

Светлана МАРКОВИЋ, Слађана ЂОРЂЕВИЋ, Изудин РЕДЖЕПОВИЋ, Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу; ЖИКО МИЛАНОВИЋ, Истраживачко-развојни центар за биоинжењеринг БиоИРЦ доо; (e-mail: mark@kg.ac.rs, sladjana.djordjevic@pmf.kg.ac.rs, izudin.redzepovic@pmf.kg.ac.rs, milanovicziko463@gmail.com)

СИМУЛИРАЊЕ ХЕМИЈСКИХ СПЕКТАРА ПОМОЋУ СОФТВЕРА ЗА МОЛЕКУЛСКО МОДЕЛИРАЊЕ

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

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

МЕТОДОЛОГИЈА ИЗРАЧУНАВАЊА

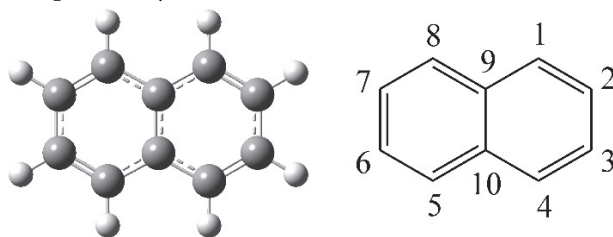
Прорачуни су обављени помоћу функционала густине B3LYP [2] и B3LYP-D3 [3] у комбинацији са базисним скупом 6-311+G(d,p). Будући да се ради о молекулу у мировању, резултати добијени помоћу две методе су готово идентични, а у раду су представљени резултати добијени помоћу функционала B3LYP. Вршена је оптимизација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

програмског пакета Гаусијан (Gaussian 09) [6]. Визуелизација добијених резултата вршена је помоћу програма Гаусвју (GaussView 5.0.8) [7].

ОПТИМИЗОВАНА ГЕОМЕТРИЈА И РЕНДГЕНСКА СТРУКТУРНА АНАЛИЗА

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

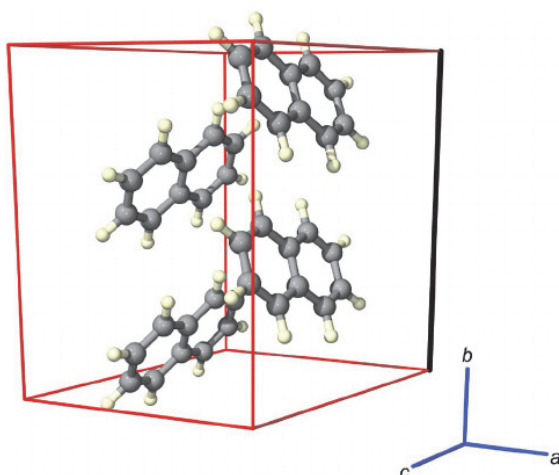
Свако оптимизовање равнотежне геометрије било које молекулске врсте на неки начин симулира кристалографски експеримент. Резултат оптимизације је структура молекула са свим његовим дужинама, угловима веза и диједарским угловима, а то су величине које обезбеђује и рендгенска структурна анализа. Оптимизована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



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

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

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



Слика 2. Јединична кристална ћелија нафталена

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

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

| Везе | Дужина везе (pm) | |
|-----------|------------------|--------------------|
| | Експ. вредности | V3LYP/6-311+G(d,p) |
| C1-C2 | 137.4 | 137.4 |
| C2-C3 | 141.6 | 141.5 |
| C4-C10 | 141.7 | 141.9 |
| C9-C10 | 142.2 | 143.1 |
| C1-H1 | 108.3 | 108.5 |
| C2-H2 | 108.3 | 108.4 |
| Углови | Угао везе (°) | |
| C1-C2-C3 | 120.2 | 120.2 |
| H3-C3-C4 | 119.5 | 120.1 |
| H4-C4-C10 | 118.3 | 118.8 |
| C4-C10-C5 | 121.7 | 122.3 |

ВИБРАЦИОНИ СПЕКТРИ

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

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

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

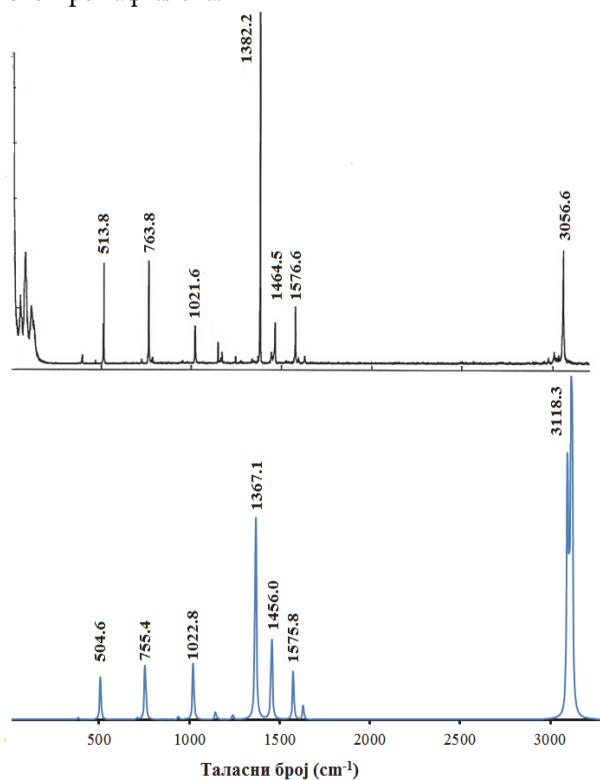
Симулацијом вибрационих спектра нафталена репродуковане су све траке карактеристичне за ароматичне системе. Асигнацију вибрационих облика умногоме је олакшала употреба програма Гаусвиу који има способност да анимира молекулске вибрације. Ако се посматрају приказани рамански и IR спектри на Сликама 3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

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

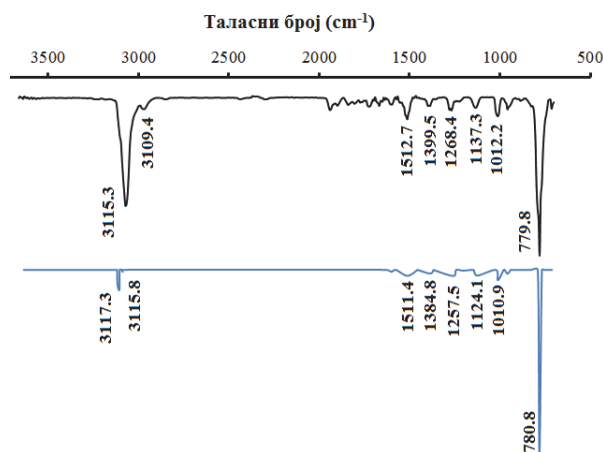
Табела 2. Експериментални и израчунати положаји трака у IR и раманском спектру нафталена

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

ријски модел веома успешно репродукује вибрационе спектре нафталена.



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



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

NMR СПЕКТРИ

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

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

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

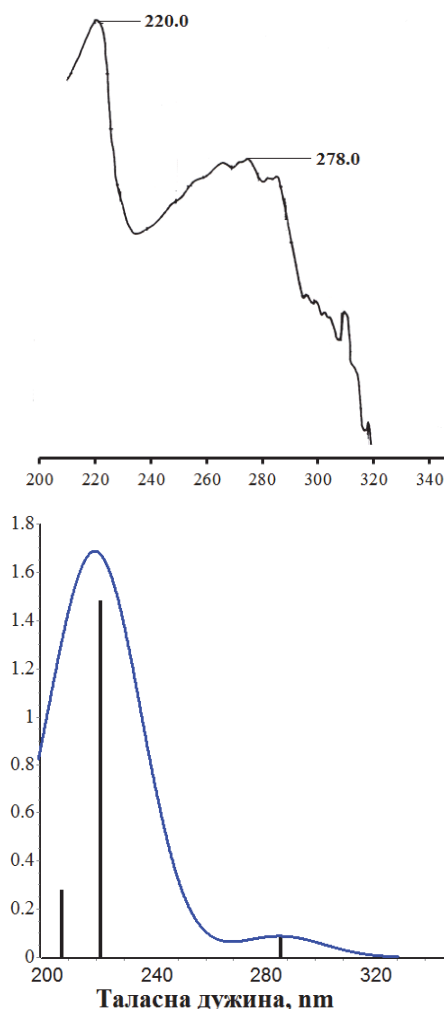
| Н-атоми | ^1H NMR | |
|---------------------|-------------------------------------|------------|
| | Хемијско померање (δ , ppm) | |
| | Експериментални | Израчунати |
| H-1, H-4, H-5, H-8 | 7.84 | 7.84 |
| H-2, H-3, H-6, H-7 | 7.48 | 7.48 |
| C-атоми | | |
| ^{13}C NMR | | |
| C-1, C-4, C-5, C-8 |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

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

UV-VIS СПЕКТАР

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

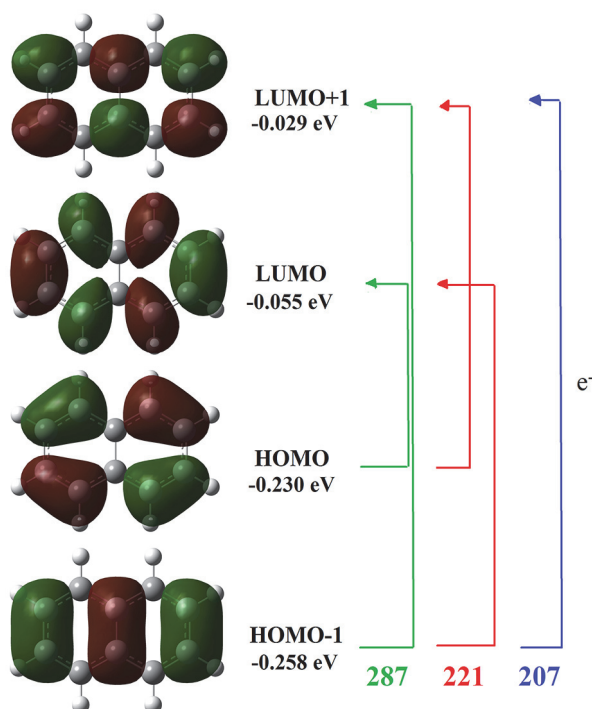
Експериментални UV-vis спектар нафталена снимљен је у етанолу [14], а репродукован је на описани начин. На Слици 5 приказан је експериментални и израчунати UV спектар нафталена, док се у Табели 4 налазе таласне дужине које одговарају апсорпционим максимумима, вредности за осцилаторну јачину (f), као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



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

Табела 4. Експериментални и израчунати електронски прелази нафталена

| Експ. таласне дужине λ (nm) | TD-B ₃ LYP/6-311+G(d,p) | | |
|-------------------------------------|------------------------------------|-------|--|
| | λ (nm) | f | Главни електронски прелази |
| 278.0 | 287 | 0.088 | HOMO→LUMO (69%) HOMO-1→LUMO+1 (14%) |
| | 221 | 1.484 | HOMO-1→LUMO (50%) HOMO→LUMO+1 (49%) |
| 220.0 | 207 | 0.279 | HOMO-1→LUMO+1 (68%) |



Слика 6. Орбитале нафталена одговорне за електронске прелазе

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

ЗАКЉУЧАК

Циљ овог рада је био да демонстрира софистицираност модерних програма за молекулско моделирање. Циљ је постигнут тако што су симулирани вибрациони, NMR и UV-vis спектри нафталена, а потом су поређени са постојећим експерименталним спектрима. Такође, геометрија оптимизоване структуре испитиваног једињења поређена је са резултатима рендгенске структурне анализе. У сагласности са очекивањима једног хемичара, методе B3LYP и B3LYP-D3 производе практично идентичне резултате, јер је у питању молекул у мировању. Анализа и поређење израчунатих са експерименталним спектрима су показали да обе методе изванредно репродукују експериментално добијене резултате. Може се претпоставити да се теоријски модели примењени у овом истраживању

могу успешно користити приликом симулације спектра деривата нафталена и других полицикличних ароматичних угљоводника, чији спектри нису довољно разјашњени или уопште не постоје. Не смемо занемарити значај програма за визуелизацију резултата израчунавања, јер нам они приказују (нпр. молекулске орбитале) и анимирају (нпр. молекулске вибрације) различите хемијске феномене.

Abstract

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

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

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

ЛИТЕРАТУРА

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

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



ВЕСТИ из ШКОЛЕ
ВЕСТИ за ШКОЛЕ

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

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

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

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

Први такмичарски дан је започео израдом теста у три такмичарске категорије: Тест и практична вежба за ученике 7. разреда (72 ученика), Тест и практична вежба за ученике 8. разреда (66 ученика) и Тест и истраживачки рад за ученике 7. и 8. разреда (3 ученика 7. и 3 ученика 8. разреда). Истовремено је проф. др Божо Далмација одржао предавање за наставнике под насловом „Климатске промене и квалитет воде”. Након израде теста, комисија их је детаљно прегледала и саопштила прелиминарне резултате. На основу резултата теста, најуспешнији ученици су се пласирали на

други део такмичења (1 ученик у категорији Тест и истраживачки рад за ученике 7. и 8. разреда, 24 ученика у категорији Тест и практична вежба за ученике 7. разреда и 22 ученика у категорији Тест и практична вежба за ученике 8. разреда). Првог такмичарског дана одржана је одбрана истраживачког рада јединог пласираног ученика, а практична вежба, у трајању од једног сата, је одржана другог такмичарског дана. Док су ученици радили практичну вежбу, за наставнике пласираних ученика је одржана едукативна радионица под називом „Израда интерактивних тестова у настави хемије”, коју је водила проф. др Јасна Адамов. На основу збирних резултата остварених на тесту и практичној вежби формирана је коначна ранг-листа ученика, а најуспешнијим су уручене дипломе и похвалнице Министарства просвете, науке и технолошког развоја, као и дипломе Српског хемијског друштва. На ранг-листама које достављамо, наведени су пласмани ученика који су награђени.

Целокупна реализација такмичења је успешно изведена према свим планираним активностима.

Приложени су резултати такмичења:

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

Нови Сад, 23. мај 2019.

Председник Републичке комисије
Доц. др Душица Родић