola R_1 , R_2 i R_3 kao i dužina niza m .

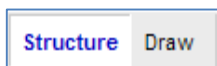


Slika 10.1 Markušova strukturna formula.

Program *ChemSketch* sadrži sledeće režime i mogućnosti:

- režim za crtanje hemijskih struktura;
- režim za unos teksta i grafičkih objekata;
- pretragu prikazane strukture u bazama podataka;
- generisanje imena nacrtane strukture po *IUPAC* nomenklaturi (samo za molekule manje od 50 atoma u besplatnoj verziji programa);
- opcije za automatska izračunavanja i procenu:
 - molekulske mase jedinjenja;
 - procentnog sastava jedinjenja;
 - molarne zapremine;
 - indeksa prelamanja;
 - površinskog napona;
 - gustine;
 - dielektrične konstante;
 - polarizabilnosti;
 - fragmentacije u masenom spektru.

U programu *ChemSketch* postoje dva režima rada, *Structure* i *Draw*, koji se mogu naizmenično koristiti. Prebacivanje iz jednog u drugi režim rada se vrši izborom alatki *Structure* i *Draw*, koje se nalaze u gornjem levom uglu aktivnog prozora (slika 10.2).



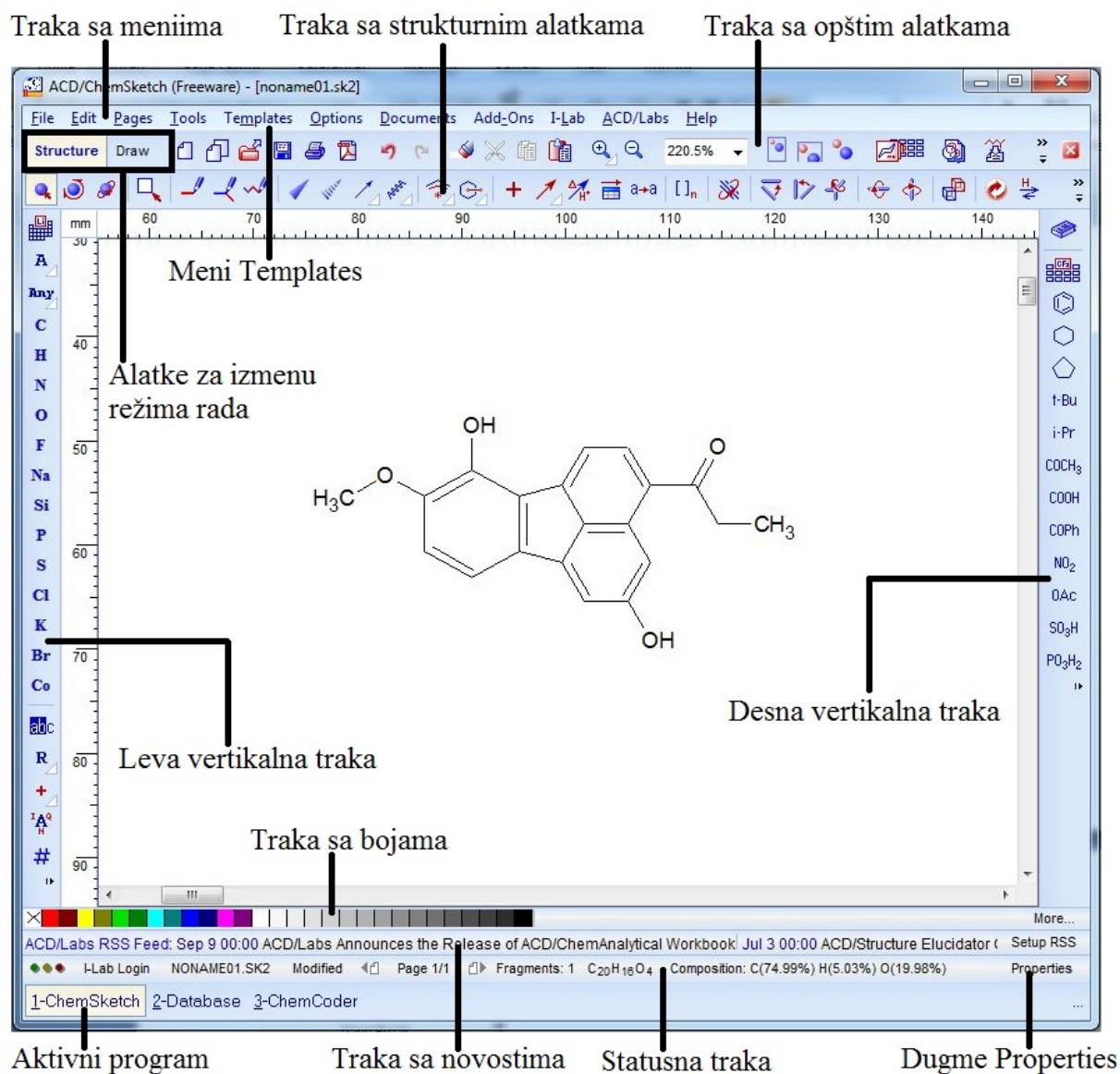
Slika 10.2 Alatkice za izmenu režima rada.

Rad u režimu *Structure*

Režim *Structure* koristi se za crtanje hemijskih struktura i reakcionih šema, dok se u režimu *Draw* nalaze alatkice namenjene za unos teksta, slika i različitih geometrijskih objekata.

Aktivni prozor programa *ChemSketch* u režimu *Structure* prikazan je na slici 10.3. Centralni deo prozora zauzima površina za crtanje. Iznad površine za crtanje nalaze se dve horizontalne trake sa alatkama: traka sa strukturnim alatkama (*Structure toolbar*) i traka sa opštim alatkama (*General toolbar*). Iznad njih nalazi se traka sa meniima i naslovna traka. Sa leve i desne strane površine za crtanje nalazi se po jedna vertikalna traka sa alatkama. Ispod površine za crtanje nalazi se traka sa bojama pomoću koje se može menjati boja izabrane strukture ili dela strukture. Ispod trake sa bojama je traka sa novostima, na kojoj se objavljuju novosti iz ponude kompanije




















ACD/Labs a ispod nje je statusna traka na kojoj su ispisane određene osobine molekula koji je nacrtan. Na samom dnu radnog prozora nalaze se dugmad za brzo prebacivanje iz jednog u drugi program u okviru *ChemSketch* programskog paketa.



Slika 10.3 Aktivni prozor programa *ChemSketch* u režimu *Structure*.

Prikaz nekih od alatki koje se nalaze na traci sa opštim alatkama (*General Toolbar*) u režimu *Structure*, sa oznakama naredbi koje predstavljaju i definicijom namene, date su tabeli 10.1.

Tabela 10.1 Alatkke iz trake sa opštim alatkama.

Alatka	Naredba	Namena
	<i>New Document</i>	Otvaranje novog dokumenta.
	<i>New Page</i>	Otvaranje nove strane.
	<i>Open File</i>	Otvaranje nove datoteke.
	<i>Save File</i>	Čuvanje datoteke.
	<i>Print</i>	Štampanje dokumenta.
	<i>Export to PDF</i>	Prebacivanje dokumenta u PDF format.
	<i>Undo</i>	Poništavanje prethodne radnje.
	<i>Redo</i>	Ponovno aktiviranje poništene radnje.
	<i>Delete</i>	Brisanje nekog segmenta.
	<i>Cut</i>	Isecanje sadržaja.
	<i>Copy</i>	Kopiranje sadržaja.
	<i>Paste</i>	Postavljanje isečenog ili kopiranog sadržaja na izabrano mesto.
	<i>Full Page</i>	Prikazivanje cele radne strane.
	<i>Page Width</i>	Prikazivanje gornje polovine radne strane.
	<i>Fit All</i>	Prikazivanje dela radne strane u kojoj se nalazi sadržaj.
	<i>Template Window</i>	Otvaranje prozora sa unapred definisanim (templatnim) strukturama.
	<i>Generate Name</i>	Ispisivanje <i>IUPAC</i> imena prikazane strukture.
	<i>3D Viewer</i>	Trodimenzionalno (3D) prikazivanje strukture.
	<i>Calculate logP</i>	Računanje <i>logP</i> vrednosti za prikazanu strukturu.

Program *ChemSketch* je povezan sa pojedinim literaturnim bazama podataka, tako da je omogućena direktna pretraga baze podataka pomoću struktura nacrtanih u ovom programu. Potrebno je samo izabrati nacrtanu strukturu i pritisnuti odgovarajuću alatku iz trake sa opštim alatkama (slika 10.4). Među povezanim bazama, nalazi se i *PubChem* baza koju smo detaljnije obradili na prošlom času.



Slika 10.4 Alatke za povezivanje sa bazama podataka.

Alatke koje se nalaze u traci sa strukturnim alatkama (*Structure Toolbar*) namenjene su za crtanje struktura, hemijskih jednačina, optimizaciju struktura, kao i za selektovanje, pomeranje i rotiranje nacrtanih struktura. Prikaz alatki koje se nalaze na ovoj traci, sa oznakama naredbi koje predstavljaju i definicijom namene, date su tabelama 10.2 i 10.3.

Tabela 10.2 Alatke iz trake sa strukturnim alatkama koje služe za crtanje struktura molekula, hemijskih jednačina i optimizaciju geometrije.



























Alatka	Naredba	Namena
	<i>Draw Normal</i>	Normalno crtanje struktura.
	<i>Draw Continuous</i>	Kontinuirano crtanje struktura.
	<i>Draw Chains</i>	Crtanje lančanih struktura.
	<i>Up Stereo Bonds</i>	Prikazivanje veze koja se nalazi ispred radne površine.
	<i>Down Stereo Bonds</i>	Prikazivanje veze koja se nalazi iza radne površine.
	<i>Coordinating Bonds</i>	Prikazivanje koordinacione veze.
	<i>Undefined Stereo Bonds</i>	Prikazivanje prostorno nedefinisane veze.
	<i>Solid Delocalization Curve</i>	Prikaz delokalizacije elektrona.
	<i>Markush Bond</i>	Crtanje Markušovih struktura.
	<i>Reaction Plus</i>	Ubacivanje plusa u reakcionu šemu.
	<i>Reaction Arrow</i>	Reakciona strelica.
	<i>Reaction Arrow Labeling</i>	Za unošenje uslova reakcije iznad i ispod strelice.
	<i>Polymers</i>	Zagrade za označavanje polimernih struktura.
	<i>Instant Template</i>	Alatka za korišćenje izabrane strukture kao templatne.
	<i>Clean Structure</i>	Sređivanje prikazane strukture.
	<i>3D Optimization</i>	Trodimenzionalna optimizacija izabrane strukture.


Tabela 10.3 Alatkne iz trake sa strukturnim alatkama koje služe za izbor, pomeranje i rotiranje nacrtanih struktura.

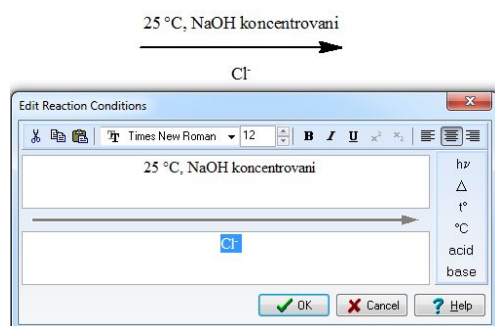
Alatka	Naredba	Namena
	<i>Lasso On/Off</i>	Biranje strukture ili šeme.
	<i>Select/Move</i>	Translacija izabrane strukture u ravni radne površine.
	<i>Select/Rotate/Resize</i>	Rotacija izabrane strukture u ravni radne površine.
	<i>3D Rotation</i>	Prostorna rotacija izabrane strukture.
	<i>Change position</i>	Zamena mesta atoma u grupi.
	<i>Set Bond Horizontally</i>	Podešavanje izabrane veze u horizontalni položaj.
	<i>Set Bond Vertically</i>	Podešavanje izabrane veze u vertikalni položaj .
	<i>Flip on Bond</i>	Rotacija strukture za 180° oko selektovane veze.
	<i>Flip Top to Bottom</i>	Okretanje strukture s vrha na dno.
	<i>Flip Left to Right</i>	Okretanje strukture s desna na levo.

Beli trougao u donjem desnom uglu alatke, označava da u sklopu te alatke ima dodatnih opcija, koje će biti prikazane ako pritisnete taj trougao. Tako, na primer, ako pritisnete beli trougao alatke za umetanje reakcione strelice, pojaviće se tabela sa različitim oblicima i namenama strelica (slika 10. 5)




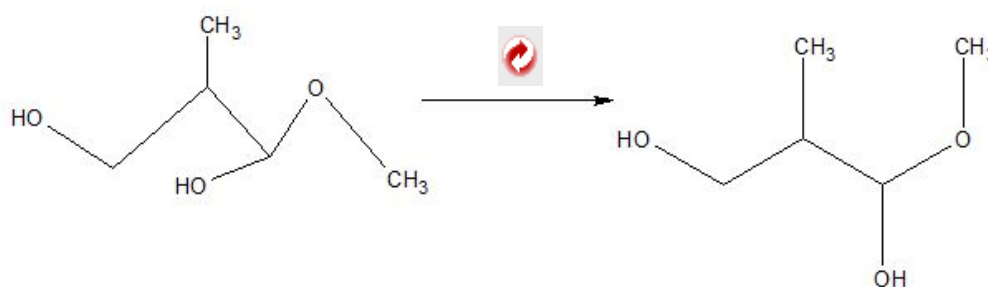
Slika 10.5 Različiti oblici reakcionih strelica.

Većina alatki iz ove trake je veoma intuitivna i lako je zaključiti čemu služe, tako da ih nećemo detaljnije objašnjavati. Alatka za unošenje uslova reakcije iznad i ispod strelice, , se koristi tako što prvo aktivirate tu alatku, a zatim izaberete neku već unetu strelicu. Otvoriće se novi prozor sa dva okna (slika 10.6); gornje okno sliži za unos podataka koji će biti sa gornje strane strelice, a donje za unos podataka koji će biti sa donje strane strelice. U okviru ovog prozora možete menjati veličinu i vrstu fonta ispisa teksta na strelici, umetati simbole, umetati znakove u indeks i eksponent, itd.



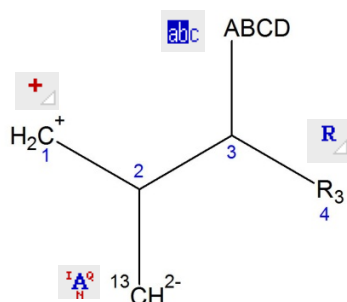
Slika 10.6 Alatka za unošenje uslova reakcije iznad i ispod strelice.

Alatka koju ćete često koristiti a čija funkcija nije odmah najjasnija je alatka za sređivanje prikazane strukture, . Prilikom crtanja strukture ne morate voditi računa da sve veze budu iste dužine i pod odgovarajućim uglom. Dovoljno je da samo, kako god, nacrtate strukturu i pritisnete alatku za sređivanje strukture, da biste dobili sređenu strukturu sa svim vezama iste dužine i odgovarajućim uglovima između veza. Funkcija alatke za sređivanje strukture je prikazana na slici 10.7.




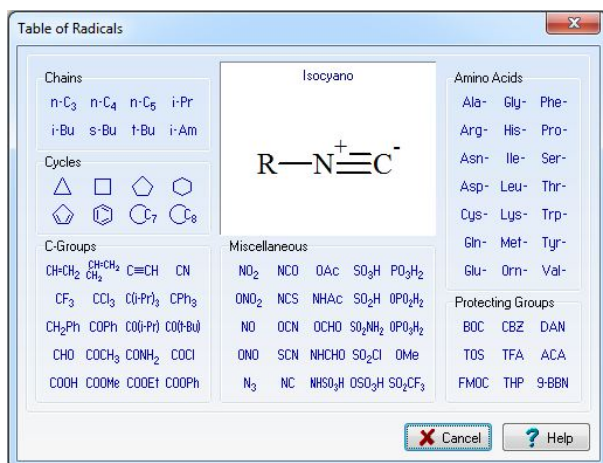
Slika 10.7 Upotreba alatke za sređivanje strukture.

Sa leve i desne strane površine za crtanje nalaze se dve kolone sa alatkama. Sa leve strane nalaze se alatke za promenu osnovnog atoma (tetraedarski ugljenikov atom), kao i za promenu oznaka i simbola atoma, dodavanje oznake jona, izotopa, itd. Upotreba ovih alatki je ilustrovana na slici 10.8.



Slika 10.8 Upotreba alatki za promenu oznaka i simbola atoma.






U koloni sa desne strane se nalaze se alatke za umetanje unapred definisanih delova struktura (radikala). Tabela sa svim radikalima (slika 10.9) se može dobiti izborom alatke *Table of Radicals*, . Neki, najčešće korišćeni delovi struktura, osim što se nalaze u tabeli, izdvojeni su kao posebne alatke u ovoj koloni.



Slika 10.9 Tabela sa unapred definisanim delovima struktura (*Table of Radicals*).

Upotreba nekih alatki iz ove dve vertikalne kolone je detaljnije objašnjenja u tabeli 10.4.

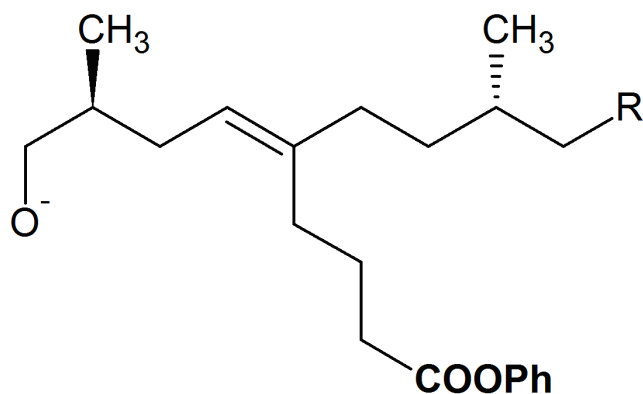
Tabela 10.4 Prikaz nekih alatki koje se nalaze u vertikalnim kolonama.

Alatka	Naredba	Namena
	<i>Edit Atom Label</i>	Promena oznake selektovanog atoma; možete izabrati neku od postojećih oznaka ili uneti oznaku koju želite.
	<i>Radical Label</i>	Označavanje položaja alkil supstituenata u strukturi.
	<i>Increment Charge</i>	Označavanje naelektrisanja u strukturi.
	<i>Atom Chemical Properties</i>	Podešavanje hemijskih osobina selektovanih atoma.
	<i>Table of Radicals</i>	Paleta radikala koji se koriste kao kalup za nadograđivanje.


Prilikom crtanja nove strukture možemo crtati celu strukturu od početka dodavanjem jednog po jednog atoma. Ovakav način crtanja se praktikuje za crtanje jednostavnijih acikličnih molekula. Složenije strukture se mnogo lakše crtaju ako se počne od unapred definisanih (templatnih) struktura koje mogu da posluže kao osnova za dalje nadograđivanje. U nastavku ove vežbe ćemo detaljno objasniti (korak po korak) način crtanja strukturnih formula u programu *ChemSketch*.

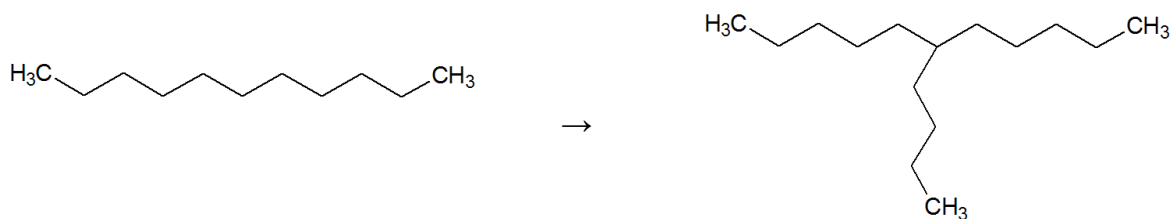
Crtanje acikličnih struktura


Potrebno je nacrtati strukturnu formulu anjona prikazanog na slici 10.10.

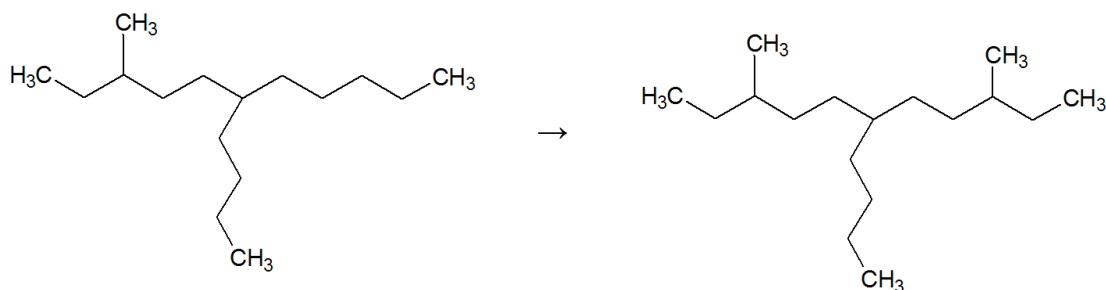


Slika 10.10 Strukturna formula anjona.

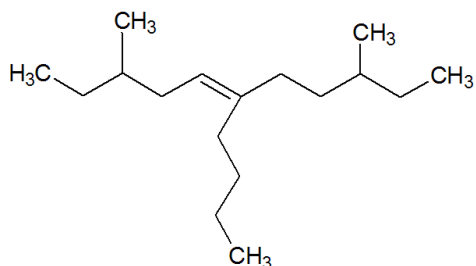
Korak 1. Korišćenjem alčke *Draw Chains* () nacrtajte normalni niz ugljovodonika od jedanaest ugljenikovih atoma, a zatim na šesti ugljenikov atom, prikažite niz od četiri ugljenikova atoma, sa linearnim rasporedom, korišćenjem iste alatke.





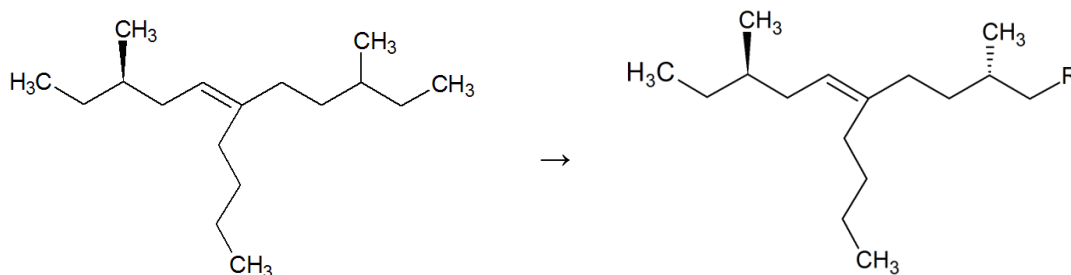
Korak 2. Korišćenjem alčke *Draw Normal* () dodajte po jednu metil grupu na treći i na deveti ugljenikov atom osnovnog niza.



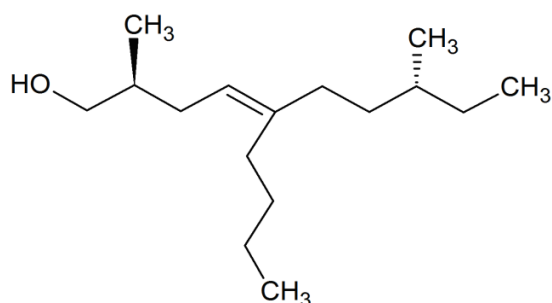
Korak 3. Umetanje dvostruke veze postiže se pritiskom levog dugmeta miša na vezu koju želimo da modifikujemo. Prvim pritiskom dugmeta miša na prostu vezu, ona se pretvara u dvostruku vezu, ponovnim pritiskom dugmeta miša dobija se trostruka veza. Umetnite dvostruku vezu između petog i šestog ugljenikovog atoma osnovnog niza.





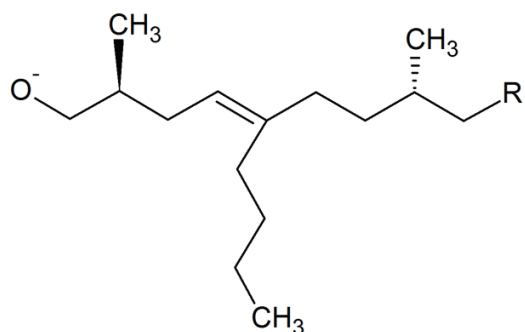
Korak 4. Pomoću alatki za prostorno prikazivanje veza ( i ), metil grupu na trećem ugljenikovom atomu postavite u položaj ispred radne površine, a metil grupu na devetom ugljenikovom atomu postavite u položaj iza radne površine.




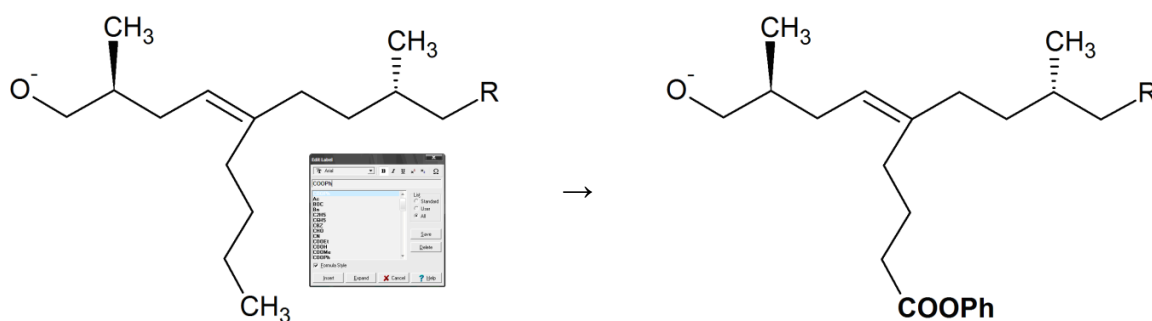
Korak 5. Zamena ugljenikovog atoma vrši se tako, što se najpre odabere tip atoma kojim želite da zamenite ugljenikov atom (paleta sa atomima se nalazi u levoj vertikalnoj koloni). U ovom slučaju selektujete atom kiseonika, a zatim levim dugmetom miša izaberite atom koji želite da zamenite, a to je ugljenikov atom na položaju 1.




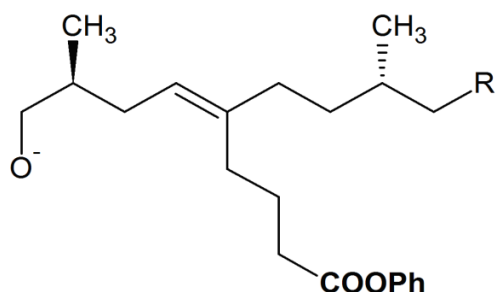
Korak 6. Podešavanje naelektrisanja vrši se pomoću alatke *Increment Charge* (), izborom atoma kojem želite da dodelite naelektrisanje. Metil grupa osnovnog niza se zamenjuje nedefinisanim alkil grupom (R), korišćenjem alatke za unos alkil supstituenta u strukturu ().



Korak 7. Pomoću alatke *Edit Atom Label* () može se izvršiti zamena funkcionalnih grupa. Aktivirajte ovu alatku a zatim izaberite grupu koju želite da zamenite. Otvariće se prozor u kome se nalazi spisak ponuđenih funkcionalnih grupa. Izborom fenil-estarske grupe (COOPh) i pritiskom na dugme *Insert* izvršićete zamenu. Napomena, ukoliko se željena grupa ne nalazi na ponuđenoj listi funkcionalnih grupa, možete je sami uneti u predviđeno polje.

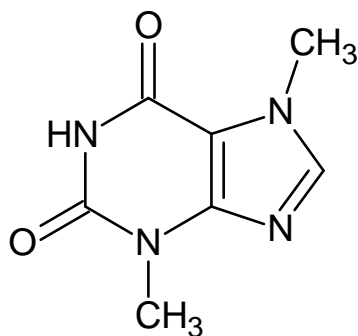


Korak 8. Pomoću alatke za za sređivanje strukture () izjednačite sve dužine veza i uglove. Nacrtali ste traženu strukturu anjona.



Crtanje složenijih cikličnih struktura sa kondenzovanim prstenovima

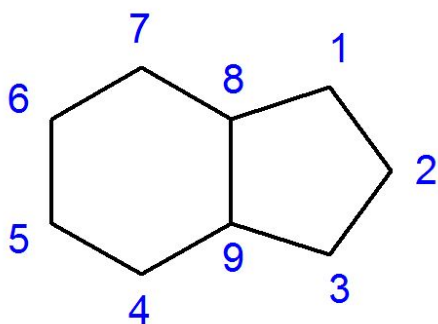
Kreiranje **kondenzovanih struktura** vrši se jednostavnim slepljivanjem dva prstena. Alkaloid teobromin (slika 10.11) je dobar primer jedinjenja sa kondenzovanim prstenom. Nacrtajmo, korak po korak, strukturu ovog jedinjenja.



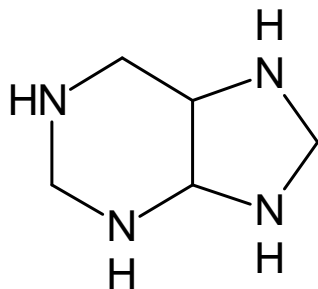
Slika 10.11 Strukture alkaloida teobromina.

Korak 1. Prvo je potrebno napraviti kondenzovani sistem od šestočlanog i petočlanog prstena. Iz kolone sa alatkama sa desne strane izaberite strukturu šestočlanog prstena i unesite je na površinu za crtanje. Zatim, iz iste kolone sa alatkama, izaberite strukturu petočlanog prstena i postavite pokazivač miša na šestočlani prsten na površini za crtanje.

Kada pomerate pokazivač miša, *ChemSketch* će prikazivati različite načine vezivanja dva prstena: kondenzovanje preko dva zajednička ugljenikova atoma ili povezivanje dva prstena jednostrukom vezom. Kada se prikaže način vezivanja koji želite (povezivanje prstena preko dva zajednička ugljenikova atoma), pritisnite levo dugme miša da biste spojili dva prstena.

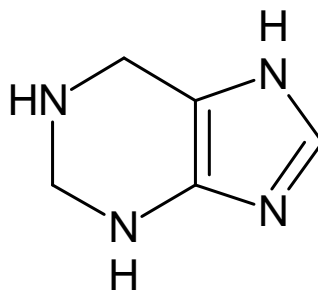



Korak 2. Zamenite ugljenikove atome na položajima 1, 3, 4 i 6 atomima azota.

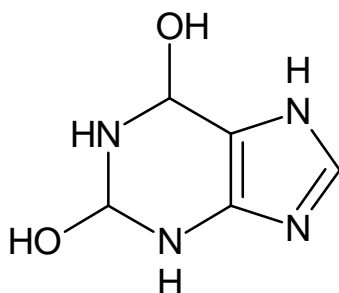


Korak 3. Umetnite dvostruke veze između atoma azota na položaju 3 i atoma ugljenika na položaju 2, kao i između atoma ugljenika na položajima 8 i 9.

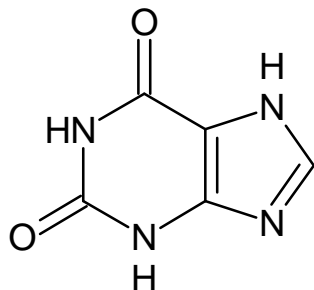
Podsetnik: dvosrtuka veza se umeće pritiskom levog dugmeta miša na vezu koju želimo da modifikujemo.




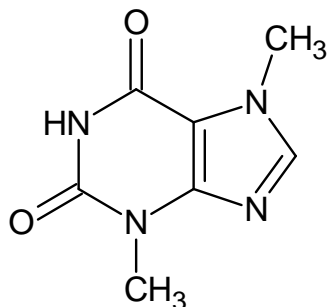
Korak 4. Iz kolone sa alatkama sa leve strane površine za crtanje izaberite kiseonik i pomoću altke *Draw Normal* (), prikačiti dve hidrosilne grupe na ugljenikove atome na položajima 5 i 7.



Korak 5. Pretvorite veze između ugljenika i kiseonika u dvostruke. Primetite kako se OH grupa automatski menja u O kada se umetne dvostruka veza.

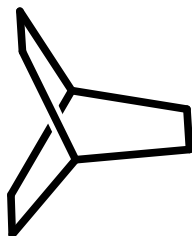


Korak 6. Pomoću alтке *Draw Normal* () , prikačiti dve metil grupe za atome azota na položajima 1 i 4 kondenzovanog prstena. Nacrtali ste strukturu alkaloida teobromina.




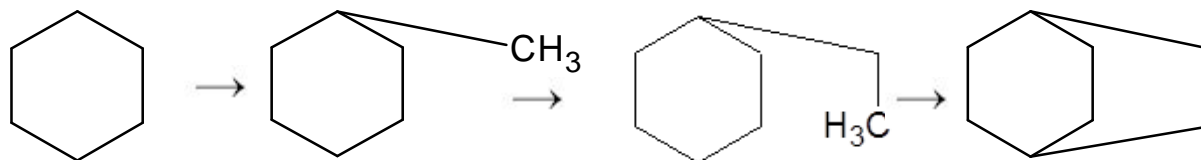
Crtanje bicikličnih struktura i 3D optimizacija molekula


Crtanje bicikličnih struktura prikazaćemo na primeru biciklo[2,2,2]oktana, čija je struktura prikazana na slici 10.12. Da bismo potpuno razumeli strukturu ovog jedinjenja, potrebno je da ga prikazemo kao trodimenzionu strukturu.




Slika 10.12 Struktura biciklo[2,2,2]oktana.

Korak 1. Iz palete radikala izaberite strukturu šestočlanog zasićenog prstena. Pomoću alatke *Draw Normal* () nacrtajte most od dva ugljenikova atoma, prevlačenjem, kao što je prikazano na sledećoj šemi:

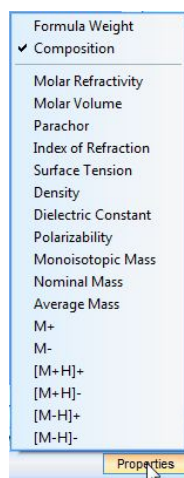


Korak 2. Izaberite dugme za *3D optimizaciju* () da biste dobili *3D model* nacrtane strukture. Pre optimizacije, struktura mora biti izabrana. Nakon optimizacije, struktura može izgledati nepregledno, jer program automatski ubacuje atome vodonika. Uklanjanje atoma vodonika vrši se naredbom *Remove Explicit Hydrogens*, koja se nalazi u padajućem meniju opcije *Tools*. Nakon uklanjanja atoma vodonika, struktura izgleda kao na slici 10.12.

Alatka za trodimenzionalnu optimizaciju molekula, na osnovu nekoliko jednostavnih pravila, pretvara dvodimenzionalnu strukturnu formulu u trodimenzionalnu geometriju. Prikazana geometrija molekula je samo aproksimacija prave geometrije molekula. Za određivanje prave geometrije molekula, potrebno je uraditi mnogi ozbiljnije proračune, od onih koje koristi program *ChemSketch*. Pomoću alatke za trodimenzionalnu rotaciju molekula,  , možete rotirati molekul na površini za crtanje i steći osećaj o međusobnom položaju atoma ugljenika u tom molekulu.

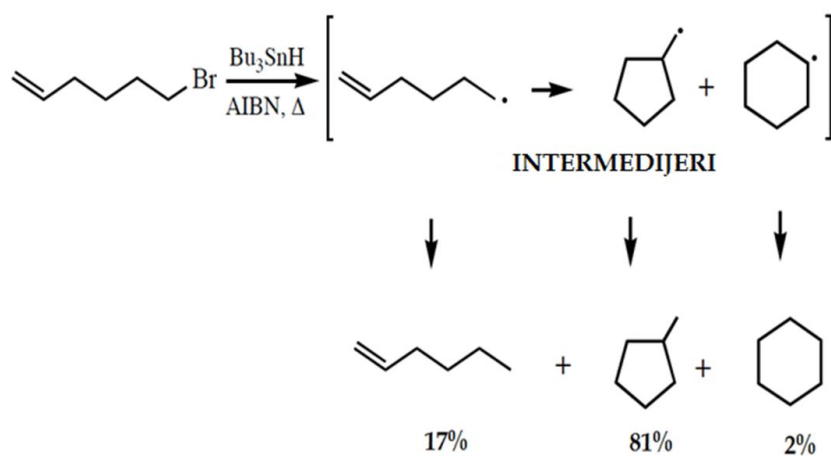
Svojstva jedinjenja

Sa desne strane statusne trake nalazi se dugme *Properties*. Pritiskom na ovo dugme pojaviće se lista (slika 10.13) sa spiskom svojstava izabranog molekula koje *ChemSketch* može da izračuna ili proceni. Izračunate ili procenjene vrednosti biće prikazane na statusnoj traci programa *ChemSketch*.

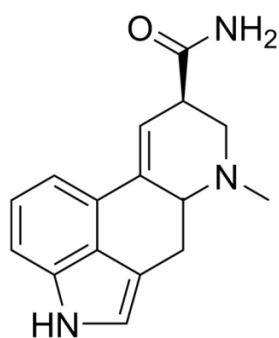


Slika 10.13 Lista sa svojstvima izabranog molekula. Svojstva označena na ovoj listi biće prikazana na statusnoj traci programa *ChemSketch*.

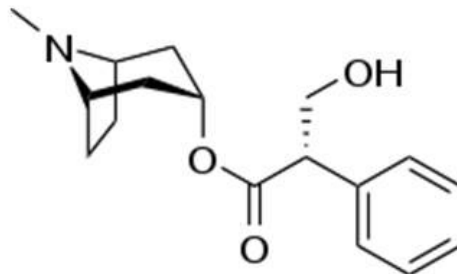
Zadatak 1. Nacrtajte reakcionu šemu prikazanu na slici ispod.



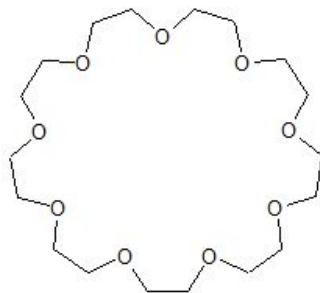
Zadatak 2. Nacrtajte strukturu alkaloida ergina, prikazanog na slici ispod.



Zadatak 3. Nacrtajte strukturu alkaloida, prikazanog na slici ispod.



Zadatak 4. Nacrtajte strukturu krunskog etra prikazanog na slici ispod. Pomoću dugmeta *Properties* odredite njegovu molarnu masu, procentni sadržaj ugljenika, kiseonika i vodonika, molarnu zapreminu i polarizabilnost.



Mr=_____; %C=_____; %O=_____; %H=_____;

MV²⁰ = _____; α =_____;

Zadatak 5. Na Internetu pronađite strukturu jednog veoma zanimljivog molekula - adamantina. Ovaj molekul se sastoji iz četiri kondenzovana cikloheksanska prstena. Na osnovu podataka dobijenih na Internetu u programu *ChemSketch* nacrtajte dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu strukturu ovog molekula. Nacrtane strukture precrtajte u odgovarajuća polja.

2D struktura molekula adamantina

3D struktura molekula adamantina

Datum







Potpis asistenta






Vežba 11.

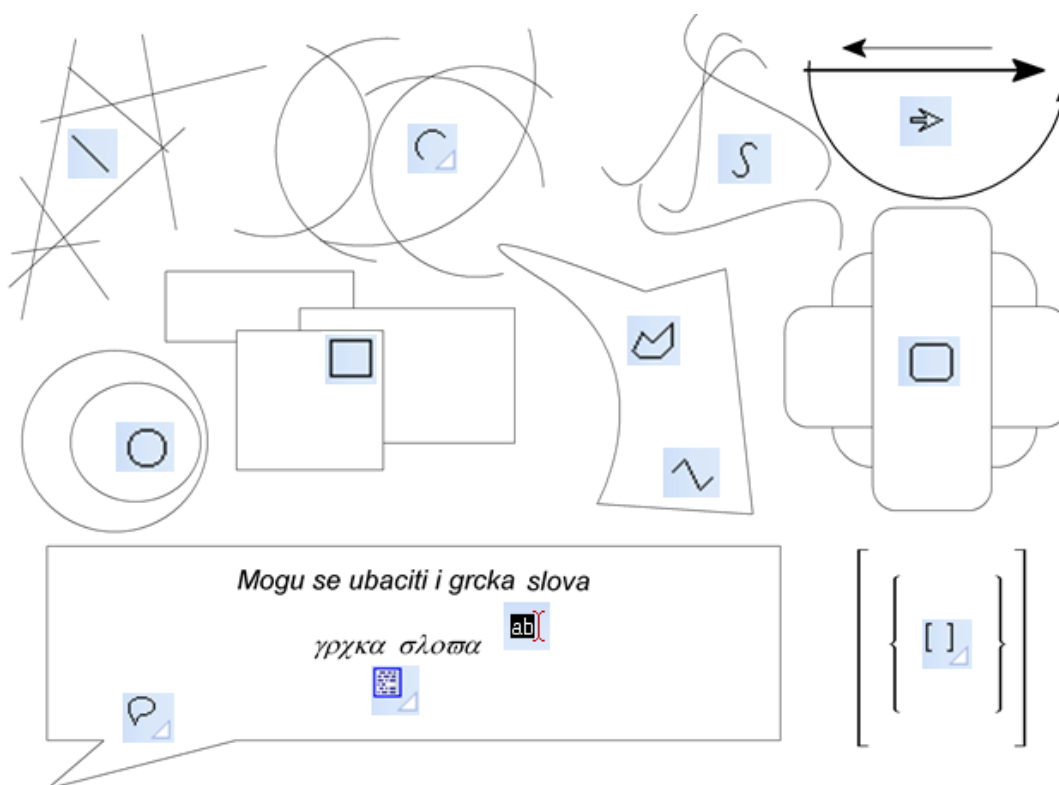
ACD/ChemSketch - režim Draw

Režim *Draw* koristi se za unos teksta, slika i različitih geometrijskih objekata na površinu za crtanje. Radna površina u režimu *Draw*, takođe, se sastoji od površine za crtanje i alatki, organizovanih u dve horizontalne trake na vrhu prozora i samo jednoj vertikalnoj koloni. Alatkama koje se nalaze u traci sa opštim alatkama su iste kao i u režimu *Structure*. Alatkama koje se nalaze u traci sa alatkama za crtanje su namenjene za crtanje struktura, jednačina hemijskih reakcija, optimizaciju struktura, selektovanje, pomeranje i rotiranje nacrtanih struktura, kao i za uređivanje slika i unetog teksta. Svi ostali delovi radne površine su isti kao i u režimu *Structure*. Prikaz alatki koje se nalaze u traci sa alatkama za crtanje, sa oznakama naredbi koje predstavljaju i definicijom namene, dat je u tabeli 11.1.

Tabela 11.1 Prikaz alatki koje se nalaze u traci sa alatkama za crtanje režima *Draw*.

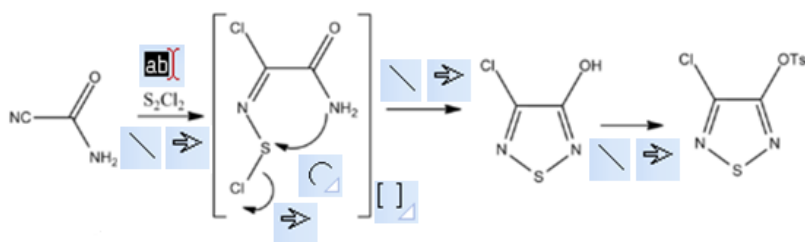
Alatka	Naredba	Namena
	<i>Select/Move/Resize</i>	Selektovanje, pomeranje u ravni radne površine i promena veličine.
	<i>Select/Move/Rotate</i>	Selektovanje, pomeranje u ravni radne površine i rotacija.
	<i>Edit Nodes</i>	Uređivanje slike.
	<i>Edit Text</i>	Umetanje teksta.
	<i>Group/Ungroup</i>	Grupisanje više objekata u jedan ili razdvajanje složenog objekata na pojedinačne.
	<i>Bring to Front</i> <i>Send to Back</i>	Za određivanje nivoa objekata koji se preklapaju. Objekat koji je ispred (<i>Front</i>) će prekrivati objekat koji je iza (<i>Back</i>).

Alatke koje se nalaze u vertikalnoj koloni sa leve strane površine za crtanje namenjene su za unos geometrijskih objekata, slika () , tabela () polja sa tekстом () , zagrada () i oblačića () . Namena ostalih alatki iz vertikalne kolone sa alatkama je prilično intuitivna. Na slici 11.1 je grafički ilustrovana upotreba ovih alatki. Pored svake alatke je prikazan objekat koja ta alatka ispisuje na površini za crtanje.





Slika 11.1 Šematski prikaz primene nekih alatki za unos geometrijskih objekata.



Pažljivim čitanjem primetićete da postoje naredbe koje se nalaze u oba režimu. Jedna od njih je naredba za unos teksta. Prednost unosa teksta u režimu *Draw* je što se mogu umetnuti i slova grčkog alfabeta i ostali simboli, a nudi i mogućnost formatiranja teksta, kao i mogućnost unosa teksta u indeks i eksponent. Druga zajednička alatka je alatka za umetanje strelica. Alatka za umetanje strelica u režimu *Draw* nudi mogućnost unosa i paraboličnih strelica, koje se često koriste kod prikazivanja mehanizama hemijskih reakcija (slika 11.2).







Slika 11.2. Šematski prikaz primene nekih alatki iz režima *Draw*.

Za razliku od režima *Structure*, u režimu *Draw*, strzelice se umeću izborom dve alatke. Prvom alatkom biramo oblik strelice (prav, paraboličan, u obliku slova S ili Z), a drugom alatkom upućujemo da se linija završi strelicom.




 i  - za prikazivanje pravih strelica;

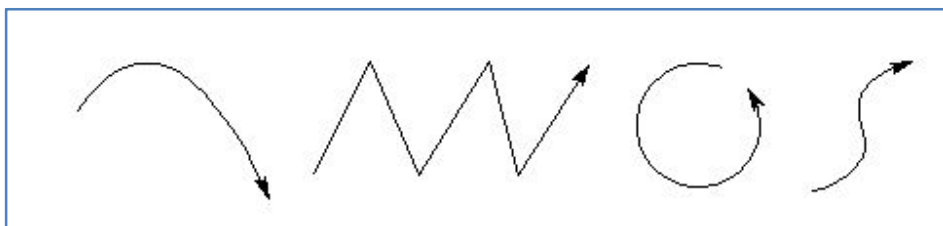
 i  - za prikazivanje paraboličnih strelica;

 i  - za prikazivanje strelica u obliku slova S;


 i  - za prikazivanje strelica u obliku slova Z.

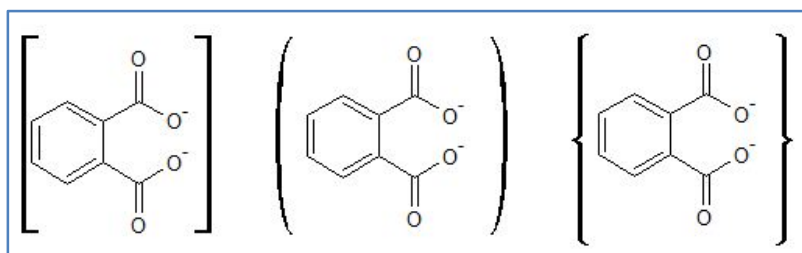
Jednom umetnutu strelicu ili bilo koji drugi objekat možete dodatno modifikovati pomoću alatki

,  i . Izaberite strelicu ili neki drugi objekat, aktivirajte neku od tri prikazane alatke i povlačite mišem crne kvadratiće koji će se pojaviti oko izabranog objekta. Uz malo vežbe možete se izveštiti i praviti strelice zaista neobičnog oblika (slika 11.3).






Slika 11.3 Strelice neobičnog oblika koje se mogu napraviti u programu *ChemSketch*.

Često, prilikom prikazivanja mehanizma hemijskih reakcija, strukture intermedijera i prelaznih stanja se stavljaju u zagrade da bi se naglasilo sa su u pitanju hemijske vrste kratkog života. U programu *ChemSketch* zagrade, željene veličine, možete umetati pomoću alatke . Postoji tri vrste zagrada: iskrivljenje (), uglaste [] i vitičaste { } (slika 11.4).




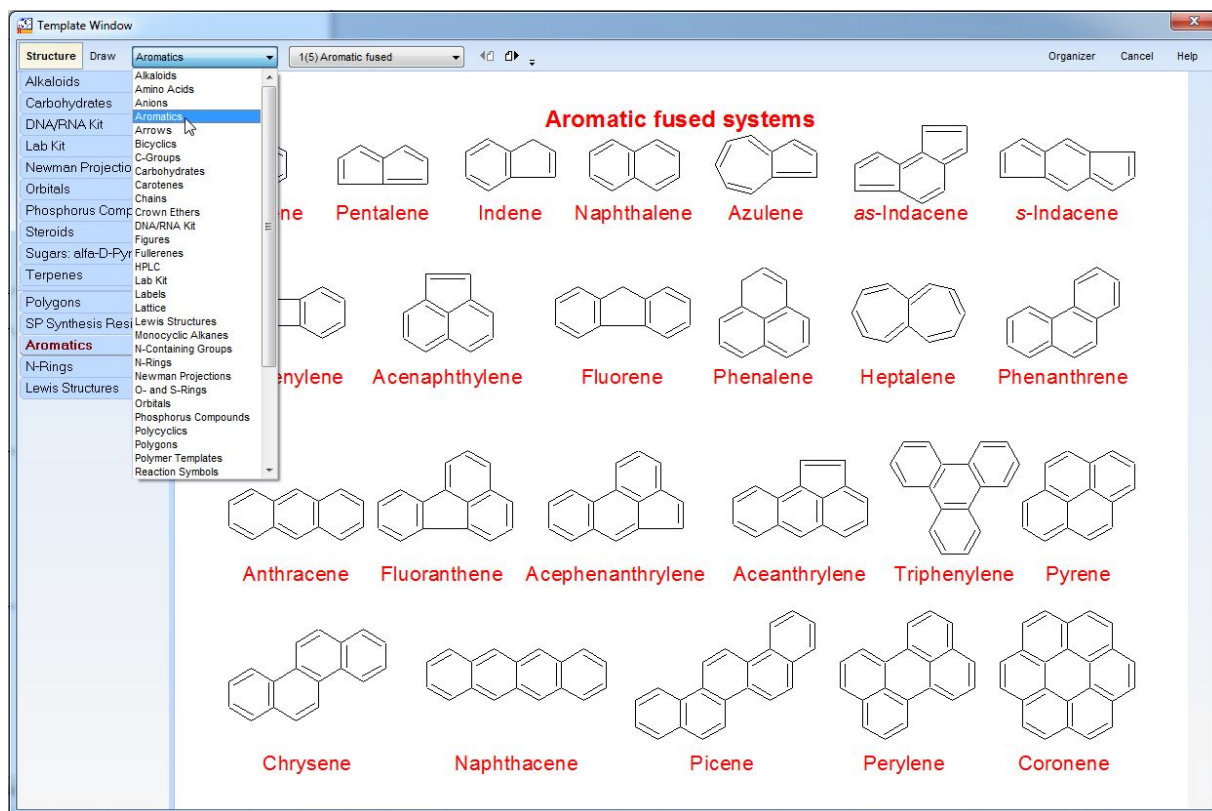
Slika 11.4 Intermedijer prikazan u tri različite vrste zagrada.

Prilikom crtanja pravougaonika ili elipsi pomoću alatki ,  i  možete dobiti kvadrat, odnosno krug, ukoliko držite pritisnut taster *Shift*, dok povlačite mišem po površini za crtanje.

Unapred definisane templatne strukture

Program *ChemSketch* ima veliki broj unapred definisanih templatnih struktura. Osim gotovih molekula u ovim strukturama ćete naći i reakcione simbole, laboratorijsko posuđe, oznake opasnosti, slike instrumenata, crteže orbitala, primere kristalnih rešetki, poligone, Njumanove projekcione formule, itd. Prozor sa templatnim strukturama (slika 11.5) možete otvoriti na tri načina:

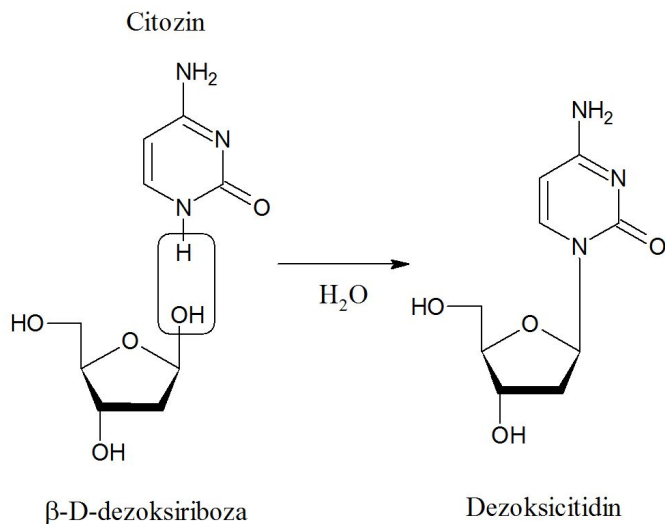
- izborom menija *Templates* pa opcije *Template Window* sa padajuće liste;
- aktiviranjem alatke *Open Template Window*, , iz trake sa opštim alatkama;
- pritiskanjem tastera F5.




Slika 11.5 Prozor sa templatnim strukturama.

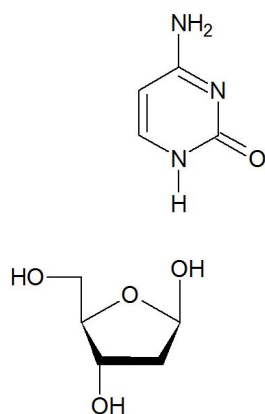
Templatne strukture su organizovane u 40 kategorija. Padajuća lista sa koje možete odabrati željenu kategoriju se nalazi sa leve strane prozora sa templatnim strukturama (slika 11.5). Obratite pažnju da se većina kategorija temeplatnih struktura nalazi na više strana. Desno od padajuće liste sa kategorijama, nalazi se još jedna padajuća lista, pomoću koje možete prelaziti sa strane na stranu u okviru izabrane kategorije. Templatne strukture vam mogu veoma olakšati crtanje komplikovanih molekula i reakcionih šema. Pokažimo to jednim primerom.

Primer 1. Potrebno je da prikazemo reakcionu šemu sinteze dezoksicitidina iz citozina i β -D-dezoksiriboze kao na slici 11.6.

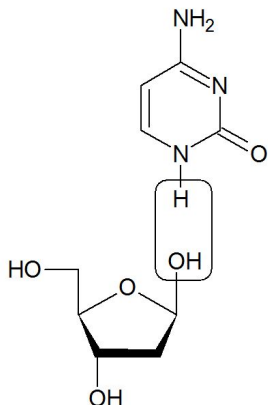



Slika 11.6 Reakciona šema sinteze dezoksicitidina

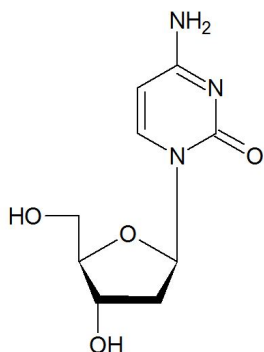
Korak 1. Otvorite prozor sa templatnim strukturama i iz kategorije *DNA/RNA Kit* (strana 1) izaberite prvo molekul citozina a potom i molekul β -D-dezoksiriboze. U režimu *Structure*, NH grupu molekula citozina prevedite u grupu sa prikazanom N—H vezom. Ovo se može postići tako što ćete izabrati element vodonik iz Periodnog sistema sa leve vertikalne trake sa alatkom u režimu *Structure* i povezati ga sa azotom. Nakon toga izaberite samo strukturu citozina i sredite je pomoću alatke *Clean Structure* . Postavite citozin iznad β -D-dezoksiriboze kako je to prikazano na slici.





Korak 2. Pređite u režim *Draw* i ucrtajte kvadrat koji obuhvata atom vodonika i OH grupu, odnosno koji obeležava mesto na kome se dešava reakcija.

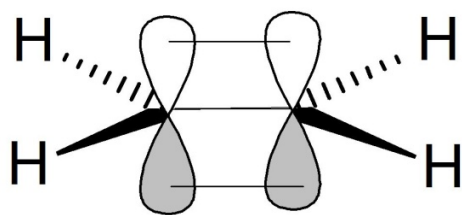


Korak 3. Ponovo iz prozora sa templatnim strukturama izaberite citozin i β -D-dezoksiribozu (ili samo prekopirajte već umetnute molekule) i izbrišite OH grupu sa β -D-dezoksiriboze. Spojite vezom dva molekula, pomoću alatke *Draw Normal*  u režimu *Structure*.

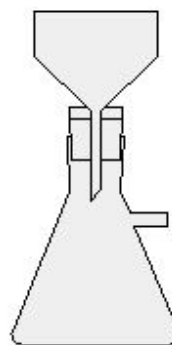


Korak 4. Docrtajte strelicu, umetnite molekul H_2O ispod strelice u režimu *Structure*, a zatim u režimu *Draw* umetnite imena molekula u odgovarajuća polja za tekst. Da biste umetnuli grčko slovo β u ime šećera, izaberite font *Symbol* i otkucajte slovo b.

Pomoću kategorije *Orbitals* u strukturu molekula možete umetnuti i prikaze orbitala. Na slici 11.7a prikazano je nastajanje π veze u molekulu etena. U kategoriji *Lab Kit* nalaze se crteži laboratorijskog posuda. Ovi crteži se mogu međusobno kombinovati da bi se dobile složenije aparature. Prilikom pravljenja složenijih aparatura, potrebno je da koristite alatke *Group/Ungroup* () i *Bring to Front/Send to Back* (). Prikaz aparature za ceđenje pri sniženom pritisku, napravljen u programu *ChemSketch*, dat je na slici 11.7b.




a)

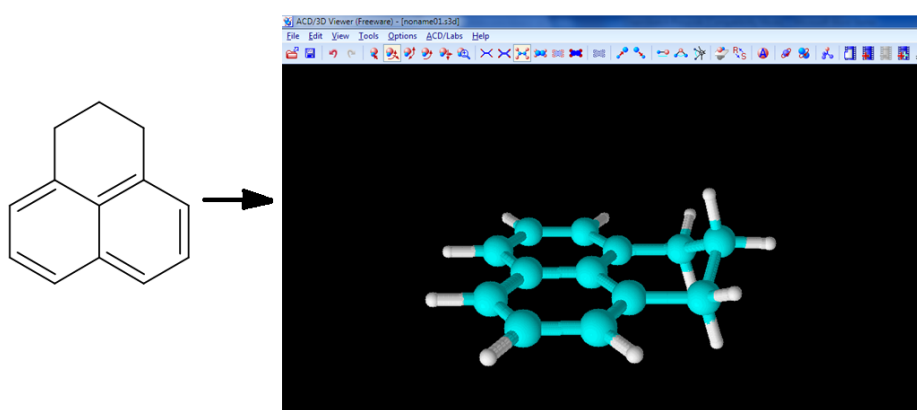


b)

Slika 11.7 a) Preklapanje p orbitala u molekulu etena; b) aparatura za ceđenje pri sniženom pritisku

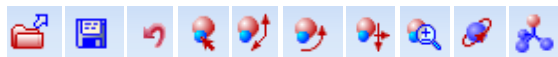
Trodimenzionalno prikazivanje struktura

Da biste strukturu mogli da vidite u trodimenzionom okruženju potrebno je otvorite novi program *3D Viewer*. Program *3D Viewer* se otvara aktiviranjem alatke *3D Viewer* () koja se nalazi na traci sa opštim alatkama. U programu *3D Viewer* moguće je prikazati samo jednu strukturu, tako da se ova opcija ne može koristiti za prikazivanje mehanizama reakcija. Izborom alatke *3D Viewer* otvara se novi prozor, namenjen za trodimenzionalno prikazivanje strukture, uvezene iz *Structure* ili *Draw* režima. Radni prozor programa *3D Viewer* se sastoji od trake sa meniima, alatki smeštenih u jedan red i radne površine (slika 11.8).



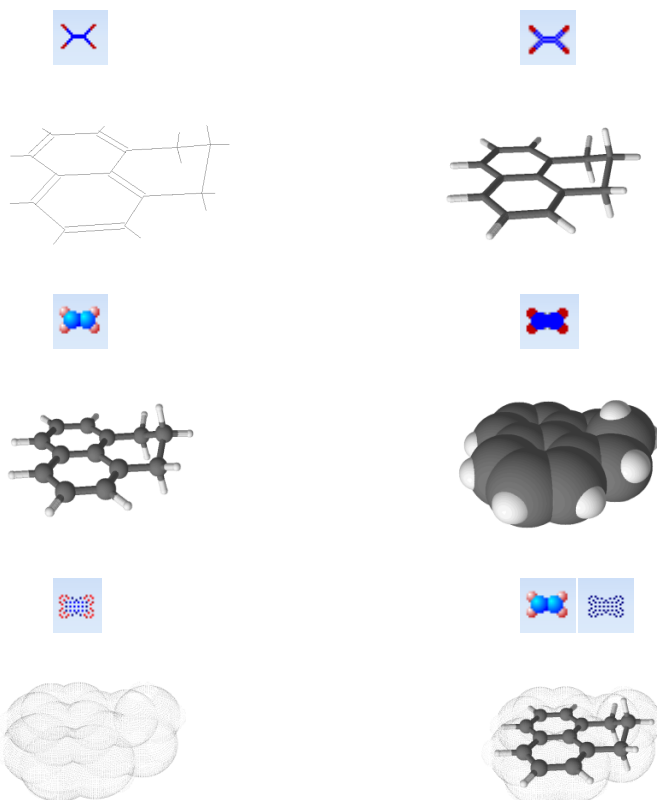
Slika 11.8 Radni prozor programa *3D Viewer*.

Alatke koje se nalaze u prvoj grupi sa leve strane namenjene su, između ostalog, za: otvaranje nove datoteke, snimanje datoteke, poništavanje prethodne operacije, transliranje molekula, rotiranje molekula u ravni ili u prostoru i povećanje odnosno smanjenje prikaza. Ove alatke su prikazane na slici 11.9, po redosledu po kome smo ih naveli u tekstu.



Slika 11.9 Alatke sa leve strane u programu *3D Viewer*.


Drugu grupu alatki čine alatke kojima se određuje stil kojim je prikazana struktura molekula (slika 11.10).

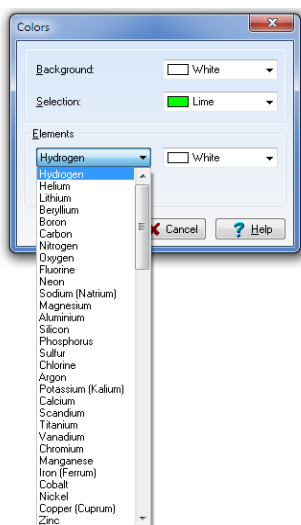


Slika 11.10 Stilovi za trodimenzionalno prikazivanje molekula.

Za povećavanje, odnosno smanjivanje veličine kuglica kojima su prikazani atomi u strukturi, koriste se sledeće alatke:

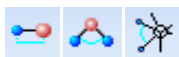




Osim stila za prikazivanje strukture, moguće je promeniti boju pozadine radne površine, kao i boju pojedinih atoma. To se postiže izborom alatke *Set Colors* () , nakon čega se otvara novi prozor u kome se mogu izvršiti ove promene (slika 11.11).




Slika 11.11 Prozor za podešavanje boje pozadine i atoma u programu *3D Viewer*.

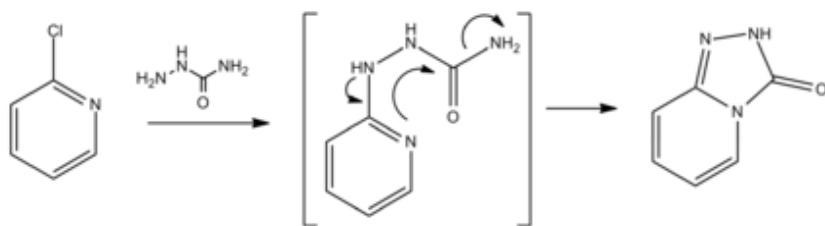
Jedna od prednosti programa *3D Viewer* je u tome što u njemu možemo meriti dužine veza (selektuju se dva atoma), uglove veza (selektuju se tri atoma) i torziona uglove (selektuju se četiri atoma) u strukturi. Alatke za merenje dužina veza, uglova i torzionih uglova su:



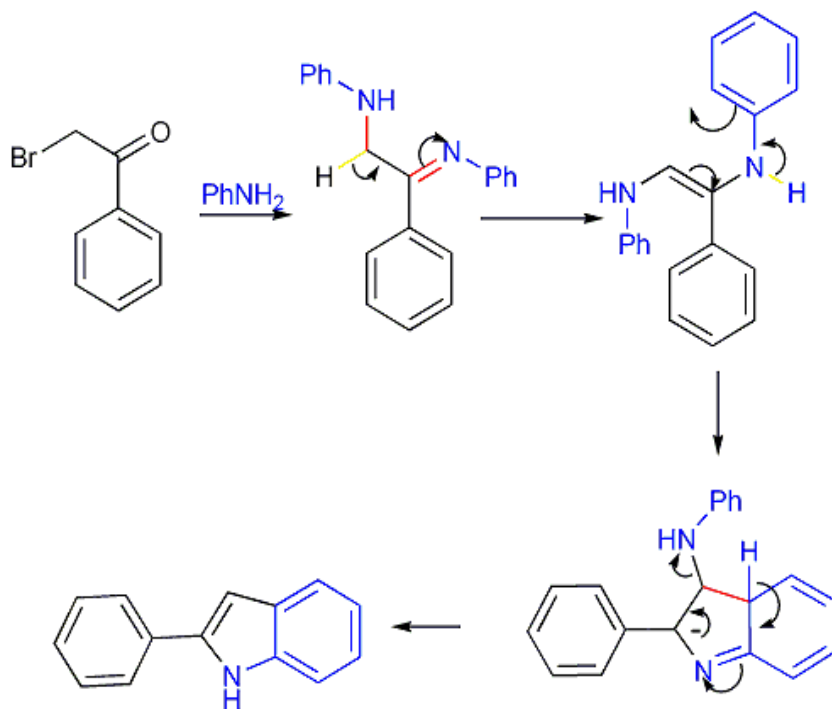
Primenom alatke *Mirror* () dobija se lik u ogledalu početne strukture. Primenom alatke *Invert Center* () menja se apsolutna konfiguracija na hiralnim centrom. Ove alatke ima smisla koristiti samo ukoliko crtate molekul sa hiralinim centrom.

Poslednje alatke na traci sa alatkama programa *3D Viewer* () služe za pravljenje kratkih video zapisa sa trodimenzionalnim strukturama.

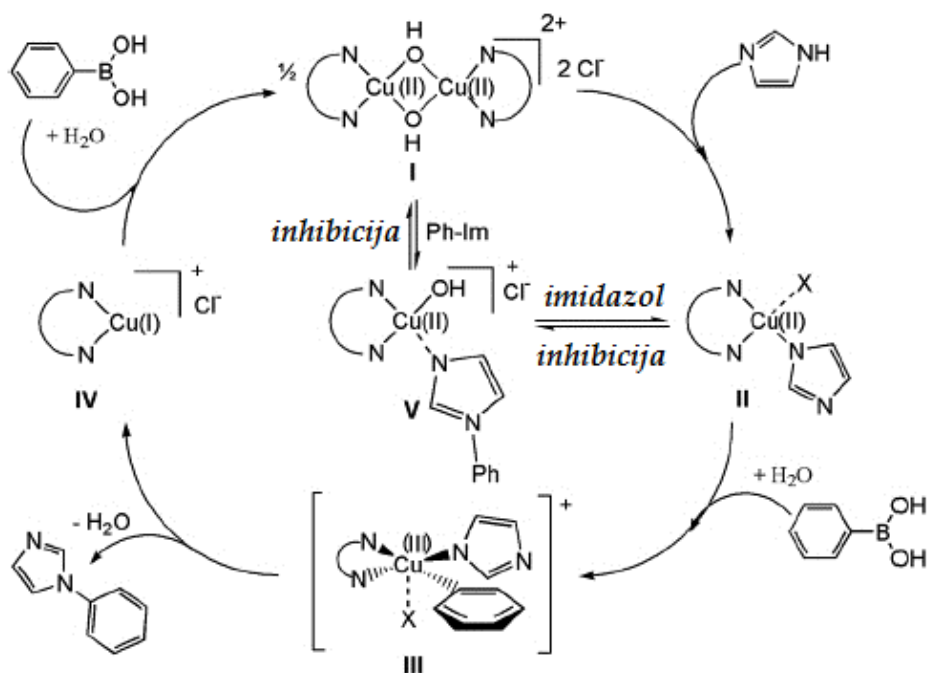
Zadatak 1. Nacrtajte sledeću reakcionu šemu:



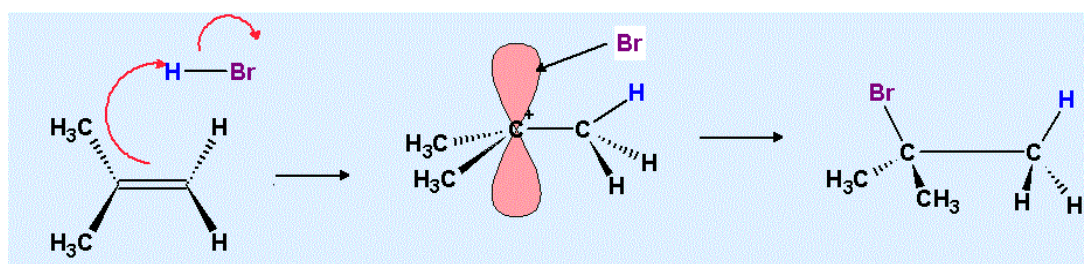
Zadatak 2. Nacrtajte sledeću reakcionu šemu:



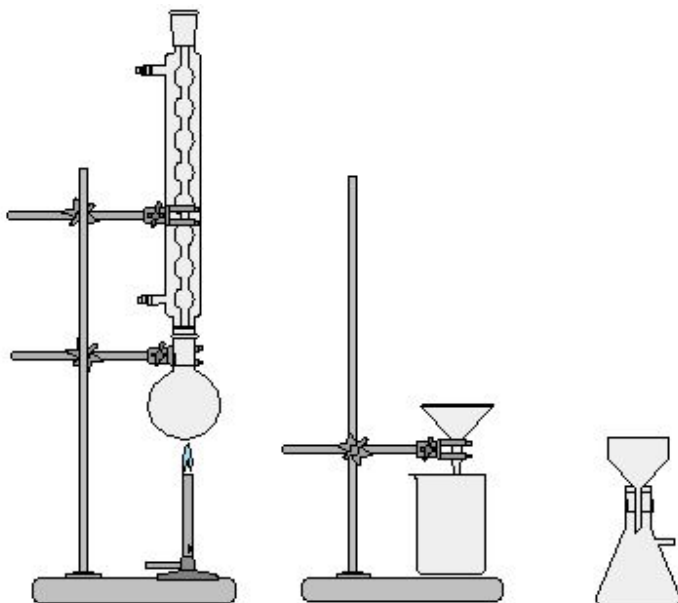
Zadatak 3. Nacrtajte sledeću reakcionu šemu:





Zadatak 4. Pomoću templatnih struktura nacrtajte sledeću reakcionu šemu:



Zadatak 5. Pomoću templatnih struktura nacrtaite sledeće aparature:

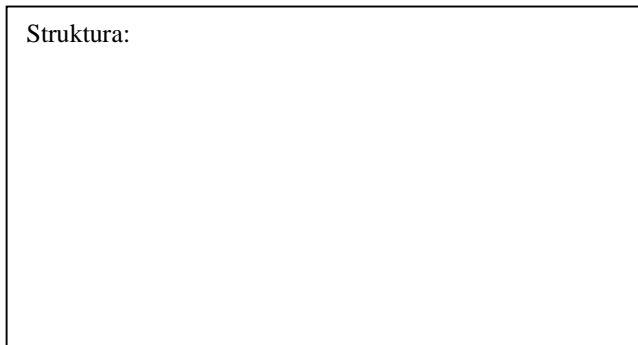


Napomena: prilikom crtanja ovih aparatura potrebno je da koristite alatke *Group/Ungroup* () i *Bring to Front/Send to Back* ().

Zadatak 6. Pronađite na Internetu strukturu vitamina B2 i nacrtaite njegovu strukturu u programu *ChemSketch*. Izmerite dužine veza između svih atoma azota i atoma ugljenika koji su za njih vezani.

Dužine N-C veza: _____

Struktura:



Datum

Potpis asistenta

Vežba 12.

ArgusLab – crtanje strukturnih formula i optimizacija geometrije

U potrebnom programu *ArgusLab* ćemo "zagrebati" po površini jedne velike grane hemije - računarske hemije. Računarska hemija je grana hemije koja se bavi modelovanjem i simulacijom hemijskih i biohemijskih sistema, kao što su neorganska i organska jedinjenja, biomolekuli, polimeri, lekovi, itd. Danas, računarska hemija predstavlja modernu disciplinu, koja ima važnu ulogu u hemiji i ostalim prirodnim naukama.

Sa povećanjem snage računara i sa pojavom bržih i efikasnijih numeričkih algoritama, računarska hemija se veoma efikasno koristi za rešavanje kompleksnih hemijskih i bioloških problema, kao što su:

1. određivanje strukture i energije molekula;
2. optimizacija geometrije;
3. određivanje strukture i energije prelaznog stanja;
4. određivanje energije veze;
5. izračunavanje energijskog toka hemijskih reakcija i svih termodinamičkih svojstava;
6. izračunavanje molekulskih orbitala;
7. izračunavanje gustine naelektrisanja i elektrostatickog potencijala;
8. izračunavanje vibracionih frekvencija molekula;
9. izračunavanje Ramanskih spektara molekula;
10. simuliranje NMR spektara molekula;
11. simuliranje CD spektara molekula;
12. određivanje magnetnih osobina molekula;
13. određivanje polarizabilnosti molekula;
14. predviđanje reakcionog puta neke hemijske reakcije;
15. izračunavanje svojstva atoma i molekula kao što su energija jonizacije i afinitet prema elektronu;
16. modelovanje prelaznog stanja;
17. određivanje površinskih svojstava i tako dalje.

Primenom računarske hemije se struktura i svojstva molekula mogu odrediti pomoću matematičkih proračuna kojima se opisuje položaj i ponašanje elektrona, jezgara ili atoma. Razvijeno je nekoliko matematičkih modela koji su podeljeni u zavisnosti od toga da li koriste principe klasične mehanike ili kvantne mehanike.

Crtanje struktura u programu *ArgusLab*

ArgusLab je veoma koristan i visoko-funkcionalan program namenjen za molekulske modelovanje i grafičko prikazivanje molekulskih modela. Pored svoje osnovne namene, a to je grafičko prikazivanje molekulskih modela, ArgusLab se može koristiti i za:



- optimizaciju geometrije molekula;
- izračunavanje energije molekula (*single-point* proračuni);
- analizu optimizovane geometrije;
- izračunavanje i prikazivanje molekulskih orbitala;
- izračunavanje i prikazivanje mape elektrostatičkog potencijala (*MEP*) molekula;
- izračunavanje energije i geometrije međumolekulskih interakcija;
- izračunavanje elektronskih spektara;
- određivanje interakcija između dva molekula ili molekula i proteina (*docking*).



Docking je metoda molekulskog modelovanja kojom se predviđa orijentacija jednog molekula u odnosu na drugi, kada oni međusobno interaguju i formiraju stabilan kompleks. Poznavanje orijentacije može da bude korisno u predviđanju afiniteta vezivanja i jačine veze između dva molekula. Posebno je interesantna interakcija između bioloških molekula, pre svega proteina, i malih organskih i neorganskih molekula, potencijalnih lekova. Zbog mogućnosti da predvidi orijentaciju i interakciju između (potencijalnog) leka i proteina, *docking* je metoda koja se danas intenzivno koristi u farmaceutskoj industriji pri dizajnu novih lekova.

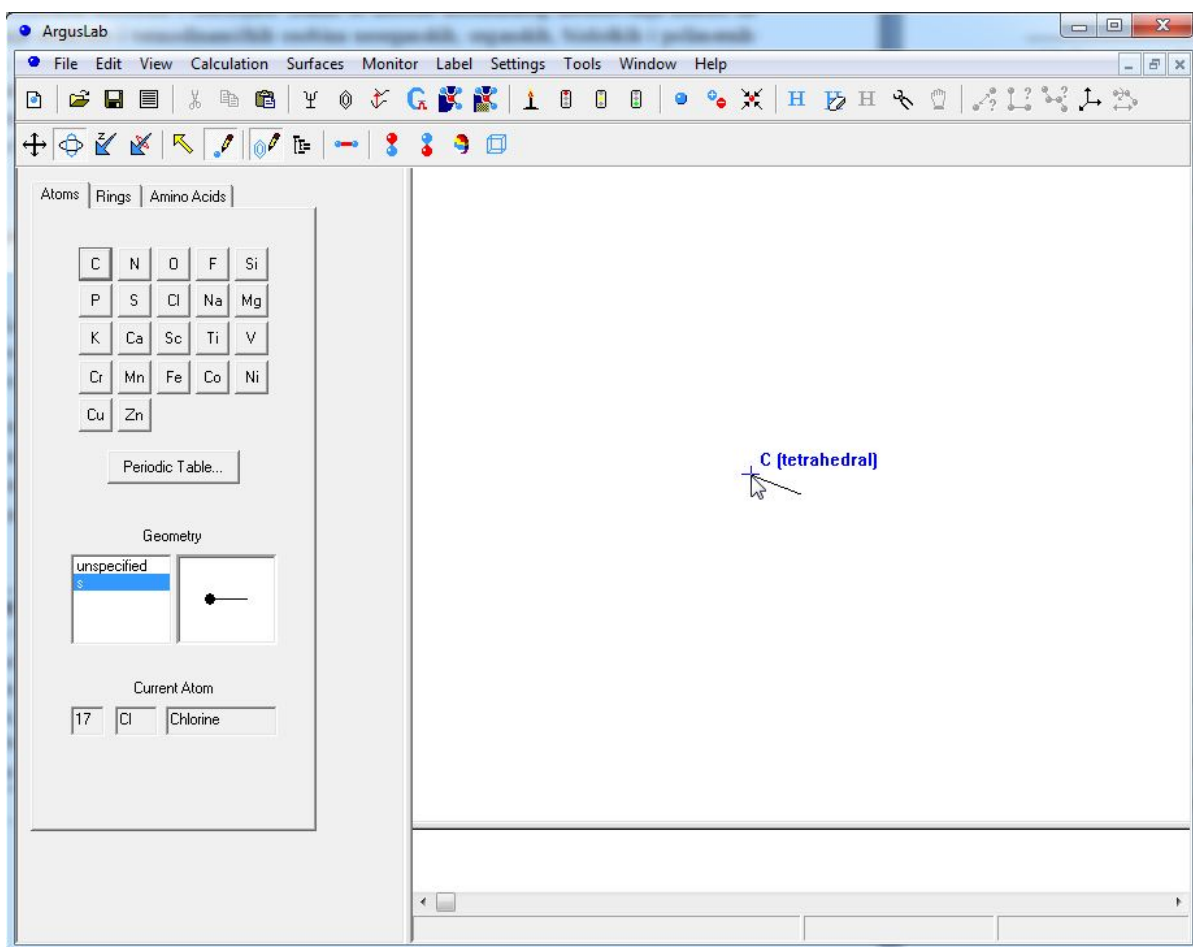
Radna površina programa *ArgusLab* sastoji se velikog crnog prozora (grafički prozor), dva reda sa alatkama iznad njega i polja sa unapred definisanim (templatnim) strukturama sa leve strane (slika 12.1). U samom vrhu prozora nalazi se naslovna traka i traka sa opcijama (meniima).

Na početku rada u ovom programu pokazivač miša će imati izgled strelice sa znakom + iznad koje će pisati *C (tetrahedral)* kao na slici 12.1. Pokazivač će biti "vezan" linijom za centar grafičkog prozora. U ovom režimu rada atomi se unose pritiskom na desno dugme miša.

U programu *ArgusLab* postoje dva režima rada desnog dugmeta miša:

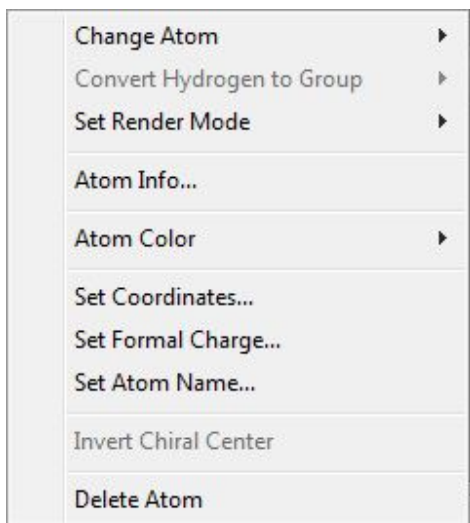
- *Add Atoms* — režim u kome se pritiskom na desno dugme miša dodaju atomi. Ovaj režim je aktivan kada je aktivirana alatka . Međutim, dodati atomi neće biti međusobno povezani. Da bi se atomi međusobno povezali jednostrukim vezama potrebno je da bude aktivirana alatka *Automatic Bonds* . Tada će svaki atom koji dodajete biti povezan sa prethodno dodatim atomom.

- *Selection* — režim u kome se pritiskom na desno dugme miša pojavljuje lista sa opcijama za manipulaciju izabranim atomom (slika 12.2). Ovaj režim je aktivan kada je aktivirana alatka . U ovom režimu atome možete izabrati pritiskom na levo dugme miša (izabrani atom će biti označen žutom bojom). Da biste izabrali više atoma potrebno je da držite pritisnut taster *Ctrl*. Kada želite da povežete dva atoma koje niste povezali tokom unošenja, pređite u ovaj režim, aktivirajte alatku za crtanje veza  i izaberite prvi atom (biće označen žutom bojom), a zatim drugi. Najjednostavniji način crtanja molekula je da prvo u režimu *Add Atoms* unesete sve atome, a zatim ih u režimu *Selection* povežete.



Slika 12.1 Prozor programa *ArgusLab*. Napomena: grafički prozor programa *ArgusLab* je crne boje, u ovom praktikumu, zbog jasnoće štampanog materijala će biti prikazan belom bojom. Boju grafičkog prozora možete promeniti izborom opcije *Settings* ⇒ *Colors*.

Ukoliko levim dugmetom miša pritisnete negde van atoma i pokrećete miša na grafičkom prozoru, moći ćete da translirate, rotirate ili zumirate molekul. Alatke kojima se definiše upotreba levog dugmeta miša date su u tabeli 12.1, a desnog u tabeli 12.2.



Slika 12.2 Lista sa opcijama za modifikovanje atoma koja se dobija pritiskom na desno dugme miša u režimu *Selection*.

Tabela 12.1 Alatke kojima se definiše upotreba levog dugmeta miša.

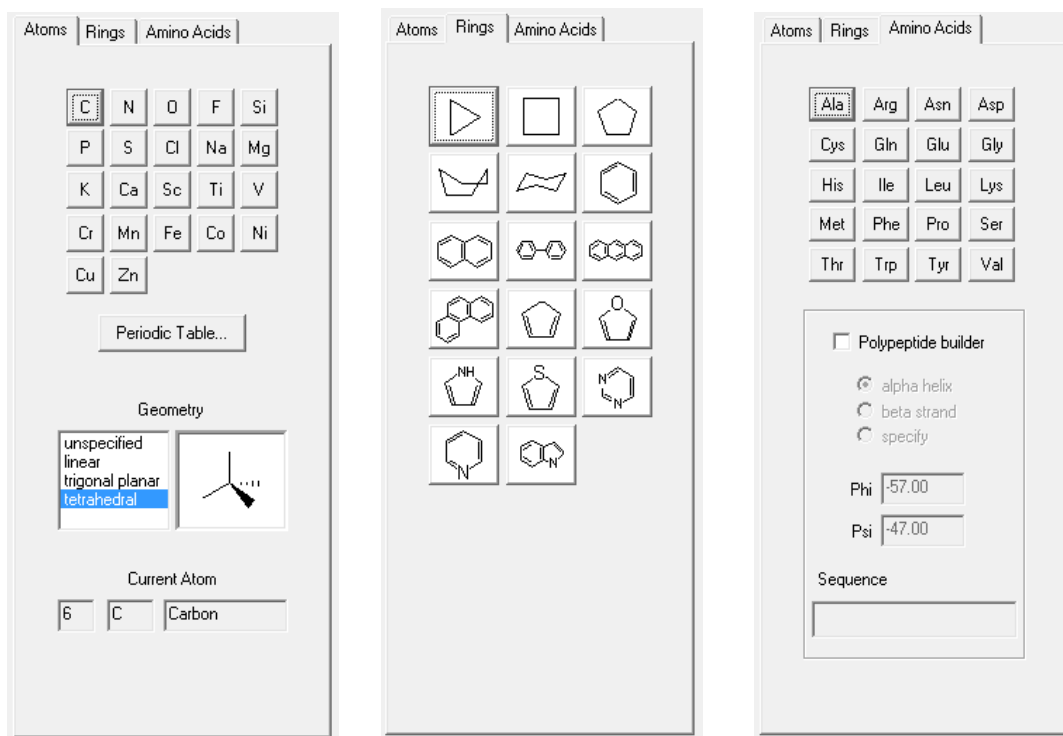
Alatka	Naredba	Namena
	<i>Translate Mode</i>	Translacija molekula.
	<i>Rotate Mode</i>	Rotacija molekula.
	<i>Zoom Mode</i>	Povećanje ili smanjenje veličine molekula.
	<i>Rotate Z-axis Mode</i>	Rotacija oko z-ose (normalna na ravan ekrana).

Tabela 12.2 Alatke kojima se definiše upotreba desnog dugmeta miša.

Alatka	Naredba	Namena
	<i>Selection Mode</i>	Izbor molekula ili fragmenta.
	<i>Add Atoms</i>	Crtanje atoma.
	<i>Automatic bonds</i>	Crtanje veze.

Alatkom *Builder Toolkit* se postavlja ili uklanja polje sa unapred definisanim strukturama sa leve strane prozora (slika 12.3). Pomoću ovog polja određuje se šta će biti uneto u grafički prozor. Ovo polje ima tri kartice: *Atoms*, *Rings* i *Amino Acids*. U okviru kartice *Atoms* data je tabela sa 22 najčešće korišćena atoma. Ukoliko se atom koji želite da unesete ne nalazi u tabeli možete ga izabrati iz ponuđenog periodnog sistema. Takođe, možete izabrati i geometriju oko izabranog atoma. Za ugljenikov atom su ponuđene tri opcije: linearna, trigonalno-planarna i

tetraedarska. Ukoliko ne znate geometriju oko izabranog atoma, ostavite je nedefinisanu i program *ArgusLab* će na osnovu broja vezanih atoma predvideti geometriju.



Slika 12.3 Prikaz sve tri kartice polja sa unapred definisanim strukturama.

Ako aktivirate karticu *Rings* moći ćete da izaberete između nekoliko unapred definisanih cikličnih struktura, a pomoću opcija na kartici *Amino Acids* možete umetati pojedinačne aminokiseline ili praviti polipeptidne nizove.

Za crtanje struktura u programu *ArgusLab* važne su i sledeće dve alatke:

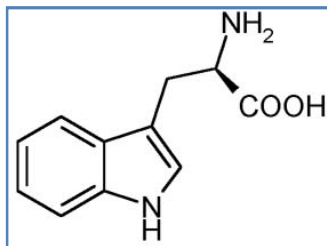


- za automatsko umetanje vodonikovih atoma u nacrtani fragment;




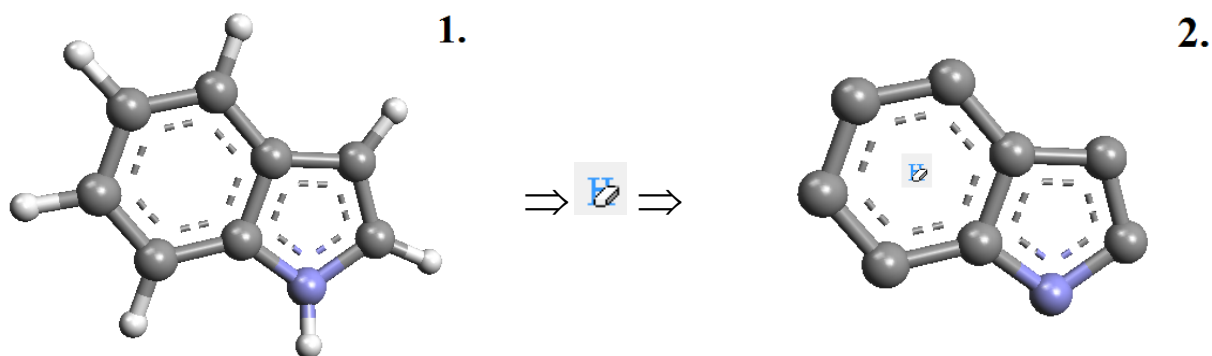
- za automatsko uklanjanje vodonikovih atoma iz nacrtanog ili ubačenog fragmenta.



Da biste lakše razumeli način crtanja struktura u programu *ArgusLab*, u delu koji sledi, prikazaćemo svaki pojedinačni korak za crtanje aminokiseline triptofan (slika 12.4), mada se ova struktura može direktno uneti korišćenjem unapred definisanih struktura.

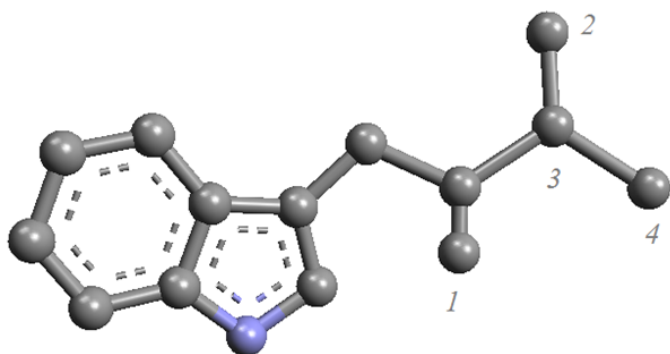


Slika 12.4 Struktura aminokiseline triptofan.

Korak 1. Korišćenjem unapred definisanih struktura (kartica *Rings*), umetnite indolov prsten (potez 1), a zatim iz te strukture ukloniti vodonikove atome  (potez 2).

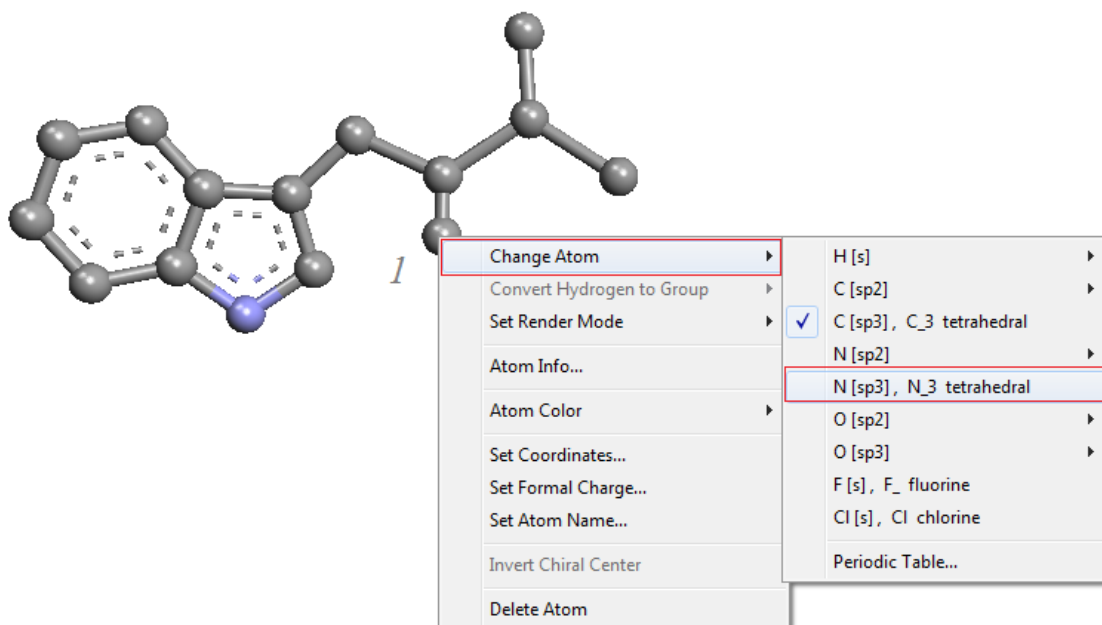


Korak 2. Korišćenjem alatke za crtanje atoma () i za crtanje veza () nacrtajte niz ugljenikovih atoma.

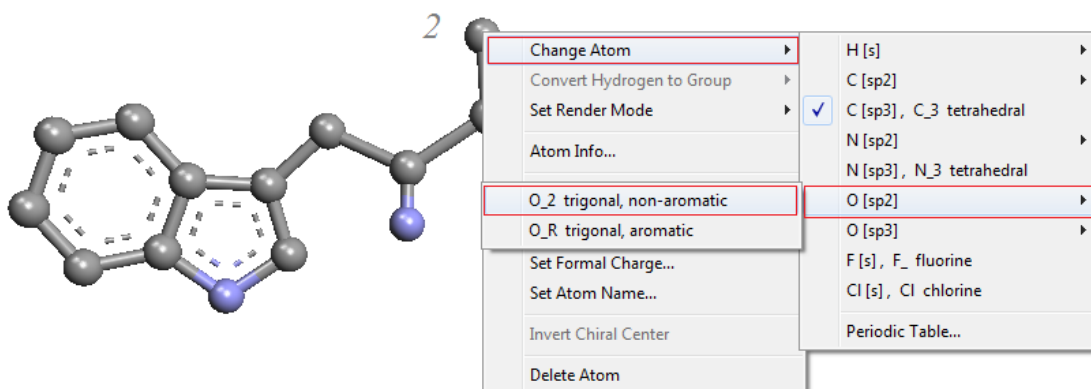


Korak 3. U koraku 2 smo uneli sve atome kao sp^3 hibridizovane atome ugljenika. Da bi dobili strukturu triptofana potrebno je da atom 1 (slika iznad) promenimo u azot, atome 2 i 4 u kiseonike, a atom 3 u sp^2 hibridizovani ugljenik.

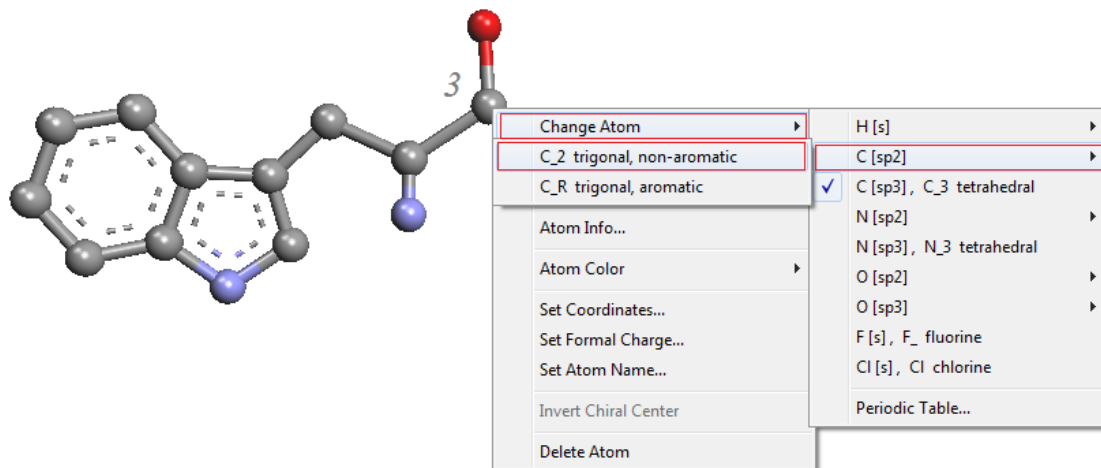
Potez 1- Atom u položaju 1 promenite u sp^3 hibridizovan atom azota. Pređite u režim *Selection* i izaberite atom 1 pritiskom desnog dugmeta miša. Sa liste izaberite opciju *Change Atom* i dodelite tom atomu odgovarajući tip ($N(sp^3)$, N_3 tetrahedral). Boja atoma će se promeniti.



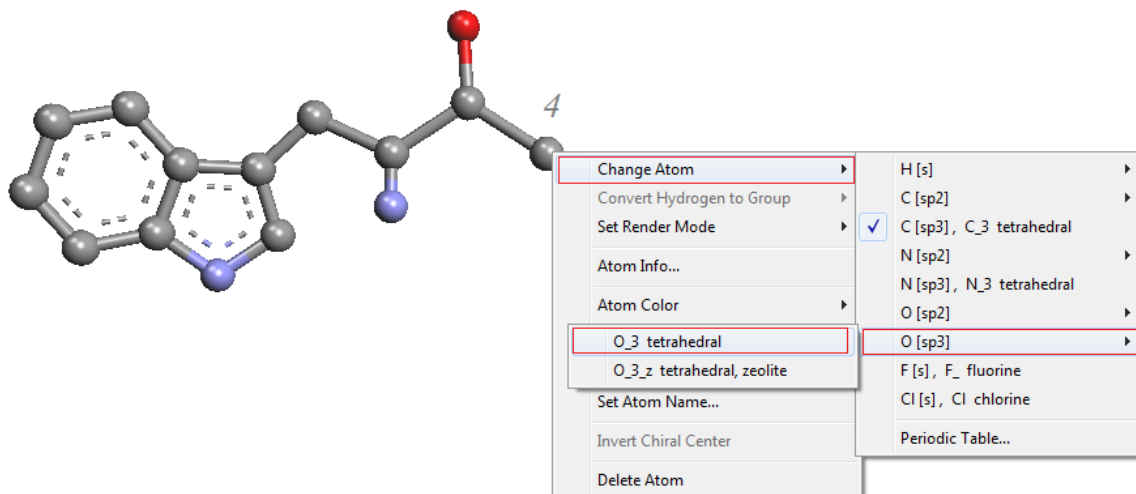
Potez 2- Na isti način atom u položaju 2 promeniti u nearomatični sp^2 hibridizovani atom kiseonika.



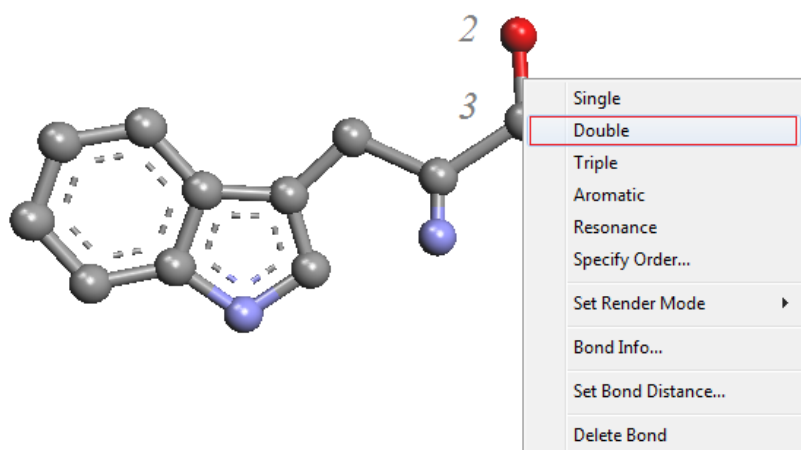
Potez 3- Atom u položaju 3 promeniti u nearomatični sp^2 hibridizovani atom ugljenika.



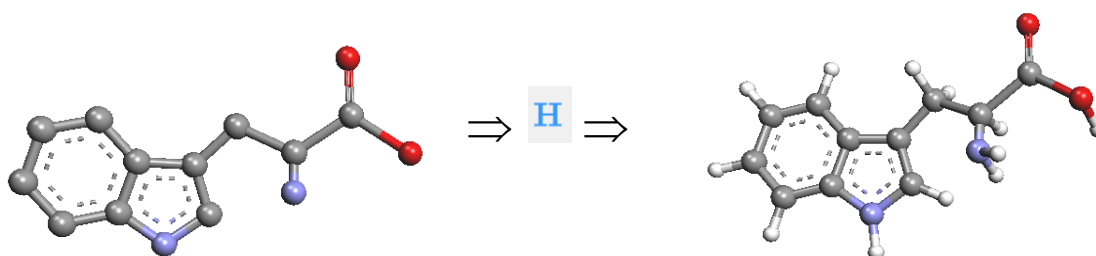
Potez 4- Atom u položaju 4 promeniti u tetraedarski sp^3 hibridizovani atom kiseonika.



Potez 5- Vežu između atoma 2 i 3 potrebno je promeniti u dvostruku vezu. Pritisnite desnim dugmetom miša bilo gde na štapić kojim je predstavljena veza između atoma 2 i 3 i sa liste koja se pojavila izaberite dvostruku vezu.



Korak 4. Ubacivanje atoma vodonika u dobijenu strukturu.



Nacrtna struktura je samo skica ove aminokiseline. Položaji atoma, dužine veza i uglovi između atoma nisu ispravni i ne odogovaraju vrednostima u pravoj strukturi triptofana. Da bi se došlo do ovih podataka, neophodno je da se skicirana struktura optimizuje.

Optimizacija geometrije

Optimizacija geometrije je ključni korak u procesu molekuskog modelovanja. Optimizacija geometrije podrazumeva da se na osnovu unete polazne strukture, pomoću metoda računarske hemije, odredi najoptimalnija geometrija molekula. Pri tome se koriste veoma komplikovani proračuni i algoritimi o kojima ćete učiti na višim godinama. Metode računarske hemije kojima se može odrediti optimalna geometrija molekula se, u zavisnosti od toga da li koriste principe klasične ili kvantne mehanike, mogu podeliti na:

Ab-initio metode, koje se zasnivaju na rešavanju Šredingerove jednačine, pa se ovaj model oslanja na teoriju kvantne fizike kako bi se opisale privlačne i odbojne interakcije između elektrona i jezgara. Ove metode ne koriste eksperimentalne parametare, već se zasnivaju samo na teorijskim principima; otuda i ime *ab initio* ("od početka"). One su teorijski „čiste“ ali računski komplikovane i oslanjaju se na korišćenje računara visokih performansi.

U zavisnosti od veličine molekula i brzine računara, *ab initio* proračuni mogu da traju i po nekoliko dana. Mogu se primenjivati za optimizaciju geometrije samo relativno "malih" molekula.

Semiempirijske metode koriste eksperimentalne podatke za pojednostavljenje načina za rešavanje Šredingerove jednačine, sa ciljem da se ona brže reši. To pomaže da se prevaziđu računarska ograničenja *ab initio* metoda, i mogu se efikasno primeniti na širok spektar problema. Razvijene su brojne semiempirijske metode, a svaka od njih ima skup parametara koji su zasnovani na eksperimentalnim merenjima za određenu klasu jedinjenja. U programu *ArgusLab* implementirane su AM1, PM3 i MNDO metode. Zbog korišćenja eksperimentalnih parametara, semiempirijske metode su mnogo manje tačne od *ab initio* metoda, ali se zato njima mogu računati znatno veći molekuli. Na izuzetno jakim računarima, naučnici su uspeali da optimizuju geometrije nekih manjih proteina semi-empirijskim metodama.

Molekulska mehanika koristi klasičnu, Njutnovu, mehaniku da objasni interakcije između atoma u molekulu kao i interakcije između molekula. U molekulsko-mehaničkim proračunima atomi su opisani kao delimično naelektrisane tačke, kojima je pridružena masa. Molekulska mehanika opisuje energiju molekula kao energiju napona, odnosno kao odstupanje pojedinih komponenti optimizovane geometrije (dužine veza, valencionih uglova, torzionih uglova, međuatomskog rastojanja) od optimalnih vrednosti. U molekulsko-mehaničkim proračunima energija napona se izračunava kao suma više različitih energijskih termova. Ovi termovi se mogu podeliti u dve grupe:

- Energijski termovi koji potiču od promena u odnosu na ravnotežne (optimalne) vrednosti:
 - promene dužine veza (ΣE_{veze});
 - promene uglova između veza (ΣE_{ugao});
 - promene torzionih uglova ($\Sigma E_{\text{torzije}}$).
- Energijski termovi koji potiču od interakcija između parova nevezanih atoma:
 - van der Valsove interakcije ($\Sigma E_{\text{van der Waals}}$);
 - elektrostatičke (Kulonove) interakcije ($\Sigma E_{\text{elektrostatičke}}$).

Da bismo mogli da odredimo energijske termove koji potiču od promena u odnosu na ravnotežne vrednosti potrebno je da znamo te ravnotežne vrednosti. Na primer, ukoliko znamo da između dva atoma postoji neka optimalna dužina veze, onda svako odstupanje dužine veze od optimalne povećava energiju napona molekula. Molekulska mehanika optimalne dužine veza, valencionih uglova i torzionih uglova "uzima" iz eksperimentalnih podataka ili iz *ab initio* proračuna. Skup ovih empirijskih podataka, zajedno sa funkcijama za koje su razvijeni, naziva se polje sila (engl. *Force Field*).

Jasno je da je nemoguće znati sve moguće dužine veza ili uglove između svih atoma u prirodi. Zato su pojedina molekulsko-mehanička polja sila usko specijalizovana za određenu klasu


jedinjenja, na primer, za ciklična i heterociklična organska jedinjenja, za aromatična jedinjenja, za alifatična jedinjenja itd. U programu *ArgusLab* su implementirana dva polja sila:

- Univerzalno polje sila (*Universal Force Field - UFF*), koje je razvijeno za male organske molekule;
- Amber polje sila, koje je razvijeno za proteine.

Molekulsko-mehanički proračuni su veoma brzi ali su zato najmanje tačni od svih metoda računarske hemije. Takođe, pošto ne uzimaju u obzir elektrone, molekulsko-mehanički proračuni ne mogu da se koriste za istraživanje procesa u kojima su elektronski efekti dominantni kao što su: jonizaciona energija, geometrija i energija prelaznih stanja, energija aktivacije, raskidanje i formiranje hemijske veze, spektri molekula itd. Ipak, za optimizaciju nekih jednostavnijih organskih molekula, molekulska mehanika daje sasvim zadovoljavajuće rezultate.

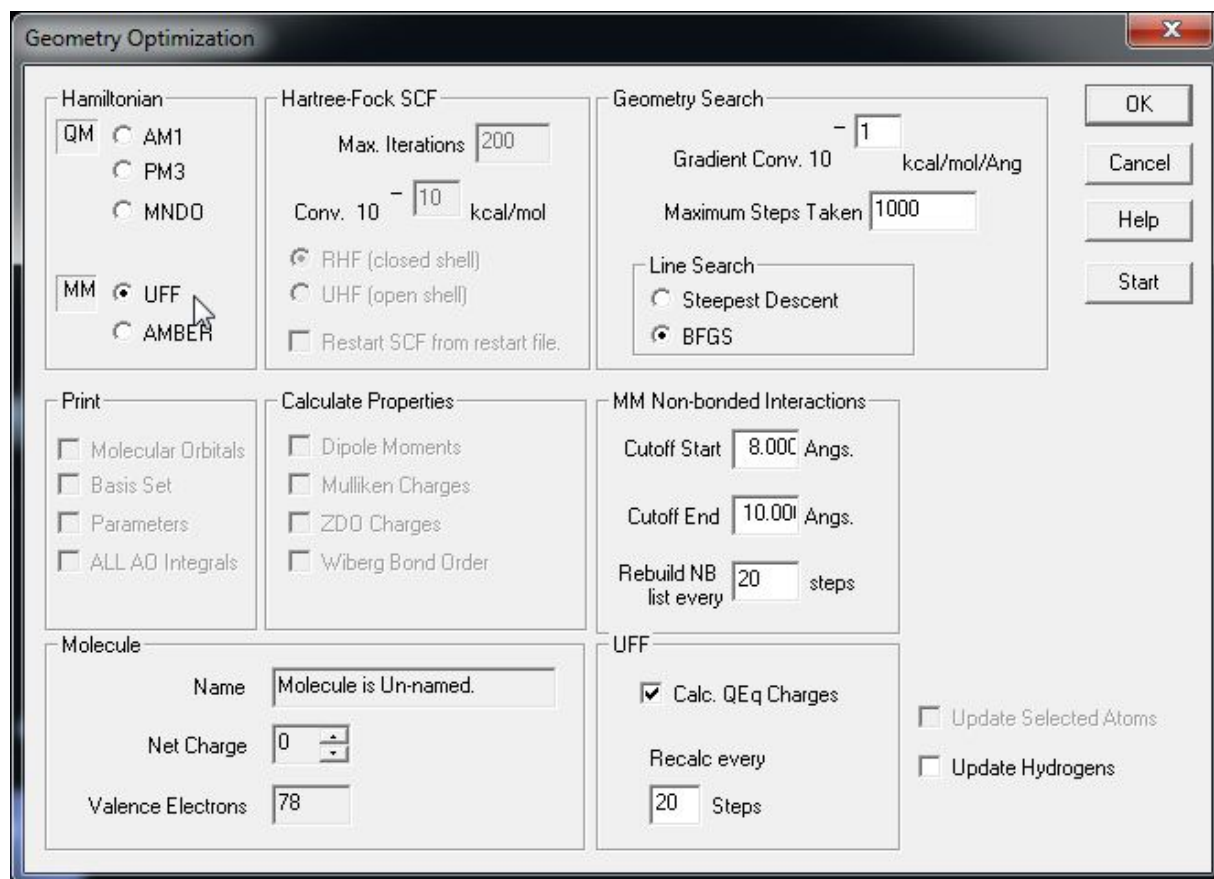
Iako su u programu *ArgusLab* implementirane sve tri metode računarske hemije, mi ćemo na ovim vežbama koristiti isključivo molekulsko-mehaničku metodu sa UFF poljem sila.

Optimizacija geometrije molekula triptofana pomoću UFF polja sila

Postupak optimizacije skicirane strukture započecemo aktiviranjem alatke () koja je namenjena za podešavanje parametara proračuna za optimizaciju geometrije. U dijalogu prozora *Geometry Optimization*, u polju *Hamiltonian* izaberite UFF polje sila, u polju *Geometry Search* podesite broj ciklusa optimizacije na 1000 (*Maximum Steps Taken*), a u polju UFF uključite računanje elektrostatičkih interakcija (slika 12.5).

Nakon podešavanja svih parametara optimizacije pritisnite dugme *Start*. Program će vam tražiti da imenujete datoteke u kojima će snimiti rezultate proračuna. Prebacite se u svoj direktorijum i unesite ime za datoteku "triptofan" i pritisnite dugme *Save* da biste započeli optimizaciju molekula triptofana.


Molekul triptofana u grafičkom prozoru će početi veoma brzo da se menja, atomi će se pomerati i dolaziti na svoje optimalne položaje. Optimizacija je završena kada se u tekstualnom polju ispod grafičkog prozora pojavi ispis "*Geometry optimization converged !*". Ukoliko se u ovom polju pojavi ispis "*>>>Geometry optimization did not converge<<< Maximum cycles reached, optimization terminated*" to znači da je početna geometrija bila daleko od optimalne i da optimizacija nije uspela u predviđenom broju ciklusa. U ovom slučaju je potrebno da nastavite optimizaciju geometrije, odnosno da još jednom ponovite ceo proces optimizacije geometrije.

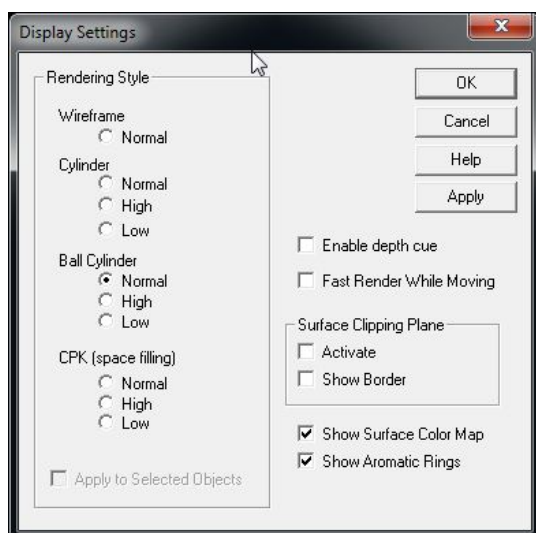


Slika 12.5 Dijalog prozora *Geometry Optimization* u kome se mogu podešavati parametri optimizacije geometrije molekula.

Dobro pogledajte optimizovanu geometriju molekula triptofana. Sve dužine veza i uglovi u ovoj strukturi su na onim vrednostima koje bi i očekivali za ovakav molekul. U principu, ukoliko ste sve uradili kako treba, možete biti prilično sigurni da će molekul triptofana biti veoma sličan onome što je prikazano u grafičkom prozoru. Napomena: molekuli nisu statični objekti kako je to prikazano na ekranu, već veoma dinamični. Atomi u molekulima se neprestano kreću, bilo da su u pitanju vibracije ili rotacije oko prostih veza. Ipak, hemičari koriste ovakve prikaze i pojam optimalne geometrije da bi ustanovili u kojoj će geometriji molekul imati najmanji sadržaj potencijalne energije.

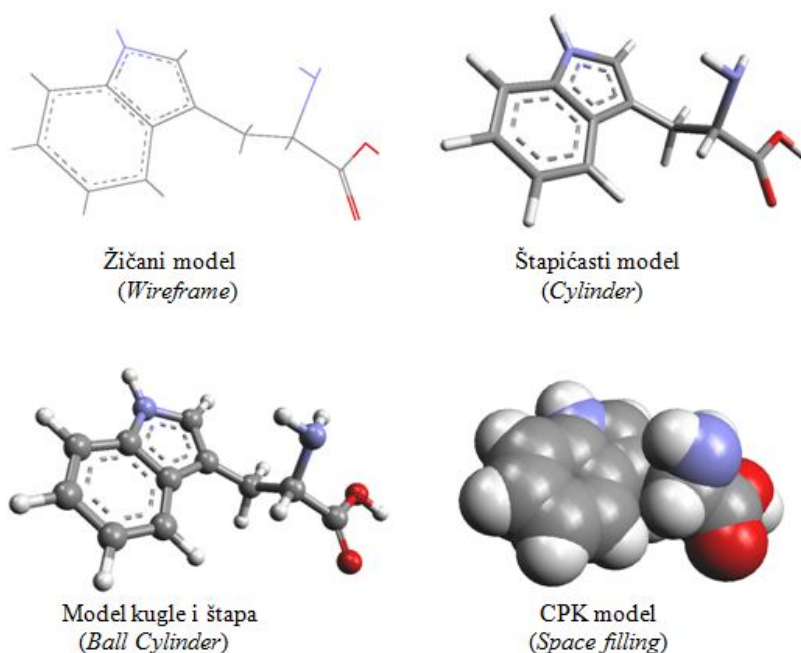
Menjanje prikaza optimizovanog molekula

Prikaz optimizovanog molekula triptofana možete menjati na ekranu pomoću alatke *Display Settings* . Aktiviranjem ove alatke pojavice se prozor *Display Settings* u kome možete odabrati vrstu prikaza molekula u grafičkom prozoru (slika 12.6).



Slika 12.6 Prozor *Display Settings* za menjanje prikaza molekula na ekranu.

Postoji ukupno četiri vrste prikaza molekula koji su prikazani na slici 12.7. Štapičasti model, model kugle i štapa kao i popunjeni (CPK) modeli mogu biti prikazani u različitim rezolucijama. Izborom visoke rezolucije dobićete najlepše slike, ali će se zato na slabijim računarima molekul znatno sporije pomerati po ekranu ukoliko ga rotirate ili translirate. Aktiviranjem opcije *Enable depth cue* pojačava se utisak treće dimenzije, pošto će atomi koji su bliži nama biti jače osvetljeni od onih u pozadini. Aktiviranjem opcije *Show Aromatic Rings* u aromatičnim prstenovima se iscertava isprekidana kružna linija koja ukazuje na aromatičnost tog prstena.






Slika 12.7 Različiti prikazi molekula u programu *ArgusLab*.

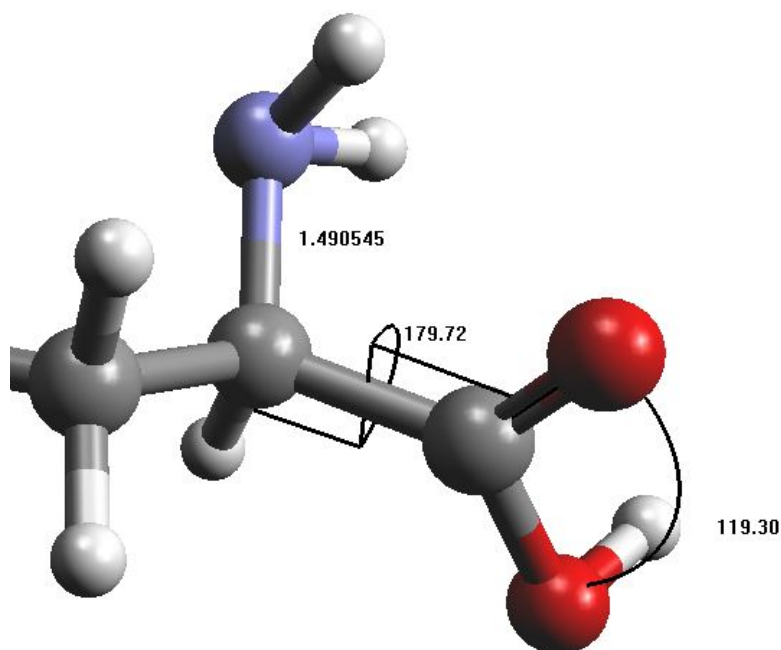
Određivanje dužine veza, uglova i torzionih uglova u optimizovanoj strukturi

ArgusLab je program koji nudi mogućnost da se određeni geometrijski parametri (rastojanje, ugao između dve veze ili torzioni ugao) kvantifikuju. U te svrhe koriste se alatke prikazane u tabeli 12.3. Da biste odredili dužinu veze potrebno je da izaberete dva atoma, za ugao je potrebno izabrati tri atoma, a za torzioni ugao četiri atoma i nakon toga izabrati odgovarajuću alatku. Program će tražene podatke ispisivati na samom grafičkom prozoru (slika 12.8).

Tabela 12.3 Prikaz prečica koje se koriste za merenje rastojanja i uglova u prikazanoj strukturi.

Alatka	Namena
	Prikazivanje rastojanja između dva selektovana atoma.
	Prikazivanje ugla koja grade tri selektovana atoma.*
	Prikazivanje torzionog ugla koja grade četiri selektovana atoma.*

**od redosleda kojim selektujete atome zavisi i vrednost ugla.*




Slika 12.8 Način prikazivanja dužine veza, vrednosti uglova i torzionih uglova u programu *ArgusLab*.

Energija optimizovane strukture

Već smo pomenuli da molekulsko-mehaničke metode energiju molekula predstavljaju kao energiju napona, odnosno odstupanje od neke idealne vrednosti za dužine veza, uglova i torzionih uglova vezanih atoma, umanjenu ili uvećanu za eventualna sterna odbijanja ili elektrostatička privlačenja, odnosno, interakcije između atoma koji nisu direktno vezani.

Prilikom optimizacije geometrije, program *ArgusLab* pravi tri različite datoteke u zadatom direktorijumu. Datoteka sa ekstenzijom *.agl* služi za snimanje optimizovane strukture kako bi se mogla učitati prilikom sledećeg pokretanja programa. Datoteka sa ekstenzijom *.restartscf* služi za eventualno ponovno startovanje optimizacije i u molekulsko-mehaničkim proračunima ona je prazna. U datoteci sa ekstenzijom *.out* su snimljeni svi najvažniji podaci o geometriji i energiji optimizovanog molekula.

Ovu datoteku možete otvoriti direktno u programu *Notepad* aktiviranjem alatke *View latest calculation results* . Najzanimljiviji podaci se nalaze na početku i na kraju ove datoteke. Na početku se nalaze podaci o proračunu, koje je polje sila korišćeno, da li su računate elektrostatičke interakcije, ukupno naelektrisanje molekula, broj ciklusa optimizacije itd. Ovi podaci su veoma bitni, pošto je, uvek kada navodite rezultat potrebno navesti i kojom metodom je taj rezultat izračunat.

```
System Type           Molecular Mechanical
Hamiltonian           UFF (Molecular Mechanics)
                      QEq charges will be used.
                      Net molecule charge set to 0.000000
                      Charges recalculated every 20 steps
Electrostatics Terms  Simple cutoff
Run Type              Optimize Geometry
Search Type           BFGS
Atoms                 27
Water Model           SPCE
Coordinates            angstroms

Max. geom cycles      1000
Convergence criteria:
max. grad. component < 0.000084 au.
MM bond type          quadratic

Scratch block size for MM 3000000 bytes
Update NB list every    20 cycles
NB list build cutoff    10.0000 angs.
NB cutoff               8.0000 angs.

MM params              internally stored
```

Pri kraju datoteke se nalaze podaci o optimizovanoj geometriji molekula u obliku XYZ koordinata svakog atoma. Ove podatke možete kopirati i prebaciti u zasebnu datoteku i zatim geometriju molekula prikazivati u drugim programima.

***** Final Geometry *****

C	-1.61377487	1.50328567	0.11821112	6
C	-0.89796136	0.36014898	-0.24424982	6
C	-1.41243080	-0.90006947	-0.06788332	6
C	-2.67900652	-1.10340214	0.47386971	6
C	-3.42936665	0.02971372	0.84249185	6
C	-2.89795788	1.32704810	0.66689703	6
C	0.36516622	0.20802220	-0.78519830	6
C	0.57363870	-1.16467409	-0.89143990	6
N	-0.52784732	-1.84941788	-0.46123331	7
H	-1.19520865	2.49645193	-0.01373032	1
H	-3.06938153	-2.10605465	0.60966429	1
H	-4.42095606	-0.09463702	1.26932259	1
H	-3.48339705	2.19465257	0.96000645	1
H	1.49025796	-1.63333467	-1.24180339	1
H	-0.65297895	-2.90491842	-0.41741238	1
C	1.36271130	1.28787563	-1.09583487	6
C	2.22168023	1.62079117	0.13541747	6
C	3.02446266	2.89582184	-0.09408492	6
O	3.89149954	2.95402976	-1.00526701	8
O	2.80137751	4.02315421	0.71692287	8
N	3.06780245	0.44099727	0.47289174	7
H	2.02062143	0.96040257	-1.93516005	1
H	0.82018664	2.19852576	-1.44273964	1
H	1.53939637	1.84010933	0.99384502	1
H	3.56499095	3.97102780	1.40874627	1
H	3.64765511	0.78634655	1.29908662	1
H	3.83099527	0.45883659	-0.27504040	1

Final Geom Energy = 0.1538642185 au
 Final Geom Energy = 96.5513 kcal/mol

Geometry Optimization elapsed time 3 sec.

Na samom kraju *.out* datoteke nalaze se podaci o energiji molekula. Prikazan je doprinos svakog terma ukupnoj energiji napona molekula, tako da se energija može analizirati. Energije su izražene u atomskim jedinicama, što je jedinica energije koja se najčešće koristi u računarskoj hemiji (zove se još i Hartri (engl. *Hartree*)). Odnos između atomskih jedinica i drugih jedinica energije je:

$$1 \text{ a. u.} = 27.212 \frac{\text{eV}}{\text{mol}}, \quad 1 \text{ a. u.} = 627.510 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}, \quad 1 \text{ a. u.} = 2625.499 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}.$$

***** Final Energy Evaluation *****

Energy Components (au)

MM Bond	0.00457236
MM Angle	0.06757960
MM Dihedral	0.00225903
MM ImpTor	0.00744972
MM vdw	0.01772320
MM Coulomb	0.05428031

Total	0.15386422 a.u.
Total	96.55134192 kcal/mol

Energija molekula dobijena molekulskom mehanikom je samo relativna vrednost u odnosu na neku idealnu strukturu, tako da se ove energije ne mogu porediti za različite molekule. Sama vrednost ove energije ne ukazuje da li će neki molekul biti stabilniji od drugog. Poređenje energija je moguće jedino kada su u pitanju izomeri istog molekula i taj deo ćemo detaljnije obraditi na narednom času.

Zadatak 1. Prvo na Internetu pronađite a zatim u programu *ArgusLab* optimizujte geometriju molekula askorbinske kiseline (Vitamin C). U tabelu upišite vrednosti različitih energijskih termova i ukupne energije napona u ovom molekulu. Uporedite dobijene vrednosti energije napona sa ostalim kolegama u grupi.

Askorbinska kiselina	
E_{Bond} (a.u.)	
E_{Angle} (a.u.)	
E_{Dihedral} (a.u.)	
E_{vdW} (a.u.)	
E_{Coulomb} (a.u.)	
E_{total} (a.u.)	
E_{total} (kcal/mol.)	

Zadatak 2. Optimizujte geometrije sledećih molekula: etanola, acetaldehida i sirćetne kiseline. Uporedite dužine veza između ugljenika i kiseonika i izvedite odgovarajuće zaključke o jačini ugljenik - kiseonik veze.

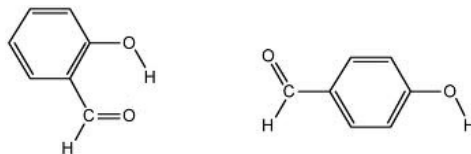
Molekul	Dužina C - O veze
Etanol	
Acetaldehid	
Sirćetna kiselina	

Zaključak: _____

Zadatak 3. Optimizujte geometrije sledećih molekula: ciklobutana, ciklopentana i cikloheksana. Na osnovu vrednosti energije napona za svaki od ovih cikličnih molekula izvedite zaključke o stabilnosti prstena.

Molekul	Energija napona
Cikobutan	
Ciklopentan	
Cikloheksan	

Zadatak 4. Optimizujte geometrije *orto*-hidroksibenzaldehida i *para*-hidroksibenzaldehida. U tabelu upišite vrednosti energijskih termova koji potiču od interakcija između parova nevezanih atoma i ukupne energije napona. Prodiskutujte rezultate.



	<i>orto</i> -hidroksibenzaldehid	<i>para</i> -hidroksibenzaldehid
E_{vdW} (a.u.)		
$E_{Coulomb}$ (a.u.)		
E_{total} (kcal/mol.)		

Zaključak: _____

Datum

Potpis asistenta

Vežba 13.


ArgusLab – energije izomera, konformaciona analiza, međumolekulske interakcije

Već je pomenuto da je energija molekula dobijena molekulskom mehanikom (energija napona) samo relativna vrednost u odnosu na neku idealnu geometriju, u kojoj bi sve dužine veza, valencioni uglovi i torzioni uglovi bili na svojim optimalnim vrednostima, a između nevezanih atoma ne bi bilo nikakvih interakcija (ni privlačnih, niti odbojnih). Iz toga proizilazi, da se izračunate vrednosti energije napona ne mogu porediti za različite molekule. Međutim, postoje molekuli kod kojih je moguće porediti izračunate vrednosti energija napona - izomeri.

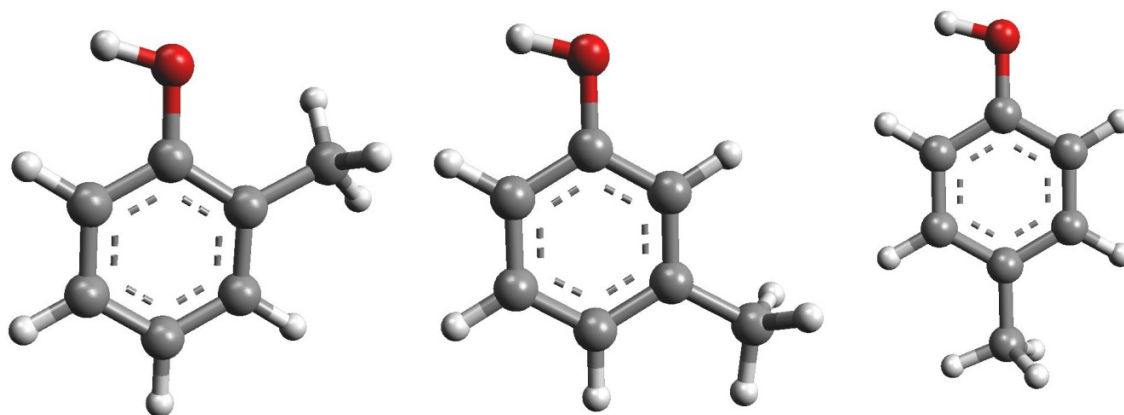
Izomeri su molekuli iste molekulske formule ali različite strukture. Izomeri imaju jednak broj atoma svakog elementa ali se razlikuju u prostornom rasporedu tih atoma. Postoje dve vrste izomera: strukturni izomeri i stereoizomeri.

Strukturni izomeri su molekuli kod kojih su atomi različito povezani. Strukturni izomeri imaju različita imena po *IUPAC* nomenklaturi i često mogu pripadati različitim klasama jedinjenja. Recimo propanal (aldehid) i aceton (keton) su strukturni izomeri.

Stereoizomeri su molekuli koji imaju istu strukturnu formulu i isti redosled vezanih atoma, ali je raspored atoma u prostoru različit. Stereoizomeri imaju isto ime po *IUPAC* nomenklaturi a razlikuju se po prefiksu ispred imena (*cis - trans, R - S, mer - fac*).

Za početak izračunajte energije napona tri strukturna izomera: 2-metilfenola, 3-metilfenola i 4-metilfenola koji su prikazani na slici 13.1 pomoću UFF polja sila. Napomena: svaki od izomera računajte u posebnom prozoru. Novi prozor u programu *ArgusLab* možete otvoriti izborom alatke *Create New Molecule*  koja se nalazi u levom gornjem uglu trake sa alatkama. Iz jednog u drugi prozor možete prelaziti pomoću komande *Window*. Najlakši način da nacrtate strukturu ovih molekula je da prvo uneste strukturu benzena iz polja sa unapred definisanim strukturama, kartica *Rings*, a zatim da odgovarajuće atome vodonika u molekula benzena zamenite sa sp^3 hibridizovanim atomima kiseonika i ugljenika. Na kraju nemojte zaboraviti da automatski dodate vodonikove atome.

Takođe prilikom optimizacije **obavezno** uključite opciju za računanje elektrostatičkih interakcija (*Calc. QEq Charges*) u polju UFF dijaloga prozora *Geomerty Optimization*. Optimizovane geometrije ova tri strukturna izomera bi trebalo da izgledaju kao na slici 13.1.



Slika 13.1 Strukturni izomeri: 2-metilfenol, 3-metilfenol i 4-metilfenol.

Izračunate vrednosti energije kao i sve vrednosti energijskih termova upišite u donju tabelu.

	2-metilfenol	3-metilfenol	4-metilfenol
E_{Bond} (a.u.)			
E_{Angle} (a.u.)			
E_{Dihedral} (a.u.)			
E_{vdW} (a.u.)			
E_{Coulomb} (a.u.)			
E_{Total} (a.u.)			
E_{Total} (kcal/mol.)			

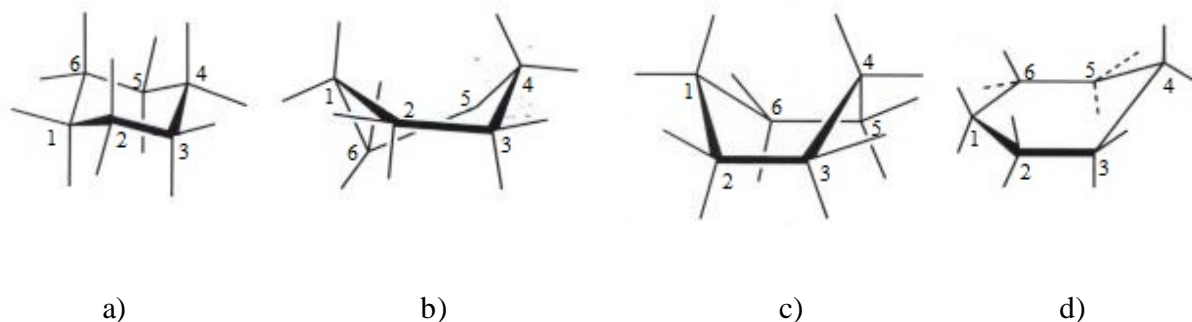
Proračuni pokazuju da će izomer 4-metilfenol imati najnižu vrednost energije napona. Detaljnijom analizom različitih energetske termova možemo videti da su kod 3-metilfenol i 4-metilfenol izomera prva četiri energetska terma skoro ista i da je jedina razlika u elektrostatičkom termu (E_{Coulomb}). Izomer 2-metilfenol ima znatno višu energiju napona od ostala dva izomera. Kod ovog izomera elektrostatički term je pozitivan što ukazuje na odbojne elektrostatičke interakcije. Takođe, zbog blizine hidroksidne i metil grupe u ovom izomeru dolazi do blage deformacije dužine veza i valencionih uglova što se ogleda u povećanim vrednostima ovih energijskih termova. Na kraju, možemo izvesti zaključak da će elektrostatičke interakcije biti

najodgovornije za različitu energiju ovih izomera kao i da će u izomeru 2-metilfenol postojati sterno nagimilavanje zbog blizine hidroksidne i metil grupe.

Konformeri i konformaciona analiza

Već smo rekli da se atomi u molekulima neprestano kreću. Jedan od oblika kretanja atoma u molekulima je rotacija oko jednostruke veze. Na temperaturama na kojima se radi u hemijskim laboratorijama (od -50 do 100°C) ove rotacije su veoma brze. Prilikom rotacije oko jednostruke veze molekul prolazi kroz različite konformacije. Konformacije se najlakše mogu definisati kao različiti prostorni oblici nekog molekula koji nastaju rotacijom oko jedne ili više jednostrukih veza.

U zavisnosti od broja jednostrukih veza i prirode samog molekula, on se može naći u većem broju konformacija. Različite konformacije nekog molekula nazivaju se konformacioni izomeri ili konformeri. Konformeri, usled razlike u prostornom rasporedu atoma, mogu imati i različita fizička svojstva, kao što su potencijalna energija, dipolni moment, termodinamičke funkcije itd. Međutim, poznato je da se konformeri, za razliku od strukturnih izomera i stereoizomera, ne mogu izolovati i odvojiti, jer oni mogu slobodno prelaziti iz jednoga izomera u drugi. Takav primer je cikloheksan, kod koga su najpoznatije konformacije „stolice“, „uvijene lađe“, „lađe“ i "polustolice" (Slika 13.2).



Slika 13.2 Različite konformacije cikloheksana, a) stolica, b) uvijena lađa, c) lađa, d) polustolica.

Termodinamički najpovoljnija konformacija cikloheksana je konformacija stolice, jer se ugljenikovi atomi nalaze u stepeničastoj konformaciji, a atomi vodonika su na najvećoj mogućoj međusobnoj udaljenosti. Konformacija uvijene lađe je znatno nestabilnija od konformacije stolice, zato što torzini uglovi između pojedinih ugljenikovih atoma nisu na optimalnim vrednostima, kao i zbog postojanja bliskih kontakata između vodonikovih atoma koji se nalaze sa iste strane ravni molekula cikloheksana.

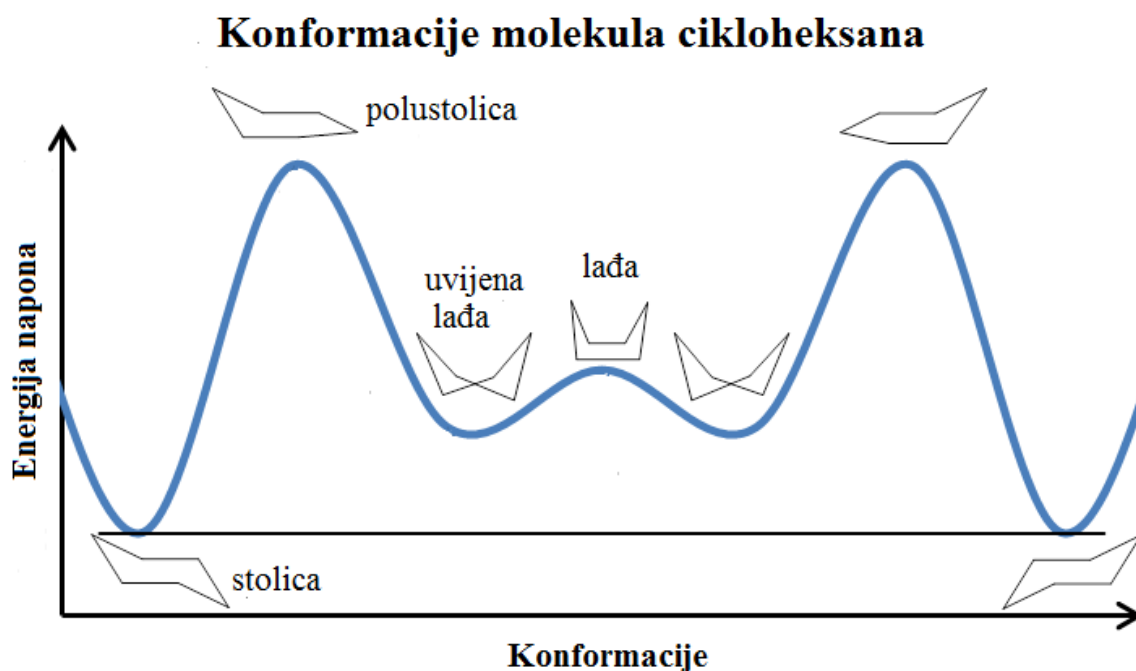
U konformaciji lađe između ugljenikovih atoma 1 i 4 postoji eklipsna interakcija (slika 13.2) i postoje veoma izražene sterne smetnje između vodonikovih atoma vezanih za ugljenikove atome

1 i 4. Ova konformacija predstavlja energijski maksimum pri prelasku iz jedne uvijene lađe u drugu (slika 13.3).

Konformacija polustolice je najnestabilnija od svih razmatranih konformacija cikloheksana. Pošto se pet ugljenikovih atoma nalazi u istoj ravni (1, 2, 3, 5 i 6; slika 13.2) postoje dve eklipsne interakcije (između atoma 3 i 6 i 2 i 5) kao i između svih vodonikovih atoma koji su vezani za ugljenikove atome u ravni (slika 13.2). Konformacija polustolice je, takođe, maksimum pri prelasku iz stolice u uvijenu lađu (slika 13.3).

Na sobnoj temperaturi, energija koju poseduju atomi cikloheksana će biti dovoljna da se savladaju energijske barijere koje nastaju usled rotacija oko jednostruke veze, odnosno dovoljna za brz prelazak molekula iz jedne u drugu konformaciju (slika 13.3).

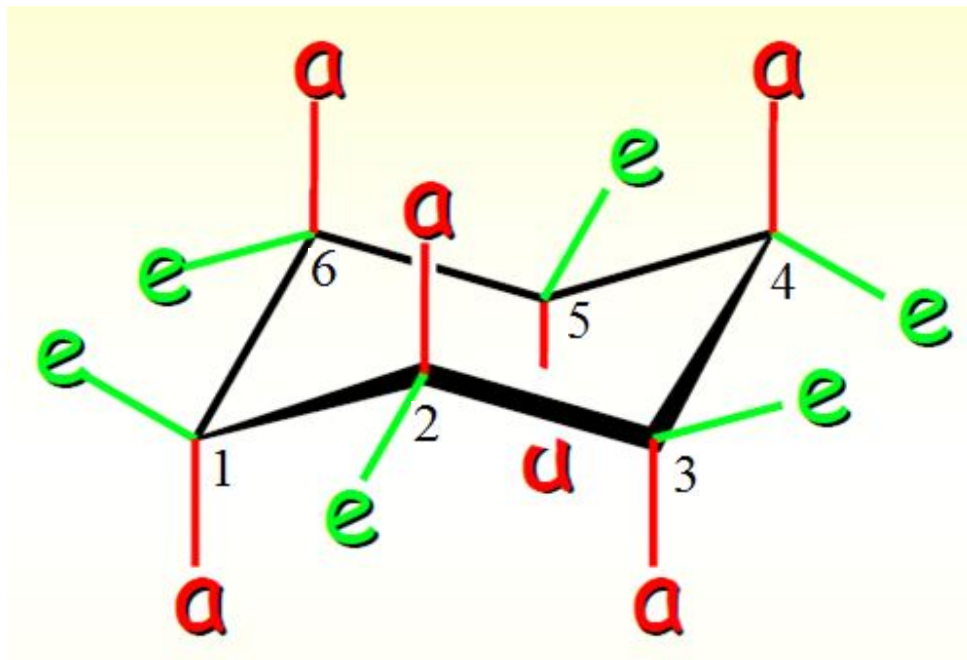
Veličina energijske barijere konformacionih prelaza zavisi od broja jednostrukih veza oko kojih se vrši rotacija i prirode samog molekula, i u jednostavnim organskim molekulama ona prosečno iznosi oko 20-25 kJ/mol.



Slika 13.3. Prelazi molekula cikloheksana iz jedne konformacije u drugu i relativne energije konformacija.

Vodonikovi atomi molekula cikloheksana nemaju iste položaje u prostoru. U konformaciji stolice, šest C-H veza cikloheksana usmerene su normalno na srednju ravan prstena (aksijalni atomi vodonika), a preostalih šest C-H veza nalaze se malo ispod ili iznad te ravni (ekvatorijalni atomi vodonika). Dakle, za svaki ugljenikov atom cikloheksana je vezan jedan aksijalni i jedan

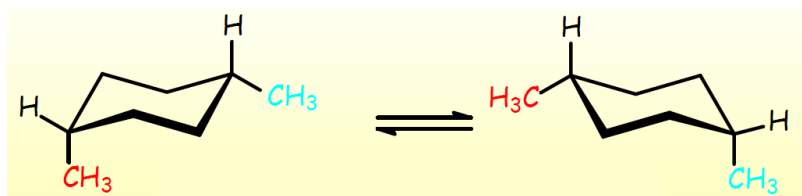
ekvatorijalni vodonikov atom. Aksijalni vodonikovi atomi vezani za atome ugljika broj 1, 3 i 5 će biti sa jedne strane prstena a oni vezani za atome 2, 4 i 6 sa druge (slika 13.4).



Slika 13.4 Prikaz aksijalnih i ekvatorijalnih vodonikovih atoma u molekulu cikloheksana.

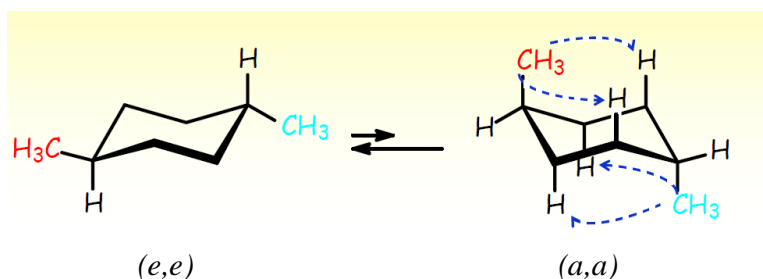
Kad jedna konformacija stolice pređe u drugu konformaciju stolice (inverzija konformacije), svi ekvatorijalni vodonikovi atomi postaju aksijalni, a svi aksijalni postaju ekvatorijalni. Ova inverzija konformacije na sobnoj temperaturi je brza, tako da se svi vodikovi atomi mogu smatrati ekvivalentnim. Kod supstituisanih cikloheksana, inverzija konformacije je sporija, i diktirana stabilnošću konformacije. Aksijalni položaji su nepovoljniji, zbog nepovoljnih sternih interakcija sa grupama koje se nalaze u aksijalnim položajima sa iste strane srednje ravni prstena (1,3- *sin*-diaksijalne interakcije).

Kod *cis* izomera 1,4-dimetilcikloheksana prikazanog na slici 13.5 (*cis* označava da se supstituenti nalaze sa istih strana srednje ravni prstena), inverzijom konformacije se dobija ista struktura (jedna metil grupa je u ekvatorijalnom, a druga u aksijalnom položaju).



Slika 13.5. Inverzija konformacije kod *cis*-1,4-dimetilcikloheksana.

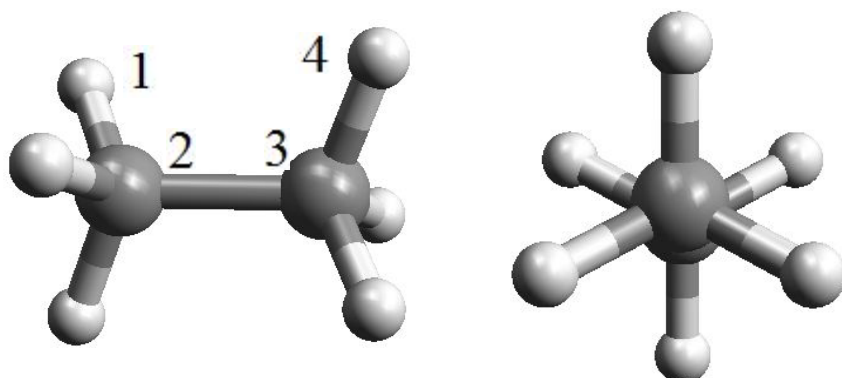
Međutim, kod *trans* izomera 1,4-dimetilcikloheksana prikazanog na slici 13.6 (*trans* označava da se supstituenti nalaze sa različitih strana srednje ravni prstena), konformer kod kojeg su oba supstituenta u aksijalnom položaju (*a,a* izomer), je zbog 1,3-*sin*-diaksijalnih interakcija sa atomima vodonika nestabilniji od konformera u kome su oba supstituenta u ekvatorijalnom položaju (*e,e* izomer).



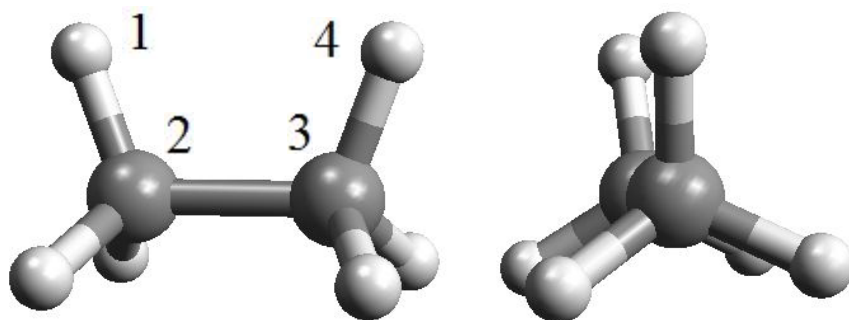
Slika 13.6 Inverzija konformacije kod *trans*-1,4-dimetilcikloheksana.

Određivanje energije svih mogućih konformera nekog molekula se naziva **koformaciona analiza**. Kod jednostavnijih molekula sa malim brojem veza oko kojih može da se vrši rotacija, kao što je cikloheksan, prilično je jednostavno odrediti energije svih konformera. Međutim, kod velikih molekula, broj konformera raste sa 3^N gde je N broj jednostrukih veza oko kojih može da se vrši rotacija. Tako da će molekul koji ima 6 jednostrukih veza, imati $3^6 = 729$ konformera.

Rotacija oko jednostruke veze je još izraženija kod acikličnih jedinjenja. Kod molekula etana postoji samo jedna jednostruka veza oko koje se vrši rotacija (C—C veza), pa je samim tim i broj konformacija 3. Posmatrajmo međusobnu orijentaciju atoma vodonika prilikom rotacije oko C—C veze u molekulu etana. Uočljivo je da postoje dve ekstremne konformacije; kada su atomi vodonika sa susednih ugljenikovih atoma najviše udaljeni jedan od drugog - stepeničasta konformacija (slika 13.7) i kada su atomi vodonika najbliži jedan drugom - eklipsna konformacija (slika 13.8).



Slika 13.7 Stepeničasta konformacija etana; pogled odozgo i pogled duž C—C veze.



Slika 13.8 Eklipsna konformacija etana; pogled odozgo i pogled duž C—C veze.

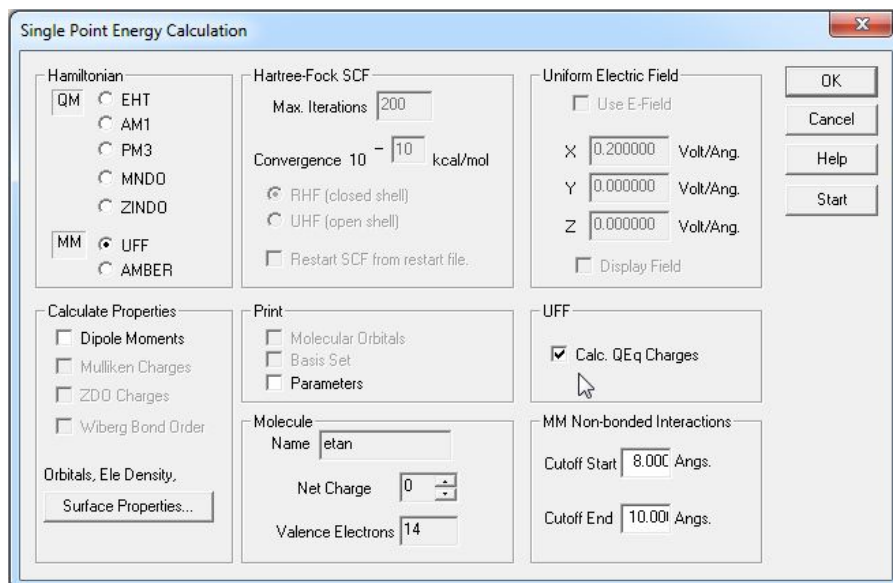
Dobar način da se precizno opišu razne konformacije etana je pomoću vrednosti torzionog ugla. Torzioni ugao se definiše kao ugao između četiri atoma, tačnije ugao između dve ravni (zbog čega se naziva i diedarski ugao) koje čine ova četiri atoma. Prvu ravan čine atomi 1, 2 i 3 a drugu atomi 2, 3 i 4 (slika 13.7 i 13.8).

Odredimo sada energije molekula etana u zavisnosti od torzionog ugla između atoma 1, 2, 3 i 4. Prvo je potrebno da unesete i optimizujete molekul etana a zatim da odredite vrednost torzionog ugla u optimizovanoj strukturi. Optimalna geometrija etana će biti stepeničasta a torzioni ugao će imati vrednost od 60° . Sada je potrebno da postavite torzioni ugao na neku drugu vrednost, recimo 0° . To ćete uraditi tako, što ćete na liniju kojom je obeležen torzioni ugao na grafičkom ekranu izabrati desnim dugmetom miša i sa padajuće liste izabrati opciju *Set Value*. Otvoriće se novi prozor, u kome možete uneti željenu vrednost torzionog ugla. Izaberite prvo dugme *Apply* a zatim i *OK*. U grafičkom prozoru će biti prikazana eklipsna konformacija etana.

Energiju ove konformacije etana možete izračunati pomoću specijalne vrste proračuna - proračuni jedne tačke (engl. *Sigle-point calculations*). Ova vrsta proračuna računa samo energiju molekula onako kako je nacrtan na ekranu bez optimizacije geometrije. Napomena: ukoliko bi ste sada pokušali da optimizujete geometriju etana dobili biste ponovo optimalnu, stepeničastu, konformaciju.

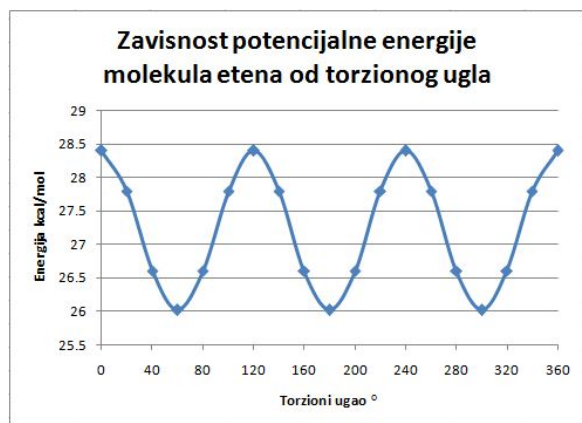
Proračun jedne tačke se pokreće izborom alatke *Sigle-point energy calculations* Ψ . U dijalogu prozora *Sigle-point energy calculations* (slika 13.9) potrebno je u polju *Hamiltonian* izabrati UFF polje sila, u polju UFF uključiti računanje elektrostatičkih interakcija (*Calc. QEq Charges*).

Nakon toga izaberite dugme *Start* da biste izvršili proračun. Izračunatu energiju napona, kao i vrednosti svih energijskih termova, zadate konformacije možete pronaći na samom kraju datoteke sa ekstenzijom *.out*.



Slika 13.9 Dijalog prozora *Single Point Energy Calculations*.

Zbog simetrije molekula etana, dijagram zavisnosti izračunate energije od vrednosti torzionog ugla će biti simetričan sa maksimumima na 0, 120, 240 i 360° i minimumima na 60, 180 i 300° (slika 13.10). To znači da nismo morali da računamo celu rotaciju od 0 do 360° da bi pretražili ceo konformacioni prostor etana.



Slika 3.10 Dijagram zavisnosti izračunate energije od torzionog ugla u molekulu etana.

Međumolekulske interakcije

Međumolekulske interakcije su sile privlačenja i odbijanja koje deluju između susednih molekula. One su slabije u odnosu na kovalentnu vezu, koja drži atome u molekulu. Na primer, kovalentna veza prisutna u molekulima HCl je mnogo jača nego sile prisutne između susednih molekula, koje se javljaju kad su molekuli dovoljno blizu jedan drugom. Ove privlačne sile

postoje na mnogo većim rastojanjima (čak i do 10,0 Å) u odnosu na rastojanja između atoma u molekulu (do 2,0 Å).

Međumolekulske interakcije se mogu podeliti na:

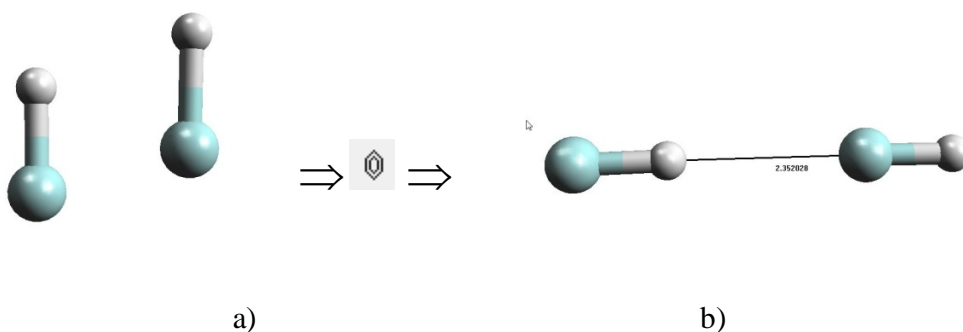
1. dipol-dipol inetrakcije;
2. dipol-indukovani dipol interakcije;
3. Londonove disperzione sile.

Kao specifičan tip dipol-dipol interakcija javljaju se vodonične veze. Predstavljaju se često D-H...A šemom, gde je D donator a A akceptor vodonikovog atoma. D i A su obično jako elektronegativni atomi (kiseonik, azot ili fluor), tako da vodonikov atom na taj način premošćuje dva jako elektronegativna atoma, te se stoga vodonična veza naziva i vodonikov most.

U programu *ArgusLab* pomoću UFF polja sila možemo računati geometrije i energije međumolekulskih interakcija.

Izračunajmo energiju interakcije između dva molekula fluorovodonika. U novom prozoru prvo ucrtajte jedan molekul fluorovodonika a zatim bilo gde u grafičkom prozoru dodajte drugi molekul fluorovodonika (slika 13.11a).

Prilikom podešavanja parametara optimizacije potrebno je da broj ciklusa optimizacije (*Maximum Steps Taken*) povećate na 1000 i obavezno uključite računanje elektrostatičkih interakcija (*Calc. QEq Charges*). Nakon završene optimizacije, dva molekula se postavljaju u idealan položaj za građenje vodonične veze (slika 13.11b).



Slika 13.11 Dva molekula fluorovodonika a) pre i b) posle optimizacije geometrije

Rastojanje između atoma vodonika prvog molekula HF i fluora drugog molekula HF u optimizovanoj strukturi iznosi 2,35 Å. Rastojanje između ova dva molekula možete menjati isto kao i vrednosti torzionog ugla u prethodnom primeru (izborom linije kojom je obeleženo rastojanje desnim dugmetom miša, izborom opcije *Set Value* i unošenjem željene vrednosti rastojanja).

Zadatak 1. Optimizujete geometrije i u tabelu upišite energije sledećih izomera:

	1,2-benzendiol	1,3-benzendiol	1,4-benzendiol
E_{Bond} (a.u.)			
E_{Angle} (a.u.)			
E_{Dihedral} (a.u.)			
E_{vdW} (a.u.)			
E_{Coulomb} (a.u.)			
E_{total} (a.u.)			
E_{total} (kcal/mol.)			

Na osnovu izračunatih energijskih termova izvedite zaključke o različitim potencijalnim energijama ovih izomera

Zaključak: _____

Zadatak 2. Optimizujete geometrije dva stereoizomera: *cis*-1,2-dihloreten i *trans*-1,2-dihloreten. Na osnovu izračunatih energijskih termova izvedite zaključke o različitim potencijalnim energijama ovih stereoizomera

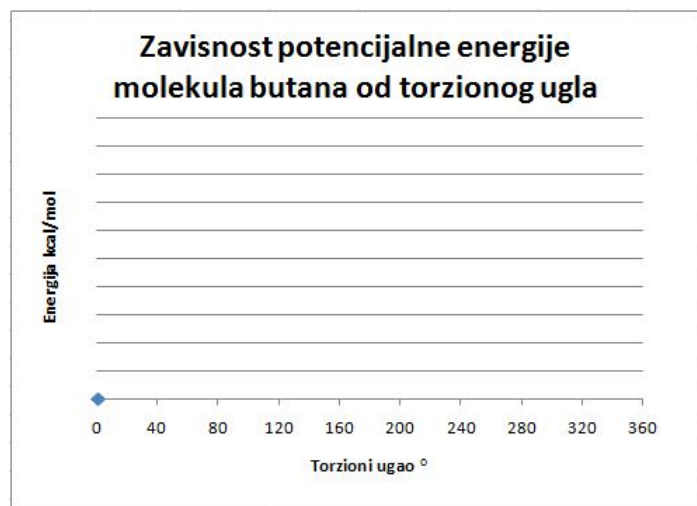
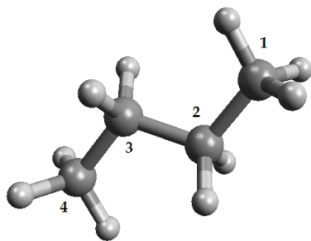
Zaključak: _____

Zadatak 3. Molekulske mehaničke proračune pomoću UFF polja sila odredite koji je konformer *trans*-1,4-dimetilcikloheksana stabilniji.

Energija <i>e,e</i> konformera	Energija <i>a,a</i> konformera

Zaključak: _____

Zadatak 4. Predstavite dijagramom zavisnost energije od vrednosti torzionog ugla za rotaciju oko C2 - C3 veze u molekulu butana. Prodiskutujte dobijene rezultate

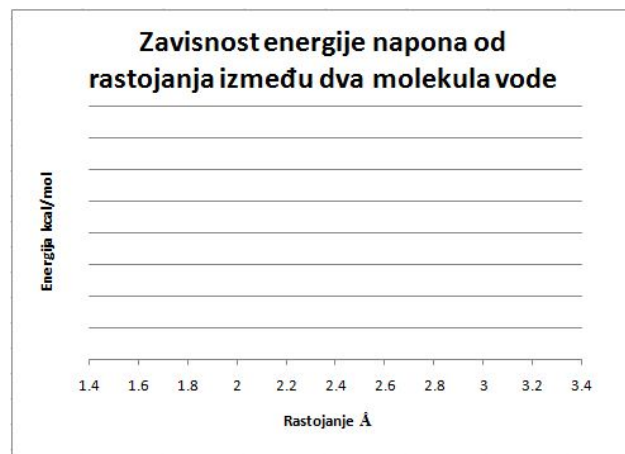
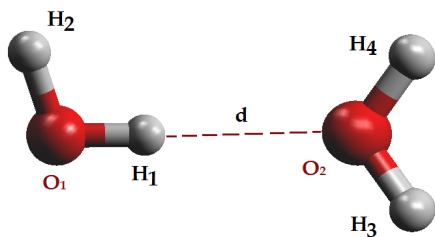


Zaključak: _____

Zadatak 5. Odredite vrednosti energije međumolekulskih interakcija između molekula fluorovodonika na rastojanjima 1,9; 2,1; 2,3; 2,5; 2,7; 2,9; 3,5; 3,9; 4,5 i 5,0 Å. Posmatrajte promenu energijskih termova za van der Walsove i elektrostatičke interakcije i izvedite zaključke o prirodi interakcije između ova dva molekula.

Zaključak: _____

Zadatak 6. Odredite vrednosti energije napona za sistem od dva molekula vode prikazan na slici, i grafički prikažite zavisnost promene energije napona od rastojanja d . Vrednosti rastojanja d menjati od 1,4 do 3,4 Å, u koracima od 0,2 Å.



Datum

Potpis asistenta

Vežba 14.

Baze podataka sa strukturama molekula

Baze podataka koje su usko specijalizovane za skladištenje informacija o rasporedu atoma u molekulima zovu se baze podataka sa strukturama molekula (engl. *Structural Data Bases*). Geometrije molekula se najpreciznije mogu odrediti metodama rendgenske kristalografske analize i neutronske difrakcije. Geometrije proteina se, na osnovu poznate aminokiselinske sekvence i sekundarne strukture, mogu predvideti i pomoću NMR spektroskopije, međutim, strukture dobijene na ovakav način su manje precizne i pouzdane.

Rendgenska kristalografija (engl. *X-ray crystallography*) je metoda za određivanje atomske i molekulske strukture kristala, kod koje se X zraci difraktuju na specifičan način sa atoma u kristalu. Merenjem ugla i intenziteta difraktovanih X zraka, može se odrediti mapa elektronske gustine kristala. Na osnovu ove mape elektronske gustine mogu se odrediti položaji pojedinačnih atoma u kristalu, a samim tim i geometrija molekula od kojih je kristal sačinjen. Da bi se struktura nekog jedinjenja mogla ispitivati rendgenskom kristalografskom analizom potrebno je da to jedinjenja kristališe u obliku pravilnih kristala (monokristala), odnosno da ima pravilnu kristalnu strukturu u čvrstom stanju.

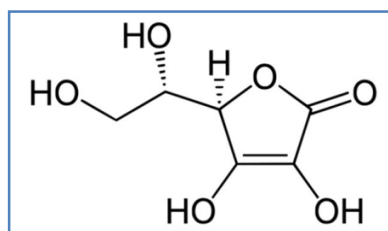
Zbog toga je, osim informacija o strukturi molekula, pretragom baza podataka sa strukturama molekula moguće dobiti i informacije o načinu pakovanja molekula u kristalu. Primeri baza podataka sa strukturama molekula koje ćemo obraditi u ovoj vežbi su: Kembrička kristalografska banka podataka i Proteinska banka podataka.

Kembrička kristalografska banka podataka

Kembrička kristalografska banka podataka ili skraćeno *CSD* (engl. *Cambridge Structural Database*) je jedna od prvih hemijskih baza podataka u svetu, u kojoj se skladište eksperimentalni podaci o trodimenzionalnim strukturama molekula. *CSD* sadrži više od pola miliona kristalnih struktura malih molekula (molekuli sa manje od 500 teških atoma), kojima je struktura određena primenom rendgenske kristalografske analize ili neutronske difrakcije. U ovoj bazi podataka su uskladištene informacije o geometrijama i kristalnim strukturama neorganskih, organskih i organometalnih jedinjenja.

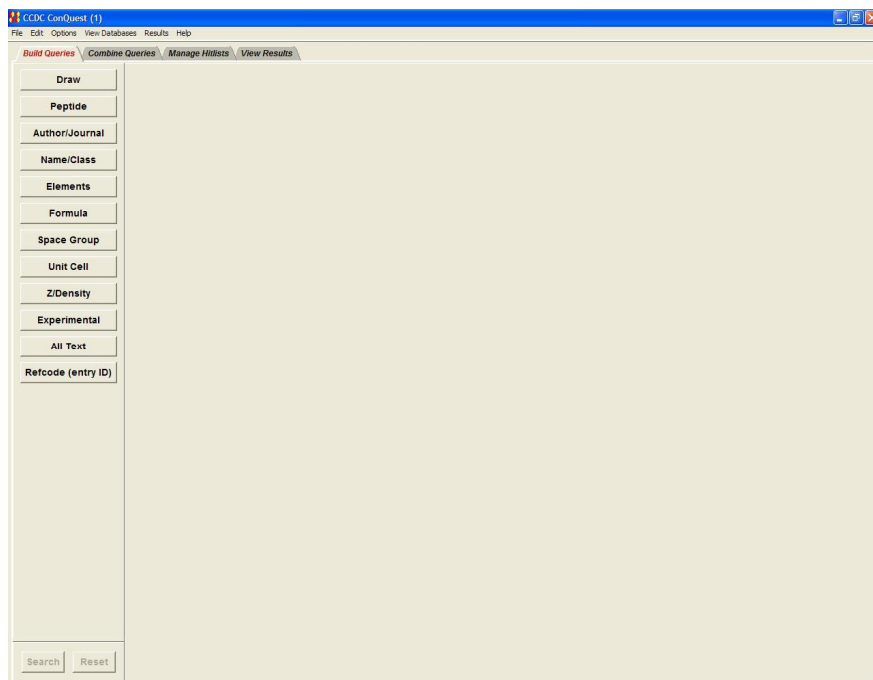
Informacije koje se dobijaju iz ove baze mogu se koristiti u mnogim oblastima kao što su: molekulska modelovanje i dizajn lekova, hemijska informatika, kristalno inženjerstvo, ispitivanje nekovalentnih interakcija, ispitivanje i predviđanje strukturnih karakteristika određenih klasa jedinjenja, mehanizmi reakcija itd.

Svaka rešena kristalna struktura u *CSD* bazi podataka označava se odgovarajućim kodom (REFCODE), koji sadrži šest karaktera (kombinacija slova) ili osam karaktera (kombinacija šest slova i dva broja). U ovom delu, prikazaćemo vam kako se pretražuje *CSD*, pomoću programa *ConQuest*, sa ciljem preuzimanja željene kristalne strukture. Kao primer izabrana je struktura vitamina C ili askorbinske kiseline (slika 14.1).

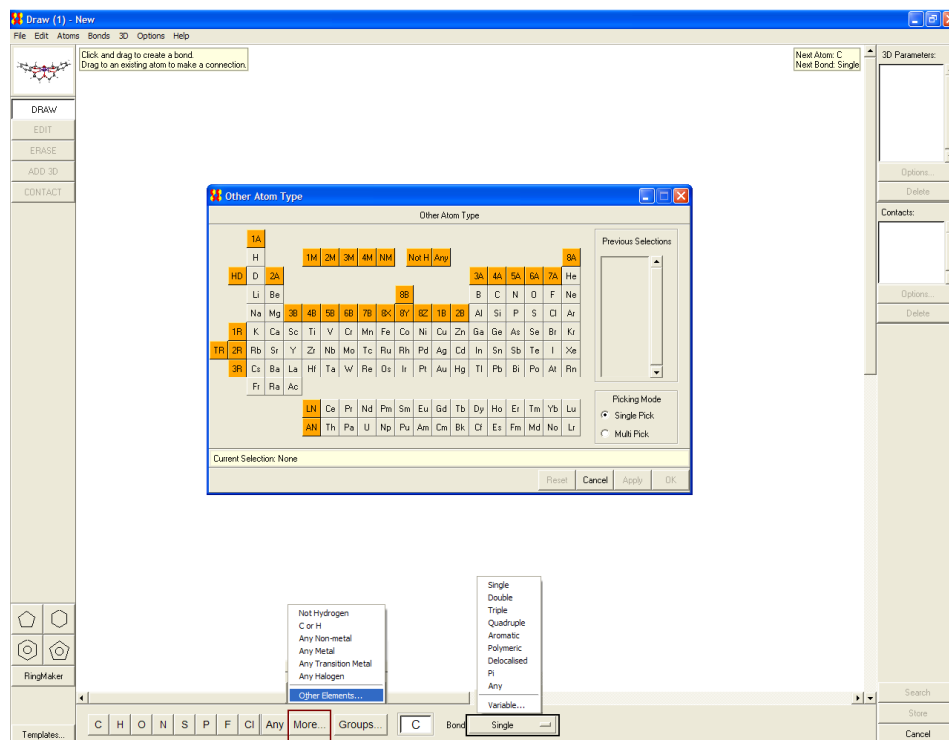


Slika 14.1 Struktura vitamina C (askorbinska kiselina).

Da bismo dobili željenu strukturu iz banke, potrebno je da u nekom od programa za pretraživanje, a to je najčešće *ConQuest*, nacrtamo njenu strukturu. Na slici 14.2 prikazana je početna stranica programa *ConQuest*. Izborom alatke *Draw*, otvara se prozor namenjen za crtanje strukture ili fragmenta strukture, koju želimo da preuzmemo iz *CSD* baze podataka. Za crtanje strukture koriste se elementi koji su prikazani na donjoj traci aktivnog prozora programa *ConQuest* (slika 14.3). Ukoliko nam je potreban element, koji nije prikazan na ovoj traci, naćićemo ga u Periodnom sistemu elemenata. Do njega dolazimo aktiviranjem opcije *More*, i izborom podopcije *Other Elements* iz padajuće liste. U novootvorenom prozoru, pritiskom levog dugmeta miša vrši se izbor traženog elementa. Tip veze se bira sa padajuće liste dugmeta sa oznakom *Single*.

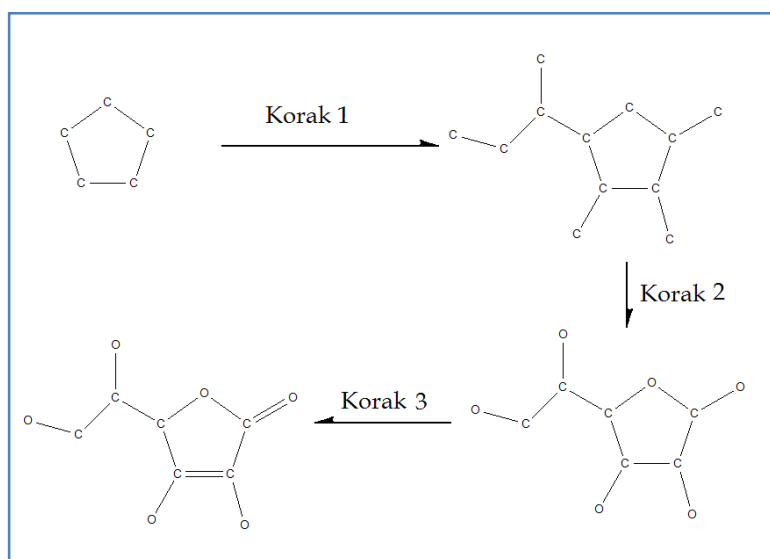


Slika 14.2 Početna stranica programa *ConQuest*.



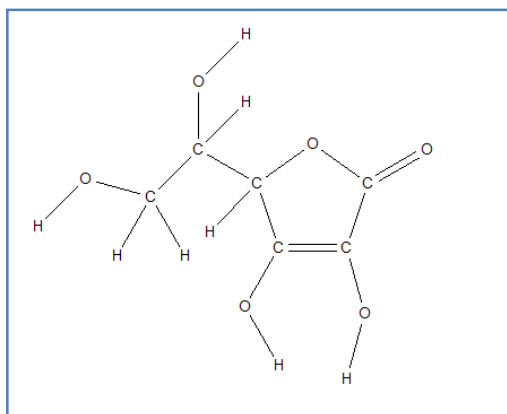
Slika 14.3 Crtanje strukture ili fragmenta strukture u programu *ConQuest*.

U donjem levom uglu aktivnog prozora nalazi se paleta sa unapred definisanim templatnim strukturama (*Templates*). Da bismo nacrtali strukturu vitamina C, iz palete sa unapred definisanim strukturama potrebno je izabrati strukturu ciklopentanskog prstena i preneti je u prozor za crtanje. Na ovaj prsten potrebno je vezati četiri supstituenta koji imaju ugljenični skelet, kao što je prikazano na slici 14.4 (korak 1). Ove supstituente vezujemo izborom simbola ugljenika sa donje trake i dodavanjem supstituenta atom po atom.



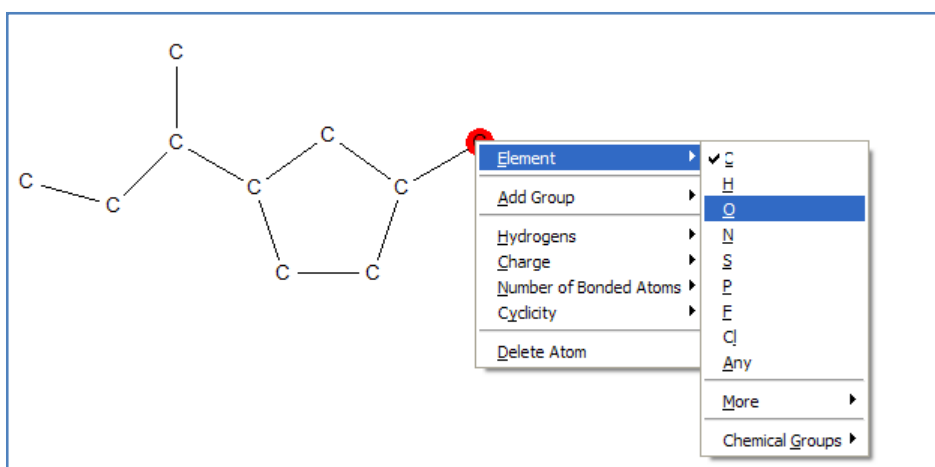
Slika 14.4 Pojedini koraci u crtanju strukture vitamina C.

U sledećem koraku (korak 2), potrebno je zameniti tri ugljenikova atoma atomima kiseonika. Kako u strukturi vitamina C postoje i dvostruke veze, neophodno je zameniti jednostuke veze dvostukim (korak 3). Poslednji korak predstavlja dodavanje vodonikovih atoma u strukturu (slika 14.5).



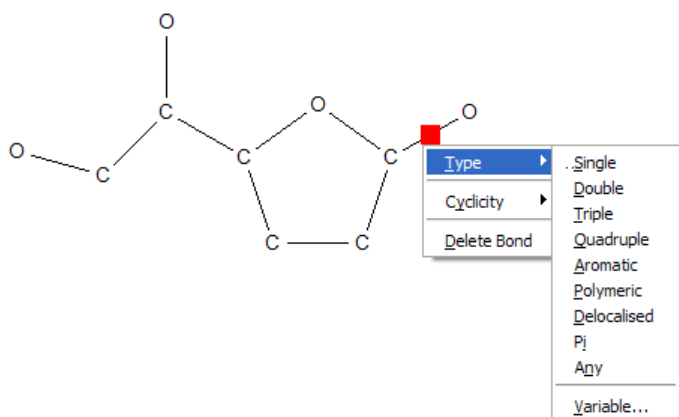
Slika 14.5 Struktura nakon ubacivanja atoma vodonika.

Zamena jednog elementa drugim, vrši se pritiskom desnog dugmeta miša na element koji želimo da zamenimo, a zatim izborom opcije *Element* (slika 14.6). Sa padajuće liste koja se pojavila potrebno je izabrati simbol elementa kojim želimo da zamenimo prvobitni element.



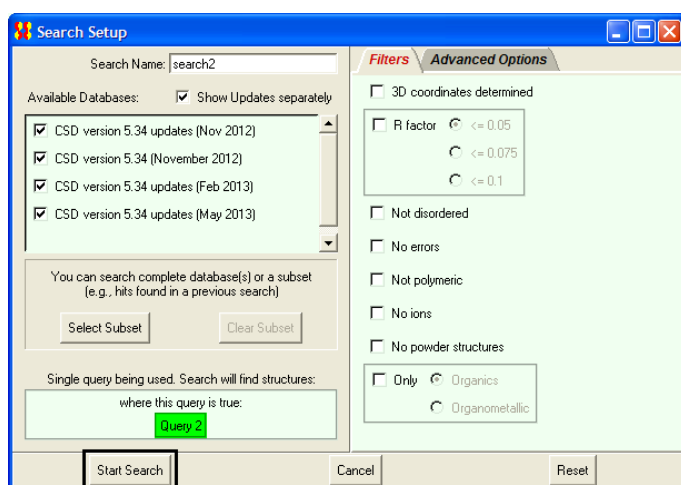
Slika 14.6 Zamena atoma.

Na sličan način se vrši i promena tipa veze (slika 14.7). Desnim dugmetom miša izaberemo vezu koji želimo da zamenimo, i iz padajuće liste izaberemo opciju *Type*. U novootvorenoj listi biće ponuđene različiti tipovi veza. Za crtanje strukture vitamina C potrebno je izabrati dvostruku vezu (*Double*).



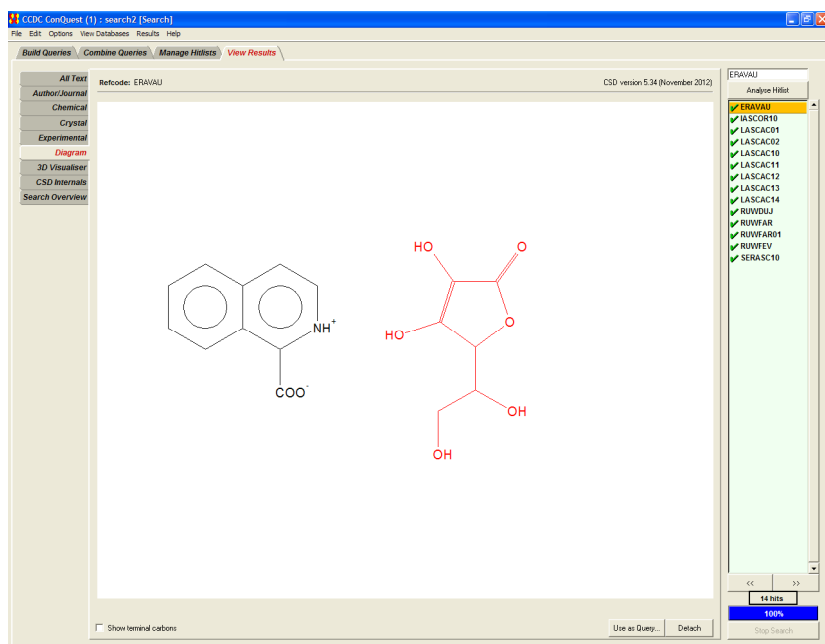
Slika 14.7 Promena tipova veza.

Pretraga CSD baze podataka, na osnovu unete strukture, započinje se izborom dugmeta *Search*, koje se nalazi u donjem desnom uglu početnog prozora programa *ConQuest*. Nakon izbora ovog dugmeta otvoriće se novi prozor, u kome se mogu podesiti filteri pretrage (slika 14.8). Filteri pretrage se uglavnom odnose na način snimanja i rezoluciju traženih struktura i zahtevaju bolje poznavanje eksperimenta rendgenske kristalografske analize, pa ih nećemo detaljnije objašnjavati. Unapred definisane opcije za filtere pretrage daju sasvim zadovoljavajuće rezultate. Pretrage se nastavlja izborom dugmeta *Start Search*.



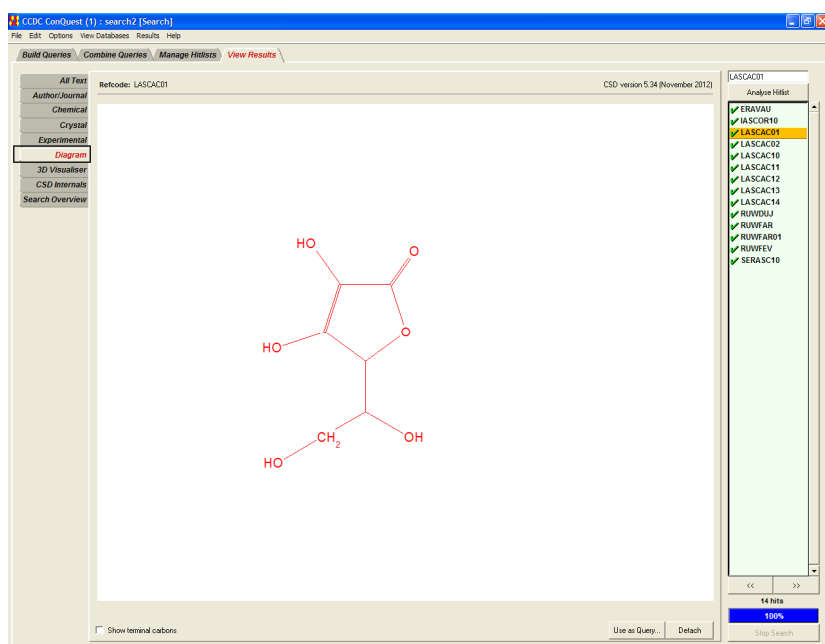
Slika 14.8 Prozor za podešavanje filtera i započinjanje pretrage.

Program započinje pretragu CSD baze podataka, što se može videti po pokazivaču statusa pretrage u donjem desnom uglu prozora programa *ConQuest* (slika 14.9). Pretraga je završena kada status pretrage dođe do vrednosti 100%. Paralelno sa napredovanjem pretrage baze podataka, u prozoru sa desne strane će biti prikazani kodovi pronađenih struktura. Sve strukture deponovane u CSD bazi podataka, koje imaju u sebi vitamin C će biti pronađene.



Slika 14.9 Prozor sa rezultatima pretrage.

Na slici 14.9 vidimo kako izgleda radna strana programa, po završetku pretrage. Pretragom je dobijeno 14 struktura, koje zadovoljavaju kriterijum pretrage, a to je struktura vitamina C. Lista kodova, za kristalne strukture koje zadovoljavaju kriterijum pretrage, nalazi se sa desne strane radne površine. U sredini radne površine kartice *Diagram*, nalazi se prikaz strukture čiji kod je izabran (u ovom slučaju je to struktura sa kodom ERAVAU). Kao što se može videti na slici 14.9, u izabranoj kristalnoj strukturi, pored askorbinske kiseline nalazi se se i molekul 1-izohinolin karboksilne kiseline. S druge strane, u strukturi sa kodom LASCAO10 (slika 14.10), nalazi se samo molekul askorbinske kiseline.



Slika 14.10 Radna površina kartice *Diagram*.

Detaljniji podaci o izabranoj strukturi mogu se pronaći na karticama koje se nalaze sa leve strane radne površine. Tako, podatke o autorima koji su snimili i rešili kristalnu strukturu molekula kao i o časopisu u kome je ova struktura objavljena, možemo naći na kartici *Author/Journal* (slika 14.11).

Build Queries Combine Queries Manage Hitlists View Results

All Text Author/Journal Chemical Crystal Experimental Diagram 3D Visualiser CSD Internals Search Overview

Refcode: LASCAC01 CSD version 5.34 (November 2012)

Author(s): J. Hvoslef

Journal: Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Crystallogr. Cryst. Chem.

Volume: 24

Page: 1431

Year: 1968

Publication DOI: [10.1107/S0567740868004449](https://doi.org/10.1107/S0567740868004449)

Deposition: IUCr A08285

Notes:

Slika 14.11 Podaci na kartici *Author/Journal*.

Za prikaz trodimenzionalne strukture molekula, moramo izabrati karticu *3D Visualiser* sa leve strane prozora programa *ConQuest* (slika 14.12). Trodimenzioni prikaz molekula možete rotirati pritiskom levog dugmeta miša i povlačenjem miša po ekranu.

Build Queries Combine Queries Manage Hitlists View Results

All Text Author/Journal Chemical Crystal Experimental Diagram 3D Visualiser CSD Internals Search Overview

Refcode: LASCAC14

LASCAC14

Analyse Hitlist

- ✓ ERAVAU
- ✓ IASCOR10
- ✓ LASCAC01
- ✓ LASCAC02
- ✓ LASCAC10
- ✓ LASCAC11
- ✓ LASCAC12
- ✓ LASCAC13
- ✓ LASCAC14
- ✓ RUWDUJ
- ✓ RUWFAR
- ✓ RUWFAR01
- ✓ RUWFEV
- ✓ SERASC10

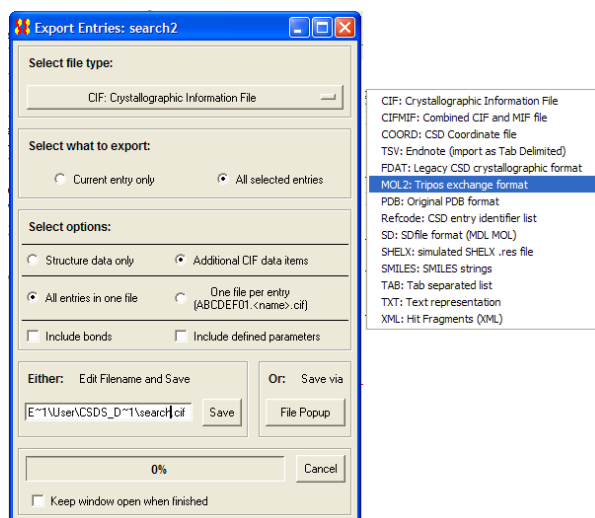
Slika 14.12 Radna površina kartice *3D Visualiser*.

Snimanje izabrane kristalne strukture, ili svih pronađenih struktura, vrši se u nekoliko koraka. Iz trake sa meniima izaberemo meni *File* i iz padajuće liste opciju za eksportovanje rezultata pretrage (opcija *Export Entries as*). Nakon toga se otvara novi dijalog prozora *Export Entries* (slika 14.13). Aktiviranjem alatke *Select file type* pojaviće se lista sa svim formatima u kojima program *ConQuest* može da snimi strukturu molekula. Izabraćemo format *MOL2* ili *PDB*, jer se datoteke snimljene u tom formatu mogu otvoriti u velikom broju programa za prikazivanje trodimenzionalne strukture molekula, uključujući i program *ArguLab*. U *Select what to export*

delu, možete izabrati da li ćete snimiti samo izabranu strukturu (opcija *Current entry only*) ili sve strukture dobijene pretragom (opcija *All selected entries*).

Aktiviranjem opcije *One file per entry* obezbeđuje se da svaka struktura bude snimljena u zasebnu datoteku. Ovu opciju je potrebno aktivirati svaki put kada planirate da otvarate strukture u programima za prikazivanje trodimenzionalne strukture molekula, zato što većina tih programa ne može da učitava datoteke sa višestrukim unosima.

Pomoću opcije *File Popup* bira se direktorijum na disku računaru, u kome će datoteke biti snimljene. Na kraju, snimanje datoteke započinje se izborom dugmeta *Save*.



Slika 14.13 Prozor sa opcijama za snimanje struktura.

Proteinska baza podataka

Proteinska baza podataka ili skraćeno *PDB* (od engl. *Protein Data Bank*), je baza trodimenzionalnih strukturnih podataka velikih bioloških molekula, kao što su proteini i nukleinske kiseline. Baza je napravljena na osnovu podataka dobijenih rendgenskom strukturnom analizom ili NMR spektroskopijom. Većina struktura određena je difrakcijom X-zraka, dok je, svega oko 15% struktura određeno NMR spektroskopijom.

Proteinska baza podataka je dostupna na internetu (<http://www.rcsb.org/pdb>), a proteinske strukture mogu se preuzeti u obliku .pdb datoteke ili kao Makromolekularni kristalografski informacioni fajl (*mmCIF*). Svaka struktura objavljena u proteinskoj bazi podataka dobija identifikator (*PDB ID*) koji sadrži četiri karaktera (kombinacija brojeva i slova). Na primer, **1SI4** je *PDB* identifikator za jednu od kristalnih struktura humanog hemoglobina A2.

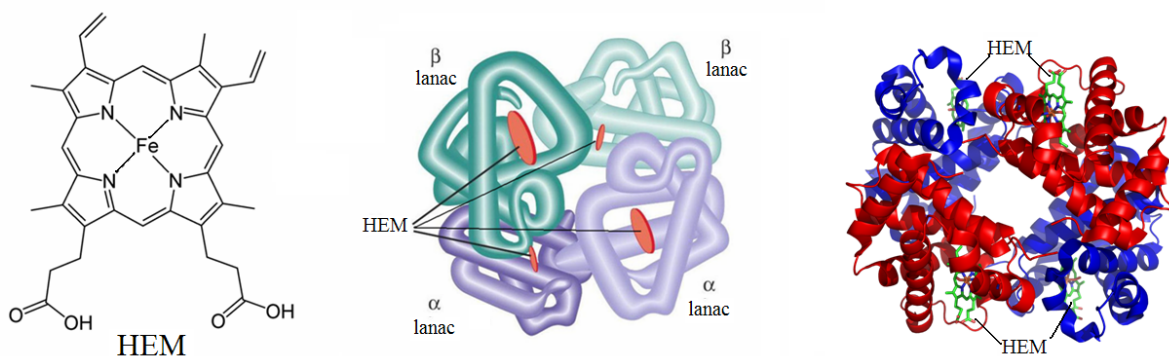
U ovom delu praktikuma, objasnićemo kako se mogu preuzeti datoteke sa strukturama proteina iz proteinske baze podataka. Strukturu ćemo preuzeti u .pdb formatu, jer je prikazivanje datoteka u

ovom formatu moguće u programu *ArgusLab*. Kao primer, izabrali smo kristalnu strukturu hemoglobina A2.

Hemoglobin je respiratorni protein koji se nalazi u eritrocitima (crvena krvna zrnca), i ima funkciju u prenosu kiseonika iz pluća ili škrge u ostale delove tela. Pored prenosa kiseonika, hemoglobin ima ključnu ulogu i u prenosu ugljen-dioksida i vodonikovih jona. Vezivanje ugljen-dioksida prouzrokuje konformacione promene u proteinu, i na taj način olakšava oslobađanje kiseonika.

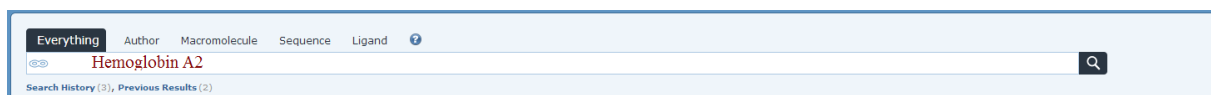
Hemoglobin pripada porodici metaloproteina, koji se sastoji od proteinskog dela (globin) i neproteinskog dela (hem). Hemoglobin čine četiri proteinske podjedinice (slika 14.14), a svaka od ovih podjedinica se sastoji od proteinskog lanca za koji je vezan hem, odnosno porfirinski kompleks gvožđa.

Hemoglobin A je glavni prenosnik kiseonika kod odraslih osoba (95-98%), i sastoji se od dva para međusobno jednakih α i β lanaca. Hemoglobin A2 (2α i 2δ lanca) i fetalni hemoglobin (2α i 2γ lanca) takođe se mogu naći, ali u manjim količinama.



Slika 14.14 Struktura hema i hemoglobina.

Unošenjem Internet adrese proteinske baze podataka (<http://www.rcsb.org/pdb>), u internet pretraživač otvoriće se početna strana ove baze, čiji sadržaj nećemo detaljnije opisivati. Najvažniji deo ove strane je polje za pretragu koje se nalazi u gornjem delu strane (slika 4.15). U ovo polje se mogu unositi razni parametri pretrage; *PDB* baza podataka se može pretraživati na osnovu imena proteina, imena autor koji je odredio strukturu proteina, *PDB ID* proteina, aminokiselinske sekvence, imena liganda itd. Pošto mi znamo ime proteina čiju strukturu želimo da pronađemo, dovoljno je da u polje za pretragu unesemo: "Hemoglobin A2".



Slika 14.15 Polje za pretragu *PDB* baze podataka.

Pretragom *PDB* baze podataka po ovom kriterijumu dobijeno je dvanaest struktura hemoglobina A2. Kao što se vidi sa slike 14.16, proteini su razdvojeni u grupe, u zavisnosti od organizma iz kojeg su izolovani, eksperimentalne metode korišćene za određivanje strukture, rezolucije strukture, itd.

The screenshot shows the PDB search interface. At the top, it indicates '12 Structure Hits', '1 Unreleased Structure', '7 Citations', '13 Ligand Hits', and '104 Web Page Hits'. The search parameters are 'Text Search for: hemoglobin a2'. Below this, there are search suggestions for 'Molecule Name' and 'Ontology Terms'. The 'Query Refinements' section includes filters for Organism (Homo sapiens, Oligobranchia mashkoi), Taxonomy (Eukaryota only), Experimental Method (X-ray), X-ray Resolution (less than 1.5 Å, 1.5-2.0 Å, 2.0-2.5 Å, 2.5-3.0 Å, 3.0 and more Å), Release Date (before 2000, 2000-2005, 2005-2010, more choices), Polymer Type (Protein), SCOP Classification (Hemoglobin, beta-chain, Hemoglobin, alpha-chain), Protein Symmetry (Cyclic, Dihedral, more choices), and Protein Stoichiometry (Heteromer, Homomer, more choices). At the bottom, there is a 'Refine Query with Advanced Search' button and a 'Show only representatives at' dropdown menu set to 'sequence identity'.

Slika 14.16 Prozor sa rezultatima pretrage *PDB* baze podataka.

Ispod ovog dela, nalaze se polja sa podacima za svih dvanaest kristalnih struktura, koje su pronađene pretragom (slika 14.17). U gornjem levom uglu svakog polja nalazi se *PDB* identifikator kristalne strukture.

U nastavku, pokazaćemo kako se preuzima *PDB* datoteka sa strukturom proteina, za koji znamo *PDB* identifikator. Izabrali smo strkturu humanog hemoglobina A2, čiji je identifikator **1SI4**.

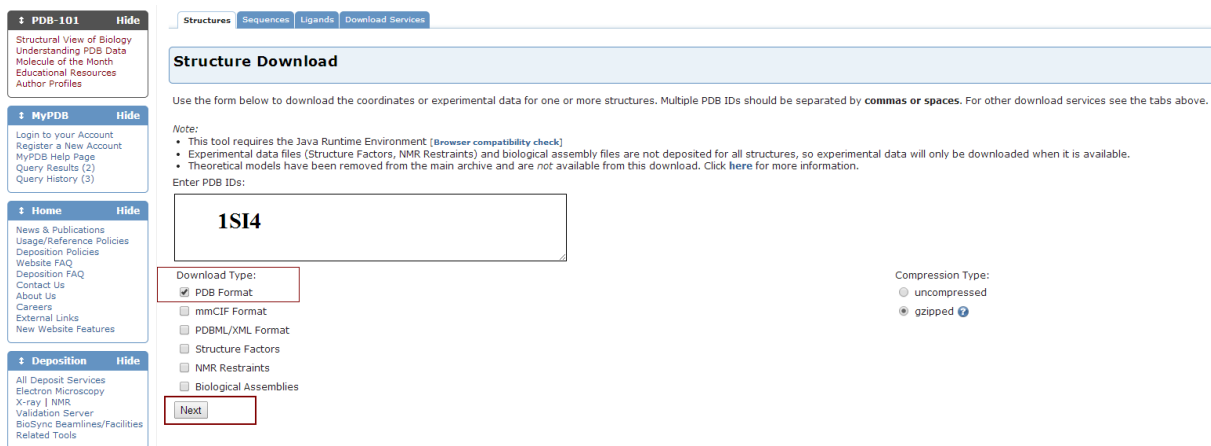
The screenshot shows the PDB entry page for 1SI4. The entry title is 'Crystal structure of Human hemoglobin A2 (in R2 state) at 2.2 Å resolution'. The authors listed are Sen, U., Dasgupta, J., Choudhury, D., Datta, P., Chakrabarti, A., Chakrabarty, S.B., Chakrabarty, A., and Dattagupta, J.K. The release date is 2004-10-26. The experiment is 'X-RAY DIFFRACTION with resolution of 2.20 Å' and the residue count is 574. The compound consists of 2 Polymers and 2 Ligands. The citation is 'Crystal structures of HbA2 and HbE and modeling of hemoglobin delta4: interpretation of the thermal stability and the antisickling effect of HbA2 and identification of the ferrocyanide binding site in Hb. (2004) Biochemistry 43: 12477-12488'. The molecule is identified as 'PDB Pioneers, Erythrocrurin, Hemoglobin'.

Below the 1SI4 entry, there is another entry for 1HBA, titled 'HIGH-RESOLUTION X-RAY STUDY OF DEOXYHEMOGLOBIN ROTHSCHILD 37BETA TRP-> ARG: A MUTATION THAT CREATES AN INTERSUBUNIT CHLORIDE-BINDING SITE'. Its authors are Kavanagh, J.S. and Amore, A., released on 1994-01-31. The experiment is 'X-RAY DIFFRACTION with resolution of 2.10 Å' with a residue count of 574. The citation is 'High-resolution X-ray study of deoxyhemoglobin Rothschild 37 beta Trp->Arg: a mutation that creates an intersubunit chloride-binding site. (1992) Biochemistry 31: 4111-4121'.

Slika 14.17 Prikaz pojedinačnih referenci za strukture dobijene pretragom.

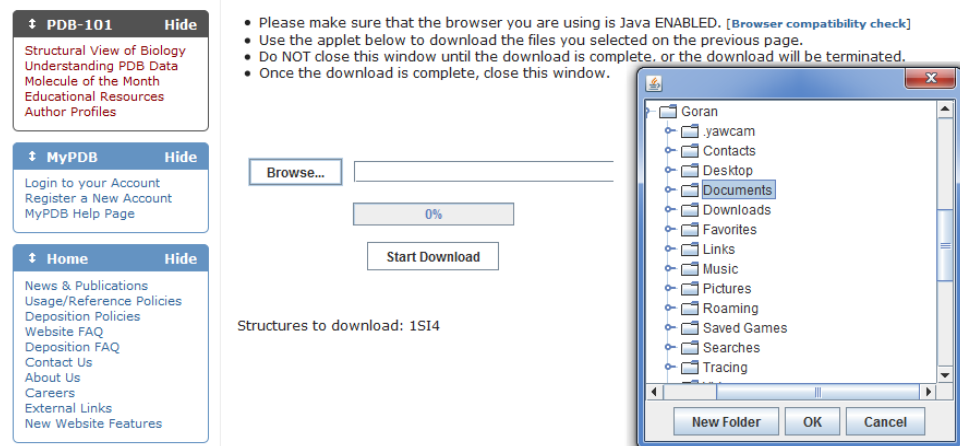
Na levoj strani početne stranice *PDB* baze podataka nalazi se 6 kartica, među kojima je i kartica *Tools*. Aktiviranjem opcije za preuzimanje datoteke (*Download Files*), otvara se nova Internet stranica (slika 4.18). Na ovoj stranici, u polje *Enter PDB Ids* može se uneti *PDB* identifikator

traženog proteina. Takođe, potrebno je podesiti da preuzeta datoteka bude u PDB formatu, što se postiže izborom opcije *PDB format*. Nakon toga, potrebno je izabrati dugme *Next*.



Slika 14.18 Pretraživanje prema *PDB ID*.

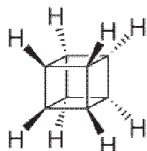
Otvoriće se nova stranica na kojoj, aktiviranjem dugmeta *Browse*, se može izabrati direktorijum na disku računara u kome će biti sačuvana izabrana datoteka. Proces preuzimanja se započinje izborom dugmeta *Start Download* (slika 14.19).



Slika 14.19 Preuzimanje datoteke sa strukturom proteina.

Prezetu datoteku možete otvoriti u programu *ArgusLab*.

Zadatak 1. Kuban je organsko jedinjenje, koje sadrži 8 atoma ugljenika i 8 atoma vodonika. Struktura jedinjenja je prikazana na slici levo. Pretragom *CSD*, utvrdite da li postoji kristalna struktura biskubna ili kubilkubana, koji se sastoji iz dva prstena, povezana jednostrukom C-C vezom. Ukoliko postoji, u polje ispod, navesti referencu naučnog rada u kojem je ova struktura opisana.



Referenca: _____

Zadatak 2. Pretragom *PDB* baze podataka pronađite naučni rad u kojem je opisana struktura proteina Delta A1-A4 insulina. Za pronađeni rad i protein popunite sledeće podatke:

PDB ID: _____

Autori: _____

Naslov rada: _____

Časopis: _____

Godina izdanja: _____

Broj početne stranice rada: _____

Iz *PDB* baze podataka preuzmite datoteku .pdb sa koordinatama atoma ovog proteina i otvorite je u programu *ArgusLab*.

Datum

Potpis asistenta

Dodatak 1.

Pravila pisanja teksta na računaru

Paralelno sa razvojem računara došlo je i do naglog povećanja komunikacije između korisnika u pisanoj formi. Međutim, pravopisna pravila, koja se odnose na kucani tekst su u najvećoj meri zanemarena u školskom programu. Zbog toga je sve veći broj tekstova koji nisu otkucani u skladu sa pravopisnim pravilima za kucani tekst. U ovom dodatku ćemo izneti nekoliko najvažnijih pravopisnih pravila koja se primenjuju prilikom kucanja teksta:

- iza svake reči unosi se jedan razmak;
- iza svakog znaka interpunkcije (tačka, upitnik, uzvičnik, zapeta, dvotačka, tačka zapeta) unosi se jedan razmak;
- znakovi interpunkcije pišu se zajedno s reči ili brojem iza kojeg slijede tj. bez razmaka;
- na kraju pasusa, iza znaka interpunkcije ne treba kucati razmak, nego znak za novi red (Enter); pasus ne sme da počinje razmakom;
- naglašene reči ne treba kucati sa razmakom između slova;
- navodnici na početku navoda i otvorena zagrada pišu se zajedno sa reči ispred koje se nalaze tj. bez razmaka; navodnici na kraju navoda i zatvorena zagrada pišu se zajedno sa reči iza koje se nalaze tj. bez razmaka;
- ako iza neke reči dolazi tekst u zagradi ili pod navodnicima, između te reči i početka zagrade, odnosno otvorenih znakova navoda, stavlja se jedan razmak;
- aritmetički znakovi (+ - x : =) uvek se unose kao samostalne reči, sa razmakom ispred i iza njih; izuzetak je dvotačka kada se koristi u funkciji oznake razmere, kada se kuca bez razmaka (npr. R 1:1000);
- procenat i promil (% , ‰), ako stoje uz broj, kucaju se bez razmaka (npr. 75%);
- merne oznake se kucaju sa razmakom ispred i iza (npr. "energija je 10 kJ...");
- crtica (-) se piše zajedno s rečima između kojih stoji, ako se radi o složenici (npr: prirodno-matematički), a odvojeno ako se koristi u neku drugu svrhu (npr. „Klasične vodonične veze – kako ih Štajner definiše...“);
- skraćenice u tekstu se pišu u zagradi nakon navođenja njihovog punog značenja, a onda se u daljem tekstu koristi samo skraćenica; (npr. „Međunarodna unija za čistu i

primenjen u hemiju (IUPAC) osnovana je 1919. godine. IUPAC je organizacija koju čine...“)

- ako se datum piše samo arapskim brojevima iza svakog broja se piše tačka bez razmaka (npr. 8.2.2013.); datum se piše u formatu dan, mesec, godina; vodeće nule u broju dana i meseca se ne kucaju, osim u tehničkim dokumentima gde postoji mogućnost falsifikovanja (npr. 08.02.2013.);
- decimalni brojevi se kucaju sa zapetom kao znakom za razdvajanje celog i decimalnog dela, bez razmaka (1,234). Tačka se može koristiti kao znak za razdvajanje klasa, što se često koristi za pisanje novčanih iznosa (1.234,56).
- latinično slovo đ se ne kuca kao dvoznak dj.

Dodatak 2.

Prečice koje se koriste u programu Word

Kada kucate neki duži tekst veoma je zamorno i dugotrajno stalno podizati ruke sa tastature da biste uradili neko formatiranje ili izbor dela teksta. Ukoliko zapamtite nekoliko jednostvanih prečica sa tastature ceo posao ćete moći da uradite znatno brže. U ovom dodatku ćemo navesti samo neke, najčešće korišćene prečice sa tastature. Listu svih mogućih prečica sa tastature možete pronaći u meniju *Help* ⇒ *Keyboard Shortcuts*.

Ctrl + A (*Select all*) — za izbor celokupnog teksta u otvorenom dokumentu.

Shift + strelica (leva,desna,gore,dole) — za izbor dela teksta u željenom pravcu.

Ctrl + B (*Bold*) — za formatiranje izabranog teksta u masna slova

Ctrl + C (*Copy*) — za kopiranje izabranog teksta.

Ctrl + X (*Cut*) — za isecanje izabranog teksta.

Ctrl + P (*Print box*) — za otvaranje prozora sa opcijama za štampanje teksta.

Ctrl + F (*Find box*) — za otvaranje prozora za pretragu sadržaja.

Ctrl + I (*Italic*) — za formatiranje izabranog teksta u kurzivni ispis.

Ctrl + U (*Underline*) — za podvlačenje izabranog teksta.

Ctrl + V (*Paste*) — za prenošenje kopiranog ili isečenog teksta.

Ctrl + Z (*Undo*) — za poništavanje poslednje urađene akcije.

Ctrl + R (*Right*) — za poravnavanje teksta na desnu stranu.

Ctrl + L (*Left*) — za poravnavanje teksta na levu stranu.

Ctrl + E (*Center*) — za poravnavanje teksta na sredini stranice.

Ctrl + J (*Justify*) — za obostrano poravnavanje teksta.

Ctrl + Shift + F (*Font*) — Opcija koja se koristi za promenu fonta.

Ctrl + Shift + * — za prikazivanje odnosno skrivanje karaktera koji se ne štampaju.

Ctrl + strelica levo — za pomeranje kursora jednu reč na levo.

Ctrl + strelica desno — za pomeranje kursora jednu reč na desno.

Ctrl + strelica na gore — za pomeranje kursora na početak pasusa.

Ctrl + strelica na dole — za pomeranje kursora na početak narednog pasusa.

Ctrl + Del — za brisanje reči koja se nalazi desno od kursora.

Ctrl + Backspace — za brisanje reči koja se nalazi levo od kursora.

Ctrl + End — za pomeranje kursora na kraj dokumenta.

Ctrl + Home — za pomeranje kursora na početak dokumenta.

Ctrl + Spacebar — za uklanjanje svih vrsta formatiranja znakova na izabranom tekstu. Poništava formatiranje masnih slova, kurzivni ispis, podvlačenje teksta itd.

Alt + Ctrl + F2 — za otvaranje novog dokumenta.

Ctrl + F2 (*Print preview*) — prikazuje kako će tekst izgledati prilikom štampanja.

Shift + Home — za izbor teksta od trenutne pozicije kursora do početka reda.

Shift + End — za izbor teksta od trenutne pozicije kursora do kraja reda.

Shift + F3 — svakoj reči izabranog teksta se dodeljuje veliko početno slovo. Ponovnim pritiskom sve reči izabranog teksta su ispisane velikim slovima.

Shift + Insert (*Paste*) — za prenošenje kopiranog ili isečenog teksta.

F4 (*Repeat*) — za ponavljanje poslednje radnje koja je obavljena.

F5 — za otvaranje prozora za pretragu, zamenu i "go to".

Ctrl + Shift + F6 — za prelazak na drugi otvoreni dokument.

F7 (*Spelling & Grammar*) — za proveru gramatike i pravopisa u izabranom tekstu ili celom dokumentu.

F12 (*Save as*) — za snimanje dokumenta na disk pod novim imenom.

Shift + F12 (*Save*) — za snimanje dokumenta na disk pod postojećim imenom.

Ctrl + Shift + F12 (*Print*) — za štampanje dokumenta.

Alt + Shift + D (*Date*) — za ubacivanje datuma u aktivni dokument.

Alt + Shift + T (*Time*)— za ubacivanje trenutnog vremena u aktivni dokument.

Shift + link — Otvaranje veze u novom prozoru.

Taster Windows + D — za prebacivanje na Windows radnu površinu.

Ctrl + enter (*Page Break*)— za umetanje preloma strane.

Prečice u kojima je potrebno koristiti miša

Jedan pritisak levog tastera — ukoliko jednom pritisnete i držite levi taster i pomerate miša u nekom pravcu izabraćete tekst u tom pravcu.

Dvostruki pritisak levog tastera — za izbor cele reči.

Trostruki pritisak levog tastera — za izbor celog pasusa.

Ctrl + točak na mišu — za uvećavanje ili smanjivanje veličine trenutnog prikaza dokumenta.

Dodatak 3.

Unicode kodovi nekih najčešće korišćenih simbola

Da biste uneli neki simbol preko tastature potrebno je otkucati kod tog simbola a zatim pritisnuti kombinaciju tastera **Alt+X**.

Simbol	Kod simbola	Opsi simbola
Δ	0394	Grčko veliko slovo delta
Λ	039B	Grčko veliko slovo lambda
Σ	03A3	Grčko veliko slovo sigma, simbol za sumu
Φ	03A6	Grčko veliko slovo fi
Ψ	03A8	Grčko veliko slovo psi, simbol za talasnu funkciju
Ω	03A9	Grčko veliko slovo omega
α	03B1	Grčko malo slovo alfa
β	03B2	Grčko malo slovo beta
γ	03B3	Grčko malo slovo gama
δ	03B4	Grčko malo slovo delta, oznaka parcijalnog izvoda
η	03B7	Grčko malo slovo eta
θ	03B8	Grčko malo slovo teta, označavaju se uglovi
λ	03BB	Grčko malo slovo lambda, označava se talasna dužina zračenja
μ	03BC	Grčko malo slovo mi, označava se mikro odnosno 10^{-6}
ν	03BD	Grčko malo slovo ni, oznaka frekvencije
π	03C0	Grčko malo slovo pi, oznake tipa hemijske veze ili molekulskih orbitala
ρ	03C1	Grčko malo slovo ro, oznaka za gustinu
σ	03C3	Grčko malo slovo sigma, oznaka tipa hemijske veze ili molekulskih

		orbitala
←	2190	Strelica na levo
↑	2191	Strelica na gore, koristi se da označi isparljivu supstancu
→	2192	Strelica na desno, koristi se u jednačinama reakcija
↓	2193	Strelica na dole, označava talog
↔	21C4	Dve strelice suprotnog smera, koristi se za označavanje povratne reakcije
↔	2194	Dvostruka strelica, označava rezonantne strukture (može da se koristi i za povratne reakcije ali nije preporučljivo)
·	2219	Srednja tačka, koristi se u formulama kristalohidrata ili da označi radikale
Å	00C5	Oznaka za Angstrom (dužina 1 Å = 1 × 10 ⁻¹⁰ m)
°	00B0	Oznaka za stepen
√	221A	Kvadratni koren
∞	221E	Simbol za beskonačnost
∫	222B	Oznaka za integral
±	00B1	Oznaka za plus-minus
≠	2260	Oznaka za različito
≤	2264	Oznaka za manje ili jednako
≥	2265	Oznaka za veće ili jednako

Dodatak 4.

Funkcije programa Excel iz kategorije *Math & Trig*

Funkcija	Opis
ABS	Računa apsolutnu vrednost broja
ACOS	Računa inverzni (arkus) kosinus broja
ACOSH	Računa inverzni hiperbolični kosinus broja
ASIN	Računa inverzni (arkus)-sinus broja
ASINH	Računa inverzni hiperbolični sinus broja
ATAN	Računa inverzni (arkus)-tangens broja
ATAN2	Računa inverzni (arkus)-tangens iz x- i y- koordinata
ATANH	Računa inverzni hiperbolični tangens broja
CEILING	Zaokružuje broj do najbližeg celog broja
COMBIN	Računa broj kombinacija bez ponavljanja za <i>argument 1</i> elemenata <i>argument 2</i> klase
COS	Računa kosinus broja
COSH	Računa hiperbolični kosinus broja
DEGREES	Pretvara radijane u stepene
EVEN	Zaokružuje broj do najbližeg parnog celog broja
EXP	Računa <i>e</i> podignuto na stepen zadatog broja (e^x)
FACT	Računa faktorijel broja
FACTDOUBLE	Računa dvostruki faktorijel broja
FLOOR	Zaokružuje broj naniže, prema nuli
GCD	Računa najveći zajednički delilac
INT	Zaokružuje broj do najbližeg celog broja
LCM	Računa najmanji zajednički množilac
LN	Računa prirodni logaritam zadatog broja ($\ln x$)
LOG	Računa logaritam broja za navedenu osnovu
LOG10	Računa logaritam broja za osnovu 10 ($\log x$)
MDETERM	Računa determinantu zadate matrice (područja ćelija)
MINVERSE	Računa inverznu matricu zadate matrice (područja ćelija)
MMULT	Množi dve marice (dva područja ćelija)
MOD	Deli dva broja i upisuje ostatak nakon deljenja
MROUND	Zaokružuje broj do najbližeg množioca željenog broja
MULTINOMIAL	Računa multinomni skup brojeva
ODD	Zaokružuje broj do najbližeg neparnog celog broja
PI	Ispisuje vrednost broja pi

POWER	Podiže broj na zadati stepen
PRODUCT	Množi argumente
QUOTIENT	Deli dva broja i ispisuje samo celobrojni deo količnika
RADIANS	Pretvara stepene u radijane
RAND	Ispisuje nasumični broj između 0 i 1
RANDBETWEEN	Ospisuje nasumični broj između dva navedena broja
ROMAN	Pretvara arapske brojeve u rimske, kao tekst
ROUND	Zaokružuje broj na određeni broj cifara
ROUNDDOWN	Zaokružuje broj naniže, prema nuli
ROUNDUP	Zaokružuje broj naviše, od nule
SERIESSUM	Računa zbir stepenog niza na osnovu formule
SIGN	Određuje znak zadatog broja, ispisuje 1 ako je broj pozitivan, 0 ako je broj 0 i -1 ako je broj negativan
SIN	Računa sinus datog ugla
SINH	Računa hiperbolični sinus broja
SQRT	Računa koren broja
SQRTPI	Računa koren zadatog broja pomnoženog sa π
SUBTOTAL	Računa podzbir na popisu ili u bazi podataka
SUM	Sabira argumente
SUMIF	Sabira ćelije navedene po zadatom kriterijumu
SUMIFS	Sabira ćelije u redu koji zadovoljava višestruke kriterijume
SUMPRODUCT	Računa zbir umnožaka ćelija područja
SUMSQ	Računa zbir kvadrata argumenata
SUMX2MY2	Računa zbir razlika kvadrata odgovarajućih vrednosti u dva područja
SUMX2PY2	Računa zbir zbira kvadrata odgovarajućih vrednosti u dva područja
SUMXMY2	Računa zbir kvadrata razlike odgovarajućih vrednosti u dva područja
TAN	Računa tangens broja
TANH	Računa hiperbolični tangens broja
TRUNC	Odbacuje decimalni deo broja pretvarajući ga u celi broj

Dodatak 5.

Funkcije programa Excel iz podkategorije *Statistical*

Funkcija	Opis
AVEDEV	Računa prosek apsolutnih odstupanja tačaka podataka od svojih srednjih vrednosti
AVERAGE	Računa prosek argumenata
AVERAGEA	Računa prosek argumenata, uključujući brojeve, tekst i logičke vrednosti
AVERAGEIF	Računa prosek (aritmetičku sredinu) svih ćelija koje zadovoljavaju zadate kriterijumume
AVERAGEIF	Računa prosek (aritmetičku sredinu) svih ćelija koje zadovoljavaju višestruke kriterijumume
BETADIST	Računa funkciju kumulativne raspodele
BETAINV	Računa inverziju kumulativne funkcije raspodele za navedenu beta raspodelu
BINOMDIST	Računa pojedine binomne izraze raspodele verovatnoće
CHIDIST	Računa verovatnost hi-kvadratne raspodele
CHIINV	Računa inverznu verovatnoću za hi-kvadrat raspodelu
CHITEST	Računa test za nezavisne
CONFIDENCE	Računa interval pouzdanosti za srednju vrednost populacije
CORREL	Računa koeficijent korelacije između dva skupa podataka
COUNT	Prebrojava koliko ima brojeva na listi argumenata
COUNTA	Prebrojava koliko ima vrednosti na listi argumenata
COUNTBLANK	Broji prazne ćelije
COUNTIF	Broji ćelije u razmaku koji zadovoljava zadati kriterijumum
COUNTIFS	Broji ćelije u razmaku koji zadovoljava višestruke kriterijume
COVAR	Računa kovarijantu, prosek umnožaka odstupanja u paru
CRITBINOM	Računa najmanju vrednost za koju je kumulativna binomna raspodela manja ili jednaka vrednosti kriterijuma
DEVSQ	Računa zbir kvadrata odstupanja
EXPONDIST	Računa eksponencijalnu raspodelu
FDIST	Računa F raspodelu verovatnoće
FINV	Računa inverznu F raspodelu verovatnoće
FISHER	Računa Fisherovu transformaciju
FISHERINV	Računa inverznu Fisherovu transformaciju
FORECAST	Računa vrednost na linearnom trendu

FREQUENCY	Računa raspodelu frekvencija kao vertikalno polje
FTEST	Računa rezultat F-testa
GAMMADIST	Računa gama raspodelu
GAMMAINV	Računa inverznu kumulativnu gama raspodelu
GAMMALN	Računa prirodni logaritam gama funkcije, $\Gamma(x)$
GEOMEAN	Nalazi geometrijsku sredinu
GROWTH	Računa vrednost na eksponencijalnom trendu
HARMEAN	Računa harmonijsku srednju vrednost
HYPGEOMDIST	Računa hipergeometrijsku raspodelu
INTERCEPT	Računa odsečak crte linearne regresije
KURT	Računa kurtosis skupa podataka
LARGE	Računa k-tu vrednost po veličini u skupu podataka
LINEST	Računa parametre linearnog trenda
LOGEST	Računa parametre eksponencijalnog trenda
LOGINV	Računa inverznu normalnu logaritamsku raspodelu
LOGNORMDIST	Računa kumulativnu normalnu logaritamsku raspodelu
MAX	Nalazi najveću vrednost u listi argumenata
MAXA	Nalazi maksimalnu vrednost na listi argumenata, uključujući brojeve, tekst i logičke vrednosti
MEDIAN	Nalazi medijan zadatih brojeva
MIN	Nalazi minimalnu vrednost na listi argumenata
MINA	Nalazi najmanju vrednost na listi argumenata, uključujući brojeve, tekst i logičke vrednosti
MODE	Nalazi najčešću vrednost u skupu podataka
NEGBINOMDIST	Računa negativnu binomnu raspodelu
NORMDIST	Računa normalnu kumulativnu raspodelu
NORMINV	Računa inverznu normalnu kumulativnu raspodelu
NORMSDIST	Računa standardnu normalnu kumulativnu raspodelu
NORMSINV	Računa inverznu standardnu normalnu kumulativnu raspodelu
PEARSON	Računa Pearsonov produkt-moment koeficijent korelacije
PERCENTILE	Računa k-ti postotakvrednosti u razmaku
PERCENTRANK	Računa položaj postotka vrednosti skupa podataka
PERMUT	Računa broj permutacija za zadati broj objekata
POISSON	Računa Poissonovu raspodelu
PROB	Računa verovatnoću da su vrednosti u razmaku između dve granice
QUARTILE	Računa kvartil skupa podataka
RANK	Nalazi položaj broja na listi brojeva
RSQ	Računa kvadrat Pearsonovog produkt-moment koeficijenta korelacije
SKEW	Nalazi asimetriju raspodele

SLOPE	Računa nagib pravca linearne regresije
SMALL	Nalazi k-tu najmanju vrednost u skupu podataka
STANDARDIZE	Računa normalizovanu vrednost
STDEV	Procenjuje standardnu devijaciju na osnovu uzorka
STDEVA	Procenjuje standardnu devijaciju na osnovu uzorka, uključujući brojeve, tekst i logičke vrednosti
STDEVP	Izračunava standardnu devijaciju na osnovu cele populacije
STDEVPA	Izračunava standardnu devijaciju na osnovu cele populacije, uključujući brojeve, tekst i logičke vrednosti
STEYX	Računa standardnu grešku predviđene y-vrednosti za svaki x u regresiji
TDIST	Računa studentovu t-raspodelu
TINV	Računa inverznu studentovu t-raspodelu
TREND	Računa vrednosti po linearnom trendu
TRIMMEAN	Računa srednju vrednost unutrašnjosti skupa podataka
TTEST	Računa verovatnoću povezanu sa studentovim t-testom
VAR	Procenjuje varijantu na osnovu uzorka
VARA	Procenjuje varijantu na osnovu uzorka, uključujući brojeve, tekst i logičke vrednosti
VARP	Izračunava varijantu na osnovu cele populacije
VARPA	Izračunava varijantu na osnovu cele populacije, uključujući brojeve, tekst i logičke vrednosti
WEIBULL	Računa Weibullovu raspodelu
ZTEST	Računa jednokratnu vrednostverovatnoće z-testa

Literatura

J. Walkenbach, H. Tyson, F. Wempen, C. N. Prague, M. R. Groh, P. G. Aitken, L.A. Bucki Office 2007 Biblija, Mikro knjiga, **2008**.

ACD/ChemSketch Reference Manual, Comprehensive Interface Description, Advanced Chemistry Development, Inc, **2010**.

"A theoretical examination of the electronic structure and spectroscopy of the photosynthetic reaction center from *Rhodospseudomonas viridis*" M. A. Thompson, M. C Zerner, *J. Am. Chem. Soc.*, 113, 8210, **1991**.

"The Nature of K⁺/Crown Ether Interactions: A Hybrid Quantum Mechanical-Molecular Mechanical Study" M. A. Thompson, E. D. Glendening, D. Feller, *J. Phys. Chem.* 98, 10465-10476, **1994**.

"Excited States of the Bacteriochlorophyll b Dimer of *Rhodospseudomonas viridis*: A QM/MM Study of the Photosynthetic Reaction Center That Includes MM Polarization" M. A. Thompson, G. K. Schenter, *J. Phys. Chem.* 99, 6374-6386, **1995**.

"QM/MMpol: A Consistent Model for Solute/Solvent Polarization. Application to the Aqueous Solvation and Spectroscopy of Formaldehyde, Acetaldehyde, and Acetone" M. A. Thompson, *J. Phys. Chem.* 100, 14492-14507, **1996**.

"The Cambridge Structural Database: a quarter of a million crystal structures and rising" F. H. Allen, *Acta Crystallogr., Sect. B* 58, 380-388, **2002**.

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна библиотека Србије, Београд
004.9:54(075.8)(076)

МИЛЧИЋ, Милош, 1973-
Praktikum iz primene računara u hemiji /
Miloš Milčić, Goran Janjić. - Beograd:
Hemijski fakultet, 2014 (Beograd : Goragraf).
236 str. : ilustr. ; 30 cm

Tiraž 300. - Bibliografija: str. [237].

ISBN 978-86-7220-061-4
1. Јањић, Горан, 1977- [аутор]
а) Хемија - Апликативни програми - Вежбе
COBISS.SR-ID 205604620