

Plan obilaska Instituta Ruđer Bošković

Izaberite ulaznicu za **žutu (A)**, **zelenu (B)**, **plavu (C)** ili **crvenu (D)** stazu.

Posjet obuhvaća uvodno predavanje (30 minuta) i obilazak laboratorija (60 minuta).

Posjetioci staza A i B zajednički slušaju uvodno predavanje (P1) svaki puni sat (:00).

Posjetioci staza C i D zajednički slušaju uvodno predavanje (P2) svaki polusat (:30).

Prvo predavanje počinje u 9:00 (P1), a zadnje u 16:00 (P2).

P1 Predavanja u :00 sati

- A1 Nanočestica – opeka budućnosti (str 20)
- A2 E-znanost vodi u znanstvene tajne (str 17)
- A3 Lijevi i desni svijet (str 4)
- A4 Pogled u prošlost (str 8)
- A5 Svjetlost u medicini i obrani (str 5)

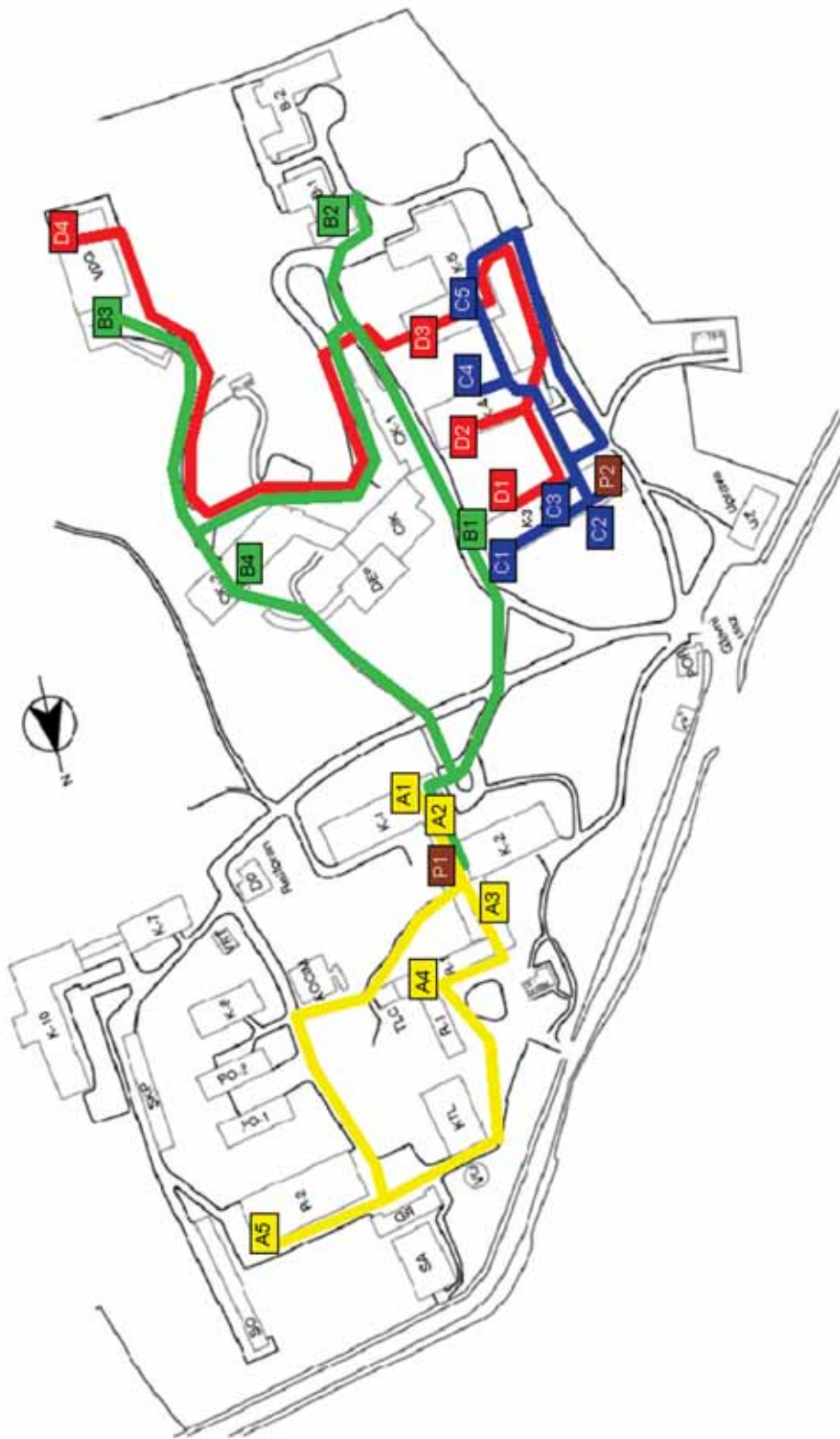
- B1 Čudesni svijet molekula i kristala (str 6)
- B2 DNA-čip u zdravlju i bolesti (str 10)
- B3 Čestice i Einstein (str 19)
- B4 Površinski aktivne tvari: male molekule – višestruke uloge (str 13)

P2 Predavanja u :30 sati

- C1 Istraživanja uređenosti u materijalima: od amorfne tvari do višefaznih smjesa (str 7)
- C2 Gledajmo na nanoskali (str 16)
- C3 Metalotonein: mala molekula – veliki izazovi (str 15)
- C4 Imate li vi i vaš kućni ljubimac kamence istog sastava? (str 9)
- C5 Knjižnica bez zidova (str 18)

- D1 Novi materijali – sinteza prije svega (str 14)
- D2 Organska tvar i tragovi metala u moru (str 3)
- D3 Određivanje slijeda nukleotida u molekuli DNK (str 11)
- D4 Akceleratori – od nukleare fizike prema nanotehnologijama (str 12)

OTVORENI DANI 2005

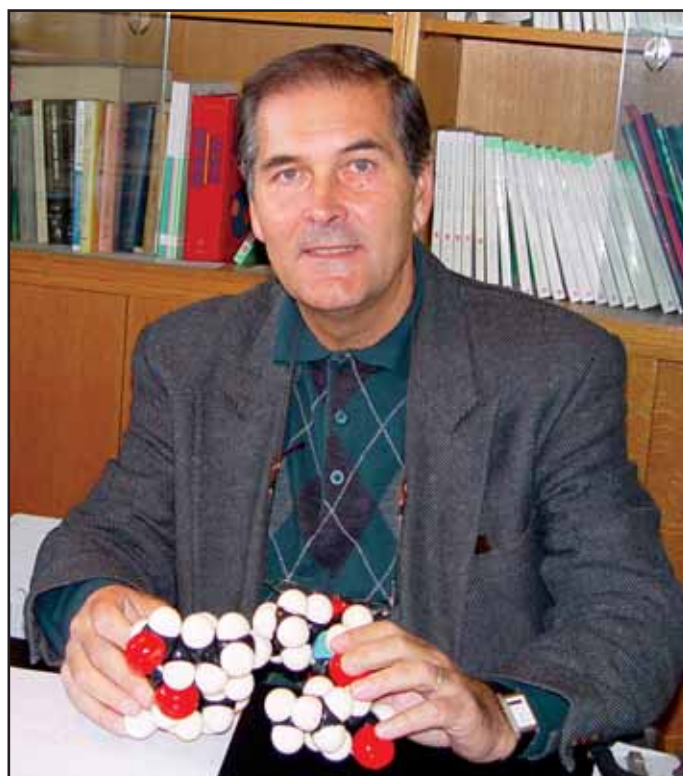


Cijenjeni posjetioци, dragi prijatelji Instituta Ruđer Bošković

Drugi puta zaredom Institut Ruđer Bošković organizira svoje Otvorene dane i poziva u posjet sve zainteresirane građane Republike Hrvatske. Ovaj puta Otvoreni dani počinju nešto ranije (21.-24. 04.) u odnosu na prošlu godinu (13.-15. 05. 2004) kako bi omogućili masovniji posjet maturanata koji se nalaze pred vrlo značajnom odlukom izbora studija a time i svog budućeg zvanja. Nadamo se da će upravo njima posjet Institutu pomoći u rješavanju često prisutne dileme o izboru studija te pomoći u donošenju ove važne odluke. S druge strane nadamo se da će kod mlađih generacija učenika posjet Institutu probuditi zanimanje za znanost i znanstvena istraživanja i možda već u ranoj dobi usmjeriti njihov interes prema prirodnim znanostima, biomedicini ili računarstvu i informatičkim znanostima. Vjerujemo da na taj način barem malo možemo pridonijeti ostvarenju strateškog cilja razvitka Republike Hrvatske u društvo utemeljeno na znanju. S druge strane namjera nam je prezentirati naše rezultate radno aktivnom dijelu građana Republike Hrvatske koji doprinose izdavanju za znanost i pokazati da se uložena sredstva koriste na najbolji način u cilju razvoja društva, visokog obrazovanja i stvaranja boljih životnih uvjeta svih naših građana.

Institut Ruđer Bošković najveći je nacionalni istraživački institut u područjima prirodnih znanosti i biomedicine koji je osnovan prije 55 godina. U ovom momentu na Institutu se intenzivno bavi znanostima oko 500 znanstvenika u područjima eksperimentalne i teorijske fizike i kemije, molekularne biokemije i medicine, ekologije, istraživanja mora i računarstva. Znanstveni rad je organiziram u više od 120 temeljnih i kolaborativnih

istraživačkih projekata financiranih od Ministarstva znanosti, obrazovanja i športa Republike Hrvatske, 59 međunarodnih znanstvenih projekata uključujući i 10 projekata u okviru programa koje financira Europska unija, 12 tehnoloških projekata usmjerenih prema primjeni te više od 130 projekata u suradnji sa domaćom privredom. Velik broj međunarodnih projekata pokazuje značajnu suradnju znanstvenika Instituta mnogim institucijama u



Europi i svijetu. S druge strane uočljiva je i intenzivna suradnja s domaćom privredom čime Institut doprinosi ukupnom ekonomskom razvoju Republike Hrvatske. Posebno je značajno da u ovom trenutku na Institutu radi oko 200 znanstvenih novaka potpomognutih sredstvima Ministarstva znanosti obrazovanja i športa koji marljivo uče i rade na svojim magistarskim i doktorskim tezama.

Znanstveni rezultati postignuti na Institutu objavljuju se u vrhunskim svjetskim znanstvenim časopisima sa strogim međunarodnim recenzijama što ukazuje na visoku razinu kvalitete znanstvenog rada na Institutu. Na taj način postiže se prepoznatljivost Instituta i Hrvatske u međunarodnoj znanstvenoj javnosti i olakšava uključivanje hrvatskih znanstvenika u međunarodnu znanstvenu suradnju.

Drago mi je da mogu istaknuti i doprinos znanstvenika Instituta području visokog obrazovanja posebno na poslijediplomskoj razini; oko 200 različitih kolegija na fakultetima Sveučilišta u Zagrebu i drugim Sveučilištima u Hrvatskoj predaju znanstvenici Instituta.

Dragi posjetioци, ove godine smo pripremili 18 izložbenih točaka koje vjerujemo, na zanimljiv i pristupačan način prikazuju neke posebnosti iz svijeta znanosti. Uvest ćemo vas u impresivan svijet molekula i kristala, svijet čestica i kozmičkih zraka, nukleinskih kiselina i novih materijala, svijet na nano skali i svijet elektronske znanosti.

U ime svih Ruđerovih djelatnika želim vam srdačnu dobrodošlicu i ugodan boravak na našem Institutu s nadom da ćemo vas vidjeti i dogodine.

Ravnatelj Instituta Ruđer Bošković,
prof. dr. sc. Mladen Žinić

impresum:

Znanstveno glasilo
Instituta "Ruđer Bošković"
Bijenička c. 54, 10 002 Zagreb
tel: +385 (0)1 4561 111,
fax: 4560 084
e-mail: rudjer@irb.hr
URL: <http://www.irb.hr>

Glavni urednik: Mislav Jurin
Tehnički urednik: Karolj Skala

Uredništvo:
Dunja Čukman
Koraljka Gall-Trošelj
Kata Majerski
Mladen Martinis
Iva Melinščak-Zlodi
Tvrтко Smital
Jadranka Stojanovski

Digitalna obrada i izvedba:
Institut Ruđer Bošković
Grafički fakultet u Zagrebu

ISSN 1333-5693
UDK 061.6:5

Tisak: Kratis d.o.o.
prigodno izdanje u 5000
primjeraka
uz financijsku potporu
Instituta Ruđer Bošković

PIŠU: *BLAŽENKA GAŠPAROVIĆ I IVANKA PIŽETA*

Organska tvar (OT) u moru jedan je od najvećih spremnika organskog ugljika na Zemlji. Ukupna količina je približno jednaka količini atmosferskog ugljičnog dioksida. Glavni izvor OT u moru je primarna produkcija (~ 90%), dok manji dio potječe iz zraka i s kopna kao prirodna i antropogena OT. Eutrofikacija mora je najrašireniji način poremećaja priobalnog morskog ekosustava kao izravna posljedica ljudskog djelovanja. Rezultat je to vanjskog unosa hranjivih tvari u more



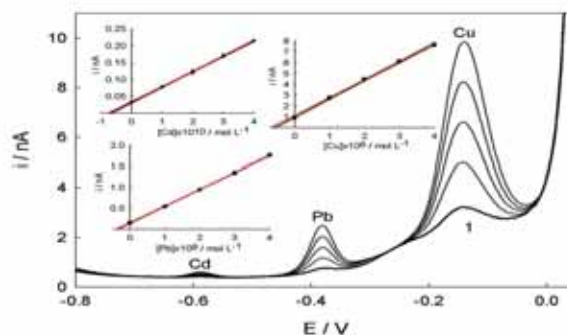
što kao posljedicu ima povećanu produkciju i sedimentaciju organske tvari (pojava sluzavih nakupina) koja utječe na život pri dnu. Druge vrste poremećaja su unosi specifičnih antropogenih organskih tvari, otrovnih u malim količinama, čiju je koncentraciju i sudbinu u okolišu poželjno znati. Veliki dio prirodne OT mora su površinski aktivne tvari (PAT) koje su zbog svojih hidrofobnih i hidrofilnih funkcionalnih grupa vrlo reaktivne te zbog toga važne za izmjenu tvari i energije na granici atmosfera/more i drugim prirodnim granicama faza.

U moru ima tragova svih metala, kako tragova metala koji su biološki važni i poticajni (Fe, Zn, Cu, Mn, Co, Ni), tako i vrlo toksičnih (Hg, Cd, Pb, As, Tl), na čije se prirodne ravnotežne koncentracije reda veličine ng/L eko sustav prilagođavao milionima godina. Osim ukupne koncentracije pojedinog metala (mjerilo općeg stanja opterećenosti), važno je poznavati njegovu raspodjelu po fizičkim oblicima i kemijskim vrstama (slobodni hidratizirani kationi, kompleksi s anorganskim i organskim ligandima, metali vezani na koloide i čestice) jer o tome ovisi njihova interakcija s biološkim svijetom (biodostupnost i otrovnost).

U posljednje vrijeme povećava se znanje o ponašanju organske tvari i otopljenih metalnih kompleksa i koloida,

njihovoj ulozi u biološkim ciklusima u moru. Istovremeno, povećanom industrijskom uporabom umjetnih gnojiva, herbicida, pesticida i metala čovječanstvo je znatno promijenilo njihovu zastupljenost u okolišu i često narušilo lokalnu ravnotežu na kopnu, priobalju i atmosferi. Zato je razumljivo zanimanje za mehanizme i kapacitete samopročišćavanja i općenitu sudbinu tvari kako prirodno prisutnih tako i onih unesenih u more.

Elektrokemijska metoda polarografija, koju je započeo Jaroslav Heyrovský 1922. g. (i za nju dobio Nobelovu nagradu 1959.g.) je pogodna za proučavanje OT i metala u moru kao idealnom elektrolitu. Zasniva se na poticanju i analizi prelaska elektrona s elektrode u otopinu i obratno, pri čemu dolazi do redukcije ili oksidacije reaktanata koji su difuzijom došli na elektrodu ili na praćenju promjene električnog kapaciteta elektrode adsorpcijom neutralnih organskih molekula na njenoj površini. Ove metode su razvijene do osjetljivosti dovoljne za direktno mjerenje prirodnih koncentracija u uzorku (ng/L za tragove metala i mg/L za organske tvari). Prednost im je u jednostavnosti, brzini i minimalnoj potrebi obrade uzorka prije mjerenja, a osim o koncentraciji, metode daju odgovor i o specijaciji. Zbog vrlo niskih koncentracija koje se određuju, važan korak prije mjerenja je uzimanje, obrada, konzerviranje i čuvanje uzoraka. Prirodni uzorci uzimaju se na potencijalno



zanimljivim mjestima, po dubinskim profilima, po godišnjim dobima ili incidentnim situacijama. Istovremeno se razvijaju postupci frakcioniranja uzoraka prije mjerenja po fizičko-kemijskim karakteristikama ali se razvijaju i primjenjuju metode za mjerenje bez uzorkovanja, na licu mjesta (in-situ).

Primjer promjene ekosustava Rogozničkog jezera kao posljedice eutrofikacije i antropogenog utjecaja prikazan je na Slici 1. Slika 1a je netaknuto jezero dok Slika 1b predstavlja potpunu anoksiju vodenog stupca jezera. Zbog nedostatka kisika u jezeru prevladava sumpor.

Primjer određivanja koncentracije bakra, olova i kadmija u uzorku morske vode uzetog blizu otoka Zlarina prikazan je na Slici 2. Krivulja 1 predstavlja uzorak zakiseljen na pH 2, a ostale su snimljene nakon uzastopnih standardnih dodataka iona metala od 1×10^{-8} , 1×10^{-9} i 1×10^{-10} mol L⁻¹ Cu²⁺, Pb²⁺ i Cd²⁺. Nađene koncentracije tih metalnih iona u uzorku su 388 ± 63 ng/L Cu²⁺, $78,7 \pm 8,3$ ng/L Pb²⁺ i $7,9 \pm 0,9$ ng/L Cd²⁺.

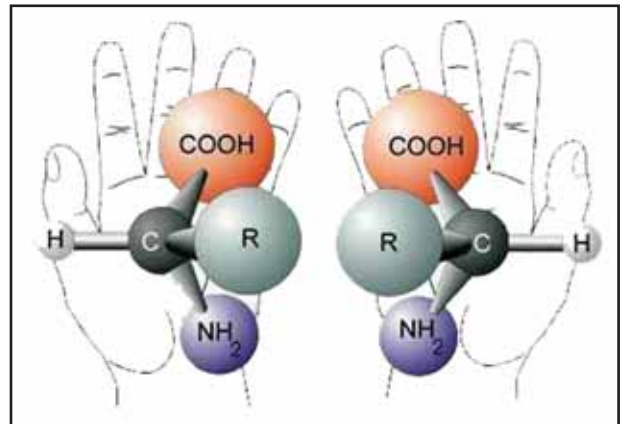
PIŠE: DAVORKA MOSLAVAC FORJAN

Predmeti koji se ne mogu preklopiti sa svojom zrcalnom slikom nazivaju se kiralnima, npr. vijci ili puževe kućice. I molekule mogu biti kiralne. Pripraviti samo "lijeve" ili samo "desne" molekule u laboratoriju, kako to čini priroda u živim organizmima, izazov je kemičarima od doba Pasteura. Naučimo nešto o tome...

Kiralnost (grč. cheir = ruka) je geometrijsko svojstvo predmeta ili molekule kada se ona ne može preklopiti sa svojom zrcalnom slikom. Dvije moguće strukture takvog spoja ponašaju se kao zrcalne slike, odnosno kao desna i lijeva ruka, a takvi se stereoizomeri nazivaju enantiomerima.

Dobro je poznato da su esencijalne biomakromolekule, poput proteina i nukleinskih kiselina, izgrađene od enantiomernih molekula. Aminokiseline, nukleozidi, ugljikohidrati i fosfolipidi koji izgrađuju naše tijelo su kiralne molekule. Kiralnost bioloških makromolekula osigurava odgovarajuću funkciju dvaju karakterističnih životnih procesa: sintezu specifičnih proteina (iz isključivo L-aminokiselina) i replikaciju DNA (iz D-monosaharida), stoga se danas razvoj lijekova, pesticida, dodataka hrani i sl. intenzivno usmjerava prema enantiomerno čistim spojevima koji djeluju vrlo specifično. Često je jedan stereoizomer lijeka aktivan, dok je drugi neaktivan ili čak otrovan.

Odjeljivanje enantiomera vrlo je čest problem kako u pripravi kemijskih spojeva, tako i u pripravi biološki aktivnih spojeva, poglavito lijekova. Glavni problem proizlazi iz činjenice da se enantiomeri, osim u kiralnoj okolini, ne mogu razlikovati niti po kemijskim niti po fizičkim svojstvima. U tom je pogledu



SLIKA 1. ENANTIOMERI SE MEĐUSOBNO ODOSE KAO LIJEVA I DESNA RUKA I NE MOGU SE PREKLOPITI.

tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (engl. high performance liquid chromatography, HPLC) iznimno važna tehnika kako za određivanje sastava, odnosno optičke čistoće kiralnih spojeva, tako i za preparativno odjeljivanje u svrhu dobivanja velikih količina čistih enantiomera.

U Laboratoriju za stereoselektivnu katalizu i biokatalizu Instituta "Ruđer Bošković", a i u ostalim Laboratorijima Zavoda za organsku kemiju i biokemiju, kemičari danas rutinski rabe HPLC instrumente, koji predstavljaju neizostavni dio svakog laboratorija.

SLIKA 2. TIPIČAN HPLC INSTRUMENT.

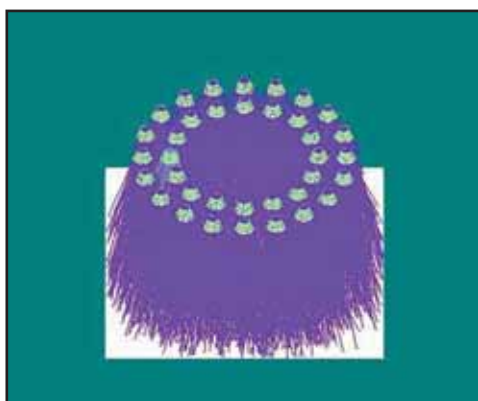


PIŠE: DUNJA SOLDO ROUDNICKY

Jedna od primjena svjetlosti u medicini je fotodinamička dijagnostika i terapija bolesnog tkiva, primjenom svjetlosti u kombinaciji s određenom kemikalijom - fotosenzibilizatorom. Fotosenzibilizator se nanosi na tkivo i ulazi u bolesne i u zdrave stanice. Iz zdravih stanica se prirodnim procesima uklanja, a u bolesnima se nakuplja. Tijekom dijagnostike, tako tretirano tkivo, se osvijetli ljubičastom svjetlošću. Bolesne stanice će se razlikovati od zdravih po tome što fluoresciraju (svijetle) crveno, a zdrave ne. Terapija se provodi osvjetljavanjem, bolesnog tkiva s nakupljenim fotosenzibilizatorom, crvenim svje-

oblikovanje izlaznog snopa koriste se kombinacije reflektora i leća. Formiranjem više ovakvih grozdova u novi grozd, nastaje grozd grozdova s kojim je moguće dobiti veći svjetlosni intenzitet potreban pri osvjetljavanju većih oboljelih površina. Uređaj napravljen na tom principu je MediLED 5.

Pored rada na neslikovnim optičkim sustavima kao što su to svjetlosni izvori, u Zavodu LAIR se razvijaju i slikovni optoelektronički sustavi kao što su to uređaji za noćno gledanje. To su sustavi koji koriste minimalnu svjetlost koja postoji



OD DIZAJNA DO UREĐAJA - MediLED5

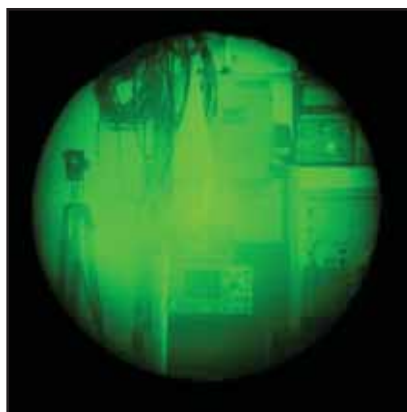
tlom, čijom apsorpcijom nastaje aktivni oblik kisika koji razara bolesnu stanicu.

Ova primjena svjetlosti u medicini potakla je Zavodu LAIR na intenzivno istraživanje i razvoj izvora svjetlosti koji zrače u području spektra koji je optimalan za fotodinamičku dijagnostiku i terapiju. Rezultat tog istraživanja je razvoj niza uređaja u kojima je elementarni svjetlosni izvor svjetleća dioda (LED). Razlozi za odabir svjetlećih dioda kao svjetlosnog izvora su: dugi radni vijek, niski radni napon, visoka efikasnost pretvorbe električne energije u svjetlost i uska spektralna poluširina. Kako intenzitet pojedinačnih svjetlosnih dioda nije dovoljan za uzbuđenje u fotodinamičkom procesu korišteni su tako zvani grozdovi (cluster) dioda. To je konfiguracija koji sadrži veći broj kristalića svjetlećih dioda jednoliko i gusto razmještenih u dvije dimenzije. Svjetleće diode zrače u poluprostor, a za

u prirodi (zvijezda, mjeseca ili udaljene umjetne rasvjete) u vidljivom i bliskom infracrvenom dijelu spektra te je pojačavaju pomoću pojačala slike. To pojačanje je veće od 10000 puta. Pojačalo slike multiplicira elektrone izbačene svjetlošću s ulazne plohe pojačala - fotokatode. Sliku scene na fotokaturi stvara optički sustav objektiv. Elektroni multiplicirani pojačalom slike daju sliku scene na izlaznom fosforescentnom ekranu pojačala, a tu sliku gledamo pomoću okulara. Ukoliko će se uređaj koristiti za direktno gledanje, najčešće pri noćnoj vožnji i osmatranju, sustav nema povećanja i naziva se noćne naočale. Za gledanje daljih objekata (600m) rade se uređaji koji imaju povećanje, najčešće oko 4x. Prilikom razvoja takvih uređaja, osobita se pažnja poklanja razvoju optimalnog dizajna optičkog sustava objektiv i okulara uz pomoć složenih računalnih programa.



NOĆNE NAOČALE



SLIKA ZAMRAČENOG LABORATORIJA DOBIVENA NOĆNIM NAOČALAMA



SUSTAV ZA NOĆNO GLEDANJE

PIŠE: MARIJA LUIĆ

Rendgenske ili X-zrake elektromagnetsko su zračenje čija valna duljina približno odgovara razmaku atoma u molekuli (valna duljina vidljivog spektra je reda veličine 100 nm, a X-zraka 0.1 nm), te se koristi za određivanje trodimenzionalne (3D) strukture molekula. U tu svrhu najprije treba pripremiti kristale. Dobiveni kristali dijelom apsorbiraju, a dijelom raspršuju rendgensko zračenje prema zakonu difrakcije na rešetci. Na temelju položaja i intenziteta difraktiranih rendgenskih zraka, uz pomoć složenih matematičkih računa, određujemo prostorni raspored atoma u kristalu. Opisanu metodu zovemo **rendgenska strukturna analiza**. To je danas dominantna metoda u istraživanju molekularnih struktura na atomskoj razini u čvrstom stanju. Topologija molekula u kristalu daje uvid u inter- i intra-molekularna djelovanja koja onda određuju fizička, kemijska i biološka svojstva molekula. Moć suvremene rendgenske strukturne analize najbolje ilustriraju primjeri određivanja kristalnih struktura vrlo složenih bioloških tvorevina kao što su na primjer virusi i ribozomi. Ove metoda uvelike je pridonijela razvoju drugih znanstvenih grana kao što su farmakologija, biomedicina i biotehnologija.

Uz rendgensku strukturnu analizu, u našim istraživanjima koristimo i **metode molekularnog modeliranja**. Molekularno modeliranje temelji se na rezultatima rendgenske strukturne analize, a kod složenijih sustava, sastavni je dio postupka određivanja strukture. Ono podrazumijeva proučavanje molekula, njihovog oblika, promjena te kemijskih i fizičkih svojstava korištenjem računalnih programa. Moderna industrija lijekova, ali i biologija i medicina, nezamislive su danas bez molekularnog modeliranja. Predviđajući djelovanje potencijalnog lijeka, metode molekularnog modeliranja mogu kemičarima uštedjeti mjesece eksperimentalnog rada, smanjiti količine neophodnih kemikalija, a time utjecati i na cijenu lijeka.

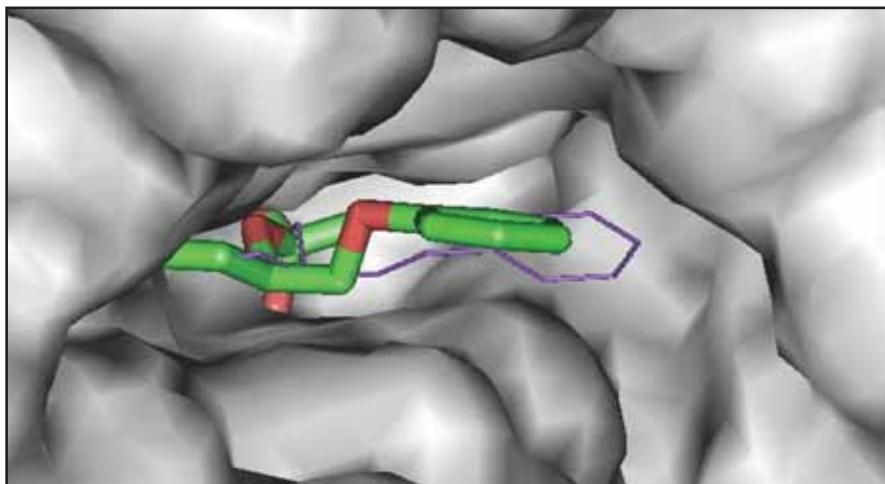
Dio naših znanstvenih istraživanja usmjeren je na izučavanje mehanizma djelovanja bakterijskih lipaza, enzima važnih kako u biotehnologiji, tako i u medicini. Lipaze kataliziraju hidrolizu triglicerida, ali i transformacije niza industrijski važnih kemijskih spojeva. Neke od njih djeluju enantioselektivno (enantiomeri su molekule koje se odnose kao lijeva i desna ruka), tj. kataliziraju kemijsku reakciju samo jednog enantiomera. Kod lijekova često samo jedan enantiomer ima željeni učinak, dok je drugi neaktivan ili čak štetan.

Zato je dobivanje enantiomerno čistih supstanci od posebnog značaja u industriji lijekova. Enantioselektivnost lipaze bakterije *Burkholderia cepacia* istraživali smo gore spomenutim metodama. Molekularnim modeliranjem računski se pokušalo predvidjeti koji će se enantiomer bolje vezati te vidjeti razlike u načinu njihova vezanja u aktivno mjesto enzima. Točnost rezultata modeliranja provjerena je eksperimentom. Kristaliziran je kompleks lipaze s brže reagirajućim enantiomerom te mu je određena 3D struktura. Usporedba rezultata pokazala je da je modeliranje dobro previdjelo u koji će se dio aktivnog mjesta vezati brže reagirajući enantiomer, te da je konformacija enantiomera dobivena modeliranjem vrlo slična onoj u kristalu.



SLIKA 1. RENDGENSKI DIFRAKCIJSKI UREĐAJ

U sklopu prezentacija, posjetitelji će imati priliku pod mikroskopom vidjeti kako izgledaju monokristali koji se koriste u difrakcijskom eksperimentu, te čuti o metodama mikrokristalizacije koje koristimo. Osnove teorije difrakcije rendgenskih zraka na kristalu bit će objašnjene uz demonstraciju rada rendgenskog difraktometra. Na zaslonu računala bit će prikazano aktivno mjesto lipaze bakterije *Burkholderia cepacia* dobiveno rendgenskom strukturnom analizom i uspoređeno s rezultatima molekularnog modeliranja. Ukratko će se objasniti osnovna načela i svrha molekularnog modeliranja.



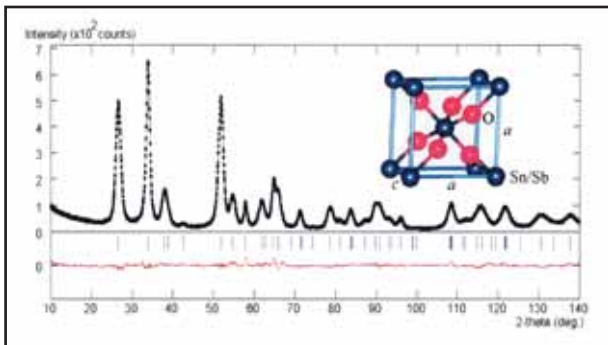
SLIKA 2. AKTIVNO MJESTO LIPAZE BAKTERIJE *BURKHOLDERIA CEPACIA* - USPOREDBA EKSPERIMENTA (DEBLJE CRTANO) I MODELIRANJA (TANJE CRTANO)

Istraživanje uredenosti u materijalima: od amorfne tvari do višefaznih smjesa

C1

PIŠE: BISERKA GRŽETA

Standardna metoda istraživanja strukture kristalne tvari jest metoda difrakcije (ogiba) rentgenskih zraka u kristalu koja se temelji na činjenici da je pravilni raspored atoma u kristalu za rentgensko zračenje isto što i optička rešetka za vidljivi dio spektra elektromagnetskih valova. Difrakcijska slika kristalne tvari sadrži difrakcijske maksimume na određenim vrijednostima Braggovog kuta θ . Svaka kristalna tvar ima karakterističnu difrakcijsku sliku koja se razlikuje od difrakcijske slike svih ostalih kristalnih tvari.



SLIKA 1. REZULTAT RJEŠAVANJA STRUKTURE POMOĆU RIETVELDOVE METODE ZA NANOFAZNI SnO₂ DOPIRAN S 12 AT% Sb. ZA SNIMANJE DIFRAKCIJE KORIŠTENO JE Cu K α ZRAČENJE. NAVEDENI MATERIJAL SE KORISTI U PROIZVODNJI SOLARNIH KOLEKTORA I SOLARNIH ČELIJA.

Položaji maksimuma na difrakcijskoj slici ovise o periodičnostima uzduž triju kristalnih osi i o kutovima između njih, tj. o veličini i obliku jedinične ćelije kristala. Intenzitet difrakcijske linije sadrži informaciju o vrsti i položaju atoma u jediničnoj ćeliji. To omogućuje da se iz difrakcijske slike tvari pomoću odgovarajućeg matematičkog postupka odrede položaji atoma u jediničnoj ćeliji kristala, tj. da se riješi kristalna struktura. Rješavanje kristalne strukture vrši se iz difrakcijske slike monokristala, ali i iz difrakcijske slike polikristalnih (praškastih) uzoraka. Ovo posljednje je izuzetno važno u slučaju tvari koje se ne mogu prirediti u obliku monokristala (primjer supravodiča), a izvodi se pomoću Rietveldove metode. Ta se metoda sastoji u usklađivanju teorijske difrakcijske slike praha materijala, izračunate na osnovi modela strukture, s eksperimentalnom difrakcijskom slikom praha (slika 1).

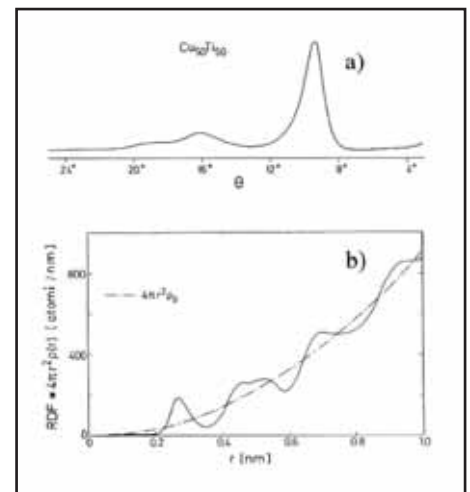
Difrakcijska slika višefazne smjese sadrži difrakcijske slike svih prisutnih faza, što je osnova za kvalitativnu i kvantitativnu faznu analizu. Iz difrakcijske slike višefazne smjese moguće je pomoću Rietveldove metode simultano riješiti kristalne strukture svih prisutnih faza.

U amorfnoj tvari atomi nisu pravilno razmješteni u prostoru pa nema uvjeta za difrakciju, već se rentgensko zračenje u takvoj tvari samo raspršuje na atomima. Slika raspršenja rentgenskog zračenja u amorfnoj tvari ima samo mali broj širokih maksimuma (slika 2a). Iz intenziteta raspršenog rentgenskog zračenja nije moguće odrediti točan položaj svakog pojedinog atoma u prostoru kao u slučaju difraktiranog rentgenskog zračenja u kristalu, već se matematičkom analizom raspršenog zračenja dolazi do funkcije radijalne raspodjele atoma amorfne tvari, RDF (engl. radial distribution function), kao što je prikazano na slici 2b. Površina ispod prvog maksimuma krivulje RDF daje prosječni broj prvih susjednih atoma oko atoma smještenog u ishodištu, tj. koordinacijski broj amorfne tvari;

površina ispod drugog maksimuma daje prosječni broj drugih najbližih susjeda, itd.

Rentgenska difrakcija polikristalnih uzoraka nezaobilazna je metoda istraživanja u fizici i kemiji čvrstog stanja te u znanosti o materijalima. Koristi se za: identifikaciju materijala, za prepoznavanje amorfne i kristalne tvari, za kvalitativnu i kvantitativnu faznu analizu višefaznih mjesa, za precizno određivanje parametara jedinične ćelije, za rješavanje kristalne strukture, za istraživanje reda kratkog doseg, za precizno određivanje gustoće tvari, za istraživanje termičkog rastezanja tvari, za određivanje granice topljivosti u čvrstim otopinama, za istraživanje faznih prijelaza u tvarima prouzročenih promjenom temperature, tlaka ili koncentracije komponenata u sistemu, za određivanje faznih dijagrama, za određivanje deformacija kristalne rešetke i veličine kristalita, za određivanje preferirane

SLIKA 2. SLIKA RASPRŠENJA RENTGENSKOG ZRAČENJA I FUNKCIJA RADIJALNE RASPODJELE ATOMA



orijentacije kristalita u polikristalu, te za ispitivanje kemijske stabilnosti materijala.

Istraživanje strukture kristalnih tvari pomoću rentgenske difrakcije prisutno je na IRB od samog početka rada Instituta.

U Laboratoriju za sintezu novih materijala Zavoda za kemiju materijala pomoću metode rentgenske difrakcije u polikristalnim uzorcima vrši se istraživanje strukturnih osobina niza anorganskih materijala kao što su metalni oksidi, slitine, keramički materijali, zeoliti, poluvodički materijali, supravodiči i drugi. Slika 3 prikazuje difrakcijski uređaj u Zavodu za kemiju materijala. Poznavanje strukture tvari od izuzetne je važnosti za razumijevanje svojstava materijala. Važno je istaći, da poznavanje strukturnih osobina tvari često dovodi do novih ideja kako da se izmjenom nekih elemenata strukture poboljšaju svojstva materijala.



SLIKA 3. UREĐAJ ZA RENTGENSKU DIFRAKCIJU POLIKRISTALNIH UZORAKA (DIFRAKTOMETAR ZA PRAŠKASTE UZORKE).

Određivanje apsolutne starosti arheoloških, geoloških i drugih uzoraka mjerenjem aktivnosti prirodnog radioaktivnog izotopa ugljika ^{14}C

PIŠE: BOGOMIL OBELIĆ

Paleontolozi, arheolozi i povjesničari umjetnosti često su suočeni s problemom kako odrediti starost nekog lokaliteta ili predmeta. Sve do nedavno koristili su se tzv. relativnim datiranjem, koje se sastoji u sustavnom slijedu artefakata ili depozita, ili procjenjivanjem starosti u ovisnosti o obliku predmeta, sadržaju ili načinu izvedbe nekog umjetničkog djela. Mjerenje apsolutne starosti postalo je moguće uvođenjem tzv. "radioaktivnih satova", zasnovanih na radioaktivnom raspadu. Najpoznatija od tih metoda je ona koja se temelji na radioaktivnom raspadu izotopa ugljika ^{14}C . Koncentracija aktivnosti ^{14}C u cijeloj atmosferi i biosferi je konstantna, jer je uspostavljena ravnoteža između prirodne produkcije uslijed djelovanja kozmičkog zračenja i radioaktivnog raspada tog izotopa. Atomi ^{14}C ulaze u životni ciklus biljaka, životinja i ljudi. Nakon smrti organizma prestaje i nadoknađivanje raspadlih ugljikovih atoma, pa se aktivnost ^{14}C u njemu počinje smanjivati prema eksponencijalnom zakonu radioaktivnog raspada. Mjerenjem preostale aktivnosti ^{14}C u nekom materijalu se može odrediti vrijeme proteklo od smrti organizma. Vrijeme poluraspada ^{14}C iznosi 5730 godina, tako da se primjenom ove metode mogu odrediti starosti do oko 50-000 godina.

U Laboratoriju za mjerenje niskih aktivnosti se ^{14}C metoda datiranja primjenjuje već skoro četrdeset godina. U upotrebi su dva mjeračka uređaja: plinski proporcionalni brojač i tekućinski scintilacijski brojač. Svaka od ovih tehnika mjerenja zahtijeva poseban način obrade i pripreme uzoraka koje želimo datirati. Uzorak treba nakon odstranjivanja eventualnih nečistoća pretvoriti u ugljični dioksid, što se radi spaljivanjem organskih uzoraka u struji kisika, odnosno djelovanjem kiseline na karbonatne uzorke. Kod tehnike proporcionalnog brojača je radni plin metan koji se dobiva redukcijom ugljičnog dioksida, dok se za mjerenje tekućinskim scintilacijskim brojačem ugljični dioksid sintetizira u benzen (C_6H_6).

Do sada je u Laboratoriju izmjerena starost preko 3000 uzoraka iz područja arheologije, paleontologije, geologije i hidrogeologije za brojne naručitelje iz Hrvatske i susjednih zemalja. Izvršena su i sljedeća datiranja značajna za hrvatsku arheologiju, od paleolitika do kasnog srednjeg vijeka: nalazi



LINIJ ZA PRIPREMU BENZENA ZA MJERENJE AKTIVNOSTI ^{14}C POMOĆU LSC

u spiljama Bezdanjači, Šandalji, Velikoj pećini i Vindiji, neolitska naselja Galovo i Zadubravlje kod Slavenskog Broda, gdje je određena starost dosad najstarijeg nađenog bunara u Europi, eneolitska naselja u Vinkovcima i Vučedolu kod Vukovara, naselja iz željeznog doba na zagrebačkom Gornjem gradu i kod Kaptola u Požeškoj kotlini, ostatci rimskih naselja iz Ščitarjeva, Siska i Varaždinskih toplica, više antičkih i starohrvatskih brodova, te srednjovjekovni kompleks na mjestu današnjeg Muzeja grada Zagreba. Značajno je datiranje najduljeg pronađenog etruščanskog napisa, Liber Linteus Zagrabiensis iz Arheološkog muzeja u Zagrebu, te crkve sv. Donata i škrinje sv. Šimuna u Zadru. Datirali smo također sedre i sige s područja Dinarida, posebno iz Nacionalnog parka Plitvička jezera i Nacionalnog parka Krka, a ova istraživanja proširena su i na izučavanje paleoklimatskih promjena u našim krajevima i promjene razine Jadranskog mora u prošlosti.

mjena u našim krajevima i promjene razine Jadranskog mora u prošlosti.

Obilazak će započeti u dijelu Laboratorija u kojem se obavlja kemijska priprema uzoraka, kako bi se dobio u obliku pogodnom za mjerenje proporcionalnim, odnosno tekućinskim scintilacijskim brojačem. Uređaji za mjerenje aktivnosti ^{14}C nalaze se u podrumskom dijelu Laboratorija, kako bi se što više smanjio utjecaj kozmičkog zračenja i povećala preciznost mjerenja.

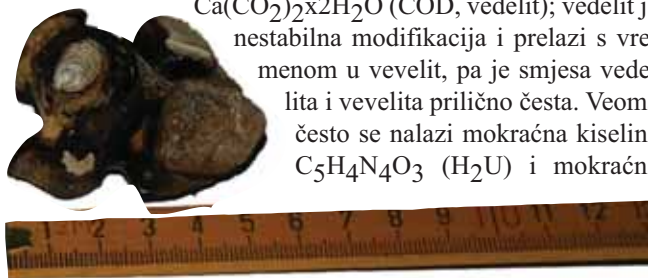
TEKUĆINSKI SCINTILACIJSKI BROJAČ (LSC)
QUANTULUS 1220



PIŠE: IVAN HABUŠ

Stvaranje kamenaca u urinarnom traktu poznato je od davnine. Koncem 18. i početkom 19. stoljeća identificirani su glavni sastojci kamenaca – mokraćna kiselina, kalcijev oksalat, kalcijev fosfat, magnezijev amonijev fosfat i cistin. U to vrijeme kamenci su češće nego danas imali mokraćnu kiselinu samu ili u smjesi s fosfatima. Već tada je uočeno da način prehrane može utjecati na stvaranje kamenaca. Od urolitijaze obolijevaju i životinje; kamenci su nađeni kod pasa, mačaka, zečeva, kanadskih kuna zlatica, itd., a komponente su iste kao i kod ljudi.

Danas kao najčešći sastojci kamenaca dolaze kalcijevi oksalati monohidrat $\text{Ca}(\text{CO}_2)_2 \times \text{H}_2\text{O}$ (COM, vevelit) i dihidrat $\text{Ca}(\text{CO}_2)_2 \times 2\text{H}_2\text{O}$ (COD, vedelit); vedelit je nestabilna modifikacija i prelazi s vremenom u vevelit, pa je smjesa vedelita i vevelita prilično česta. Veoma često se nalazi mokraćna kiselina $\text{C}_5\text{H}_4\text{N}_4\text{O}_3$ (H_2U) i mokraćna



SLIKA 1. KARBONAT APATIT

kiselina dihidrat $\text{C}_5\text{H}_4\text{N}_4\text{O}_3 \times 2\text{H}_2\text{O}$ (H_2UD), fosfati kao karbonat apatit (Slika 1) $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6-x(\text{OH})_{2-y}(\text{CO}_3)_{x+y}$ i struvit $\text{Mg}(\text{NH}_4)(\text{PO}_4) \times 6\text{H}_2\text{O}$, nešto rjeđe brušit $\text{CaHPO}_4 \times 2\text{H}_2\text{O}$, te cistin $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_4\text{S}_2$. Rijetko se nalaze natrijeva i amonijeva sol mokraćne kiseline. Vrlo rijetko se nalaze protein, ksantin, 2,8-dihidroksiadenin, kalcijev fosfat $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ kao amorfni ili kristalinični, oktakalcijev fosfat $\text{Ca}_8\text{H}_2(\text{PO}_4)_6 \times 5\text{H}_2\text{O}$, te kalcijev karbonat.

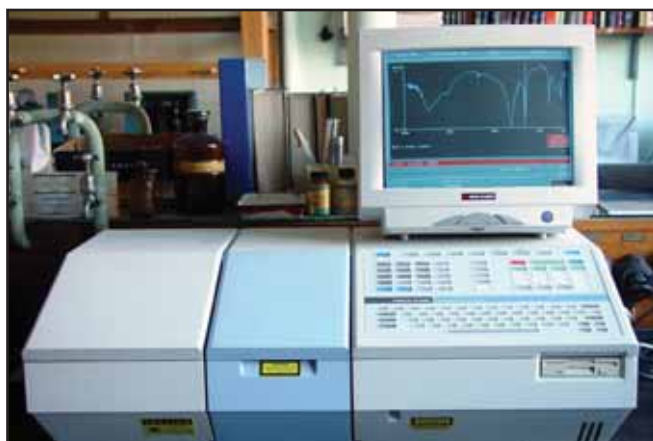
Stvaranje bubrežnih kamenaca mora se promatrati kao simptom kompleksne bolesti. Uzroci stvaranja kamenaca višestruki su i do danas nisu sasvim ispitani i definirani. Stvaranje cistinskih kamenaca relativno je rijetko (1-2%), a povezano je s genetskim metaboličkim čimbenicima odnosno poremećajima, pa su recidivi vrlo česti. Neki kamenci kao struvit, karbonat apatit (Slika 1) i amonijev hidrogen urat povezani su s infekcijama mokraćnih putova kod kojih dolazi do povećanja pH urina zbog cijepanja uree na amonijak i ugljikov dioksid. Stvaranje ostalih kamenaca ovisi o različitim fizikalno-kemijskim i patofiziološkim procesima u organizmu. Sastav i pH urina u svakom slučaju su jedan od presudnih i bitnih čimbenika. Urin je otpadni produkt organizma vrlo kompleksnog i varijabilnog sastava. Prosječna ionska jakost je oko $0,3 \text{ mol dm}^{-3}$, a pH varira od 5 do 7,8. Sadrži razne ione, male organske molekule i makromolekule. Taloženje raznih soli u urinu ovisi o njihovoj koncentraciji i o pH, ali i o udjelu raznih promotora ili inhibitora nukleacije. Kalcijev hidroksi karbonat fosfat (karbonat apatit) i struvit talože kod $\text{pH} > 7$, dok mokraćna kiselina taloži u kiselom mediju ($\text{pH} < 6,2$) a dihidrat mokraćne kiseline kod $\text{pH} < 5,5$. Brušit također taloži u kiselom mediju. Cistinski kamenci topljiviji su u alkalnom području ($\text{pH} > 8$), dok je za taloženje kalcijevih oksalata bitniji sastav urina nego sam pH.

Analiziranjem sastava kamenaca može se odrediti njihova geneza na osnovu koje se određuje terapija i dijetalna prehrana radi sprječavanja ponovnog stvaranja kamenaca. Kemijske metode analize zamijenjene su u današnje vrijeme fizikalnim

metodama – rendgenskom difrakcijom i infracrvenom (IR) spektroskopijom jer su jednostavnije, brže i trebaju manje količine uzorka. IR spektroskopija tehnikom Nujol prvi je put primijenjena za analize kamenaca 1955. godine. Upotrebom tehnike pastile kalijevog bromida riješeni su neki nedostaci koje je pokazivala upotreba Nujola, te se danas isključivo radi s KBr pastilama.

Analize bubrežnih kamenaca rade se u Institutu “Ruđer Bošković” od 1963. godine, u početku metodom rendgenske difrakcije, a nešto kasnije razvijena je i metoda IR spektroskopije. Od 1967. godine do danas je u Laboratoriju za analitičku kemiju napravljeno preko 16 000 analiza metodom IR spektroskopije (Slika 2).

Zapažanje o znatnoj učestalosti urolitijaze u području srednje Dalmacije i otoka potaknulo je Jugoslavensku akademiju znanosti i umjetnosti 1954. godine da pokrene sustavno istraživanje te bolesti. Istraživanja su nastavljena kada je u okviru projekta “Normalna i patološka mineralizacija tkiva u organizmu” Samoupravna interesna zajednica za znanstveni rad Republike Hrvatske 1982. godine odobrila i financirala projektni zadatak “Multicentrični program istraživanja urolitijaze u SR Hrvatskoj”. Otada je napravljen niz istraživanja u raznim regijama Hrvatske. Ta su ispitivanja pokazala da je učestalost te bolesti u Dalmaciji i Primorju dostizala i do 2,7 % ukupnog stanovništva u pojedinim naseljima. Karakteristike urolitijaze kod populacija na visokoj socioekonomskoj razini: najveća učestalost među odraslima, manje od 10 % kamenaca iz mokraćnog mjehura, više od 25 % žena među oboljelima, više od 60 % oksalatnih i manje od 20 % uratnih kamenaca – i usporedimo naše podatke za razdoblje od 1990. do 1998. godine i podatke za 2000. godinu kada je analizirano 3675 kamenaca, možemo zaključiti da u prosjeku urolitijaza u Hrvatskoj ima sve te karakteristike. Ostaje još uvijek pitanje zašto na Jadranu ima više muškaraca oboljelih od urolitijaze i zašto ima više uratnih kamenaca nego u ostalom dijelu Hrvatske. Smatra se da uzroci mogu biti pored dehidratacije organizma u ljetnim mjesecima, pored navika u uzimanju tekućine, načinu prehrane, uvjetima života i rada, te u genetski uvjetovanim poremećajima metabolizma mokraćne kiseline. Međutim, opći uvjeti života u Hrvatskoj kao zdravstvena zaštita, kvaliteta vode, higijenski uvjeti, prehrane navike, itd. nisu bitno različiti od onih u razvijenim zapadnim zemljama i to se odražava i na karakteristike urolitijaze kod nas.



SLIKA 2. PERKIN ELMER SPECTRUM RX I FT – IR SYSTEM

PIŠE: KORALJKA GALL-TROŠELJ

Tehnologija temeljena na DNA-čipovima dovela je do značajnih pomaka u svim područjima znanosti koja su na bilo koji način povezana s izučavanjem nukleinskih kiselina. Izrečeno jednostavnim riječima, DNA-čip je mali nosač na koji su vezani kratki odsječci DNA, dugački samo 25 baza. Na GeneChip® (patentirani nosač američkog proizvođača Affymetrix) je vezano 54 000 odsječaka koji predstavljaju jedinstvene DNA sljedove 47 400 transkripata koji nastaju prepisivanjem 29 000 gena čovjeka.

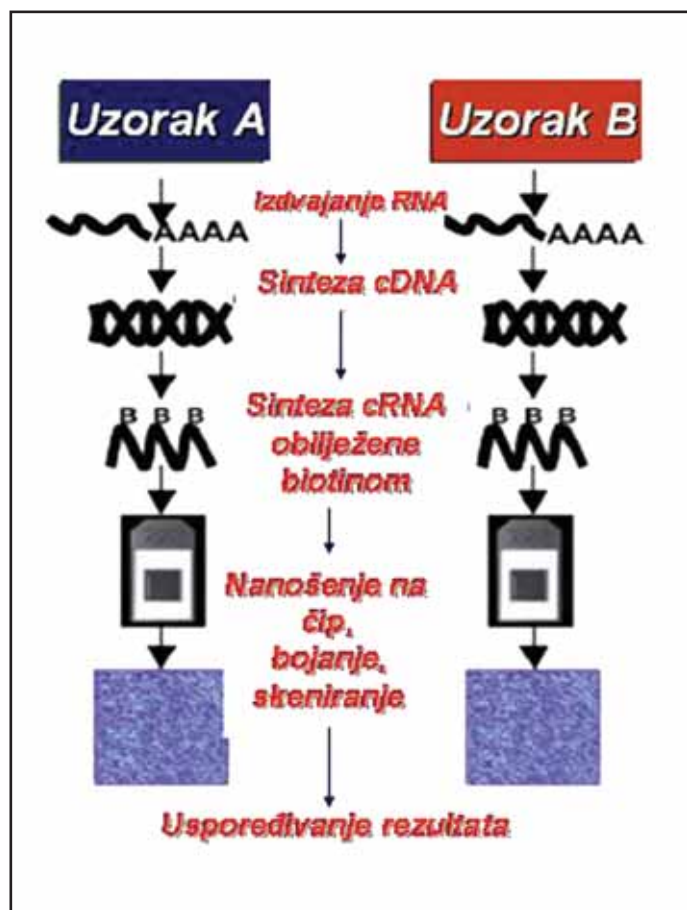
Posjedovanje ovako impresivnog "genetičkog blaga" na samo jednom čipu omogućuje analizu aktivnost svih gena čovjeka u određenom tkivu. Kada govorimo o aktivnosti gena, tada nužno upotrebljavamo pojmove "tkivno i vremenski specifična aktivnost (ekspresija)". "Mjera aktivnosti" naših gena su proteini, ali i glasnička RNA (mRNA) koja je "posrednik" između gena (DNA) i efektorne molekule (proteina). Ako u vremenu "t" izdvojimo glasničku RNA iz određenog tkiva (na primjer, tkiva tumora), dobit ćemo uvid u aktivnost svih gena u tom tumoru u trenutku "t". Kako? Na slici je prikazano na koji način pripremamo RNA za nanašanje na čip kako bi se, po načelu komplementarnosti, odsječci RNA prisutni u uzorku vezali na komplementarne odsječke na čipu. Naravno, ako gen nije ispoljen, nema niti njegove mRNA, pa je stoga i signal na položaju gdje se očekuje hiridizacijski signal na čipu jednak nuli. U slučaju da je gen iznimno jako ispoljen – aktivan, u uzorku će biti prisutan i velik broj glasničkih molekula RNA koje će se, po načelu komplementarnosti, vezati za ciljna mjesta – probe na čipu, što će rezultirati snažnim signalom na određenom dijelu čipa.

Tehnologija na kojoj su nastali DNA-čipovi nezamisliva je bez dobrog skenera i zahtjevnog kompjutorskog programa. Svaki oligonukleotid vezan na čipu nalazi se na točno određenom položaju a slijed nukleotida koji ga čine moguće je saznati na stranicama proizvođača čipa: <http://www.affymetrix.com>

Istraživanja u kojima se koriste DNA-čipovi, kao i većina istraživanja u molekularnoj medicini, temelje se na usporednim analizama pri čemu se najčešće analiziraju i uspoređuju nepromijenjeno tkivo i tkivo zahvaćeno bolešću. U molekularnoj onkologiji najčešće uspoređujemo tkivo zloćudnog tumora s nepromijenjenim okolnim tkivom, tumore istog porijekla ali različitog stupnja diferencijacije i uznapredovalosti, središnji dio tumora s njegovom periferijom, tumor, odnosno njegove transkripte, prije i nakon terapije.

Naravno, rezultati dobiveni na razini RNA, kao što je to slučaj s rezultatima dobivenim nakon analize čipa, ne mogu se smatrati konačnim. Njihova se valjanost treba potvrditi na razini proteina koji su izvršne molekule u stanici. Problem koji se javlja u ovom slučaju je vrlo malen broj kvalitetnih protutijela u odnosu na broj poznatih transkripata i jasno je da se, na razini proteina, može prekontrolirati tek mali broj rezultata dobivenih analizom RNA (transkriptomska analiza).

Broj podataka koji se dobije u jednom pokusu vrlo je velik (jedan čip – 47 400 transkripata) i uvijek postoji vjerojatnost da su se neki rezultati, koji upućuju na razlike između dva uzorka, desili slučajno. Ovo je još jedan razlog za dodatne provjere rezultata dobivenih na čipu koji bi se, smatra većina istraživača koji koriste ovu metodologiju, trebali smatrati odličnom bazom za postavljanje radnih hipoteza ("hypothesis generating") za buduća istraživanja.



ORGANIZACIJSKI ODBOR OTVORENIH DANA 2005.

Pavao Dubček | Maja Dutour Sikirić | Milko Jakšić | Željka Knežević | Branislav Matasović

Ratko Mileta | Greta Pifat-Mrzljak | Tomislav Portada | Mary Sopta | Jadranka Stojanovski

Tihomir Surić | Neven Žarković

određivanje slijeda nukleotida u molekuli DNA

D3

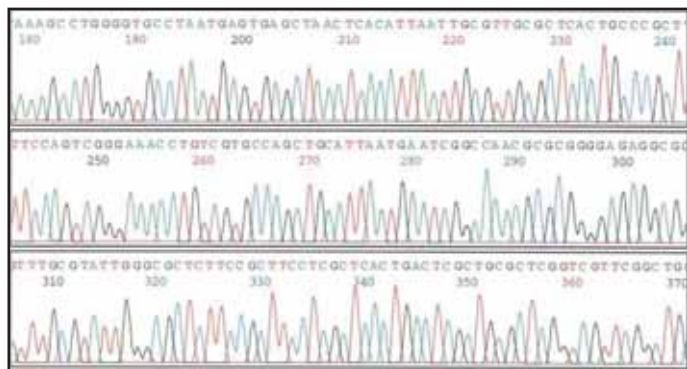
PIŠE: HELENA ČETKOVIĆ

Metode za određivanje slijeda nukleotida u molekuli DNA razvijale su se sredinom sedamdesetih godina, paralelno s mnogim metodama rekombinantne DNA tehnologije. 1977. godine Fred Sanger sa suradnicima na Sveučilištu u Cambridgeu razvio je metodu koja se zasniva na zaustavljanju enzimatske sinteze lanca DNA ugradnjom analoga nukleotida (dideoziribonukleozid-trifosfata), pa se ova metoda još naziva i enzimatska metoda. Za razvoj metoda za određivanje slijeda nukleotida u DNA, Sanger je godine 1980, zajedno s Walterom Gilbertom dobio Nobelovu nagradu za kemiju.

Nagli razvoj tehnika molekularne genetike, pogotovo pojava nove generacije vektora za kloniranje gena, te upotreba sintetskih oligonukleotida, učinili su ovu metodu najviše upotrebljavanom i jednim od najvažnijih oruđa u molekularnoj biologiji.

Osnovna načela određivanja slijeda nukleotida u DNA nisu se promijenila od tada. Metoda je doživjela samo manje preinake i usavršavanja. Razvoj instrumentacije, te automatizacija i kompjuterizacija procesa omogućili su daleko veću točnost i efikasnost u radu.

Prirodni supstrati za sintezu DNA su nukleotidi. Enzimi koji sintetiziraju DNA mogu ugraditi u rastući lanac i analoge nukleotida, uzrokujući zaustavljanja daljnje sinteze DNA lanca. Svaki analog nukleotida obilježen je drugom fluorescencijskom bojom. Na kraju reakcije nastaje smjesa fragmenata DNA koji se razlikuju dužinom samo za jedan nukleotid. Tijekom elektroforeze fluorescentno obilježeni fragmenti putuju u okomito postavljenom gelu. Detekcija se provodi sustavom koji uključuje laserski čitač. Signali se automatski pohranjuju i kompjuterski obrađuju. "DNA-sekvenator" je uređaj kojim se određuje slijed nukleotida u molekuli DNA. Najnoviju generaciju "DNA-sekvenatora" predstavlja kapilarni tip instrumenta velikog kapaci-



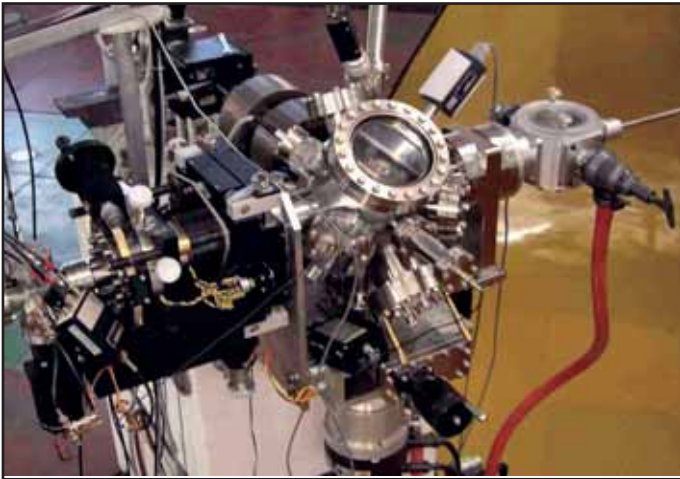
citeta. Ovakvi instrumenti u sve su većoj mjeri automatizirani i koriste "četverbojnu" biokemiju. Osim primjene "DNA-sekvenatora" u određivanju primarne strukture DNA, vrlo je značajna upotreba ovog instrumenta za određivanje dužine fragmenata DNA (mikrosateliti, AFLP, SSCP itd.). Genotipizacija pomoću mikrosatelita je u proteklih desetak godina postala najvažnija metoda za proučavanje genetičkog biodiverziteta.

20.12.2004. godine uz prisustvo ministra znanosti, obrazovanja i sporta Dr. Dragana Primorca i brojnih uzvanika u Zavodu za molekularnu biologiju (Laboratorij za molekularnu genetiku) svečano je pušten u rad nedavno nabavljeni "DNA sekvenator", odnosno uređaj "ABI PRISM® 3100-Avant Genetic Analyzer". Ovaj kapilarni DNA sekvenator, proizvod tvrtke Applied Biosystems, radi s četiri kapilare istovremeno, koristi "četverbojnu" biokemiju, što značajno skraćuje manipuliranje uzorcima i ljudski rad. Korištenjem standardnih postavki, instrument može očitati 23.400 baza u jednom danu (u brzjoj analizi i do 48.000 baza/dan) i određuje od 2.560 do 5.760 genotipova u danu. Krajem veljače počeo je s radom "DNA-servis" o čijem se radu moguće detaljnije informirati na web stranici <http://www.irb.hr/hr/str/zmg/servis/>.



PIŠE: MILKO JAKŠIĆ

Od ove godine uz postojeći 6 MV Tandem Van de Graaff akcelerator, na Institutu Ruđer Bošković kreće s radom i novi 1.0 MV Tandetron akcelerator iona. Očekivana stabilnost energije ionskog snopa kao i pouzdanost rada novog akceleratora proširit će mogućnosti primjena na nova područja, od kojih će posebno značajne biti primjene u modifikaciji svojstava materijala. Akcelerator je instaliran tijekom 2004. godine



SLIKA 1. NOVI 1.0 MV TANDETRON AKCELERATOR

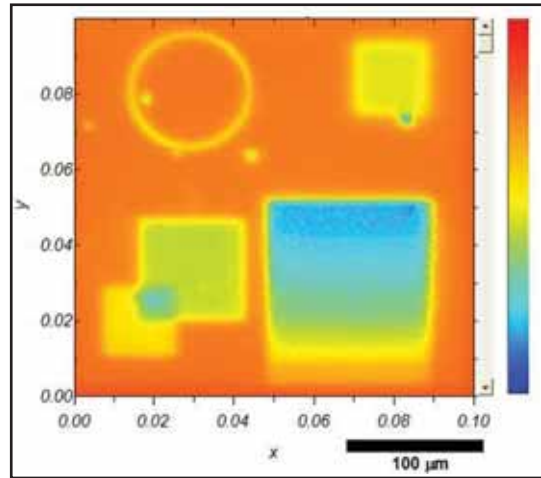
zajedničkom investicijom Međunarodne agencije za atomsku energiju (IAEA) iz Beča i Republike Hrvatske (slika 1).

Saznanja iz nuklearne fizike te metode istraživanja koje su razvijali fizičari, već se desetljećima primjenjuju u nuklearnoj energetici, medicinskoj dijagnostici i liječenju te nizu drugih područja.

Dvadeset i prvo stoljeće i potreba za razvojem novih



SLIKA 2. POMOĆU IBIC METODE VIZUALIZIRANE SU PROMJENE U ELEKTRONIČKIM SVOJSTVIMA SI DIODE USLIJED DEFEKATA KOJE SMO PROIZVELI U RAZLIČITIM OBLICIMA I DUBINAMA S Li I He IONIMA ENERGIJE 2 MeV



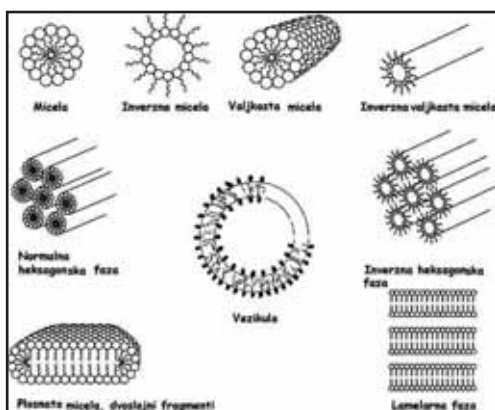
SLIKA 3. SUSTAV ZA FOKUSIRANJE IONA (NUKLEARNA MIKROPROBA)

nanometarskih struktura u materijalima, mijenjaju i smjerove znanstvenih istraživanja koji koriste akceleratorne ione. Prednost sustava akceleratora Instituta Ruđer Bošković je da se pomoću jednog od tri ionska izvora mogu ubrzati protoni, alfa čestice i teški ioni (Li, C, O, Si, Cl, I, Au, itd.), na energije na kojima oni u materijalu imaju najveću zaustavnu moć (gube najveću količinu energije po jedinici puta). To omogućuje specifične primjene koje su dostupne samo u nekim svjetskim akceleratorskim laboratorijima. Upravo te mogućnosti iskoristili smo za proizvodnju lokaliziranih defekata u jednostavnim poluvodičkim strukturama pomoću fokusiranog ionskog snopa (slika 2). Daljnjim proučavanjem defekata koji u materijalu nastaju kao posljedica prolaska samo jednog iona na točno određenom mjestu, očekujemo otvaranje novih područja primjene akceleratora.

Uz analitičke primjene metoda spektroskopije x-zraka, u Laboratoriju za interakcije ionskih snopova razvijamo i metode analize materijala zasnovane na raspršenjima iona. Novi sustavi za detekciju koje smo razvili za metode RBS (Rutherford Backscattering) i ERDA (Elastic Recoil Detection Analysis) mnogo su osjetljiviji od konvencionalnih detekcijskih sustava, a koriste se za dubinsko profiliranje elemenata (od vodika do urana) u tankim nanometarskim slojevima. Pomoću sustava nuklearne mikroprobe sa snopom fokusiranim na dimenzije manje od 1 mikrometra, postojeće analitičke metode koriste se za proučavanja svojstava novih i nepoznatih materijala i struktura na mikro i nano razinama (slika 3).

PIŠE: NADA FILIPOVIĆ-VINCEKOVIĆ

Površinski aktivne tvari (PAT) su svestrani spojevi široke i raznovrsne primjene. Važne su za funkcioniranje živih organizama (membrane stanica, lipidi, žučne soli itd.), prisutne su u brojnim proizvodima (sredstva za pranje i čišćenje, farmaceutski i kozmetički pripravci, boje, papir itd.), koriste se u klasičnim (dispersatori, emulgatori, omekšivači, gelatori itd.) i modernim tehnologijama (nanoreaktori, priprava nanočestica, mezoporoznih materijala, biokompozita itd.). Ono što ih čini tako posebnim spojevima je postojanje dva strukturno različita dijela u molekuli: dijela koji "voli" vodu (hidrofilan dio) i dijela koji "mrzi" vodu (hidrofoban dio). U vodenim otopinama molekule PAT nastoje "zaštititi" hidrofoban dio od vode,

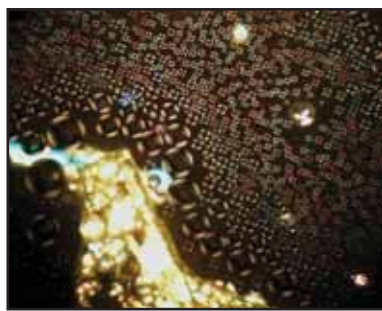
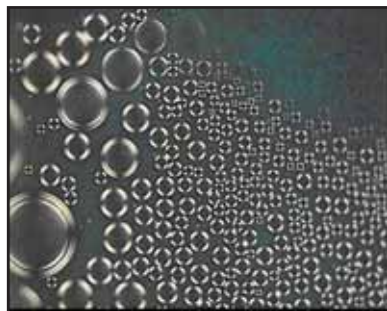


SLIKA 1. SHEMATSKI PRIKAZ RAZLIČITIH SUPRAMOLEKULA U OTOPINAMA PAT

adsorbiraju se na površinama s orijentacijom hidrofilnog dijela molekule prema vodi, mijenjaju svojstva površina, te se zato i zovu površinski aktivne tvari. Npr., sniženjem napetosti površine vode PAT omogućavaju brže vlaženje površine (npr. rublja, suđa i dr.) otopinom za čišćenje i lakše uklanjanje nečistoća.

Kada se popune granice faza, monomeri PAT nastavljaju proces izdvajanja hidrofobnog dijela iz vode samoorganiziranjem u supramolekule različitih veličina i oblika – monosloj, micela, vezikule, otvoreni dvoslojevi, različite mezofaze i inverzne strukture (kada voda nije otapalo) (slika 1).

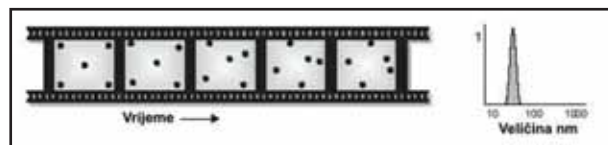
Veći dio istraživanja u grupi za kemiju površinski aktivnih tvari uključuje istraživanja odnosa strukture molekule PAT i fizičko kemijskih svojstava u vodenim otopinama. Istražuju se zakonitosti koje povezuju strukturu molekule PAT i strukturu supramolekule, kao i složene strukturno-



SLIKA 3. MIKROFOTOGRAFIJE SNIMLJENE POLARIZACIJSKIM MIKROSKOPOM PRIKAZUJU: (A) VEZIKULE U VODENOJ OTOPINI DODECILAMONIJEVOG PIKRATA I (B) SMEKTIČKE SFEROLITE KRISTALIZIRANE IZ TALINE DODECILAMONIJEVOG PIKRATA

transformacijske odnose višefaznih i višekomponentnih sustava s PAT. Pravilnim izborom strukturnih dijelova molekule PAT moguće je dizajniranje određene supramolekule, a time i dobivanje potrebnih svojstva za ciljanu primjenu.

Važan eksperimentalan podatak u našim istraživanjima je veličina pripremljenih nanočestica, koja se kreće od približno 5 nm za kuglaste micela i od 20 do 1000 nm za vezikule. Pouzdana, točna i brza metoda određivanja veličine nanočestica u njezinom prirodnom okruženju je metoda koja se temelji na raspršenju svjetlosti. Čestice u otopini se stalno nasumično kreću, pri čemu male čestice imaju veću brzinu, a velike manju.



SLIKA 2. SLIKE KRETANJA ČESTICA U OTOPINI I NJIHOVA VELIČINA ODREĐENA NA TEMELJU BRZINE DIFUZIJE

Ako "snimamo" otopinu u kratkim vremenskim intervalima, od recimo 100 μ s, možemo ustanoviti koliko su se čestice pomakle, a na temelju toga i koliko su velike.

Koje tekuće kristale imate kod kuće, a da to ne znate?

Imate li mobilni? Znači, imate tekuće kristale (LC). Posjedujete li laptop ili plosnati kompjuterski ekran? O, imate praktičan LC display. Sigurno imate sapun, vrećicu detergenta, u garaži možda kakvo mazivo ulje ili tubu sredstva za poliranje? A kozmetičku "antiage" kremu s lipozomima? Njihove glavne komponente su tekući kristali. Da li vam je kolesterol u gramicama normale? U nadi da jest, znači da imate LC i u sebi, svi ih imamo.

Što su to tekući kristali? To fazno stanje nije ni kruta ni tekuća faza, posjeduje svojstva i uređenosti kristalne rešetke i pokretljivosti izotropne tekućine. Neke micela (pločaste), sve vezikule, lipozomi (dvoslojevi lipida) ili bilozomi (dvoslojevi žučnih soli) samoorganiziraju se u tekuće kristale. Spojevi koji stvaraju tekuće kristale samo u prisutnosti otapala, zovu se LIOTROPI, dok neke druge tvari (TERMOTROPE), treba prethodno zagrijati tj. podvrgnuti faznoj transformaciji. AMFOTROPI su tvari koje pokazuju i liotropna i termotropna svojstva. Većina PAT ima amfotropna svojstva. Vrlo brza i jednostavna metoda prepoznavanja tekućih kristala je promatranje tekstura pomoću polarizacijskog mikroskopa sa stoličcem za grijanje.

D1 Novi materijali - sinteza prije svega visokotemperaturno-supravodljivi oksidi, metalni klasteri, molekularni magneti

PIŠU: NEVENKA BRNIČEVIĆ I PAVICA PLANINIĆ

Suvremena se tehnologija velikim dijelom temelji na novim materijalima. Iako se u pravilu značajna otkrića događaju slučajno, ipak je moguće, promišljenim postupcima kemijske sinteze, prirediti nove spojeve poželjnih fizičko-kemijskih svojstava. Ne začuđuje stoga činjenica da su gotovo svi novi materijali posljedica istraživačkih napora učinjenih u kemijskim laboratorijima, od toga znatan dio kao rezultat istraživanja u području kemije prijelaznih metala i anorganske kemije općenito.

U Laboratoriju za kemiju kompleksnih spojeva priređujemo i istražujemo različite vrste novih anorganskih, odnosno anorgansko-organskih sustava, od supravodljivih oksida, preko metalnih klastera do molekularnih magneta.

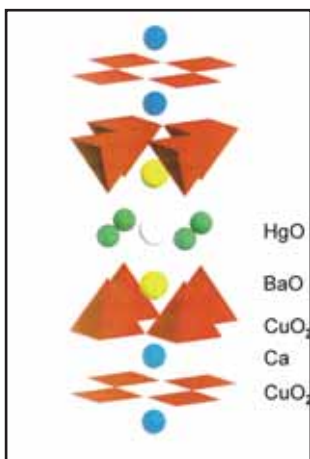
Visokotemperaturno-supravodljivi oksidi priređeni su prvi put 1986. godine. Dobivaju se višekratnom termičkom obradom smjese oksida bakra(II), lantana(III), itrija(III), elemenata rijetkih zemalja, te zemno-alkalnih metala, u obliku polikristalnih uzoraka ili monokristala. Ovi keramički materijali ispod neke kritične temperature vode električnu struju gotovo bez otpora. Njihovom uporabom sprječava se gubitak električne energije koji je posljedica zagrijavanja sustava kojim struja prolazi, što doprinosi velikoj uštedi energije i povećanju efikasnosti rada uređaja. Poželjno je prirediti uzorke sa što višim kritičnim veličinama: temperaturom prijelaza u supravodljivo stanje (T_C), gustoćom struje (I_C), te magnetskim poljem (H_C) dovoljno visokim za tehnološku primjenu. Za sada je najviša vrijednost $T_C = 138$ K izmjerena na mješovitom oksidu živa-talij-barij-kalcij-bakar-kisik (slika 1).

Prijelaz u supravodljivo stanje ($T_C \sim 15$ K) nađen je i među heksanuklearnim klasterima molibdena, a svojstvo supravodljivosti ostaje očuvano i pri visokim vrijednostima magnetskog polja, $H_C \sim 60$ T. Metalni klasteri (grozdovi) su spojevi u kojima su dva ili više metalnih atoma međusobno povezani neposrednom vezom metal – metal. U našem laboratoriju istražuju se heksanuklearni (M_6) klasteri niobija, tantala, molibdena i volframa, u kojima šest metalnih atoma čini gotovo pravilan oktaedar (slika 2). Elektroni raspoloživi za vezu metal – metal delokalizirani su između svih metalnih atoma. Unutar ovih sustava priređen je niz dijamagnetskih i paramagnetskih heksanuklearnih klastera niobija i tantala koji pokazuju poluvodička svojstva s energijama aktivacije $E_a = 0.16 - 0.22$

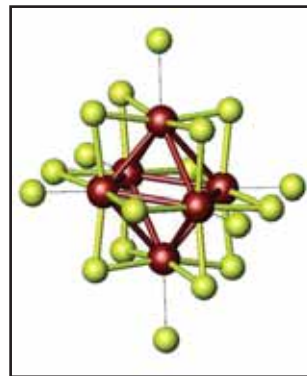
eV. Neki od ovih spojeva osjetljivi su na kisik i vlagu iz zraka, te ih je moguće prirediti isključivo tehnikom rada u visokom vakuumu i inertnoj atmosferi (suha komora).

Molekularni magneti su spojevi koji sadrže metalne centre s nepopunjenim elektronskim orbitalama. Elektronski spin ovakvih sustava u osnovnom, odnosno u nižim pobuđenim stanjima uvijek je veći od nule. Spojevi mogu sadržavati različite kombinacije dvaju ili više istovrsnih ili raznovrsnih atoma, a uključuju elemente prijelaznih metala, obično bakra, kroma, mangana, kobalta, nikla ili rijetkih zemalja. Promjenom sastava, odnosno arhitekture molekule (tj. broja ili vrste paramagnetskih centara ili liganada koji ih okružuju), moguće je postići određena fizikalna, posebno magnetska svojstva (slika 3). Ova bi istraživanja mogla dovesti do novih fero-, odnosno ferimagnetskih materijala, koji bi se onda mogli koristiti kao aktivne komponente pri izradi različitih magneto-optičkih naprava, poput malih memorijskih jedinica ili magnetskih senzora.

U sklopu predstavljanja laboratorija, pored ostalog, prikazat će se rad na vakuumskoj liniji i suhoj komori, te lebdjenje magneta iznad uzorka supravodljivog oksida.

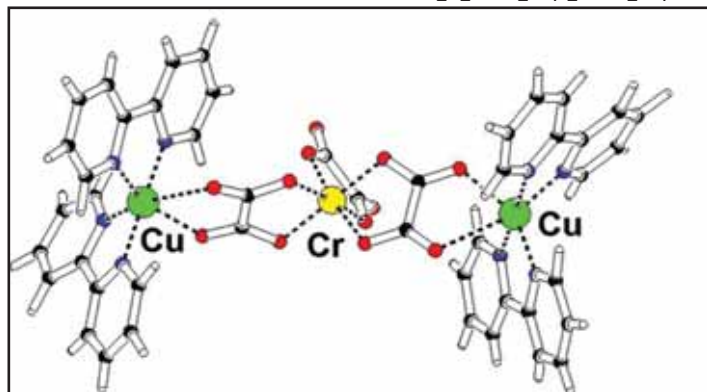


SLIKA 1. SLOJEVITA STRUKTURA SUPRAVODLJIVOG OKSIDA $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$



SLIKA 2. GROZD TANTALOVIH ATOMA PREMOŠTENIH ATOMIMA KLORA, $[(Ta_6Cl_{12})Cl_6]^{2-}$

SLIKA 3. ATOMI BAKRA(II) I KROMA(III) PREMOŠTENI OKSALATNIM SKUPINAMA U KOMPLEKSNOJ KATIONU $[\{Cu(bpy)_2\}_2(\mu-C_2O_4)_2Cr(C_2O_4)]^+$



PIŠE: BISERKA RASPOR

Metalotionein je protein, sastavljen od šezdesetak aminokiselina, od kojih jednu trećinu čine molekule cisteina. Metalni ioni, koji potiču pobudnu sintezu apoproteina (tio-neina), stvaraju stabilne komplekse sa SH-skupinom cisteina. Pobudnu sintezu potiču ioni cinka, bakra, kadmija, žive i srebra. Kad je koncentracija metalnih iona veća od kapaciteta vezanja



SLIKA 1. TRLJA BLATARICA

unutarstaničnih liganada, kao što je npr. glutation, započinje transkripcija metalotioneinskog gena, ekspresija apotioneina i stvaranje metalotioneina, radi sprečavanja toksičnosti. Slijed reakcija shematski je prikazan shemi 1.

Od 1957. godine, kad je metalotionein izoliran kao kadmijev kompleks iz kore konjskog bubrega, izoliran je iz raznih skupina organizama (kralješnjaka, beskralješnjaka, nekih eukariotskih mikroorganizama). Konzervativna struktura tog proteina ukazuje na njegovu biološku važnost. U biološkim sustavima metalotioneini imaju dvojaku ulogu:

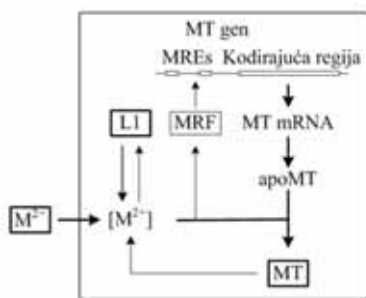
- u metabolizmu biološki neophodnih metala (bakar, cink) i održavanju ravnotežne koncentracije tih metala u stanic;
- detoksikacijsku ulogu za toksične metale (kadmij, živu i srebro).

Najveći istraživački interes potaknulo je osnovno svojstvo metalotioneina, a to je pobudna sinteza, radi čega se i u istraživanjima mora metalotioneini primijenjuju kao indikatori (biomarkeri) izloženosti organizama navedenim metalima. Izučavanje autohtonih morskih organizama (školjkaša, riba) ima za cilj rano otkrivanje specifičnih promjena unutar stanice, izazvanih toksičnim metalima. Međutim, zbog dvojake uloge metalotioneina, na početku ispitivanja potrebno je razlučiti primarnu koncentraciju tog proteina, vezanu uz održavanje ravnotežne koncentracije biološki neophodnih metala, od inducirane koncentracije, potaknute detoksikacijskim

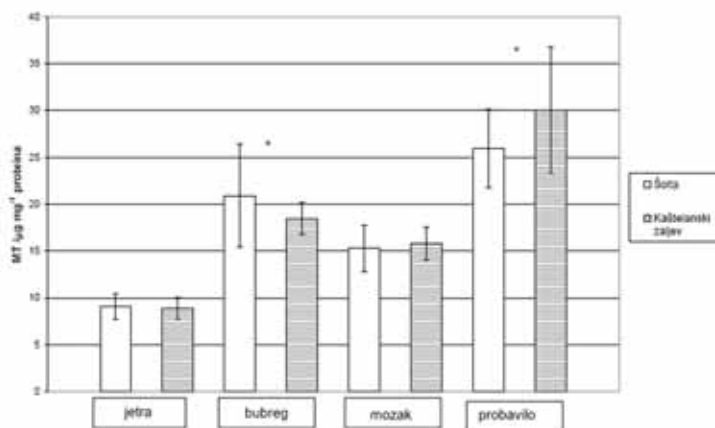
procesima. Stoga se izučavanja u okolišu (na terenu) ne mogu ograničiti samo na određivanje metalotioneina kao biomarkera, nego takva ispitivanja treba dopuniti biometrijskim podacima (duljina, masa organizma, starost, spol, reprodukcijski ciklus), koncentracijama ukupnih proteina i metala u citozolu, te odrediti osnovne fizikalno-kemijske pokazatelje vode (pH-vrijednost, temperaturu, slanost, otopljeni kisik).

U Laboratoriju za biološke učinke metala, koji je utemeljen 1996. godine, sustavno povezujemo terenski i laboratorijski rad, sudjelovanjem u nacionalnim i međunarodnim projektima sa svrhom razlučivanja indikatorskog organizma i tkiva, koji odražavaju izloženost morskih organizama metalima. Rezultate ispitivanja obrađujemo sa svrhom ocjene izloženosti priobalnih područja metalima, a time i organizama koji obitavaju u području "vrućih točaka". Za ovaj prikaz izložit ćemo rezultate vezane uz rasprostranjenu jadransku/mediteransku vrstu ribe, koja obitava iznad muljevitog i pjeskovitog morskog dna, a to je trlja blatarica (*Mullus barbatus*). Hrani se bentičkim organizmima, koje traži prebiranjem pipcima po sedimentu. U Jadranu se mrijesti u proljetno-ljetnom razdoblju, kad se odrasle jedinke primiču obali.

Grafičkim prikazom predočene su razine metalotioneina u tkivima trlje blatarice iz Kaštelanskog zaljeva i Splitskog kanala (otok Šolta). Prikazane su srednje vrijednosti i odstupanje masenih udjela metalotioneina u citozolskim proteinima (mg mg^{-1} proteina), u ribljjoj jetri, bubrezima, mozgu i probavilu. Najveći udjeli određeni su u probavilu, a najmanji u jetri. U trljama različitih obitavališta, statistički se značajno razlikuju razine metalotioneina u bubrezima te u probavilu, što je na grafu označeno zvijezdicom. Daljnja statistička obrada i interpretacija podataka odvija se povezivanjem rezultata određivanja metalotioneina sa metalima i biometrijskim podacima. Ovakim cjelovitim pristupom ustanovili smo da je veća razina metalotioneina u bubrezima trlje iz područja Splitskog kanala (otoka Šolte) posljedica veće starosti riba, a time i dugotrajnije izloženosti kadmiju, kao toksičnom metalu, koji se akumulira u tkivu bubrega.



SHEMA 1. SLIJED REAKCIJA



SLIKA 2. GRAFIČKI PRIKAZ

PIŠU: VESNA SVETLIČIĆ I VERA ŽUTIĆ

Demonstrirat ćemo rad novog uređaja – mikroskopa s pretražnom probom (SPM, Scanning Probe Microscope), poznatijeg kao AFM/STM koji je za sada jedini u Hrvatskoj i predstavlja jedan od najmodernijih načina vizualizacije nanostrukture. Nanoskop pripada novoj generaciji uređaja kojima “gledamo” organizaciju atoma i molekula tvari i organizama.



SLIKA 1. ČVJTANJE MORA VIĐENO RAZNIM TEHNIKAMA NA SKALI OD 100 KM (SATELIT) DO NANOMETRA (AFM).

AFM – osnovni princip rada

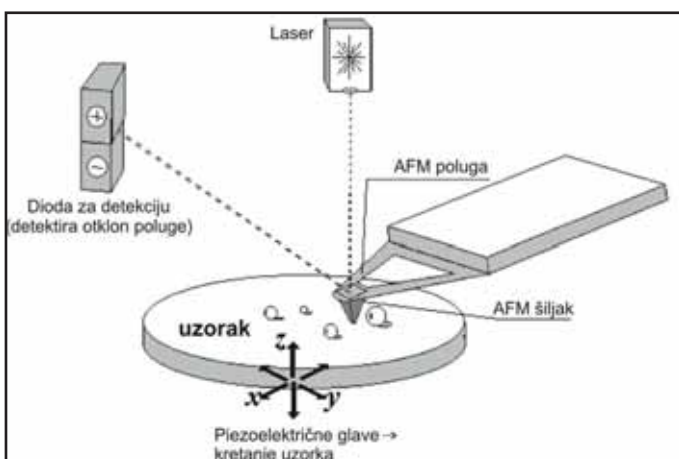
- Osjeća interakciju atomskih sila na maloj udaljenosti (0.1 do 10 nm) između probe i uzorka.
- Senzor se sastoji od poluge sa šiljkom (SiN_3 , SiO_2 , C-nanotubice) i opruge. Otklon opruge mjeri se optičkom detekcijom (laser + dioda).
- U kontaktnom režimu mjere se sile 10^{-6} N do 10^{-10} N, u nekkontaktnom režimu mjere se van der Waalsove sile i interakcije.

AFM-neoslikavajući režim rada – mjerenje sila

- Inter i intra molekularne sile, sile adhezije
- Elasticitet uzorka
- Tvrdoća površine

SPM metode pokazuju raznolikost veću od bilo kojih dosada korištenih mikroskopskih metoda. Privlačne su za fundamentalna istraživanja kao i za rutinska ispitivanja materijala, budući da su lokalne, nerazarajuće i primjenljive kod krajnje različitih uvjeta. Primjena SPM metoda ujedinjuje znanstvenike raznih disciplina (fizike, kemije, biologije, biofizike, izučavanje materijala) u istraživanju fenomena na nanometarskoj skali. Važno je naglasiti da za razliku od elektronske mikroskopije (transmisijske i pretražne) nikakva prethodna

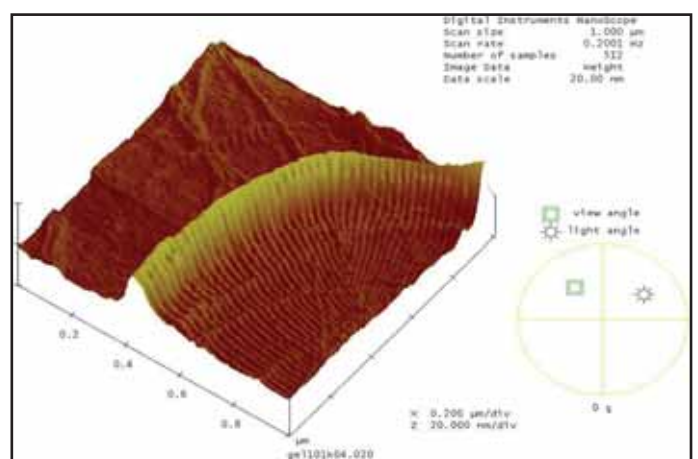
SLIKA 2B SHEMA PRINCIPA RADA MIKROSKOPA



SLIKA 2A. MIKROSKOP SA PRETRAŽNOM PROBOM (AFM/STM) U LABORATORIJU ZA EKOLOŠKO MODELIRANJE ZAVODA ZA ISTRAŽIVANJE MORA I OKOLIŠA.

STM (Scanning Tunneling Microscopy) se oslanja na tuneliranje elektrona između šiljka i vodljive površine. Metoda ispituje lokalnu elektronsku gustoću stanja površina, što je čini spektroskopskom metodom. Za razliku od ostalih spektroskopskih tehnika, STM otkriva trodimenzionalne slike površina do atomske rezolucije. AFM (Atomic Force Microscopy) osjeća interakciju atomskih sila između šiljka i površine. Slike su odraz ukupne gustoće elektronskih stanja sve do Fermijevog nivoa. Prema tome, AFM je neovisan o elektronskoj vodljivosti uzorka, substrata ili šiljka. Ova metoda je pogodna za ispitivanje makromolekula, polimera, vezikula, tekućih kristala, koloida, stanica i staničnih organela, te abiotskih čestica. Komplementarna svojstva STM-a i AFM-a čine ih nezaobilaznim kod izučavanja i praćenja procesa u okolišu. Uvođenje ovih metoda omogućuje nam ravnopravnije sudjelovanje na međunarodnoj znanstvenoj sceni.

SLIKA 3. AFM SLIKA DIJELA POKROVNE LJUŠTURICE NANOPLANKTONA UHVAĆENOG U MREŽU MORSKOG GELA.



Od abakusa do grida

PIŠU: KAROLJ SKALA I ZORISLAV ŠOJAT

Od davnine razvoja naše civilizacije ljudi su imali potrebu da računaju. Bilo da zbrajaju i oduzimaju količine blaga koje su imali, ili pak da se bave proučavanjem svijeta oko sebe, potreba za nekom napravom koja bi im olakšala računske radnje bila je velika. Među prvim takovim napravama, koja se u uporabi očuvala sve do danas, bio je abakus. Tijekom mnogo stoljeća ta je vrsta računaljki ostala jedina prava pomoć u računu. Prvi je napredan računski stroj napravio Blaise Pascal 1642., kako bi svome ocu pomogao u izračunavanju poslovnih računa. Ta je naprava mogla samo zbrajati, a množenje se izvodilo ponavljanjem zbrajanja. Prvu pravu mehaničku računaljku, zapravo već računalo, napravio je Gottfried Wilhelm von Leibniz. Godine 1694. prikazao je uređaj koji je mogao zbrajati, oduzimati, množiti, dijeliti, pa čak i vaditi drugi korjen. Na tržištu je njegov uređaj bio dostupan puno kasnije 1820. Pa ipak, to su bile samo računaljke i računari, nijedna od tih naprava nije mogla sama izvesti niz radnji, dakle biti programski vođena. Prvo pravo računalo, stroj koji je mogao na temelju podataka donositi odluke o nastavku izvršavanja naputka, napravio je Charles Babbage. Tek oko 1936. godine Konrad Zuse, njemački znanstvenik, napravio je računalo Z1 koji je rabio dvojni brojni sustav, napravio od releja, rabeći pri tome tada već uobičajene dijelove iz telefonije. Iako je u zadnja dva stoljeća bilo podosta i drugih važnih stvaratelja na tome području, važno je napomenuti da je za popis stanovništva u Americi 1880. Herman Hollerith, inspiriran automatskim tkalačkim stanimima i programiranim glasovirima, napravio bušene kartice, koje su se intenzivno rabile sve do 90-tih godina XX. stoljeća. Njegova izvorna tvrtka još je i danas postojeća i znana pod imenom International Business Machines (IBM). I na kraju ovoga veoma sažetoga pregleda važno je napomenuti da je prvi elektronski digitalni računski stroj, koji je rabio elektronske cijevi, bio ENIAC, ostvaren 1946. godine i od onda računamo suvremeni razvoj računarstva.

Razvoj programirljivih računskih strojeva kakove ih danas poznajemo stalno je bio potican s jedne strane potrebama praktične primjene, a s druge strane vizijama izumitelja. U nama je suvremeno doba gotovo nemoguće zamisliti život bez računala. Posebice to važi za suvremenu znanost, koja sve dublje i dublje prodire u tajne funkcioniranja naše materijalne i žive stvarnosti. Od ENIACA, preko tranzistorskih su-

stava 60-tih godina prošloga stoljeća, pa do suvremenih strojeva koji izvode i nekoliko milijardi (109, tj. giga) programiranih radnji u sekundi velik je, ali vremenski kratak, bio put. No, nagli razvoj znanosti i sve veća i veća količina skupljenih podataka o pojedinim prirodnim procesima toliki su da je suvremene znanstvene analize već nemoguće izvoditi na pojedinim, ma koliko brzim, jediničnim strojevima. Stoga su se prije 15 godina brzim međuvezama pojedinačna računala počela uvezivati u jedinstvene veće nakupine, zvane računalnim grozdovima (eng. cluster), u kojima svi ti pojedinačni strojevi preuzimaju samo po dio obveze izvedbe cjelokupnoga naputka, te svi zajedno tek djeluju kao jedan jedinstveni 'super-kompjuter'.

Svi smo svjestni nevjerojatne količine računala koji su u ovo doba stalno ili povremeno međusobno povezani Internetom. I naravno da je sljedeći prirodan korak napredka da se svi ti strojevi, od kojih mnogi većinu vremena ionako provode čekajući da netko konačno stisne neku tipku, uvežu u jedan opći i jedinstveni stroj, kako bi se velike količine podataka i njihove sve složenije obrade podijelile pomalo svuda po svijetu. I tako se zadnjih godina rađaju spletovi grozdova računala, ono što se na engleskome zove Grid. A tek takav splet (grid) može stvoriti preduvjete za puni razvoj onoga što zovemo e-znanošću (e-Science), tj. takvoga oblika znanstvenoga rada pri kojemu spletovi grozdova pojedinačnih strojeva, s predočnicima (monitori) koji mogu prikazivati znanstvene rezultate u trodimenzionalnom slikovnom obliku, u interaktivnome okruženju, omogućuju znanstveniku povezivanje mnoštva činjenica, mjernih instrumenata, laboratorijske pokusne opreme i banaka podataka posvuda iz svijeta. Ta računalna znanost sa računalnom tehnologijom se zove ICST (Information and Communication Science and Technology) koji predstavlja osnovu kvalitetnog i brzog znanstvenog napretka u svim poljima i granama znanosti.

Centar za informatiku i računarstvo Instituta Ruđer Bošković jedan je od pionira u uvođenju grozdova i spletova (cluster i gridova) ne samo u Hrvatskoj. Programski paket za brzo i učinkovito uobličavanje grozdova, DCC (Debian Cluster Components) razvijen je vlastitim snagama u CIR-u, postiže izuzetno zapažen uspjeh u svijetu. Centar je jedan od začetnika hrvatskoga složenoga tehnološkoga projekta CRO-GRID, te voditelj projekta CRO-GRID Aplikacije, a također je i djelatnik član EU F6 i drugih europskih projekata blisko vezani uz EGEE (Cern), kojima su cilj stvaranje potrebne strojne i programske infrastrukture, u težnji dostizanja vizije Williama Rossa Ashbyja, jednoga od najčuvenijih kibernetičara, da nam nekada samo obični računski strojevi, kroz spletove grozdova, postanu u budućnosti uistinu "pojačala inteligencije".



PRVI IRB GROZD



NOVA GENERACIJA GROZDA NA IRB-U

PIŠE: JADRANKA STOJANOVSKI

U travnju 2005. godini navršava se točno jedanaest godina od kad su izrađene prve web stranice Knjižnice, ujedno i prve knjižnične web stranice u Hrvatskoj (<http://knjiznica.irb.hr>). Imajući u vidu da mnogi još uče i prilagođavaju se novoj tehnologiji to nam se razdoblje može učiniti dugim. No, ako pogledamo kojom su brzinom web tehnologije iz temelja izmijenile tradicionalno poimanje knjižnične profesije posljednjih jedanaest godina učinit će nam se kao tren. Iako je bit knjižničnog poslovanja na neki način ostala nepromijenjena, a odabir, prikupljanje, opisivanje, organiziranje, predstavljanje i pohranjivanje spadaju i dalje u njezine osnovne djelatnosti, mnogi će se korisnici i knjižničari teško prisjetiti svakodnevnih posjeta knjižnici, prelistavanja časopisa, prebiranja po kataložnim karticama ili pregledavanja nepreglednih tomova indeksnih publikacija u potrazi za potrebnom publikacijom. Knjižničari IRB Knjižnice koji bi zacjelo voljeli da ih u toku dana posjećuje puno više korisnika, istovremeno su svjesni da se interakcija s korisnicima preselila u virtualni web prostor u kojemu se odvija daleko dinamičnije i učestalije nego ikada prije.



SLIKA 1. SKORO ZABORAVLJENE KATALOŽNE KARTICE

Danas IRB Knjižnica svojim korisnicima nudi nekoliko tisuća web stranica koje svakodnevno održava. No ono što je puno značajnije od samog broja web stranica je broj usluga koje IRB

SLIKA 2. «WEB» SVAKOGA ASOCIRA NA NEŠTO DRUGO...



Knjižnica nudi ne samo znanstvenicima Instituta Ruđer već cijeloj znanstvenoj i akademskoj zajednici Hrvatske.

Sustav znanstvenih informacija RH – Prirodoslovlje (<http://prirodo.irb.hr>) – objedinjuje rad 27 znanstvenih knjižnica na izgradnji zajedničkih online kataloga, digitalnih zbirki, portala znanstvenih informacija, edukaciji korisnika i knjižničara, i dr.

ZIND (Znanstvene informacije na dlanu) (<http://zind.szi.hr>) – portal znanstvenih informacija izgrađen u sklopu Sustava znanstvenih informacija koji predstavlja sveobuhvatni knjižnični katalog mrežnih informacijskih izvora.

EJOL (Electronic Journal Online Library) (<http://ejol.irb.hr>) – portal znanstvenih časopisa koji osigurava brz i transparentni pristup oko 7000 znanstvenih časopisa;



SLIKA 3. NOVE TEHNOLOGIJE UČINILE SU PISANU RIJEČ VIDLJIVIJOM

Hrvatska znanstvena bibliografija CROSBİ (<http://bib.irb.hr>) – cjelovita i ažurna bibliografija znanstvenih i stručnih radova hrvatskih znanstvenika od 1997. g. do danas.

Centar za online baze podataka (<http://baze.szi.hr>) – osiguravanje pristupa najvažnijim bazama podataka iz pojedinih znanstvenih područja na principu nacionalnog konzorcija u suradnji s CARNet-om;

Tko je tko u znanosti u Hrvatskoj (<http://tkojetko.irb.hr>) – jedinstvena baza podataka hrvatskih znanstvenika s ciljem promocije u zemlji i inozemstvu, te poboljšavanju komunikacije i razmjene informacija među samim znanstvenicima.

PRESKOK (Pretraživač knjižničnih kataloga Hrvatske) (<http://preskok.irb.hr>) – jedinstveno sučelje za istovremeno pretraživanje desetaka online knjižničnih kataloga;

SEND (Sustav Elektroničke Narudžbe Dokumenta) (<http://send.irb.hr>) – sustav jednostavnog naručivanja radova kako za djelatnike IRB tako i za sve druge hrvatske knjižnice.

Znanost na Internetu (<http://knjiznica.irb.hr/hrv/znanost>) – informacijski izvori pojedinog znanstvenog područja pažljivo odabrani i strukturirani.

PIŠE: TOME ANTIČIĆ

Einsteinova specijalna teorija relativnosti donijela je revoluciju u našem poimanju prostora i vremena. Ona između ostalog opisuje ponašanje čestica blizu brzine svjetlosti te objašnjava kako su materija i energija usko povezane. Većina nas nema iskustva sa takvim brzinama pa postoji krivi dojam da je relativnost važna samo za kozmologiju ili za posebna visoko energetska laboratorijska okruženja.

Primjer kozmičkih miona (čestice slične elektronima ali oko 200 puta teže) dokazuje suprotno. Naime, površina zemlje je bombardirana stotinama miona po kvadratnom metru svake sekunde, i njihovo postojanje se može objasniti samo uz pomoć relativnosti.

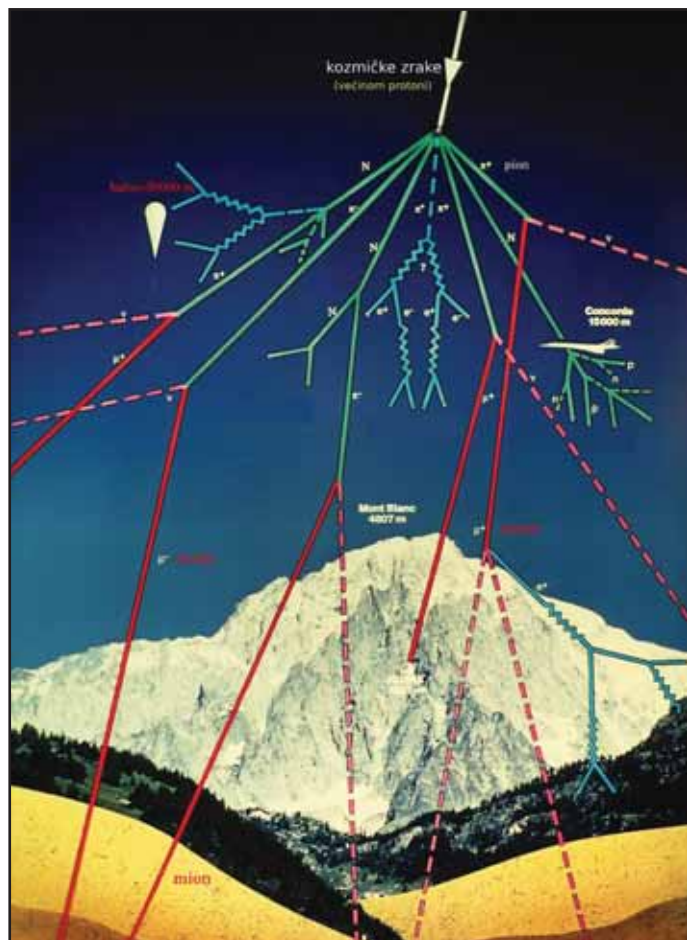
Kozmičke zrake koje mjerimo na površini uglavnom su mioni stvoreni u gornjem dijelu atmosfere djelovanjem visoko energetskih protona iz svemira. Interakcija tih protona s jezgama molekula 20 km iznad površine omogućava stvaranje velikog broja novih čestica (većinom piona - kratkoživućih čestica koje učestvuju u razmjeni sila između protona i neutrona). Pojednostavljeno, upravo famozna Einsteinova jednadžba $E = mc^2$ objašnjava kako se one mogu dobiti iz interakcije dviju brzih čestica. Nabijeni pioni se ubrzo raspadnu u mione koji putuju brzinom bliskoj svjetlosti. Ali kratak vijek miona od 2.2 mikrosekunde bi naivno značilo da oni ne bi nikada prešli više od 1 km a kamoli stigli do površine. Tu ponovno dolazi Einsteinova teorija relativnosti i njeno predviđanje dilacije vremena po kojemu se vrijeme života čestice poveća za faktor,

$$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}$$

gdje je v brzina čestice, a c brzina svjetlosti. Tipično stvoreni mioni se kreću brzinom bliskoj svjetlosti pa faktor dilacije vremena γ bude oko 10 do 20. Time se životni vijek miona poveća i do iznad 40 mikrosekundi

što je više nego dovoljno da dosegnu površinu zemlje.

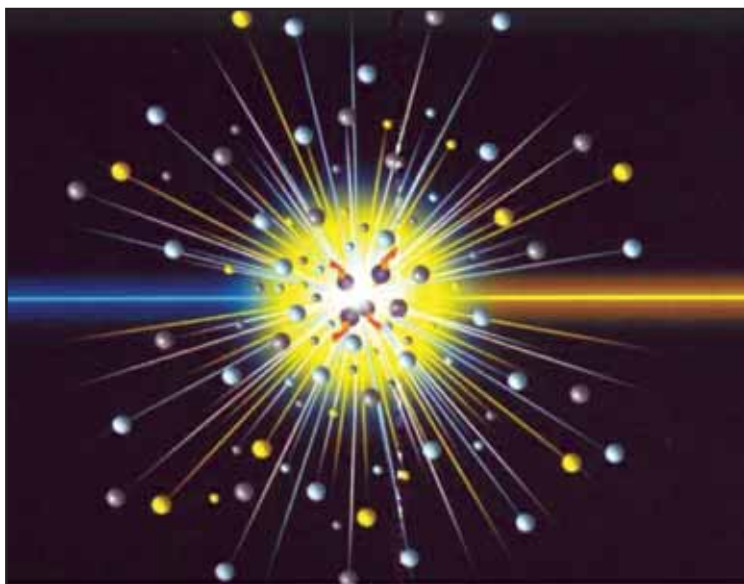
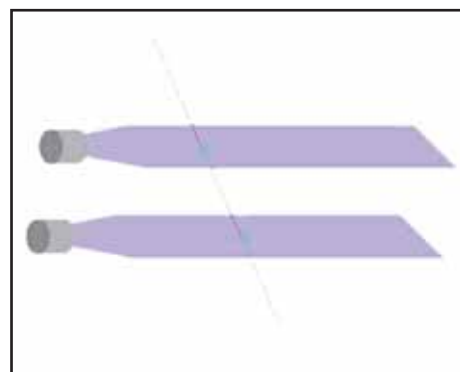
Kozmičke zrake se mogu detektirati u jednostavnim laboratorijskim uvjetima. Jedan način je da se postave sci-



ntilatori (osjetljivi na prolaz nabijenih čestica) jedan iznad drugog. Svaki scintilator će reagirati ako mion prođe kroz njega a ugrađeni sustav koincidencije će signalizirati interesantne događaje.

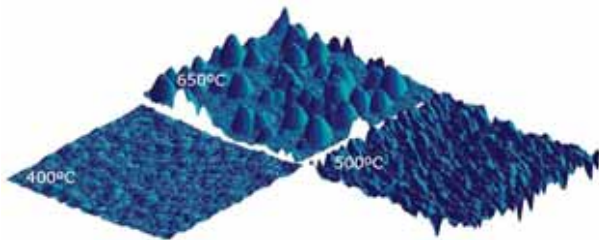
Drugi način je pomoću komore sa prezasićenim alkoholnim parama koje se kondenziraju na ionima koji su ostali nakon prolaza miona. Ovo je omogućeno s uspostavom naglog vertikalnog temperaturnog gradienta pomoću suhog leda. Gornja, topla strana je natopljena alkoholom koji zatim ispari i difundira prema hladnom dnu, gdje se i stvori sloj osjetljiv na mione. Njihov prolaz stvara put kondenziranog alkohola koji je vidljiv i golim okom.

Utjecaj kozmičkih zraka se neizravno vidi i primjenom ^{14}C metode određivanja starosti, jer upravo njihova interakcija sa dušikom u atmosferi stvara radioaktivni izotop ^{14}C , koji se onda spaja sa kisikom u ugljični dioksid i postane dio ciklusa živih bića.



PIŠE: NIKOLA RADIĆ

Moderna znanost, tehnologija, medicina i svemirska istraživanja intenzivno ispituju osobine čestica veličine od nekoliko nanometara (1 nm je milijarditi dio metra) do stotinjak nanometara - već ustaljeno nazvanih nanočesticama – sa ciljem poboljšanja postojećih ili proizvodnje potpuno novih materijala i proizvoda. Električne, magnetske i optičke osobine takvih “kvantnih točaka” jasno pokazuju diskretnost karakterističnu



SLIKA 1. TOPOGRAFIJA SLOJA GERMANIJA DEPONIRANOG NA MONOKRISTALNOM SILICIJU – PARAMETAR JE TEMPERATURA PODLOGE (NANOSKOP U ZIMO, P. DUBČEK).

za kvantne pojave. Povezivanje takvih nanočestica u organiziranu strukturu omogućava daljnje smanjivanje temeljnih uređaja moderne tehnologije/civilizacije – aktivnih elemenata integrirane optoelektronike, memorija za pohranu podataka i tsl. Nanočestice u biomedicini pružaju izgled za ciljanu primjenu lijekova, čišćenje krvnih žila, nove biokompatibilne materijale itd. Nanokristalni materijali – materijali izgrađeni od nanokristala – imaju neke osobine bitno bolje nego odgovarajući



SLIKA 2. KONTORE INTENZITETA RASPRŠENJA X-ZRAKA ZA UZORKE GERMANIJA NA MONO-SI DEPONIRANU PRI RAZLIČITIM TEMPERATURAMA (GISAXS, ELETTRA, P. DUBČEK)

SLIKA 3. GISAXS KONTORE 20-SLOJNIH UZORAKA $\text{SiO}_2/\text{Ge}+\text{SiO}_2$ GRIJANIH NA NAVEDENIM TEMPERATURAMA (ELETTRA, P. DUBČEK).

polikristalni materijali. Takve osobine mogu se iskoristiti za poboljšanje mehaničkih i korozivskih svojstava, za formiranje učinkovitijih katalizatora, pripremu “mekanih” magnetskih materijala i niz drugih primjena. Očito, nanočestice će ubrzano postajati građa za napredne materijale i tehnologije kojima će se unaprijediti kvaliteta proizvoda i života čovjeka.

U Laboratoriju za tanke filmove Zavoda za fiziku materijala je zadnjih pola godine suradnji s dr. Pivcem i dr. Desnicom pripravljeno nekoliko tipova nanočestičnih, odnosno nanokristalnih, materijala postupkom magnetronskog rasprašenja:

a) “Otoci” germanija na silicijskoj podlozi intenzivno se

proučavaju zadnjih nekoliko godina zbog izgleda da samoorganizirane nanočestice sa osobinama kvantnih točaka mogu poslužiti za proizvodnju nove generacije svijetlećih dioda, odnosno fotovoltaičnih solarnih ćelija. Mi smo rasprašeni germanij deponirali na Si(100) pri temperaturama od 400 do 700 °C sa nominalnom debljinom filma oko 5 nm. Uvid u topografiju pripremljenog filma dobiven je korištenjem nanoskopa (AFM). Na slici 1. jasno se vidi odlučni utjecaj temperature podloge na rast nanočestica germanija. Raspršenje rentgenskih zraka pod malim kutem (GISAXS) pruža dodatne informacije o raspodjeli po veličini, obliku, te razmaku među nanočesticama germanija. Ne ulazeći u potankosti analize, na slici 2. prikazane su vrlo lijepe 2-dim slike raspršenja X-zraka za iste uzorke germanija na siliciju. Kontroliranjem površinske raspodjele centara nukleacije očekuje se dobivanje i pravilne/periodičke mreže Ge-nanočestica pri optimalnim uvjetima depozicije.

b) Nanokristali germanija pripremljeni su i unutar SiO_2 matrice. Kodepozicijom iz dva magnetrona (sl. 3) pripremljeni su

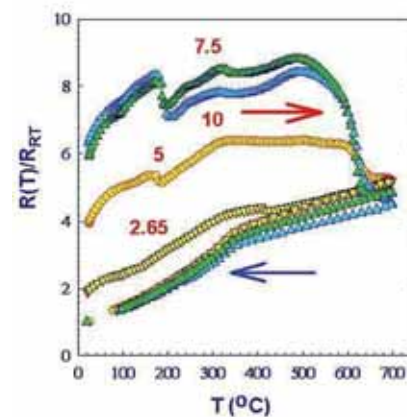
višeslojni filmovi u kojima se izmjenjuju slojevi čistog SiO_2 (5 nm) sa slojevima slitine Ge (40 at.%) + SiO_2 (10 nm), na Si(111) podlogama držanim na sobnoj temperaturi. Zagrijavanjem takvih struktura do 1000 °C, ustanovljeno je da veličina i oblik Ge-nanočestica jako ovisi o temperaturi, tedase sferne čestice najbolje formiraju napuštanjem na 700-800 °C. Vizualno intrigantne 2-dim GISAXS konture za niz uzoraka zagrijanih do različitih temperatura prikazane su na slici 3.

c) Nikal je jedan od “klasičnih” metala ponovno vrlo zanimljiv u svojem nanokristalnom stanju. Višestruko uvećana tvrdoća, povećanje otpornosti na habanje za dva reda veličine, bitno reduciranje lokalizirane korozije i druge poboljšane osobine čine ga vrlo naprednim materijalom. U Kanadi su 1997 godine postupkom elektrodepozicije nanokristalnim niklom presvučene unutarnje stijenke cijevi parnih generatora nuklearnog reaktora – jedna od prvih primjena nanostrukturnih materijala na velikim industrijskim postrojenjima. Nanokristalni nikal (veličina zrna $10 \pm$ nekoliko nm) u obliku tankih filmova debljine do 400 nm pripravili smo rasprašenjem u magnetronu s posebno oblikovanim magnetskim poljem. Promjena električnog otpora sa temperaturom (sl.4) pokazuje da je nanokristalna faza nikla stabilna do 170 °C .

Ovih nekoliko primjera potvrđuje da u Zavodu za fiziku materijala držimo korak sa svijetom u pripremljanju i karakterizaciji nanomaterijala, a mogućnosti dakako nisu iscrpljene.

ovisi o temperaturi, tedase sferne čestice najbolje formiraju napuštanjem na 700-800 °C. Vizualno intrigantne 2-dim GISAXS konture za niz uzoraka zagrijanih do različitih temperatura prikazane su na slici 3.

Ovih nekoliko primjera potvrđuje da u Zavodu za fiziku materijala držimo korak sa svijetom u pripremljanju i karakterizaciji nanomaterijala, a mogućnosti dakako nisu iscrpljene.



SLIKA 4. PROMJENA ELEKTRIČNOG OTPORA NANOKRISTALNIH SLOJEVA NIKLA SA TEMPERATUROM – PARAMETAR JE TLAK RADNOG PLINA ARGONA (J. IVKOV).