



Univerza v Mariboru

Fakulteta za naravoslovje
in matematiko



D I A N O I A

REVIIA ZA UPORABO NARAVOSLOVNO-MATEMATIČNIH ZNANOSTI

ISSN	2536-3565
Naslov publikacije/Title	DIANOIA , revija za uporabo naravoslovnih in matematičnih znanosti DIANOIA , journal for applications of natural and mathematical sciences
Letnik/Volume	6
Leto/Year	2022 (september)
Številka/Number	2
Založnik in izdajatelj/ Published & Issued by	Univerzitetna založba Univerze v Mariboru, Slomškov trg 15, 2000 Maribor, Slovenija, http://press.um.si/ , zalozba@um.si
Uredništvo/Editorial board	<i>odgovorni urednik/editor in chief</i> Mitja Slavinec <i>glavni urednik/executive editor</i> Drago Bokal <i>izvršna urednica/managing editor</i> Janja Jerebic <i>urednici za področje biologije/editors for biological sciences</i> Nina Šajna, Sonja Škornik <i>urednik za področje didaktike/editor for didactical sciences</i> Samo Repolusk <i>urednika za področje fizike/editors for physical sciences</i> Robert Repnik, Aleš Fajmut <i>urednika za področje matematike/editors for mathematical sciences</i> Igor Pesek, Janja Jerebic <i>urednik za področje tehnike/editor for technical sciences</i> Mateja Ploj Vrtič <i>tehnična urednica/technical editor</i> Polona Kren
Mednarodni uredniški svet/ International advisory board	Igor Emri (Fakulteta za strojništvo Univerze v Ljubljani, član SAZU), Matej Brešar (FNM, član SAZU), Sergey Pasechnik (Državna fakulteta v Moskvi), Vlad Popa-Nița (Fakulteta za fiziko Univerze v Bukarešti), Blaž Zmazek (FNM), Samo Kralj (FNM), Franci Janžekovič (FNM), Nataša Vaupotič (FNM), Mitja Kaligarič (FNM), Boris Aberšek (FNM), Andrej Šorgo (FNM), Bojan Mohar (Simon Fraser University, Vancouver), Matjaž Perc (FNM), Ivica Aviani (Naravoslovno matematična fakulteta Split), Fahriye Altınay (Univerza v Nikoziji), Andreas M. Hinz (Univerza Ludwig-Maximilians, München)
Oblikovanje/Design	Amadeja Bratuša
Lektoriranje/Proofreading	Ljudmila Bokal
Sedež uredništva/Address	FNM UM, Koroška cesta 160, 2000 Maribor
e-mail	dianoia@um.si
internet/web	www.fnm.um.si
Tisk/Printed by	FNM UM
Leto izida/Year	2022
Datum natisa/Published	2022
Naklada/Nr. of Copies	100 izvodov

Revija izhaja dvakrat letno, predvidoma aprila in septembra.

Kazalo / Table of Contents

Pravilo moči ali moč pravil <i>Drago Bokal</i>	5
Sinteza kalcijevega sulfata dihidrata s pomočjo ponovne uporabe žveplovega dioksida Synthesis of calcium sulfate dihydrate by reuse of sulphur dioxide <i>Neven Marković, Petra Peranić, Brina Dojer</i>	11
Vedenje suženj-gospodar Slave-Master Behavior <i>Arbresha Hölbl, Mitja Slavinec, Samo Kralj</i>	21
Pametni mobilni telefon kot merilnik koagulacije Smartphone as a coagulation sensor <i>Vida Lang, Jan Senekovič, Špela Majcen, Andrej Šorgo</i>	37
Energija molekulskih grafov Energy of molecular graphs <i>Katja Zemljič</i>	51

Pravilo moči ali moč pravil

Drago Bokal

Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija

Nedavno je na Bledu potekal 17. blejski strateški forum pod geslom *The rule of power or the power of rules*, ki so ga prevedli kot *Vladavina moči ali moč pravil*. S tem je ponudil odlično izhodišče za razmislek o vlogi moči in pravil v današnji družbi. Beseda moč ima po SSKJ veliko pomenov [4]. Morda jih zaradi številnosti prikažemo v zaporedju:

1. človekova telesna sposobnost za opravljanje fizičnega dela ali prenašanje telesnih naporov (npr. imeti medvedjo moč),
2. sposobnost za obstajanje, bivanje, razvijanje (npr. starčku pešajo moči),
3. značilnost česa glede na mero lastnosti, potrebnih za opravljanje svoje funkcije (npr. moč industrije),
4. (navadno s prilastkom) kar omogoča komu določeno dejavnost (ofenzivna moč vojske),
5. kar omogoča komu, da uveljavlja svojo voljo (moč demokratičnih institucij),
6. kar na kaj deluje zlasti v določeni smeri (kot bi jim nevidna moč izpodsekavala noge),
7. značilnost česa
 - (a) glede na učinek, posledico (moč potresa),
 - (b) glede na čutno zaznavnost (moč bolečine),
 - (c) kot intenzivnost (moč hrepenenja, ljubezni; moč vpliva, vtisa; moč volje, trdnost),
8. publicistično, s prilastkom: delavec, uslužbenec (delovna moč),
9. ekspresivno, v prislovni rabi, navadno v zvezi: na (vso) moč, zelo močno (na vso moč se trudi),
10. fizikalno: delo, opravljeno v časovni enoti: meriti moč; enota za moč.

Pomene lahko razdelimo v štiri skupine. Prva je vezana na sposobnost spreminjanja okolja (1. sposobnost za opravljanje dela, 3. značilnost glede na lastnosti, potrebne za opravljanje funkcije, 4. značilnost, ki omogoča dejavnost, 7.a značilnost glede na učinek in ne nazadnje naravoslovcem dobro poznana točka 10. fizikalna moč, ki meri delo, opravljeno v časovni enoti). Druga skupina pomenov govori o obstoju tistega, kar ima moč (2. sposobnost za obstajanje, bivanje, razvijanje, 7.b značilnost glede na čutno zaznavnost), tretja pa na vplivanje na druge (5. kar omogoča vplivanje na druge, 6. kar deluje zlasti v določeni smeri in 7.c značilnost kot intenzivnost). V četrto pa zberemo pomene, ki se na osnovne tri skupine zgolj naslanjajo (8. delovna moč kot delavec, 9. ekspresivno na vso moč).

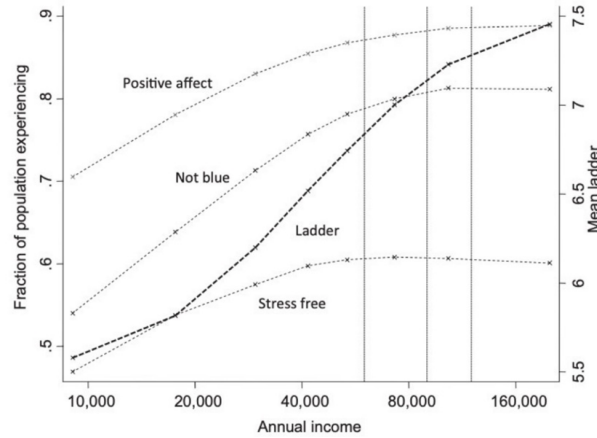
Ti pomeni besede moč se prepletajo med seboj: proces, ki ima sposobnost spreminjanja okolja in opravlja delo, ki mu omogoči dolgoročni obstoj, lahko evolucijsko razvije zadosti kompleksno obnašanje, da se zave obstoja samega sebe. Tak proces si lahko dodatno poveča možnosti preživetja s tem, da vpliva na druge procese okrog sebe, da pomagajo njegovemu preživetju. Tako prvi pomen (opravljanje dela) postane podlaga za drugega (zavedanje svojega obstoja), drugi pa za tretjega (vplivanje) od pomenov besede moč.

Tudi beseda pravilo ima več pomenov, ki pa se vsa nanašajo na dopustno ravnanje, vedenje oz. mišljenje v izbranih okoliščinah. Pravila torej omejujejo ravnanje, vedenje, lahko celo mišljenje, v okoliščinah podrejanja pravilom. Omejujejo svobodo, svobodno voljo tistega, ki jih sprejme. Od kje torej moč pravil?

Odgovor lahko ponudi teorija iger: če posamezniki sodelujejo, združijo svoje moči, lahko skupaj dosežejo več, kot bi dosegel vsak posameznik sam zase. Da lahko sodelujemo, pa se držimo pravil, ki najprej opredelijo, s kakšnim obnašanjem bomo skupaj dosegli več, kot bi vsak zase, nato pa opredelijo tudi, kako bo od tega več vsak nekaj imel. Ta interpretacija pravil je zasnovana na racionalnem obnašanju, na interesih, na učinkovitem doseganju ciljev. V osnovi torej temelji na fiziki, rezultatih (skupnega) dela in njihovi delitvi. V tej interpretaciji so pravila stabilna, ker ob nespremenjenih okoliščinah posameznikom ni v interesu, da bi pravila spreminjali. Pravila so v takih okoliščinah lahko usklajena z vsemi tremi pomeni besede moč: najprej s tem, da proces po pravilih učinkovito ustvarja, potem s tem, da podpira obstoj tistega, kar ustvarja in nenazadnje s tem, da vpliva na druge, da skupaj ustvarjajo več. Pri tem viru moči pravil torej ključno vlogo igra skupaj ustvarjeno in razdeljeno premoženje.

Drug odgovor na vprašanje o viru moči pravil lahko ponudi sociologija, antropologija: če se držimo pravil, je življenje predvidljivo, obvladljivo. Družba postane ciklična, posamezniki v njej predvidljivo menjajo vloge v krogu rojstev in smrti. Tako življenje lahko obvladamo, v njem ustvarimo cono udobja, se naučimo izogibati težavam. V tej interpretaciji so pravila stabilna zaradi udobja, ki ga nudijo tistim, ki jih upoštevajo. Tipičen primer takih pravil nudi promet: dosledno upoštevanje pravil omogoča relativno udobno vožnjo brez potrebe po pretiranem naprežanju svojih čutov ob izogibanju nepredvidljivim okoliščinam. Ta vir moči pravil deluje v obratni smeri od prejšnjega: najprej se mora posameznik pravilom podrediti (vpliv, tretji pomen) zato, da bo lahko udobno obstajal (obstoj, drugi pomen) in predvidljivo sodeloval s svojim okoljem (ustvarjal, prvi pomen). Če je pri prejšnjem viru moči pravil izhodišče interes, premoženje, je v tem viru moči pravil izhodišče udobje, predvidljivost, odsotnost stresa – red.

Psihologi so raziskovali odnos, ki ga imajo pri različnih kulturah posamezniki do obeh virov moči pravil [1].



Slika 1: Kazalniki kakovosti življenja v odvisnosti od prihodkov. Vir: [1].

Slika 1 povzema graf, ki ima na abscisi mero za premoženje – letni prihodek gospodinjstva, v katerem prebiva posameznik, leva ordinata pa predstavlja delež populacije, ki glede na psihološko definicijo pri prihodkih na x-osi izkusi odsotnost stresa, odsotnost otožnosti in pozitiven odnos do življenja. Krivulje se do neke vrednosti skoraj linearno dvigajo, od te vrednosti naprej pa so praktično vzporedne z absciso. To pomeni, da ima dvig prihodkov do teh vrednosti pozitiven učinek na manjšanje stresa, manjšanje otožnosti in pozitiven odnos do življenja. Poenostavljeno povedano, do neke vrednosti z več prihodki populacijo lahko osrečujemo. Od te vrednosti dalje pa dvig prihodkov ne pomaga več pri manjšanju stresa, otožnosti ali dvigu pozitivnega odnosa do življenja. Od te vrednosti dalje populacija z obvladovanjem več naravnih virov ne dviguje več svojega blagostanja. Morda lahko to vrednost vzamemo za mejo, do katere velja pravilo moči. Naprej pa velja moč pravil, moč reda: posamezniki so pretežno zadovoljni z življenjem, vzpostavili so svojo cono udobja. Namesto k prizadevanju za več ustvarjenega si prizadevajo za večji vpliv dogovorjenih pravil.

Vprašajmo se, kakšno obnašanje spodbuja družba v enem ali drugem primeru. Morda poenostavljeno lahko domnevamo, da v prvem primeru družba vzpostavi principe meritokracije, v kateri je posameznik pošteno plačan za svoje delo: uspešen bo posameznik, ki bo iznajdljiv, marljiv, ustvarjalen, ki bo svoje talente uporabil za pridobivanje in obvladovanje. Psihologi pa ugotavljajo, da se s poudarjanjem tega sistema posameznik lahko prevzame ter uspeh, ki ga je prinesla tudi sreča, pripíše svojim sposobnostim [3].

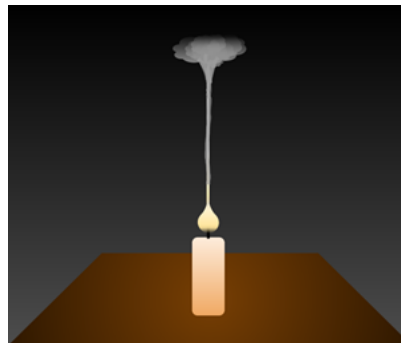
Posameznik, ki v meritokraciji pride v zanos, vso svojo pozornost posveti aktivnostim ustvarjanja in mu zmanjka proste pozornosti za to, da bi opazil, kako mineva čas, kaj si drugi mislijo o njegovem delu in kaj je koristnost, smisel njegovega početja [2].

V drugem primeru pa družba vzpostavi vladavino prava. V njej je uspešen posameznik, ki bo razumel pravila in jih znal upoštevati na način, da bo v družbi napredoval. Posameznik torej ni toliko nagraden za tisto, kar ustvari, ampak je pravično nagraden za svoje sodelovanje. Če je fokus družbe na pravilih, je manj pozornosti posvečene ustvarjanju. Uspešni ne ustvarjajo, ampak uporabijo svoj vpliv, da drugi ustvarjajo zanje. Posameznik v zanosu doživlja, kako pravila delujejo, preskrbijo njega in njegove bližnje, njegov intelektualni mehurček. Podobno kot v prejšnjem primeru pa mu v zanosu zmanjka pozornosti za čas, ki mineva in prinaša spremembe, za druge, ki s pravili niso imeli take sreče in niso pridobili vpliva, kot ga je sam, in za smisel, ki morda ni samo v pravilih, ampak tudi v ustvarjanju.

Če taka družba posameznikov ne spodbuja k ustvarjanju, družba kot celota ustvari vedno manj. V njej je za vzdrževanje zelenega življenjskega sloga potreben vedno močnejši vpliv, ki se morda neha ozirati na pravila in vpliv pravil zdrkne nazaj v pravilo vpliva.

Prispodoba za zapisano je goreča sveča. V stenju se zaradi toplote in kapilarnega tlaka dviga staljeni vosek. Ta staljeni vosek se v stiku s plamenom vname in segreva okoliški zrak. Zrak se dviga, dokler se ne ohladi na temperaturo okolja. Potem se v kaotičnem prepletu pomeša z okoliškim zrakom. V plamenu deluje pravilo moči, pravilo sproščanja toplote, ki je bila vezana v vosku. V dimu nad plamenom deluje moč pravil, moč, ki jo je zagotovila v plamenu sproščena toplota. Ko te toplote zmanjka, se zdi, da se proces ustavi kaotično, v neredu Brownovega gibanja.

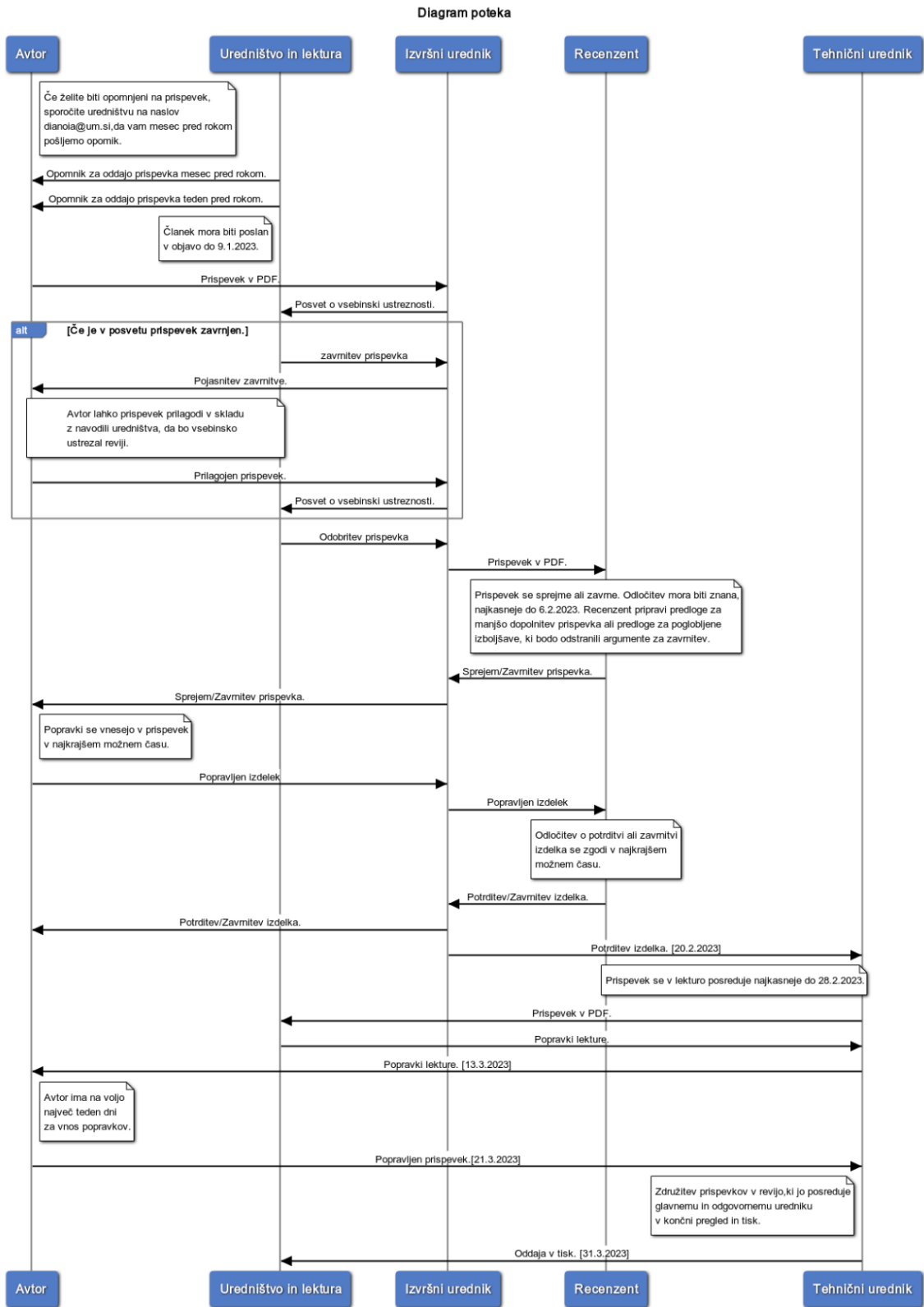
Pa ni res, proces se ne ustavi. Ogljikov dioksid, ki se je sprostil med gorenjem, zaide v liste bližnje cvetlice. Nanje posije sonce in sproži fotosintetske reakcije. Rastlina zraste in odpre cvet. Čebela z njega posrka nektar in naredi vosek in med. Čebelar med namaže hčeri na kruh, iz voska pa naredi svečo, s katero si bodo lahko svetili ob branju knjige, ob iskanju znanja in najglobljih pravil narave in skupnosti, ko bo zmanjkalo elektrike.



Slika 2: Vir: lasten.

Literatura

- [1] Jebb AT, Tay L, Diener E, Oishi S. Happiness, income satiation and turning points around the world. *Nat Hum Behav.* 2018 Jan;2(1):33-38. doi: 10.1038/s41562-017-0277-0. Epub 2018 Jan 8. PMID: 30980059.
- [2] M. Csikszentmihalyi. *Good business: Leadership, flow and the making of meaning.* New York: Penguin Books (2003).
- [3] M. Clifton, A belief in meritocracy is not only false: it's bad for you. Princeton University Press. Zajeto 28. 8. 2022. <https://press.princeton.edu/ideas/a-belief-in-meritocracy-is-not-only-false-its-bad-for-you>
- [4] ZRC SAZU, Slovar slovenskega knjižnega jezika. [Online] Zajeto 28. 8. 2022. <https://www.fran.si/>



Slika 3: Proces izdaje naslednje številke revije Dianoa. Vir: lasten.

Sinteza kalcijevega sulfata dihidrata s pomočjo ponovne uporabe žveplovega dioksida

Synthesis of calcium sulfate dihydrate by reuse of sulphur dioxide

Neven Marković^{1,2}, Petra Peranić², Brina Dojer²

¹ Prirodoslovno-matematiški fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb

² Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor

Povzetek

Izvedli smo niz kemijskih reakcij, s katerimi smo želeli pokazati, da lahko žveplov dioksid, SO₂, vezemo v spojino in uporabimo za sintezo kalcijevega sulfata dihidrata, CaSO₄·2H₂O, gipsa. Kot izhodno spojino za sintezo žveplovega dioksida smo uporabili koncentrirano žveplovo kislino, H₂SO₄, in elementarni baker, Cu. Tekom eksperimentalnega dela smo morali pridobiti tudi ogljikov dioksid, CO₂, in kisik, O₂, ki smo ju nadalje uporabili. Eksperimentirali smo po principu t. i. Obendraufove metode, katere rezultat je bil gips. Nastanek slednjega smo potrdili s IR spektroskopijo. Glede na to, da se pri pouku kemije v osnovnošolskem in srednješolskem izobraževanju večinoma plini samo pridobijo in dokažejo, je eksperiment, ki smo ga izvedli, dober prikaz sinteze in uporabe laboratorijsko sintetiziranih plinov za nove reakcije.

Ključne besede: desulfurizacija, žveplov dioksid, Obendraufova metoda, eksperimentalno delo, gips

Abstract

We performed a series of chemical reactions to show that sulfur dioxide, SO₂, can be used to synthesize calcium sulfate, CaSO₄·2H₂O, gypsum. As starting compounds for the synthesis of sulfur dioxide we used concentrated sulfuric acid, H₂SO₄, and elemental copper, Cu. During the experimental work we also had to obtain carbon dioxide, CO₂, and oxygen, O₂, which we used for further reactions. We experimented on the principle of Obendraufs' method the result of which was gypsum. It was determined by IR spectroscopy. During the primary and high school chemical education, the gases are usually used just to obtain and proven. But this experiment is a good example of synthesis and use of laboratory – synthesized gases which can be also used for further reactions.

Key words: desulfurization, sulfur dioxide, Obendrauf's method, experimental work, gypsum

1 UVOD

Žveplov dioksid je strupen brezbarven plin jedkega vonja, ki draži dihala. Nastaja pri vulkanskem delovanju in gorenju fosilnih goriv v termoelektrarnah. Skupaj z dušikovimi oksidi, NO_x, in ogljikovim dioksidom, CO₂, povzročata nastanek kislega dežja [5]. Kisli dež je okoljski problem predvsem zaradi raztapljanja apnenca, marmorja, izpiranja snovi iz prsti in nižanja pH prsti ter sladkovodnih virov. Iz glin in mineralov izpira aluminij in druge kovinske ione, kar povzroča povečan pogin rib. V 70. in 80. letih prejšnjega stoletja je bilo v Evropi veliko gozdov poškodovanih zaradi kislega dežja, problem pa se je lahko kazal tudi na politični ravni, saj so lahko emisije plinov v eni državi poškodovale okolje druge [2]. Evropski državi z najvišjimi emisijami SO₂ sta Ukrajina in Turčija [7].

Kot kažejo podatki Agencije Republike Slovenije za okolje, onesnaženost zraka z žveplovim dioksidom po letu 2005 v Sloveniji ni več nevarna za zdravje ljudi, prav tako ni presežena kritična letna koncentracija za zaščito vegetacije [8]. Podatki Evropske agencije za okolje

E-mail naslov/i: n.markovicneven@gmail.com (Neven Marković), petra.peranic1@um.si (Petra Peranić), brina.dojer@um.si (Brina Dojer)

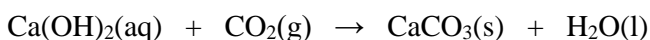
(EEA) pa kažejo, da se je emisija žveplovih oksidov, med katerimi je najpogostejši SO₂, v letih 1990 - 2011 v Sloveniji zmanjšala za 48 %, kar nas uvršča na drugo mesto med državami članicami Evropske unije. Emisije so se zmanjšale predvsem zaradi sprememb v prometu, ravnanju z odpadki ter sprememb pri proizvodnji in distribuciji energije [9].

Znano je, da mora imeti vsak večji vir SO₂, kot so termoelektrarne idr., razžvepljevalno napravo. Razžvepljevanje (desulfurizacija) pomeni odstranjevanje SO₂ iz dimnih plinov. Postopkov odstranjevanja je mnogo, najbolj pogost način razžvepljevanja pa je mokro čiščenje z apnencem [12].

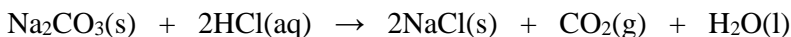
Osnovni pristop za odstranitev in uporabo SO₂ je reakcija z bazo, po navadi s kalcijevim hidroksidom, Ca(OH)₂, pri čemer nastaja kalcijev sulfit, CaSO₃. Ker pa ta spojina ni uporabna v industriji, jo je treba z dodatkom vode in kisika pretvoriti v kalcijev sulfat dihidrat, CaSO₄·2H₂O, v gips ali mavec oz. sadro. Tak material lahko po aglomeriranju in sušenju uporabljajo za mavčne plošče, strukturno polnilo, nevtralizacijo kislinskih proizvodov, v rudnikih za nadzor posedov, kmetijstvu, pri izdelavi stekla, za pigmente idr. [12].

Pri našem delu smo se lotili desulfurizacije v laboratoriju po t. i. Obendraufovi metodi [11]. Najprej smo pridobili SO₂, ta pa je zreagiriral s CaCO₃. Končni produkt niza reakcij, ki jih bomo opisali v nadaljevanju, je CaSO₄·2H₂O.

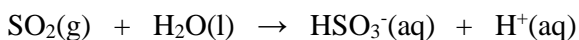
Po Obendraufovi metodi raztopini kalcijevega hidroksida, Ca(OH)₂(aq), dodamo CO₂(g), pri čemer nastaja kalcijev karbonat, CaCO₃(s):



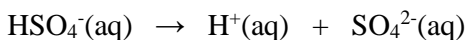
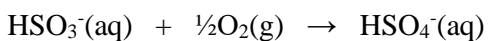
CO₂ je seveda treba prej pridobiti, za kar so znani in opisani različni postopki [14].



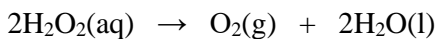
Nato je potrebno pridobiti še SO₂(g) in ga vbrizgati v zgoraj opisano raztopino/oborino:



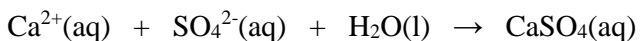
Pri tem nastajajo hidrogensulfidni ioni, HSO₃⁻, ki nadalje oksidirajo v HSO₄⁻, ti pa disociirajo v H⁺ in SO₄²⁻ [4].

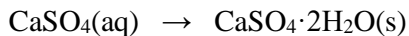


Za oksidacijo potrebujemo kisik, O₂, ki ga lahko prav tako pridobimo z različnimi reakcijami. Najpogosteje se v laboratoriju proizvede z razpadom vodikovega peroksida, pri čemer uporabimo kot katalizator MnO₂(s) [14].



Prvo epruveto, v kateri je nastal CaCO₃(s), segrejemo na 45-50 °C, saj je pri tej temperaturi topnost CaCO₃ v vodi največja. Pri tem v vodni raztopini nastaja CaSO₄(aq), saj kalcijevi ioni reagirajo s sulfatnimi. Oborino bele barve opazimo ob ohlajanju. To so kristali kalcijevega sulfata dihidrata, CaSO₄·2H₂O(s).

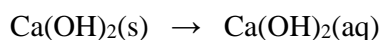
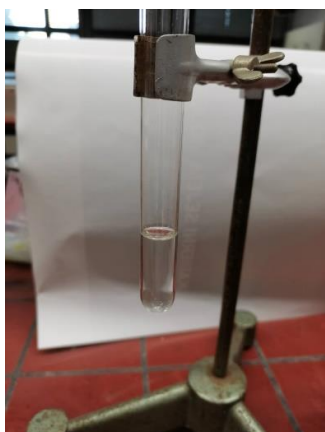




2 EKSPERIMENTALNO DELO

Eksperimenta smo se lotili na nekoliko drugačen način, kot smo ga našli opisanega v člankih. Tudi količine uporabljenih pridobljenih plinov smo povečali na dvakratni volumen, saj nam s takšno količino plinov, kot je zapisana v članku [11], ni uspelo dobiti ustreznega rezultata.

Najprej smo pripravili apnico, nasičeno raztopino $\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{aq})$. Pri tem smo upoštevali podatek o topnosti $\text{Ca}(\text{OH})_2$ v vodi, ki znaša 0,16 g /100 mL vode (pri 20 °C) [6]. Žličko kalcijevega hidroksida, $\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{s})$, približno 0,5 g, smo dali v 100 mL deionizirane vode, pustili približno pol ure, večkrat premešali in na koncu prefiltrirali (uporabili smo filter papir Macherey-Nagel MN- 751).



Del nastale apnice smo prelili v epruveto, kot je prikazano na sliki 1.

Slika 1: Apnica, $\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{aq})$ v epruveti, kjer smo izvedli nadaljnje reakcije.

V drugi epruveti smo sintetizirali $\text{CO}_2(\text{g})$, in sicer tako, da smo med seboj pomešali približno 0,3 g $\text{NaHCO}_3(\text{s})$, natrijevega hidrogenkarbonata oz. sode bikarbone in dodali približno 5 mL alkoholnega kisa (v prebitku), ki vsebuje etanojsko kislino, $\text{CH}_3\text{COOH}(\text{aq})$.

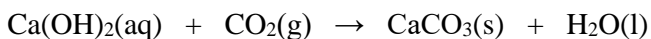


$\text{CO}_2(\text{g})$ smo ujeli v izpraznjeni balon (slika 2), ki smo ga poveznili na epruveto. $\text{CO}_2(\text{g})$ smo nato s pomočjo igle in injekcijske brizge shranili v brizgo.



Slika 2: Reakcija med sodo bikarbono in kisom, pri kateri smo pridobili CO_2 .

Nastali $\text{CO}_2(\text{g})$ smo vbrizgali v epruveto z apnico in dobili raztopino s kalcijevim karbonatom, $\text{CaCO}_3(\text{s})$ (slika 3).

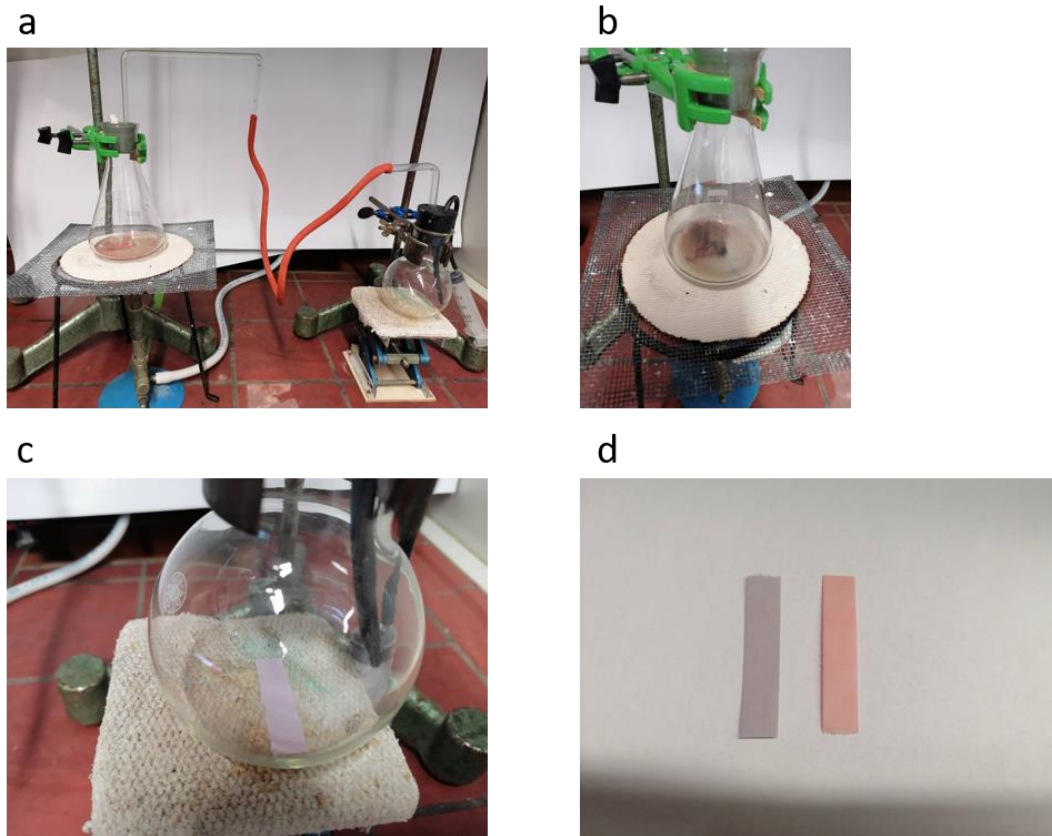


Slika 3: Nastala raztopina s $\text{CaCO}_3(\text{s})$.

Nato smo se lotili sinteze SO_2 . V erlenmajerico smo dali 0,2 g bakra v prahu, Cu , in nanj zlili 10,0 mL koncentrirane 96 % žveplove(VI) kisline, $\text{H}_2\text{SO}_4(\text{aq})$ (kislina je bila v prebitku). Erlenmajerico smo zamašili z zamaškom s cevko, ki smo jo speljali v zamašeno bučko, v katero smo dali moder lakmusov papir (slika 4). Erlenmajerico smo segrevali na keramični mrežici nad plinskim gorilnikom, da je reakcija potekla hitreje:

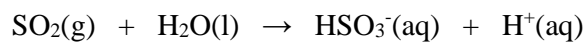


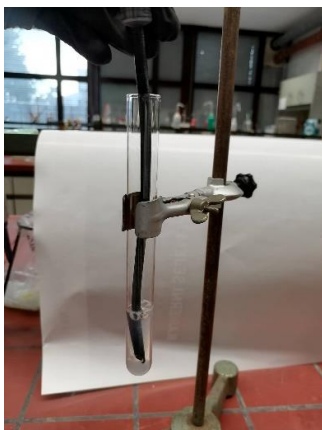
Moder lakmusov papir je ob prisotnosti žveplove(IV) kisline, $\text{H}_2\text{SO}_3(\text{aq})$ (reakcija žveplovega dioksida, SO_2 , in zračne vlažnosti) spremenil barvo v rdečo. Pridobili smo več SO_2 , kot smo ga potrebovali, saj smo eksperiment nekajkrat ponovili.



Slika 4 (a,b,c,d): Zgoraj opisana sestavljena apartura za pridobitev $\text{SO}_2(\text{g})$ (a: v erlenmajerici je uprašeni baker, na katerega zlijemo nekaj mL koncentrirane $\text{H}_2\text{SO}_4(\text{aq})$; b: segrevanje erlenmajerice nad plinskim gorilnikom; c: moder lakmusov papir se obarva rdeče zaradi prisotnosti H_2SO_3 ; d: primerjava barve lakmusovega papirja pred reakcijo in po njej.)

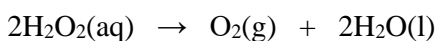
Nastali $\text{SO}_2(\text{g})$ smo shranili v brizgalki, ki smo jo zamašili s čepom, kasneje pa vbrizgali v epruveto z nastalim $\text{CaCO}_3(\text{s})$ v raztopini. Pri tem nastajajo hidrogensulfidni ioni, $\text{HSO}_3^-(\text{aq})$ (slika 5):





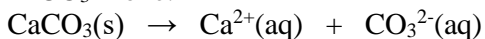
Slika 5: Vbrizgavanje SO_2 v raztopino s CaCO_3 .

Sintetizirali smo tudi kisik, $\text{O}_2(\text{g})$. V epruveto smo dali na koščke narezan krompir, dolili 10 mL 30 % raztopine vodikovega peroksida, $\text{H}_2\text{O}_2(\text{aq})$, in na epruveto poveznili balonček (slika 6), iz katerega smo nato z injekcijo posrkali nastali kisik v brizgo.

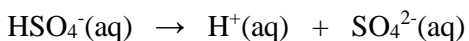
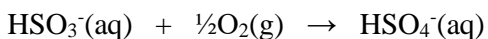


Slika 6: Katalaza razgradi vodikov peroksid na vodo in kisik. Slednji napolni balonček.

S segrevanjem zmesi v prvi epruveti na 45-50 °C, v kateri so bili CaCO_3 in hidrogensulfitni ioni, $\text{HSO}_3^-(\text{aq})$, povečamo topnost $\text{CaCO}_3(\text{s})$ v vodi [15]. $\text{CaCO}_3(\text{s})$ v vodi disociira na Ca^{2+} in CO_3^{2-} ione:



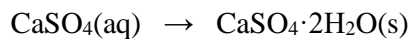
V zmes počasi vbrizgavamo kisik (slika 7). Poteče oksidacija HSO_3^- v HSO_4^- , ti ioni pa disociirajo v H^+ in SO_4^{2-} .





Slika 7: Segrevanje epruvete na vodni kopeli pri temperaturi 40 °C in vbrizgavanje kisika.

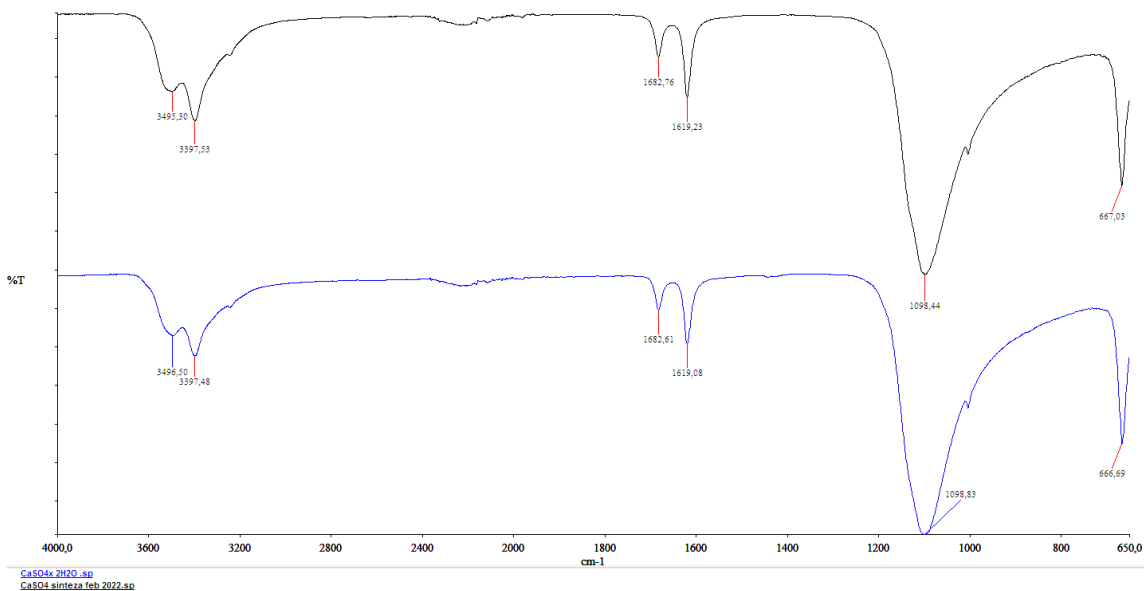
Pri tem v vodni raztopini nastaja $\text{CaSO}_4(\text{aq})$, saj kalcijevi ioni reagirajo s sulfatnimi. Z ohlajanjem nastale raztopine opazimo nastanek oborine bele barve (slika 8). To so kristali kalcijevega sulfata dihidrata, $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}(\text{s})$.



Slika 8: Ohlajanje raztopine s $\text{CaSO}_4(\text{aq})$ in po enem dnevu izločeni kristali $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, gipsa, na urnem steklu.

3 REZULTATI

Sintetizirani produkt, $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}(\text{s})$, in komercialni $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ smo analizirali z IR spektroskopijo. Spektra obeh sta prikazana na sliki 9.



Slika 9: IR posnetka komercialnega $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (spodaj) in sintetiziranega (zgoraj).

Kot lahko vidimo, se nihanja pojavijo v območju med 1130 in 1080 cm^{-1} (na spektrih: 1099 in 1098 cm^{-1}) in med 680 in 610 cm^{-1} (na spektrih: 667 cm^{-1}), kar je značilno za nihanja sulfatnih skupin [3]. Nihanja intermolekularnih vodikovih vezi se pojavljajo v območju med 3550 in 3400 cm^{-1} (na spektrih: 3495 in 3398 cm^{-1} ; 3497 in 3397 cm^{-1}). Nihanja med 1700 in 1600 cm^{-1} lahko pripišemo nihanjem O–H skupin (na spektrih: 1683 , 1619 cm^{-1}) [3].

Posamezne pline, ki smo jih pridobili, smo shranili v injekcijskih brizgah, kar je znan način shranjevanja malih količin plinov, kot so CO_2 , O_2 , H_2S , SO_2 , NO in drugih, sintetiziranih v laboratoriju, za krajši čas [1,11,13,14].

5 ZAKLJUČEK

Z Obendraufovo metodo smo uspeli z desulfurizacijo pridobiti $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, gips, kar smo dokazali tudi z IR spektroskopijo. Oba, komercialna kemikalija in sintetizirani produkt, namreč dajeta uklone pri enakih vrednostih valovnih števil. Posamezne pline (SO_2 , O_2 in CO_2) bi lahko pridobili tudi z drugimi reagenti, pri eksperimentiranju pa smo se za uporabo konkretnih kemikalij odločali predvsem zaradi predvidene razpoložljivosti slednjih v laboratoriju in na podlagi domneve, da lahko te sintezne postopke uporabijo tudi učitelji v osnovnih in srednjih šolah.

Prav je, da se že osnovnošolci seznanijo z nastankom kislega dežja in plini, ki ga povzročajo. Žveplov dioksid, SO_2 , je namreč omenjen v vsebinskih sklopih Kemijske reakcije, Kisline, baze in soli ter Družina ogljikovodikov s polimeri, ko je govora o kisljih padavinah ter nastanku kisljih spojin iz nekovinskih oksidov, zgorevanju fosilnih goriv itd. [10,16,17].

Literatura

- [1] Alyea, H. N., Syringe Gas Generators. *Journal of Chemical Education*, (1992) 69, 65.
- [2] Atkins P.W., *Kemija zakonitosti in uporaba*, TZS, Ljubljana, 1995.
- [3] Bellamy L.J., *The Infrared spectra of complex molecules*, Chapman and Hall, London, 1975.
- [4] De Blasio C., Makila E., Westerlund T., Use of carbonate rocks for flue gas desulfurization. *Reactive dissolution of limestone particles*, (2012) *Applied Energy*, 90, 175-181.
- [5] Drofenik M., *Splošna in anorganska kemija*, (2010) Uni založba d.o.o., Maribor, 208-209.
- [6] [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Inorganic_Chemistry/Supplemental_Modules_and_Websites_\(Inorganic_Chemistry\)/Descriptive_Chemistry/Elements_Organized_by_Block/1_s-Block/Elements/Group__2_Elements%3A_The_Alkaline_Earth_Metals/Z20_Chemistry_of_Calcium_\(Z20\)/Calcium_Hydroxide](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Inorganic_Chemistry/Supplemental_Modules_and_Websites_(Inorganic_Chemistry)/Descriptive_Chemistry/Elements_Organized_by_Block/1_s-Block/1_s-Block/Elements/Group__2_Elements%3A_The_Alkaline_Earth_Metals/Z20_Chemistry_of_Calcium_(Z20)/Calcium_Hydroxide) (pridobljeno 24.5.2022).
- [7] <https://infographicjournal.com/the-global-emission-of-sulfur-dioxide-you-must-know/> (pridobljeno 19.5.2022).
- [8] <http://kazalci.arso.gov.si/sl/content/onesnazenost-zraka-z-zveplovim-dioksidom-5> (pridobljeno 19.5.2022).
- [9] <https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/indicators/eea-32-sulphur-dioxide-so2-emissions-1/assessment-3> (pridobljeno 19.5.2022).
- [10] https://www.gov.si/assets/ministrstva/MIZS/Dokumenti/Osnovna-sola/Ucni-nacrti/obvezni/UN_kemija.pdf (pridobljeno 30.5.2022).
- [11] Ibanez J.G., Hernandez-Esparza M., Doria-Serano C., Fregoso-Infante A., *Green Chemistry: the recovery and reuse of sulfur dioxide (Obendrauf's method)* (2008), *Environmental chemistry*, 204-210.
- [12] Kolarič Z., *Vpliv katalitične oksidacije SO₂ na moker kalcitni postopek*, magistrsko delo, FKKT Maribor, 2009.
- [13] Mattson B. et al., *Demonstrating Heterogeneous Gas-Phase Catalysis with the Gas Reaction Catalyst Tube*, *Journal of Chemical Education*, (2003) 80, 768-773.
- [14] Obendrauf, V. "Experimente mit Gasen im Minimasstab," *Chemie in unserer Zeit* (Austria, in German) (2004) 30 (3) 118–125.
- [15] Peng J. et al., *Simulation for the dissolution mechanism of Cambrian carbonate rocks in Tarim Basin, NW China*, *Petroleum Exploration and Development*, (2018) 45(3), 431–441.
- [16] Smrdu A., *Od atoma do molekule, učbenik za kemijo v 8. razredu osnovne šole*, II. izdaja, Jutro, 2012.
- [17] Smrdu A., *Od molekule do makromolekule, učbenik za kemijo v 9. razredu osnovne šole*, II. izdaja, Jutro, 2013.

Vedenje suženj-gospodar

Slave-Master Behavior

Arbresha Hölbl¹, Mitja Slavinec^{1,2}, Samo Kralj^{1,3}¹Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška 160, 2000 Maribor, Slovenija²Pomurska akademsko znanstvena unija, Lendavska 5a, 9000 Murska Sobota, Slovenija³Institut "Jožef Stefan", Jamova 39, 1000 Ljubljana, Slovenija

Povzetek

Uvedemo mehanizem *suženj-gospodar* v faznem vedenju dvokomponentnih sistemov, kjer obe komponenti izkazujeta nekakšno (kvazi) ureditev dolgega dosega. Ključna značilnost mehanizma je, da ena komponenta močno vpliva na drugo, medtem ko je obratni vpliv zanemarljiv. Za ponazoritev učinka upoštevamo sisteme, kjer ima vsaka izolirana komponenta ureditveni-neureditveni fazni prehod pri spreminjanju kontrolnega parametra (npr. temperature), ki ga imenujemo posplošena temperatura. Obravnavamo minimalni model, ki prikazuje robustno vedenje *suženj-gospodar*. Kot vzorčne sisteme predstavljamo termotropne tekoče kristale (TK), ki kažejo nematično in smektično A fazno ureditev, ter se osredotočimo na interakcijsko moč med orientacijskim in translacijskim redom. Opisane so tudi zmesi nematičnih molekul TK in anizotropnih nanodelcev. Pokažemo, da kvalitativno različna vedenja lahko nastanejo zaradi posebne narave interakcije med komponentami. Pokažemo, da bi se zaradi posebne narave medkomponentne interakcije lahko pojavila kvalitativno različna vedenja. Obvladovanje tega mehanizma bi lahko privedlo do različnih aplikacij na osnovi lastnosti fazne nastavljalivosti.

Ključne besede: fazno vedenje, zmesi, tekoči kristali, nanodelci

Abstract

We introduce the *slave-master* mechanism in the phase behavior of two-component systems where both components could exhibit some kind of (quasi) long-range order. The key feature of the mechanism is that one component strongly influences the other while the reverse influence is negligible. To illustrate the effect, we consider systems where each isolated component exhibits an order-disorder phase transition on varying a control parameter (e.g., temperature) to which we refer as the generalized temperature. We present a minimal model that shows robust *slave-master* behavior. As exemplary systems, we present thermotropic liquid crystals (LCs) exhibiting nematic and smectic A phase order, focusing on the interaction strength between orientational and translational order. Mixtures of nematic LC molecules and anisotropic nanoparticles are also presented. We show that qualitatively different behaviors could emerge via the specific nature of the inter-component interaction. Mastering this mechanism could lead to various applications based on phase tunable properties.

Keywords: phase behavior, mixtures, liquid crystals, nanoparticles

1 Uvod

V zadnjem desetletju se je povečala raziskovalna dejavnost na področju sinteze in analize dvokomponentnih mešanic in kompozitov [12,13]. Posebej zanimivi so bili nanodelci (ND), homogeno razpršeni v gostiteljskem materialu [1]. Značilnost ND je, da je vsaj ena od njegovih dimenzij omejena na med 1 in 100 nm. Poudarek trenutnih raziskav po vsem svetu je v cilju najti ustrezno kombinacijo sestavin, ki daje kvantitativno dramatično izboljšane ali kvalitativno nove lastnosti, ki jih posamezne komponente same po sebi ne kažejo. Pričakuje se, da bodo takšni sistemi igrali pomembno vlogo pri materialih z izjemno učinkovitimi lastnostmi in na nastajajočem področju nanotehnologije.

Za takšne študije so tekoči kristali (TK) [8,18] in TK pomešani z ND [20] še posebej primerni. TK so sami po sebi izjemni materiali, ki so že bili priča številnim elektrooptičnim aplikacijam (npr. TK zasloni) in tudi "naravnim" aplikacijam (npr. biološke membrane kažejo lastnosti TK) [25]. Ta uspeh je posledica njihove edinstvene kombinacije izjemnih lastnosti, kjer

E-mail naslov/i: besal85@gmail.com (Arbresha Hölbl), mitja.slavinec@um.si (Mitja Slavinec), samo.kralj@um.si (Samo Kralj)

poudarjamo tekoči značaj, mehko (zmožnost močnega odziva tudi na šibke dražljaje), optično transparentnost in anizotropijo, bogato raznolikost faz in struktur ter samosestavljive zmogljivosti. Kompleksnost potencialnih struktur in potencialnih aplikacij se izjemno poveča, če se TK kombinirajo z ustreznimi ND. Nastali učinkoviti sistemi pogosto kažejo dramatično izboljšane [23] ali nove lastnosti materiala [2] celo za majhne koncentracije ND.

Na primer, majhna koncentracija feroelektričnih koloidov lahko zelo poveča ureditev nematičnih TK [23]. Temperatura izotropno-nematičnega prehoda T_{IN} se lahko dramatično poveča (temperatura se premakne do 30 K), medtem ko kvalitativno vedenje TK ostane nespremenjeno. Po drugi strani pa mešanice TK-aerosil (aerosili so kroglasti ND [2]) običajno kažejo potlačeno T_{IN} in kvantitativne ali celo kvalitativne spremembe v vedenju TK ob povečanju koncentracije ND [6,15]. Aerosili so namreč nagnjeni k tvorjenju fraktalnih mrež znotraj gostitelja TK, kjer bi lahko mreža izkazovala vsaj tri kvalitativno različne formacije. Poleg tega se različne faze TK dosežejo preko faznega prehoda zloma simetrije, ki neizogibno vodijo do topoloških defektov [21,32] (TD), ki ustrezajo lokaliziranim topološko zaščitenim konfiguracijam, kjer je ureditev motena. Nastale točkovne, linijske ali stenske TD bi lahko stabilizirali z ustreznimi (tj. njihova geometrija, lastnosti materiala ali površinska funkcionalizacija) ND, ki jih običajno privlačijo jedra ali TD [16,17]. V določenih pogojih lahko ND povzročijo dodatne TD [27,28,30]. Nastajajoči sistemi bi lahko učinkovito delovali kot pomanjšani kristali z nastavljivo simetrijo in posledično nastavljivimi fizikalnimi lastnostmi [26].

V tem prispevku se osredotočamo na vedenje *suženj-gospodar*, ki ga lahko opazimo pri faznem vedenju dvokomponentnih sistemov. Pri tem pojavu *gospodar* nadzoruje fazno vedenje *sužnja*, medtem ko ni obratnega vpliva. Z razumevanjem in obvladovanjem tega mehanizma bi lahko učinkovito nadzorovali in prilagajali fazno vedenje *sužnja*. Načrt članka je naslednji. V poglavju 2 predstavljamo generični minimalni model, ki omogoča vedenje *suženj-gospodar*. V poglavju 3 analiziramo mehanizem in ponudimo nekaj številčnih primerov, ki učinkovito ponazarjajo učinek. V poglavju 4 navajamo nekaj primerov v TK, kjer je takšno vedenje prisotno. V zadnjem poglavju povzamemo ugotovitve. V dodatku zberemo nekaj tehničnih izpeljav.

2 Minimalni model

Osredotočamo se na vedenje *suženj-gospodar* dvokomponentnega homogenega sistema, ki ga predstavlja brezdimenzijska prosta energija

$$f = \Omega f_1^{(kon)} + f_2^{(kon)} + f^{(int)}. \quad (1)$$

Kondenzacijski izrazi $f_i^{(kon)}$ opisujejo fazno vedenje i -te izolirane komponente, Ω meri njihovo relativno pomembnost v f , $f^{(int)}$ pa njuno medsebojno interakcijo. Vsaka od komponent naj bi imela fazni prehod pri $\tau_i = \tau_i^{(c)}$ ob spreminjanju brezdimenzijskega krmilnega parametra τ_i , ki pomeni bodisi temperaturo, pritisk ali koncentracijo komponent. Zaradi preprostosti smo nastavili, da skalarni ureditveni parameter s_i opisuje stopnjo fazne ureditve in da je ureditev ravnovesja opisana s $s_i(\tau_i > \tau_i^{(c)}) = 0$, $s_i(\tau_i \leq \tau_i^{(c)}) > 0$, $f_i^{(kon)}(\tau_i > \tau_i^{(c)}) = 0$, in $f_i^{(kon)}(\tau_i \leq \tau_i^{(c)}) < 0$.

Nezvezna in zvezna kondenzacija izolirane i -te komponente sta izraženi kot [5,19]

$$f_i^{(kon)} = \tau_i s_i^2 - 2s_i^3 + s_i^4, \quad (2a)$$

in

$$f_i^{(kon)} = \tau_i s_i^2 + \frac{s_i^4}{2}. \quad (2b)$$

Izolirana komponenta se kondenzira pod kritičnim kontrolnim parametrom $\tau_i^{(c)}$. Za nezvezne fazne prehode velja

$$\tau_i^{(c)} = 1, \quad (3a)$$

$$s_i(\tau_i \leq \tau_i^{(c)}) = \frac{3 + \sqrt{9 - 8\tau_i}}{4}. \quad (3b)$$

Za zvezni fazni prehod sledi

$$\tau_i^{(c)} = 0, \quad (4a)$$

$$s_i(\tau_i < \tau_i^{(c)}) = \sqrt{-\tau_i}. \quad (4b)$$

Za sklopitveni člen med komponentami izberemo

$$f^{(int)} = -\gamma s_1^{n_1} s_2^{n_2}. \quad (5)$$

Tukaj $\gamma > 0$ meri moč sklopitve, n_1 in n_2 sta pozitivni celi števili.

3 Vedenje suženj-gospodar

Spodaj ponazarjamo, da sistemi, ki jih opisuje prosta energija, ki izpolnjujejo pogoje, podane z enačbo (1-5), kažejo vedenje *suženj-gospodar*. V njem *gospodar* narekuje fazno vedenje *sužnja*, medtem ko vzajemni vpliv ne obstaja v določenem intervalu faznih prehodov, ki poganjajo vrednosti kontrolnih parametrov. V nadaljevanju obravnavamo različne primere, kjer posamezne izolirane komponente kažejo bodisi zvezno ali nezvezno fazno vedenje.

Za ilustrativne namene se omejimo na fazno vedenje kontrolne temperature T . Parametriziramo brezdimenzijske parametre τ_i za fazni prehod prvega reda kot

$$\tau_i = \frac{T - T_i^*}{T_i^{(0)} - T_i^*} \quad (6a)$$

in za fazni prehod drugega reda kot

$$\tau_i = \frac{T - T_i^{(0)}}{T_i^{(0)}}. \quad (6b)$$

Tukaj je $T_i^{(0)}$ temperatura faznega prehoda i -te izolirane komponente, T_i^* pa predstavlja ustrezno podhlajeno temperaturo (če je prehod nezvezen). Poleg tega označimo ustrezne fazne temperature za končne vrednosti γ s $T_i^{(c)}$.

Nato razpravljamo o faznem vedenju, kjer nastavimo $T_1^{(0)} > T_2^{(0)}$ in domnevamo, da so komponente relativno šibko sklopljene $\gamma < \gamma_c$. Tukaj γ_c pomeni kritično moč sklopitve, za katero sovпада temperatura faznega prehoda obeh komponent. *Suženj-gospodar* vedenje, ki ga odslej analiziramo, je opaženo za $\gamma < \gamma_c$. Pri temperaturah $T > T_1^{(0)}$ sta obe komponenti v neurejeni fazi ($s_1 = s_2 = 0$), sklopitveni členi so odsotni ($f^{(int)} = 0$).

Pri temperaturi $T = T_1^{(0)}$ *gospodar*, ki ga predstavlja s_1 , kondenzira. Upoštevajte, da velja $T_1^{(0)} = T_1^{(c)}$ ob povečanju γ v režimu $\gamma < \gamma_c$. Namreč, *gospodar* čuti le prispevek kondenzacijskega člena $f_1^{(kon)}$ v f (glej enačbo (1) in enačbo (2)).

Pri temperaturah $T < T_1^{(0)}$ opazimo kvalitativno različne temperaturne odzive *sužnja* pri spreminjanju γ v odvisnosti od vrednosti n_2 (glej enačbo (5)), ki so obravnavane v nadaljevanju. To vedenje nastane pri $\gamma > 0$ zaradi končnega efektivnega polja

$$\gamma^{(efe)} = \gamma s_1^{n_1}, \quad (7)$$

konjugirano s $s_2^{n_2}$, ki ga čuti *suženj*, če je *gospodar* urejen.

3.1 Kvadratna sklopitev

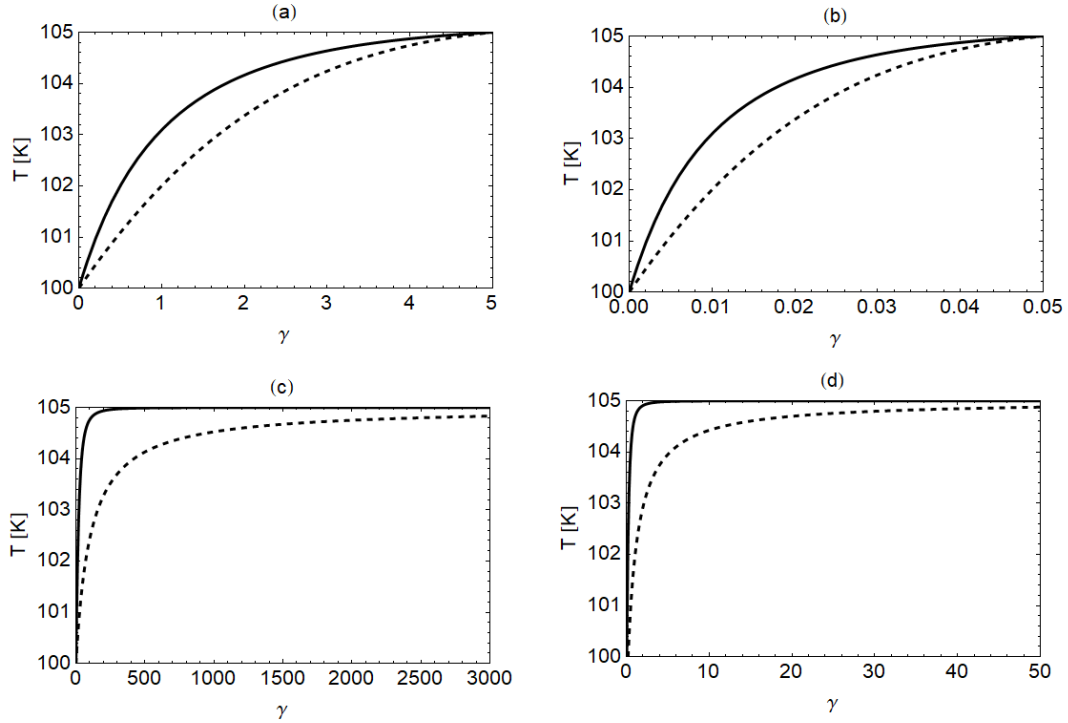
Najprej analiziramo fazno vedenje *sužnja* za primere $n_2 = 2$ v enačbi (5). V tem primeru *suženj* čuti efektivno polje, ki je povezano s s_2^2 za temperature $T < T_1^{(c)} = T_1^{(0)}$, torej $f^{(int)} = -\gamma^{(efe)} s_2^2 < 0$. Prosta energija $f^{(suženj)}$, ki je eksplicitno odvisna od s_2 , se glasi

$$f^{(suženj)} = f_2^{(kon)}(\tau_2) - \gamma^{(efe)} s_2^2 \equiv f_2^{(kon)}(\tau_2^{(efe)}). \quad (8)$$

Tukaj

$$\tau_2^{(efe)} = \tau_2 - \gamma^{(efe)} \quad (9)$$

predstavlja efektivno brezdimenzijsko temperaturo, ki jo čuti *suženj*. Zato končna vrednost $\gamma^{(efe)}$ renormalizira temperaturo faznega prehoda *sužnja*. S povečanjem γ se temperatura faznega prehoda $T_2^{(c)}$ premakne proti višjim vrednostim, dokler ni dosežen pogoj $T_1^{(0)} = T_2^{(c)}$, ki definira kritično vrednost γ_c od γ . V režimu $\gamma > \gamma_c$ so komponente razmeroma močno sklopljene in obe komponenti kondenzirata pri isti temperaturi, ki monotonno narašča z γ . Zato je vedenje *suženj-gospodar* opaženo samo za moči sklopitve $\gamma < \gamma_c$. V tem režimu z naraščajočo močjo sklopitve γ se kondenzacijska temperatura *sužnja* $T_2^{(c)}$ monotonno poveča z γ , medtem ko $T_1^{(c)}$ ostane nespremenjena.



Slika 1: Fazno vedenje *suženj-gospodar* v režimu $\gamma < \gamma_c$. $T_2^{(c)}$ in $T_1^{(c)}$ kot funkcija γ . a) [n, n] primer, enačba (10a); b) [n, z] primer, enačba (10b); c) [z, n] primer, enačba (10c); d) [z, z] primer, enačba (10d). $T_2^{(0)} = 100$ K, $T_1^{(0)} = 105$ K, $T_2^* = 99$ K, $T_1^* = 104$ K. $n_1 = 1$: črtkana črta, $n_1 = 2$: polna črta.

Kritična temperatura $T_2^{(c)}$ je določena s pogojem $\tau_2^{(efe)}[T_2^{(c)}] = 1$ za 1. red in $\tau_2^{(efe)}[T_2^{(c)}] = 0$ za 2. red izolirane 2. komponente. Dobljene enačbe za vse možne primere so zapisane spodaj.

$$[n, n]: \frac{T_2^{(c)} - T_2^*}{T_2^{(0)} - T_2^*} - \gamma \left(\frac{3 + \sqrt{9 - 8 \left(\frac{T_2^{(c)} - T_1^*}{T_1^{(0)} - T_1^*} \right)}}{4} \right)^{n_1} = 1, \quad (10a)$$

$$[n, z]: \frac{T_2^{(c)} - T_2^{(0)}}{T_2^{(0)}} - \gamma \left(\frac{3 + \sqrt{9 - 8 \left(\frac{T_2^{(c)} - T_1^*}{T_1^{(0)} - T_1^*} \right)}}{4} \right)^{n_1} = 0, \quad (10b)$$

$$[z, n]: \frac{T_2^{(c)} - T_2^*}{T_2^{(0)} - T_2^*} - \gamma \left(\sqrt{\frac{T_2^{(c)} - T_1^{(0)}}{T_1^{(0)}}} \right)^{n_1} = 1, \quad (10c)$$

$$[z, z]: \frac{T_2^{(c)} - T_2^{(0)}}{T_2^{(0)}} - \gamma \left(\sqrt{\frac{T_2^{(c)} - T_1^{(0)}}{T_1^{(0)}}} \right)^{n_1} = 0. \quad (10d)$$

Tukaj so [n, n], [n, z], [z, n], [z, z] kratke oznake primerov [nezvezno, nezvezno], [nezvezno, zvezno], [zvezno, nezvezno] in [zvezno, zvezno] za fazni prehod izolirane [prve, druge] komponente. Zato ob upoštevanju možnosti $n_1 = 1$ in $n_2 = 2$ obstaja 8 različnih enačb za $T_2^{(c)}$. Vsem tem enačbam pa je skupna monotono naraščajoča odvisnost $T_2^{(c)}(\gamma)$, medtem ko je $T_1^{(c)}(\gamma) = T_1^{(0)}$ za $\gamma < \gamma_c$. V teh primerih kvalitativno temperaturno vedenje *sužnja* ostane približno enako pri spreminjanju γ . To vedenje je prikazano na sliki 1, kjer narišemo rešitev enačb (10) za določen niz materialnih parametrov v režimu $\gamma < \gamma_c$.

3.2 Linearna sklopitev

Nato razpravljamo o faznem vedenju *sužnja* za primere $n_2 = 1$ v režimu $\gamma < \gamma_c$. V linearnem primeru *suženj* čuti učinkovito polje, ki je linearno sklopljeno s s_2 za temperature $T < T_1^{(c)} = T_1^{(0)}$. Namreč, $f^{(int)} = -\gamma^{(efe)} s_2 < 0$, prosta energija $f^{(suženj)}$ pa se glasi

$$f^{(suženj)} = f_2^{(con)}(\tau_2) - \gamma^{(efe)} s_2. \quad (11)$$

Posledično je fazno vedenje veliko bolj kompleksno, saj v tem primeru $f^{(int)}$ preprosto ne renormalizira efektivne temperature. Poleg tega takšna sklopitev uvaja kvalitativne spremembe v faznem vedenju *sužnja* v primerjavi z $\gamma = 0$.

Namreč, za značaj drugega reda izolirane komponente 2 ta prispevek nadomesti kritično vedenje s postopnim razvojem s_2 za temperature $T < T_1^{(0)}$.

Za značaj prvega reda izolirane komponente 2 bi lahko opazili podkritično in nadkritično vedenje. V tem primeru namreč velja $f^{(suženj)} = \tau_2 s_2^2 - 2s_2^3 + s_2^4 - \gamma^{(efe)} s_2$. Nastali sistem bi lahko pokazal fazni prehod pri $\tau_2 = \tau_2^{(c)}$, če so izpolnjene naslednje enačbe:

$$\gamma^{(efe)} < 0.5, \quad \tau_2^{(c)} = 1 + \gamma^{(efe)}. \quad (12)$$

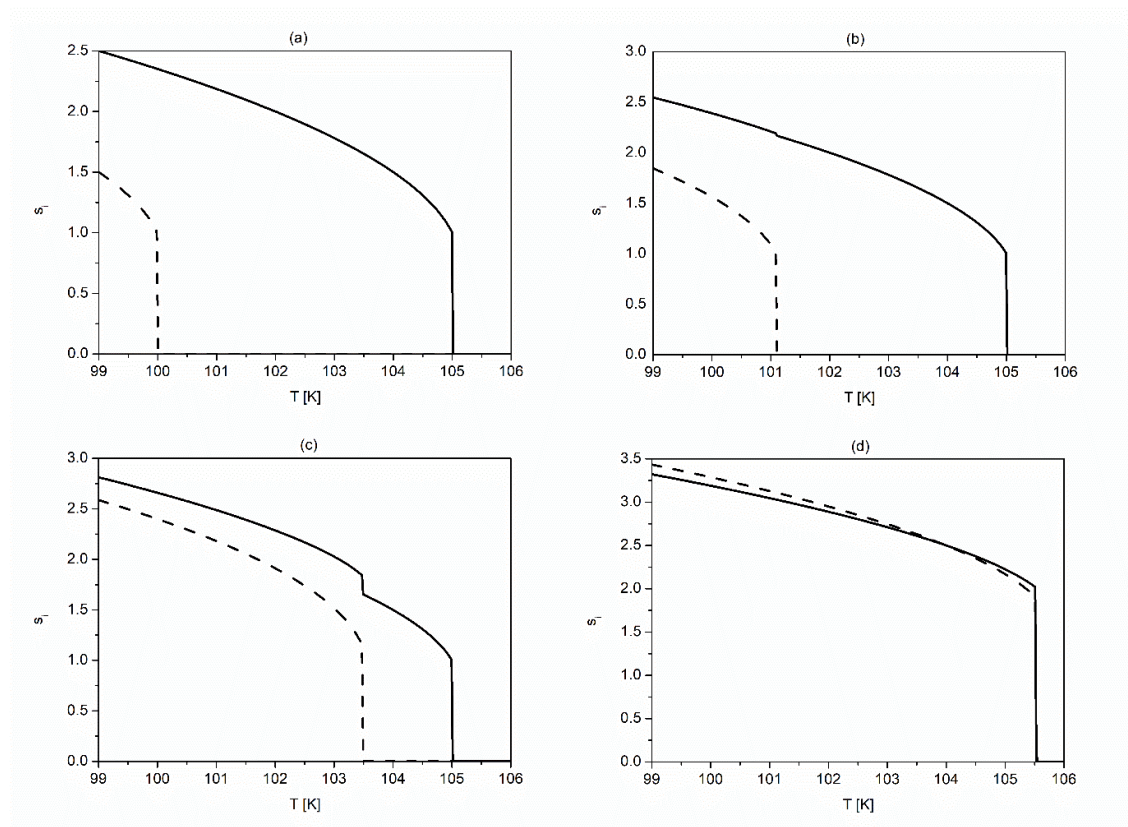
V tem primeru je temperatura faznega prehoda $T_2^{(c)}$ določena z

$$[n, n]: \frac{T_2^{(c)} - T_2^*}{T_2^{(0)} - T_2^*} = 1 + \gamma \left(\frac{3 + \sqrt{9 - 8 \left(\frac{T_2^{(c)} - T_1^*}{T_1^{(0)} - T_1^*} \right)}}{4} \right)^{n_1}, \quad (13a)$$

$$[z, n]: \frac{T_2^{(c)} - T_2^*}{T_2^{(0)} - T_2^*} = 1 + \gamma \left(\sqrt{\frac{T_2^{(c)} - T_1^{(0)}}{T_1^{(0)}}} \right)^{n_1}. \quad (13b)$$

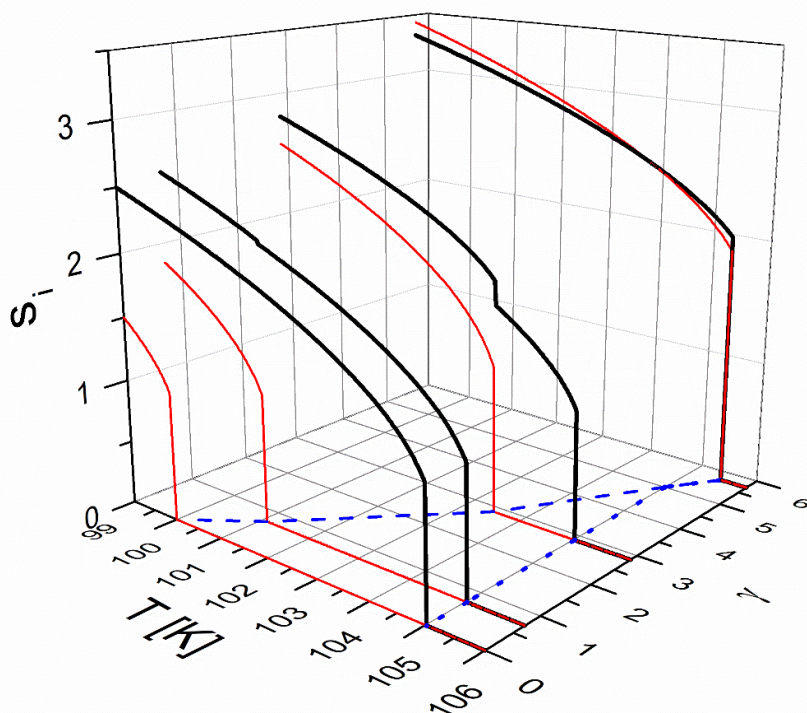
3.3 Numerični primeri

V nadaljevanju numerično ponazorimo mehanizem, kjer se omejimo na primer $[n, n]$, $n_2 = 2$ in $n_1 = 1$. Za ta sistem postopoma povečujemo sklopitveno moč γ in spremljamo posledično fazno vedenje. Tako so gostote kondenzacije proste energije podane z enačbo (2a), brezdimenzijske temperature τ_i pa so izražene z enačbo (6a). V simulacijah smo postavili $T_2^{(0)} = 100$ K, $T_2^* = 99$ K, $T_1^{(0)} = 105$ K, $T_1^* = 104$ K in $\Omega = 1$. Nastalo fazno vedenje je prikazano na sliki 2 in sliki 3.



Slika 2: Temperaturno obnašanje *suženj-gospodar* vedenja za primer $[n, n]$ (glej enačbo (10a)). S povečanjem γ se temperatura faznega prehoda *suženja* (črtkana črta) postopoma povečuje. Po drugi strani pa se v režimu $\gamma < \gamma_c$ temperatura faznega prehoda *gospodarja* (polna črta) ne spreminja. a) $\gamma = 0$, b) $\gamma = 0.6$, c) $\gamma = 2.9$, d) $\gamma = 5.4$. $T_2^* = 99$ K, $T_2^{(0)} = 100$ K, $T_1^* = 104$ K, $T_1^{(0)} = 105$ K, $n_1 = 2$.

Na sliki 2 prikazujemo ureditvene parametre kot funkcijo “realne” temperature za različne vrednosti $\gamma < \gamma_c = 5$. Vidi se, da to ne vpliva na fazni prehod *gospodarja*. Po drugi strani pa ob povečanju γ *suženj* kondenzira pri progresivno višjih temperaturah. Na sliki 3 predstavljamo 3D graf ureditvenih parametrov kot funkcijo T in γ .



Slika 3: 3D predstavitev vedenja *suženj-gospodar*, prikazana na sliki 2. Narišemo s_i (*suženj*: rdeče črte, $i = 2$; *gospodar*: črne črte, $i = 1$) pri spreminjanju τ_i (tj. T) in γ . Modro črtkana črta v ravnini (γ, T) kaže, da se temperatura faznega prehoda *sužnja* monotono povečuje s povečanjem γ . V režimu $\gamma > \gamma_c$ temperature faznega prehoda *sužnja* in *gospodarja* (modre pike) sovpadajo in naraščajo z γ . $T_2^* = 99$ K, $T_2^{(0)} = 100$ K, $T_1^* = 104$ K, $T_1^{(0)} = 105$ K, $n_1 = 2$: glej enačbo (10a).

4 Vzorčni sistemi

Spodaj predstavljamo dva demonstrativna sistema, ki dajeta izraze proste energije in fazno vedenje, podano z enačbami (1-5).

4.1 Termotropni TK, ki kažejo nematično in smektično ureditev

Vedenje *suženj-gospodar* je prikazano v termotropnih n-cianobifenilih (nCB) [4,24,29] TK, ki kažejo izotropno-nematično-smektično A (SmA) fazno vedenje pri spreminjanju se temperaturi. Izotropna faza predstavlja navadno tekočo fazo, ki ne kaže orientacijsko ali translacijsko (kvazi) ureditev dolgega dosega. V neomejenih vzorcih ima nematična faza orientacijsko ureditev dolgega dosega. V smektični A fazi je poleg tega vzpostavljena tudi translacijska kvazi ureditev dolgega dosega. V enostavnem enoosnem mezoskopskem opisu je nematična ureditev opisana z enoosnim nematičnim ureditvenim parametrom S in nematičnim direktorjem polja \vec{n} . Ureditveni parameter razkriva stopnjo enoosne ureditve, enotni vektor \vec{n} pa določa lokalno enoosno orientacijo, kjer so stanja $\pm\vec{n}$ fizikalno enaka. V ravnovesnem stanju sta tako \vec{n} kot S prostorsko homogena, pri čemer je \vec{n} poravnana vzdolž

smeri zloma simetrije. Strukturo SmA dobro opisuje smektični kompleksni ureditveni parameter $\psi = \eta e^{i\varphi}$. Tu fazno polje φ locira smektične plasti in translacijski ureditveni parameter η razkriva amplitudo tvorbe plasti. V ravnovesnem stanju velja $\varphi = q_0 \vec{n} \cdot \vec{r}$, kjer periodičnost $q_0 = 2\pi/d_0$ določa razdaljo smektične plasti d_0 , η pa je prostorsko homogen. Tako je struktura sestavljena iz ravninskega sklada enako oddaljenih plasti, poravnanih vzdolž \vec{n} .

4.1.1 Prispevki proste energije

Fazno vedenje takšnega sistema dobro opisuje mezoskopski model Landau-de Gennes-Ginzburg. Pri tem pristopu je gostota proste energije običajno izražena kot $f = f_n^{(kon)} + f_n^{(el)} + f_s^{(kon)} + f_s^{(el)} + f^{(int)}$. Tukaj $\{f_n^{(kon)}, f_s^{(kon)}\}$ in $\{f_n^{(el)}, f_s^{(el)}\}$ označujeta {nematični, smektični} kondenzacijski in elastični prispevek. Poleg tega $f^{(int)}$ opisuje sklopitve med nematičnimi in smektičnimi ureditvenimi parametri. Spodaj predstavljamo najpreprostejšo različico modela, ki zadostuje za ponazoritev generičnih izrazov, ki dajejo vedenje *suženj-gospodar*. V ta namen izrazimo gostoto proste energije kot [7,8,18]

$$f_n^{(kon)} = a(T - T^*)S^2 - bS^3 + cS^4, \quad (14a)$$

$$f_n^{(el)} = \frac{L}{2} |\nabla S|^2 + \frac{K}{2} |\nabla \vec{n}|^2, \quad (14b)$$

$$f_s^{(kon)} = \alpha(T - T_{NA})\eta^2 + \frac{\beta}{2}\eta^4, \quad (14c)$$

$$f_s^{(el)} = C_{\parallel} |(\vec{n}q_0 - \nabla)\psi|^2 + C_{\perp} |(\vec{n} \times \nabla)\psi|^2, \quad (14d)$$

$$f^{(int)} = -D\eta^2 S. \quad (14e)$$

Tukaj so a, b, c, α, β temperaturno neodvisni Landauovi koeficienti, T^* je izotropna podhlajena temperatura, T_{NA} označuje nematično-smektični A fazni prehod, če je sklopitveni člen $f^{(int)}$ odsoten. Poleg tega v slednjem primeru poteka izotropno-nematični fazni prehod pri $T_{IN} = T^* + \frac{b^2}{4ac}$. Elastičnost TK je opisana z reprezentativnimi nematičnimi (L, K) in smektičnimi (C_{\parallel}, C_{\perp}) elastičnimi konstantami. Konstanta D določa moč sklopitve med nematičnim in smektičnim ureditvenim parametrom.

4.1.2 Vedenje suženj-gospodar

Osredotočamo se na vedenje v ravnovesnem stanju, kjer ni elastičnih popačenj, to je $f_n^{(el)} = f_s^{(el)} = 0$. Sledi

$$f = a(T - T^*)S^2 - bS^3 + cS^4 + \alpha(T - T_{NA})\eta^2 + \frac{\beta}{2}\eta^4 - D\eta^2 S. \quad (15)$$

Uvajamo skalirane amplitude ureditvenih parametrov [25]: $s_1 = \frac{S}{S_0}$, $s_2 = \frac{\eta}{\eta_0}$, kjer je $S_0 = b/(2c)$ in $\eta_0 = \sqrt{\alpha T_{NA}/\beta}$; brezdimenzijske temperature $\tau_1 = (T - T^*)/(T_{IN} - T^*)$ in $\tau_2 = (T - T_{NA})/T_{NA}$; in brezdimenzijsko gostoto proste energije $\tilde{f} = \frac{f}{\alpha T_{NA} \eta_0^2}$. Sledi

$$\tilde{f} = \Omega(\tau_1 s_1^2 - 2s_1^3 + s_1^4) + \tau_2 s_2^2 + \frac{s_2^4}{2} - \gamma s_1 s_2^2, \quad (16)$$

kjer je $\Omega = a(T_{IN} - T^*)S_0^2/(\alpha T_{NA} \eta_0^2)$ in $\gamma = \frac{DS_0}{\alpha T_{NA}}$.

Ta funkcionalnost ustreza primeru $[n, z]$, obravnavanem v enačbi (10b), kjer je $n_1 = 1$ in $n_2 = 2$. V nCB TK [4,24,29] sklopitvena moč D monotono narašča z n , ki meri dolžino fleksibilnih alkilnih verig. Te so pritrjene na benzenska obroča, ki tvorita tog del paličastih TK molekul. V teh sistemih vlogo *gospodarja* in *sužnja* igrata nematična in SmA faza.

4.2 Homogene binarne zmesi nematogenov

Nato upoštevamo fazno vedenje homogene mešanice nematičnega tekočega kristala koncentracije ϕ_2 in anizotropnih nanodelcev [3,10,11] koncentracije ϕ_1 , $\phi_1 + \phi_2 = 1$. Domnevamo, da so ND paličasti in imajo zaradi svoje anizotropije mezogene lastnosti [20]. Zato domnevamo, da obe komponenti kažeta fazni prehod zloma simetrije pri dovolj nizkih temperaturah. Poleg tega smo določili, da je sklopitev med ND šibkejša od sklopitve med molekulami TK. Posledično postane slednji orientacijsko urejen pri višji temperaturi v čistem sistemu. Stopnjo ureditve obeh komponent opisujemo z orientacijskim ureditvenim parametrom S_1 in S_2 . Več podrobnosti je prikazano v dodatku A. Na semimikroskopski ravni so opredeljeni kot [20]

$$S_i = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle, \quad (17)$$

kjer θ pomeni kot med povprečno orientacijo i -te paličaste molekule in njeno časovno orientacijo znotraj majhnega volumna (tj. "točka" z vidika kontinuuma) in $\langle \dots \rangle$ pomeni statistično povprečje znotraj nje. Primer $S_i = 1$ ustreza popolnoma urejenim molekulam vzdolž ene same smeri zloma simetrije. Izotropna faza se odraža v $S_i = 0$, kjer so vse orientacije molekul enako verjetne.

4.2.1 Prispevki proste energije

Nastalo gostoto proste energije bi lahko izrazili kot [14,31] (glej dodatek A)

$$f = f_0 + \sum_{i=1}^2 \phi_i (a_i (T - T_i^*) S_i^2 - b_i S_i^3 + c_i S_i^4) - \phi_1 \phi_2 D S_1^{n_1} S_2^{n_2}. \quad (18)$$

Tukaj je f_0 gostota proste energije homogene mešanice, kjer sta obe komponenti v izotropni fazi in $a_1, b_1, c_1, a_2, b_2, c_2$ so pozitivni od materiala odvisni Landauovi koeficienti. V tem primeru obe čisti komponenti kažeta fazni prehod 1. reda. Semimikroskopska analiza kaže (glej dodatek A), da so velikosti teh konstant približno sorazmerne z $1/v_i$, kjer je v_i volumen i -te komponente molekule. Torej, če so ND večji od molekule TK, je njihov prispevek k prosti

energiji manjši. Količina T_i^* je temperatura podhlajenja izotropne faze i -te komponente. Vrednost T_i^* i -te komponente je odvisna od koncentracije j -te komponente. Semimikroskopsko modeliranje, predstavljeno v dodatku A, kaže, da se T_i^* zmanjša s povečanjem $\phi_{j \neq i}$. Zato prisotnost druge komponente (j -te komponente) oslabi povprečno ureditev sklopitvene moči i -te komponente in obratno. Pri običajnem pristopu Landauovega tipa predvidevamo, da je temperaturna variacija teh konstant zanemarljiva v temperaturnem režimu, ki nas zanima. Ta predpostavka je v skladu s podrobnejšo izpeljavo v dodatku A.

Zadnji prispevek v enačbi (18) posnema sklopitveno interakcijo med molekulami TK in ND. Pozitivni celi števili n_1 in n_2 posnemata različne vrste sklopitve. Na primer, izbira $n_1 = n_2 = 1$ ustreza primeru, ko TK in ND medsebojno delujeta preko Lebwohl-Lasherjevega tipa interakcije [22]. Izbira $n_1 = n_2 = 2$ približno posnema mešanico feroelektričnih delcev in nematičnih molekul TK [23].

4.2.2 Vedenje suženj-gospodar

Nadalje uvajamo brezdimenzijske količine za sistem, ki ga opisuje enačba (6). Ureditveni parametri so normalizirani glede na njihovo vrednost pri čistem faznem prehodu, to je $s_i = S_i/S_i^{(0)}$, $S_i^{(0)} = b_i/(2c_i)$, in uvedemo znižane brezdimenzijske temperature τ_i z uporabo enačbe (6a). Brezdimenzijska oblika f , podana z enačbo (1), kjer so kondenzacijski izrazi izraženi z enačbo (2a), $\Omega = \phi_1 a_1 (T_1^{(0)} - T_1^*) S_1^{(0)^2} / (\phi_2 a_2 (T_2^{(0)} - T_2^*) S_2^{(0)^2})$, $\gamma = D\phi_1\phi_2 S_1^{(0)n_1} S_2^{(0)n_2}$.

Upoštevajte, da so takšni sistemi nagnjeni k faznemu ločevanju. Izpeljava v dodatku namreč kaže, da je $T_i^* \sim T_{i,0}^* (1 - \phi_j)$, kjer je $i \neq j$, $T_{i,0}^*$ pa je neodvisna od ϕ_j . Iz tega sledi, da kondenzacijski izrazi dajejo prispevek oblike

$$f_{FH} = \phi_1 \phi_2 \chi, \quad (19)$$

kjer $\chi = a_1 S_1^2 T_1^* + a_2 S_2^2 T_2^* > 0$ igra vlogo sklopitve Flory-Huggins [9]. Če je ta konstanta pozitivna in dovolj velika, lahko sproži fazno ločevanje. Vendar ima sklopitveni člen enako funkcionalno strukturo in je negativen (tj. $f^{(int)} \propto -\phi_1 \phi_2$). Zato sklopitev teži k zatiranju faznega ločevanja. Prikazano vedenje suženj-gospodar je možno realizirati, če se izognemo faznemu ločevanju. Posledično mora biti efektivna sklopitev Flory-Huggins pod svojo kritično vrednostjo.

5 Zaključek

Proučujemo vedenje suženj-gospodar v faznem vedenju dvokomponentnih sistemov. Ta mehanizem je omogočen s sklopitvami med amplitudami ali ureditvenimi parametri, ki opisujejo (kvazi) ureditev dolgega dosega. Fazna ureditev po ustreznem faznem prehodu za zlom simetrije je lahko bodisi orientacijska ali translacijska. Poleg tega je treba fazne prehode obeh komponent poganjati z istim krmilnim parametrom (npr. temperaturo).

Če povzamemo bistvene lastnosti mehanizma suženj-gospodar, se omejimo na simetrično strukturo sklopitvenega izraza $f^{(int)} = -\gamma S_1^n S_2^n$, kjer je n bodisi 1 ali 2, in predpostavimo, da

je ureditveni parameter kondenzat (s_1 : *gospodar*, s_2 : *suženj*) ob zniževanju brezdimenzionalne temperature. Vendar se simetrija sklopitvenega člena ne odraža na faznem obnašanju sistema. Namreč, pri dovolj šibki sklopitvi $\gamma < \gamma_c$ (pri kateri se komponente kondenzirajo pri različnih vrednostih kontrolnega parametra, to je temperature v naših ilustrirajočih primerih) opazimo naslednjo asimetrijo. Pri visokih temperaturah, kjer sta oba ureditvena parametra staljena, je sklopitveni člen nič. Posledično *gospodar* kondenzira pri $T = T_1^{(0)}$, ker bi bil izoliran. Pri temperaturah tik pod $T_1^{(0)}$ *suženj* čuti končno zunanje polje podobno interakciji $f^{(int)} = -\gamma^{(efe)} s_2^n$, ki spodbuja težnjo po ureditvi *sužnja*. V primeru $n = 1$ ta interakcija renormalizira temperaturo faznega prehoda $T_2^{(c)}$, kjer je $T_2^{(c)} > T_2^{(0)}$. S povečanjem γ temperatura faznega prehoda *sužnja* monotono narašča. V primeru $n = 1$ dobimo kvalitativno drugačen odziv, ki je odvisen od značaja faznega obnašanja *sužnja* pri $\gamma = 0$. Toda v obeh primerih opazimo prehodne predtranzicijske pojave. Nadalje podajamo nekaj eksperimentalnih primerov (nCB TK, mešanice nematogenov), v katerih se je takšno vedenje že pokazalo [8, 22], vendar ni bilo pripisano mehanizmu *suženj-gospodar*.

Če povzamemo, pričakujemo kakovostno različne scenarije vedenja *suženj-gospodar*, odvisno od strukture sklopitvene interakcije med komponentami, ki bi lahko pokazale takšno vedenje. Podrobno razumevanje tega mehanizma bi lahko privedlo do več aplikacij, ki bi izkoriščale nastavljivo fazno vedenje, kjer bi lahko uveljavili kvantitativne in tudi kvalitativne spremembe. Naša študija daje tudi vpogled, kako oblikovati ustrezen sistem *suženj-gospodar*, da bi dosegli želeni nastavljiv odziv.

6 Dodatek: Binarna nematična mešanica

Naš cilj je pridobiti izraz proste energije v konvencionalni fenomenološki sliki tipa Landau, izhajajoč iz pristopa Maier-Saupe povprečnega polja na molekularni ravni, da bi dobili vpogled v strukturo Landauovih koeficientov.

Upoštevamo dvokomponentno mezogeno mešanico. Poleg tega sta obe komponenti podobni palici, zato ju lahko obravnavamo kot preprosto mezomorfno binarno nematično mešanico. Na podlagi tega molekularnega modela dobimo izraz za ustrezno prosto energijo mešanice tipa Landau v smislu ureditve dominantnih parametrov.

Koncentracija prve komponente je $\phi_1 = 1 - \phi$, druge pa $\phi_2 = \phi$. Nastavili smo, da so molekule cilindrično simetrične. Os simetrije molekul kaže vzdolž enote vektorja $\overline{m}_i(\Omega)$, kjer je polni kot Ω definiran z dvema Eulerjevima kotoma ϑ in φ . Stanje i -te komponente je definirano z orientacijsko porazdelitveno funkcijo $p_i(\Omega)$ in neskončnim nizom ureditvenih parametrov

$$\overline{P_{2n}^{(i)}} = \int P_{2n}(\cos\vartheta) p_i(\Omega) d\Omega, \quad (A1)$$

kjer je $n > 0$ celo število in P_{2n} Legendrovi polinomi. Med temi ureditvenimi parametri imata dominantno vlogo $S_1 = \overline{P_2^{(1)}}$ in $S_2 = \overline{P_2^{(2)}}$, preostale ureditvene parametre v nadaljevanju zanemarimo. V izotropni fazi so vse molekularne orientacije enakovredne; zato je $p_i(\Omega) = \frac{1}{4\pi}$, $S_1 = S_2 = 0$.

V urejenem stanju so nekatere orientacije prednostne. Ustrezna sprememba entropije je v najnižjem približku, ki ga daje [14,31]

$$\Delta\Sigma = -k_B \left(\frac{\phi_1}{v_1} \int p_1(\Omega) \ln(4\pi p_1(\Omega)) d\Omega + \frac{\phi_2}{v_2} \int p_2(\Omega) \ln(4\pi p_2(\Omega)) d\Omega \right), \quad (\text{A2})$$

kjer v_i pomeni volumen molekule i -te komponente.

Anizotropni prispevki k notranji gostoti energije Δw so opisani z

$$\Delta w = -\frac{1}{2} (\varepsilon_{11} \phi_1^2 S_1^2 + 2\varepsilon_{12} \phi_1 \phi_2 S_1 S_2 + \varepsilon_{22} \phi_2^2 S_2^2), \quad (\text{A3})$$

kjer je $\varepsilon_{ii} > 0$ medmolekularna orientacijska interakcija sosednjih molekul tipa i , medtem ko je $\varepsilon_{ij} > 0$ orientacijska interakcija med različnimi tipi sosednjih molekul. Zato predpostavljamo, da se molekule nagibajo k vzporedni poravnavi.

V tem približku povprečnega polja lahko razliko proste energije $\Delta f = w - T\Delta\Sigma$ med urejeno in neurejeno fazo zapišemo kot

$$\Delta f = k_B T \left(\frac{\phi_1}{v_1} \int p_1(\Omega) \ln(4\pi p_1(\Omega)) d\Omega + \frac{\phi_2}{v_2} \int p_2(\Omega) \ln(4\pi p_2(\Omega)) d\Omega \right) - \frac{1}{2} (\varepsilon_{11} \phi_1^2 S_1^2 + 2\varepsilon_{12} \phi_1 \phi_2 S_1 S_2 + \varepsilon_{22} \phi_2^2 S_2^2). \quad (\text{A4})$$

Razvijemo p_i v vrsto po Legendrovih polinomih:

$$p_i = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\overline{P_{2n}^{(i)}}}{4n+1} P_{2n}(\cos\vartheta) \approx \frac{1}{4\pi} \left(1 + \frac{S_i P_{2n}(\cos\vartheta)}{5} \right) \quad (\text{A5})$$

in razširimo Δf po S_1 in S_2 . Sledi

$$\Delta f \approx \frac{\phi_1}{v_1} \left(\frac{k_B}{250} (T - \phi_1 T_*^{(1)}) S_1^2 - \frac{k_B T}{13\,125} S_1^3 + \frac{k_B T}{87\,500} S_1^4 \right) + \frac{\phi_2}{v_2} \left(\frac{k_B}{250} (T - \phi_2 T_*^{(2)}) S_2^2 - \frac{k_B T}{13\,125} S_2^3 + \frac{k_B T}{87\,500} S_2^4 \right) - \varepsilon_{12} \phi_1 \phi_2 S_1 S_2, \quad (\text{A6})$$

kjer je $T_*^{(i)} = \frac{125\varepsilon_{ii}}{k_B}$. S tem dobimo navaden Landau-de Gennesov izraz za gostoto proste energije f :

$$f \approx f_0 + \phi_1 \left(a_1 (T - (1 - \phi_2) T_*^{(1)}) S_1^2 - b_1 S_1^3 + c_1 S_1^4 \right) + \phi_2 \left(a_2 (T - (1 - \phi_1) T_*^{(2)}) S_2^2 - b_2 S_2^3 + c_2 S_2^4 \right) - D \phi_1 \phi_2 S_1 S_2 \quad (\text{A7})$$

kjer je f_0 gostota proste energije izotropne faze, a_i , b_i , c_i , D pa so pozitivne konstante materiala. Pri običajnem pristopu tipa Landau se domneva, da je temperaturna sprememba teh konstant zanemarljiva v temperaturnem režimu, ki nas zanima.

Literatura

- [1] Balazs, A. C., Emrick, T. in Russel, T. P. (2006). Nanoparticle polymer composites: where two small worlds meet. *Science*, *314*, 1107–1110.
- [2] Bellini, T., Buscaglia, M., Chiccoli, C., Mantegazza, F., Pasini, P. in Zannoni, C. (2002). Nematics with quenched disorder: how long will it take to heal? *Phys. Rev. Lett.*, *88*, 245506.
- [3] Bisoyi, H. K. in Kumar, S. (2011). Liquid-crystal nanoscience: an emerging avenue of soft self-assembly. *Chem. Soc. Rev.*, *40*, 306–319.
- [4] Chandrasekhar, S. (1992). *Liquid crystals*, second ed., Cambridge University Press.
- [5] Cleaver, D. J., Kralj, S., Sluckin, T. J. in Allen, M. P. (1996). The random anisotropy nematic spin model, in: G. P. Crawford, S. Žumer (Eds.), *Liquid Crystals in Complex Geometries Formed by Polymer and Porous Networks*, Taylor and Francis Group, pp. 467–481.
- [6] Cordoyiannis, G., Kralj, S., Nounesis, G., Žumer, S. in Kutnjak, Z. (2006). Soft-stiff regime crossover for an aerosil network dispersed in liquid-crystal. *Phys. Rev. E*, *73*, 031707.
- [7] Cordoyiannis, G., Zidanšek, A., Lahajnar, G., Kutnjak, Z., Amenitsch, H., Nounesis, G. in Kralj, S. (2009). Influence of confinement in controlled-pore glass on the layer spacing of smectic-A liquid crystals. *Phys. Rev. E*, *79*, 051703.
- [8] De Gennes, P. G. in Prost, J. (1993). *The Physics of Liquid Crystals*, second ed., Clarendon, Oxford.
- [9] Flory, P. J. (1953). *Principles of Polymer Chemistry*, first ed., Cornell University Press, Ithaca.
- [10] Hamley, I. W. (2003). Nanotechnology with soft materials. *Angew. Chem. Int. Ed.*, *42*, 1692–1712.
- [11] Hegmann, T., Qi, H. in Marx, V. M. (2007). Nanoparticles in liquid crystals: synthesis, self-assembly, defect formation and potential applications. *J. Inorg. Organomet. Polym.*, *17*, 483–508.
- [12] Hegmann, T., Qi, H. in Marx, V. M. (2007). Nanoparticles in liquid crystals: synthesis, self-assembly, defect formation and potential applications. *J. Inorg. Organ. Polym. Mat.*, *17*, 483–507.
- [13] Hogg, P. J. (2006). Composites in amor. *Science*, *314*, 1100–1101.
- [14] Humphries, R. L., James, P. G. in Luckhurst, G. R. (1972). Molecular field treatment of nematic liquid crystals. *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2: Molecular and Chemical Physics*, *68*, 1031–1044.
- [15] Jin, T. in Finotello, D. (2004). Controlling disorder in liquid crystal aerosil dispersions. *Phys. Rev. E*, *69*, 041704.
- [16] Karatairi, E., Rožič, B., Kutnjak, Z., Tzitzios, V., Nounesis, G., Cordoyiannis, G., Thoen, J., Glorieux, C. in Kralj, S. (2010). Nanoparticle-induced widening of the temperature range of liquid-crystalline blue phases. *Phys. Rev. E*, *81*, 041703.
- [17] Kikuchi, H., Yokota, M., Hisakado, Y., Yang, H. in Kajiyama, T. (2002). Polymer-stabilized liquid crystal blue phases. *Nature Mater.*, *1*, 64–68.
- [18] Kleman, M. in Lavrentovich, O. D. (2004). *Soft Matter Physics: An Introduction*, Springer, New York.
- [19] Kralj, S. in Popa-Nita, V. (2004). Random anisotropy nematic model: connection with experimental systems. *Eur. Phys. J. E*, *14*, 115–125.
- [20] Lagerwall, J. P. in Scalia, G. (2012). A new era for liquid crystal research: applications of liquid crystals in soft matter nano-bio and microtechnology. *Curr. Appl. Phys.*, *12*, 1387–1412.

- [21] Lavrentovich, O. D. (1998). Topological defects in dispersed words and worlds around liquid crystals, or liquid crystal drops. *Liq. Cryst.*, 24, 117–126.
- [22] Lebwohl P. A. in Lasher, G. (1972). Nematic-liquid-crystal order—A Monte Carlo calculation. *Phys. Rev. A*, 6, 426–429.
- [23] Li, F., Buchnev, O., Cheon, C. I., Glushchenko, A., Reshetnyak, V., Reznikov, Y., Sluckin, T. J. in West, J. L. (2006). Orientational coupling amplification in ferroelectric nematic colloids. *Phys. Rev. Lett.*, 97, 147801.
- [24] McMillan, W. L. (1971). Simple molecular model for the smectic a phase of liquid crystals. *Phys. Rev. A*, 4, 1238.
- [25] Muhořay, P. P. (2007). Orientationally ordered soft matter: The diverse world of liquid crystals. *Phys. Today* 60, 54.
- [26] Nelson, D. R. (2002). Toward a tetravalent chemistry of colloids. *Nano Lett.*, 2, 1125–1129.
- [27] Pires, D., Fleury, J. B. in Galerne, Y. (2007). Colloid particles in the interaction field of a disclination line in a nematic phase. *Phys. Rev. Lett.*, 98, 247801.
- [28] Poulin, P., Stark, H., Lubensky, T. C. and Wietz, D. A. (1997). Novel colloidal interactions in anisotropic fluids. *Science*, 275, 1770–1773.
- [29] Tiberio, G., Muccioli, L., Berardi, R. in Zannoni, C. (2009). Towards in silico liquid crystals. Realistic transition temperatures and physical properties for n-cyanobiphenyls via molecular dynamics simulations. *ChemPhysChem*, 10, 125–136.
- [30] Tkalec, U., Ravnik, M., Čopar, S., Žumer, S. in Muševič, I. (2011). Reconfigurable knots and links in chiral nematic colloids. *Science*, 333, 62–65.
- [31] Van der Schoot, P., Popa-Nita, V. in Kralj, S. (2008). Alignment of carbon nanotubes in nematic liquid crystals. *J. Phys. Chem. B*, 112, 4512–4518.
- [32] Zurek, W. H. (1985). Cosmological experiments in superfluid helium? *Nature*, 317, 505–508.

Pametni mobilni telefon kot merilnik koagulacije

Smartphone as a coagulation sensor

Vida Lang, Jan Senekovič, Špela Majcen, Andrej Šorgo

Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, Koroška cesta 160, 2000 Maribor, Slovenija

Povzetek

Merilniki v pametnem telefonu so koristno in učinkovito orodje za eksperimentiranje na področju naravoslovja. Preučili smo primer laboratorijske vaje na temo koagulacije beljakovin s pomočjo mobilnega telefona in merilnika za svetlobo. Laboratorijska vaja je primerna za izvedbo v osnovni in srednji šoli kot proučevanje vpliva različnih dejavnikov na koagulacijo beljakovin. Rezultati so pri večini proučevanih dejavnikov skladni s pričakovanimi rezultati, kljub temu pa dotična metoda ne bi bila primerna za izvajanje natančnejših laboratorijskih meritev in znanstvenega proučevanja koagulacije. S to vajo na preprost in razumljiv način učencem prikažemo koagulacijo beljakovin in jih ob tem urimo v laboratorijskem delu. V laboratorijsko vajo smo vključili uporabo prosto dostopne aplikacije Phyphox in materiala, ki so učencem na voljo tudi v domačem okolju, posebej v primerih zaprtja šol, kot je bilo v času epidemije Covid-19, pri čemer je bilo laboratorijsko delo zapostavljeno. Iz rezultatov vaje sklepamo, da so pametni telefoni z vgrajenimi merilniki primerni merilni pripomoček pri laboratorijskem delu, ki ga lahko v učnem procesu izvajamo tudi v domačem okolju oziroma pri poučevanju na daljavo.

Ključne besede: jajčne beljakovine, koagulacija, pametni telefon, aplikacija Phyphox, merilnik svetlobe.

Abstract

Sensors in a smartphone are a useful and effective tool for experimenting in science. We examined an example of a laboratory exercise on the topic of protein coagulation using a mobile phone and a light meter. Laboratory exercise is suitable for implementation in primary and secondary school as a study of the influence of various factors on protein coagulation. The results are in line with the expected results for most of the studied factors, however, the method in question would not be suitable for performing more accurate laboratory measurements and scientific study of coagulation. With this exercise, we show students the coagulation of proteins in a simple and understandable way, and at the same time we train them in laboratory work. The laboratory exercise included the use of the freely available Phyphox application and materials that are also available to students in the home environment, especially in cases of school closures, such as during the Covid-19 epidemic, where laboratory work was neglected. From the results of the exercise we conclude that smartphones with built-in meters are a suitable measuring aid in laboratory work, which can be performed in the learning process in the home environment or in distance learning.

Key words: egg protein, coagulation, smartphone, Phyphox application, light sensor.

1 UVOD

Laboratorijsko in eksperimentalno delo je nepogrešljivo pri pouku naravoslovnih predmetov, saj predstavlja vez med teoretično-simbolnim podajanjem učne vsebine ter snovno-materialno realnostjo. Pomen takšnega dela je podprt s številnimi študijami [7,17,29] v katerih je poudarjen pomen interaktivnosti in aktivno vključevanje učencev v vse faze laboratorijskega dela, od načrtovanja do končne izvedbe. Dodana vrednost laboratorijskega dela je v primerjavi z drugimi oblikami in metodami šolskega dela, njegova priljubljenost in motivacija učečim [30]. Učenci imajo radi motivacijske poskuse, predvsem takrat, ko so aktivno vključeni v sam proces [11]. Z inovativnimi in posodobljenimi pristopi učence spodbudimo k delu in jim vzbudimo zanimanje ter radovednost. S to metodo poučevanja lahko razvijajo različne kompetence, med katerimi je tudi razvoj digitalnih kompetenc. Digitalne kompetence so ključne za izobraževanje, delo in aktivno vključevanje posameznika v sodobno družbeno življenje [36]. Danes si izobraževanje le težko predstavljamo brez vključevanja digitalnih

tehnologij, čeprav so lahko mnenja o njihovi vlogi deljena [34,13]. Praktično laboratorijsko delo v naravoslovnih predmetih ni nikakršna izjema in v šolski praksi sobivajo raznolike forme laboratorijskega dela v razponu od tradicionalnih poskusov do računalniško podprtega laboratorijskega dela v svoji virtualni in realni izvedbi [29]. Medtem ko se vsebine laboratorijskih del, namenjenih šolskemu delu, le malo spreminjajo, pa ni tako z metodami opazovanja in meritev spremenljivk. V šolski praksi tako sobivajo tradicionalni instrumenti, računalniško podprti merilni sistemi ter v zadnjem času v pametne mobilne telefone vgrajeni merilniki, kjer pa prevladuje vključevanje v pouk fizike, medtem ko so druge discipline manj zastopane [6].

Pri delu s pametnimi mobilnimi telefoni za namene šolskega dela učeči spoznajo, da ima naprava veliko več funkcij, kot samo telefoniranje, pisanje sporočil, branje novic ter brskanje po socialnih omrežjih. Pametni telefoni imajo vgrajene merilnike, ki primarno služijo za osnovno delovanje telefona, če pa jih s pomočjo prosto dostopnih aplikacij aktiviramo, jih lahko uporabimo za meritve pri raznih eksperimentih, tako za učenje kot za praktično izvenšolsko uporabo. Razpoložljivost koristnih brezplačnih aplikacij je vse večja in zdi se, da so postale privlačno orodje za izvajanje eksperimentalnih in znanstvenih meritev. Rezultati, pridobljeni z meritvami s pomočjo merilnikov na pametnih telefonih, so ustrezni in primerljivi z rezultati, pridobljenimi na klasičen analogen način. Poleg tega so nekatere uporabne aplikacije poceni ali brezplačne, zmogljive, pametne mobilne naprave pa so fizično manjše kot tradicionalne laboratorijske aparature [15].

Z uporabo mobilne tehnologije učencem damo možnost razvoja podobnih kompetenc kot pri izvedbi vaj na tradicionalen način. Digitalne kompetence se razvijajo bolje, nekatere, kot so zbiranje podatkov, analiza in risanje grafov, pa slabše. Aplikacije na pametnih mobilnih telefonih učencem omogočajo, da razvijejo sposobnost analiziranja in interpretiranja zbranih informacij s pomočjo digitalnega medija. Učenci se učijo, kako uporabiti pametni mobilni telefon tudi za šolsko in praktično eksperimentalno delo. Prav tako učenci na podlagi lastnih izkušenj pridejo do znanja, ki ga je mogoče koristno uporabiti v izvenšolskih situacijah.

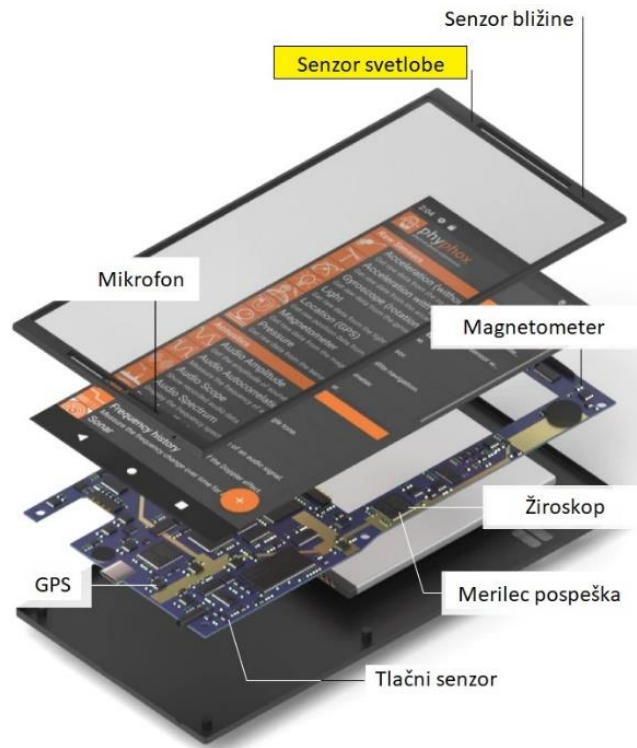
Prins in sodelavci [22] ugotavljajo, da je »Izziv izobraževanja naravoslovnih predmetov vključitev dejavnosti, vsebin in orodij na smiseln način. En od načinov za doseg tega cilja je transformacija avtentičnih znanstvenih praks v kontekst poučevanja.« Model za takšno vključevanje pa so lahko laboratorijske vaje, pri katerih učenci razrešujejo avtentičen problem z uporabo priročnih sredstev, kar pametni mobilni telefoni zaradi obče uveljavljenosti nedvomno so.

1.1 MERILNIK SVETLOBE V MOBILNEM TELEFONU

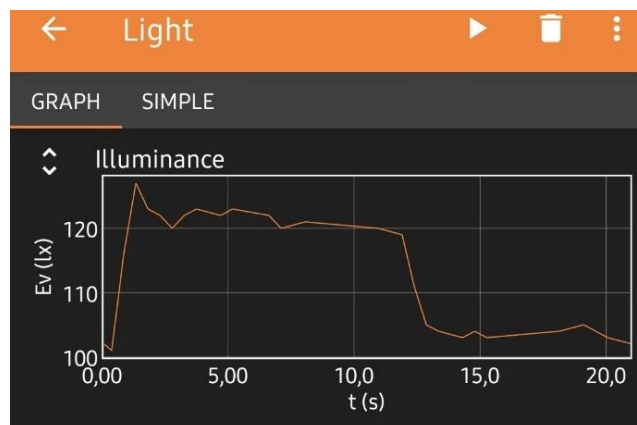
Pametni telefoni so z vsemi svojimi funkcijami in merilniki (slika 1) lahko odlično eksperimentalno in didaktično orodje [21]. Merilnik svetlobe je vklopljen na pametnem telefonu in se uporablja kot nadzor osvetlitve na LCD-prikazovalniku zaslona in lahko samodejno prilagodi svetlost zaslona.

Svetlost je fizikalna in fotometrična količina, s katero merimo skupni svetlobni tok, padajoč na površino ali ga oddaja enota površine v prostorski kot oziroma svetilnost na enoto površine svetlobe, ki potuje v dani smeri [9]. Svetlost merimo v enotah, imenovanih luks – to je enota moči oddajanja svetlobe, kjer izračunamo pretok svetlobe na enoto površine. Svetlost opisuje, kako močan vir svetlobe prihaja v človeško oko.

Merilnik svetlobe na pametnem telefonu lahko aktiviramo in preizkusimo s pomočjo različnih aplikacij, med katerimi je tudi aplikacija Phyphox. Zapisano aplikacijo so razvili v RWTH (Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule) in je na voljo v sistemih Android, Google Play [4]. Aplikacijo lahko brezplačno prenesemo. Poleg vseh drugih funkcij aplikacije Phyphox lahko merimo tudi intenzivnost svetlobe. V realnem času nam aplikacija izriše graf, na katerem prikaže razmerje med časom in jakostjo svetlobe (slika 2). Phyphox ne podpira senzorja svetlobe v napravah iOS. Če potrebujete svetlobni senzor, morate za preizkus uporabiti naprave Android ali katero drugo aplikacijo za merjenje svetlobe.



Slika 1: Merilniki v mobilnem telefonu, ki jih lahko uporabimo za eksperimentalno delo (Phyphox) [37].



Slika 2: Primer prikaza rezultatov merjenja svetlobe v realnem času (zajem zaslona na pametnem telefonu, avtorska slika).

Izbrana aplikacija Phyphox ima nekaj prednosti pri predstavitvi konceptov, saj lahko izmerjene podatke neposredno in brezžično izvozimo v Excel in jih analiziramo. Prav tako lahko podatke shranimo ali jih delimo s katero drugo aplikacijo v telefonu [4].

1.2 KOAGULACIJA

Beljakovine so nepogrešljive biomolekule, prisotne v vseh živih organizmih. Njihova raznolikost v strukturi in delovanju izhaja iz raznolikosti njihovih monomernih enot imenovanih aminokislina. Sodelujejo v skoraj vseh bioloških procesih, ki so pomembni za življenje organizmov [16]. Lastnosti beljakovin, vključno s koagulacijo, so že zelo dobro raziskane [24]. Jajčni beljak vsebuje beljakovine, ki niso odporne proti segrevanju. Kolikšno temperaturo bodo molekule beljakovine zdržale, je odvisno od njihove zgradbe. Dovajanje energije pri segrevanju povzroči prekinitev vezi v beljakovinskih molekulah – pojav imenujemo koagulacija. Koagulacija se lahko zgodi tudi drugače, na primer s kislinami in bazami, s solmi težkih kovin, drugimi beljakovinami (npr. beljakovine v kačjem strupu, sirilo) in z vrsto organskih spojin (alkoholi, alkaloidi). Nepovrnljiva koagulacija je tudi zakrknjenje jajčnega beljaka pri segrevanju v ponvi. Če do koagulacije pride v raztopini, se beljakovina izloči (obori) iz suspenzije.

2 NAMEN IN CILJI

Primer biološkega laboratorijskega dela, povezanega s prilagojenim poučevanjem in vključevanjem sodobnih načinov dela, je vpliv različnih snovi na koagulacijo beljakovin. V laboratorijsko vajo lahko tako poleg pridobivanja znanj in spretnosti vključimo še motivacijo, čustva in zabavo povezano z neformalnimi izkušnjami (npr. priprava jajčnih jedi) ter uporabo pametnih mobilnih telefonov. Na ta način lahko učenci poleg pridobivanja znanja ter ročnih spretnosti razvijajo tudi informacijske in računalniške spretnosti ter krepijo digitalne kompetence [32].

Cilj in namen raziskave je predstaviti uporabo pametnih telefonov kot orodja za merjenje in nadzor meritvenih podatkov. Kot model za predstavitev je bilo izbrano laboratorijsko delo o koagulaciji beljakovin v jajčnem beljaku. Laboratorijsko delo je bilo v prvotni obliki razvito za izvedbo v računalniško podprtem laboratorijskem delu s stacionarnimi računalniki ter analogno-digitalnim pretvornikom e-ProLab [31]. V tej prilagoditvi laboratorijske vaje o merjenju hitrosti koagulacije jajčnega beljaka z mobilnim telefonom je bil uporabljen v telefon vgrajen merilnik svetlobe, aktiviran z ustrežno aplikacijo. Laboratorijska vaja je bila utemeljena na prikazu delovanja različnih koagulantov (temperatura, kislina in alkohol) in razlike med prosojnostjo suspenzije jajčnega beljaka pred koagulacijo in po njej. Namesto klorovodikove kisline, ki je v prebavilih, smo uporabili ocatno kislino, ki jo imamo vsi doma in tako prikažemo simulacijo želodčnega soka. Rezultate dobljenih meritev bomo razložili na življenjskih primerih, npr. vpliv temperature na beljakovine bomo smiselno povezali z dogajanjem v človeškem telesu pri sončenju, vpliv kisline bomo povezali z dogajanjem v želodcu in vpliv alkoholov na koagulacijo bomo povezali z dogajanjem v celičnih membranah.

2.1 Raziskovalna vprašanja

Na podlagi teoretičnega znanja o lastnostih beljakovin smo si postavili raziskovalna vprašanja.

- 1 - Kako s pomočjo pametnega mobilnega telefona izmeriti hitrost koagulacije beljakovin?
- 2 - Kako različna temperatura vpliva na koagulacijo beljakovin?
- 3 - Kako različne koncentracije očetne kisline vplivajo na koagulacijo beljakovin?
- 4 - Kako različna koncentracija alkoholov vpliva na koagulacijo beljakovin?

2.2 Hipoteze

H₁: Hitrost koagulacije beljakovin je mogoče izmeriti z ustrezno aplikacijo na pametnem mobilnem telefonu.

H₂: Beljakovine v jajčnem beljaku učinkoviteje koagulirajo ob dodatku vode, ki ima nad 50 °C.

H₃: Beljakovine v jajčnem beljaku učinkoviteje koagulirajo ob dodatku bolj koncentrirane očetne kisline.

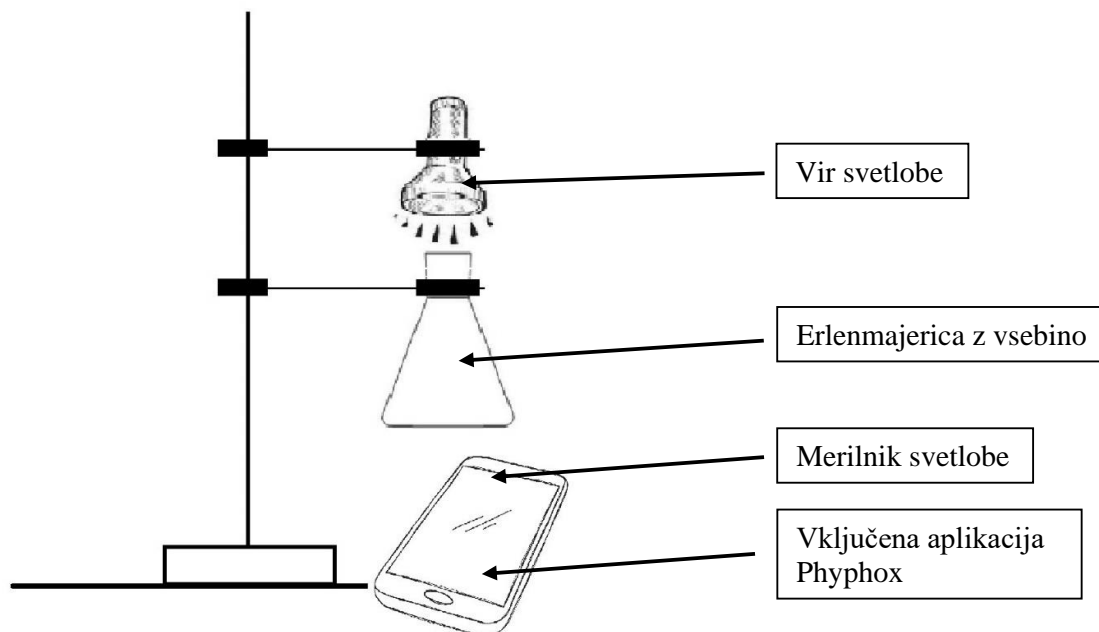
H₄: Beljakovine v jajčnem beljaku učinkoviteje koagulirajo ob dodatku bolj koncentriranega alkohola etanola.

3 MATERIALI IN METODE

Za eksperimentalni del smo potrebovali inventar in kemikalije, ki jih najdemo tudi doma, zato je eksperimentalni del izvedljiv v domačem okolju. Material je naštet v tabeli 1. Suspenzijo jajčnega beljaka v volumenskem razmerju 1 : 1 smo naredili iz kokošjih jajc, ki smo jih imeli shranjena pri temperaturi 4 °C. Jajca smo lomili ročno, beljake pa ločili od rumenjakov. Beljake smo nežno ročno zmešali s stekleno palčko in nato naredili suspenzijo jajčnega beljaka in vode v volumenskem razmerju 1 : 1.

Tabela 1: Inventar in kemikalije za izvedbo praktične vaje.

Inventar	Kemikalije
<ul style="list-style-type: none"> • stojalo, • univerzalna prižema, • dvojna mufa, • erlenmajerica, • grelnik, • termometer, • pametni mobilni telefon (aplikacija Phyphox), • svetilka (ali svetilka na mobilnem telefonu). 	<ul style="list-style-type: none"> • suspenzija jajčnega beljaka z vodo (1:1), • voda različnih temperatur (25 °C, 65 °C, 80 °C, 100 °C), • očetna kislina, CH₃COOH(aq) različnih koncentracij (9 %, 25 %, 50 %, 99 %), • etanol C₂H₅OH(aq) različnih koncentracij (70 %, 96 %)



Slika 3: Skica sestavljene aparature. Vir: lasten.

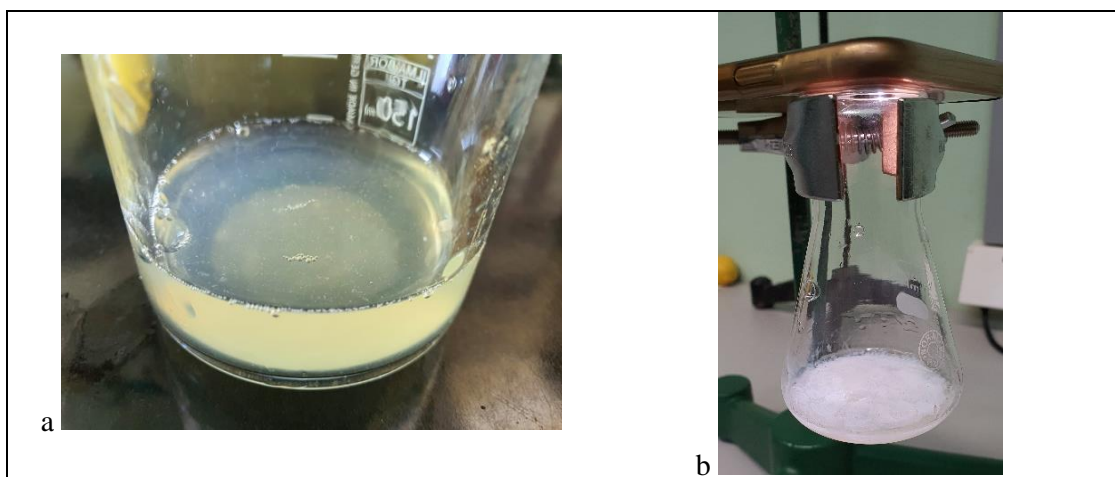
Sestavimo aparaturo (slika 3), tako da prižemo pritrdimo na stojalo z dvojno mufo, v katero vpnemo erlenmajerico. Nad erlenmajerico pritrdimo še eno prižemo, na katero naslonimo svetilko ali mobilni telefon s svetilko. Pod erlenmajerico postavimo pametni telefon, v katerem zaženemo aplikacijo Phyphox ter funkcijo »Light sensor« za merjenje osvetljenosti. Če eksperiment izvajamo v domačem okolju, sestavimo podobno aparaturo iz pripomočkov, ki jih najdemo doma. Pozorni moramo biti, da je telefon med merjenjem vedno na istem delovnem mestu.

Pripravimo raztopino jajčnega beljaka v volumenskem razmerju 1 : 1. Vodo v čaši postavimo na grelnik ter sproti preverjamo temperaturo vode, ki jo bomo potrebovali pri poskusu.

- Na slepem vzorcu v erlenmajerici, damo 4 mL suspenzije jajčnega beljaka. S svetilko posvetimo skozi erlenmajerico ter z aplikacijo začnemo meriti prepustnost svetlobe skozi vzorec.
- Poskus nadaljujemo z dodajanjem ostalih kemikalij, tako da najprej izmerimo prepustnost 4 mL suspenzije jajčnega beljaka, aplikacijo ustavimo, dodamo 5 mL ene kemikalije ter nadaljujemo z merjenjem.
- Podatke izvozimo v Excel in jih analiziramo.
- Pozorni smo, da pri merjenju stojimo na istem mestu in ne delamo nepotrebne sence.
- Meritve z vsakim vzorcem ponovimo trikrat.

4 REZULTATI Z DISKUSIJO

Tekom eksperimentalnega dela smo preverili spremembe v osvetljenosti raztopin beljaka pred koagulacijo in po njej. Koagulacijo smo izvedli pri različnih temperaturah vode in z različnimi kemikalijami: očetna kislina različnih koncentracij, etanol različnih koncentracij. Pri vseh ponovitvah smo zaradi primerljivosti rezultatov dodali enako količino sredstva za koagulacijo. Rezultat koagulacije jajčnega beljaka je vizualna sprememba (slika 4 a in b), ki pa je posledica preoblikovanja notranjega sistema in koagulacije beljakovin jajčnega beljaka. Merilnik svetlobe ob koagulaciji beljakovin zazna manjšo prosojnost skozi suspenzijo jajčnega beljaka, prav tako pa zazna hitrost koagulacije ob dodatku določene kemikalije oziroma sredstva, ki sproži koagulacijo.



Slika 4: Rezultat koagulacije je zmanjšana prosojnost suspenzije beljaka. (a - suspenzija beljaka pred koagulacijo in b - suspenzija beljaka po koagulaciji). Vir: lasten.

Iz pridobljenih podatkov izračunamo, za koliko se je spremenila oziroma zmanjšala prosojnost suspenzije po dodatku različne spojine, ki vpliva na koagulacijo beljakovin. V tabeli 2 so prikazani rezultati razlike med končno in začetno osvetljenostjo suspenzije. V tabeli 3 so podatki razvrščeni od najmanjše do največje razlike med končnim in začetnim stanjem osvetljenosti suspenzije. Iz podatkov je razvidno, da so najšibkejši koagulant jajčnega beljaka voda pri 25 °C, kis s koncentracijo 9 % očetne kisline. Po dodatku naštetih spojin je prišlo do najmanjših razlik v svetlobni prepustnosti suspenzije, to je do največ 30 luks. Prav tako je nastalo zelo malo koagulantov in suspenzija je ostala v skoraj prvotni obliki. To je bilo pričakovano, ker pri temperaturi 25 °C ne pride do prekinitve vezi v molekulah beljakovin, tudi šibkejšje vezi se začnejo prekinjati pri temperaturi okrog 50 °C.

Največja sprememba prepustnosti svetlobe skozi suspenzijo se je zgodila po dodatku 99 % očetne kisline, kjer se je osvetljenost znižala za 124 luks. Po dodatku 50 % očetne kisline se je osvetljenost znižala za 92 luks. Veliko spremembo v prepustnosti svetlobe smo izmerili tudi po dodatku vode (80 °C in 100 °C) in 96 % etanola. Večina beljakovin je občutljiva za visoko temperaturo. Visoka temperatura je povzročila zmanjšanje prepustnosti svetlobe skozi suspenzijo beljaka, ki je ostala v tekočem stanju, vendar je bil beljak iz slamnato obarvane tekočine spremenjen v poltrden bel material, ki je spominjal na želejasto skuto (slika 4 b). Po dodatku vode s temperaturo nad 80 °C je beljak koaguliral in prosojnost suspenzije se je znižala za 73 luks. Vizualne spremembe so posledica preoblikovanja notranjega sistema in koagulacije beljakovin jajčnega beljaka.

Tabela 2: Sprememba v osvetljenosti suspenzije jajčnega beljaka po dodatku različnih spojin.

Dodatek k suspenziji jajčnega beljaka		$\Delta (I_{x_2} - I_{x_1})$
voda H ₂ O	25° C	- 9 lx
	65° C	- 48 lx
	80° C	- 73 lx
	100° C	- 65 lx
očetna kislina CH ₃ COOH(aq)	9 %	- 20 lx
	25 %	- 32 lx
	50 %	- 92 lx
	99 %	- 124 lx
etanol C ₂ H ₅ OH(aq)	70 %	- 35 lx
	96 %	- 54 lx

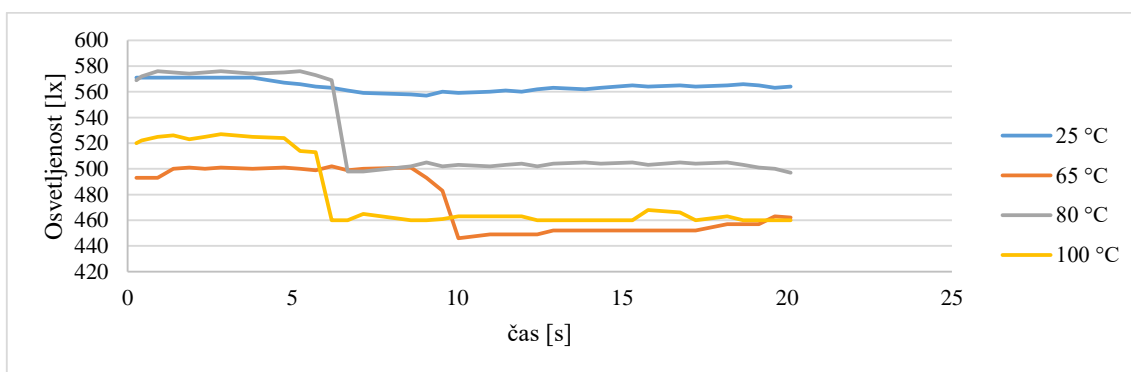
Opomba: I_{x_2} – povprečna vrednost osvetljenosti po koagulaciji, I_{x_1} – povprečna vrednost osvetljenosti suspenzije jajčnega beljaka pred koagulacijo; $\Delta (I_{x_2} - I_{x_1})$ – razlika med končno in začetno osvetljenostjo suspenzije.

Tabela 3: Spremembe v osvetljenosti razvrščene od najmanjše do največje.

Dodatek k suspenziji jajčnega beljaka		$\Delta (I_{x_2} - I_{x_1})$
voda	25° C	- 9 lx
očetna kislina	kis, 9 %	- 20 lx
očetna kislina	25 %	- 32 lx
etanol	70 %	- 35 lx
voda	65° C	- 48 lx
etanol	96 %	- 54 lx
voda	100° C	- 65 lx
voda	80° C	- 73 lx
očetna kislina	50 %	- 92 lx
očetna kislina	99 %	- 124 lx

4.1 VPLIV TEMPERATURE NA BELJAKOVINE

Slika 5 prikazuje eno od treh izvedenih meritev. Pri meritvah prepustnosti svetlobe skozi beljak za vodo so bili rezultati pričakovani. Nekoliko večja sprememba osvetljenosti je prikazana pri 65 °C, kjer se je prosojnost znižala za 48 lx, in najvišja pri 80 °C kjer se je prosojnost znižala za 73 lx. To je pričakovano zato, ker pri 65 °C najverjetneje ne pride do prekinitve močnejših sil v molekulah proteinov, medtem ko se pri 80 °C prekinejo tudi močnejše vezi. Pri dodatku vode 100 °C smo pričakovali še nekoliko večjo spremembo prepustnosti svetlobe, vendar je bila ta nekoliko nižja (65 lx), a primerljiva s spremembo osvetljenosti, izmerjeno po dodatku vode z 80 °C. Vrednosti sta primerljivi zato, ker je že 80 °C dovolj visoka temperatura, da pride do prekinitve večine močnejših vezi v molekulah beljakovin. Nekoliko nižja vrednost pri dodatku vode s 100 °C bi bila lahko posledice tega, da so se delci koaguliranega beljaka razporedili drugače po čaši in zato v merilnem območju v čaši ni prišlo do tolikšne spremembe osvetljenosti. Posledica nekoliko nižje vrednosti bi pa lahko bila tudi uporaba Pasteurjeve pipete za dodajanje sredstev za koagulacijo, ki ne omogoča popolnoma natančnih meritev in je morda prišlo do odstopanja pri dodatku vode.



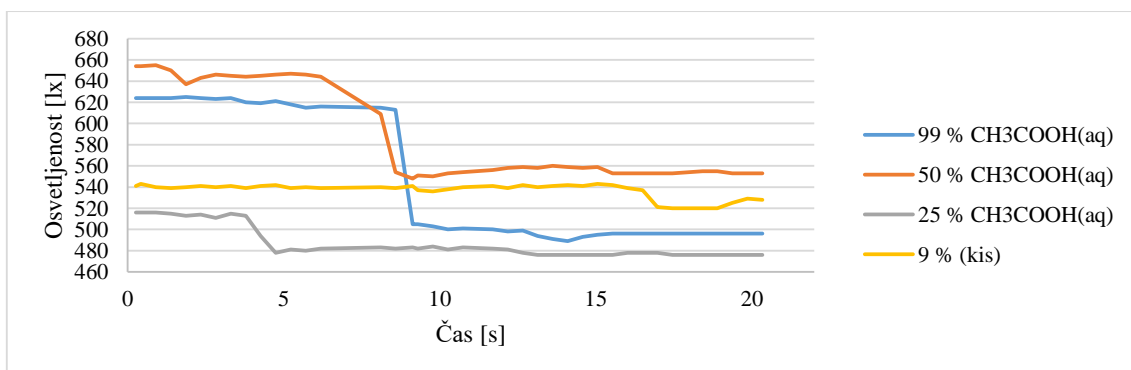
Slika 5: Vpliv različne temperature vode na osvetljenost suspenzije jajčnega beljaka.

4.1.1 Kaj se zgodi z beljakovinami v človeškem telesu pri pretiranem sončenju?

Kolikšno temperaturo bodo molekule beljakovine zdržale, je odvisno od njihove zgradbe. Dovajanje energije pri segrevanju povzroči prekinitev vezi v beljakovinskih molekulah [8]. Šibke vezi razpadejo že pri temperaturi do 50 °C, močnejše pa pri daljšem segrevanju nad 50 °C. Pretirano sončenje poškoduje beljakovine v koži, zato se koža začne hitreje starati. Številne raziskave pritrjujejo, da je pretirano izpostavljanje sončnim žarkom nevarno početje, ki lahko privede do sončnih opeklin in do nemalighnih ter malignih sprememb na koži [25].

4.2 VPLIV OCETNE KISLINE NA BELJAKOVINE

Preverjali smo tudi vpliv različnih koncentracij kisline na spremembo osvetljenosti raztopine zaradi koagulacije beljaka. V naših prebavilih vlogo koagulantna opravlja klorovodikova kislina. A za prikaz simulacije dogajanja koagulacije uporabimo očetno kislino ali po domače kis, ki je vsem dostopen in ga najdemo tudi v domačem okolju. Slika 6 prikazuje eno od treh izvedenih meritev. Rezultati so pričakovani, saj koagulacijo beljakovin povzročajo močne kisline in višja, kot je bila koncentracija raztopine očetne kisline v vodni raztopini, večja je bila sprememba osvetljenosti. Najmanjšo spremembo osvetljenosti (20 lx) smo zaznali po dodatku 9 % vodne raztopine očetne kisline in najvišjo (124 lx) po dodatku 99 % vodne raztopine očetne kisline. Osvetljenost se v primerjavi z dodatkom vode pri 80 °C bolj spremeni po dodatku 50 % in 99 % vodne raztopine očetne kisline – iz tega lahko sklepamo, da je koagulacija po dodatku kisline višje koncentracije aktivnejša kot po dodatku vroče vode. Medtem ko je sprememba osvetljenosti po dodatku 9 % (20 lx) in 25 % (32 lx) vodne raztopine očetne kisline nižja tudi kot po dodatku vode pri 65 °C (48 lx) – iz tega lahko sklepamo, da očetna kislina nižjih koncentracij prekine le najšibkejše vezi v zgradbi beljakovin jajčnega beljaka.



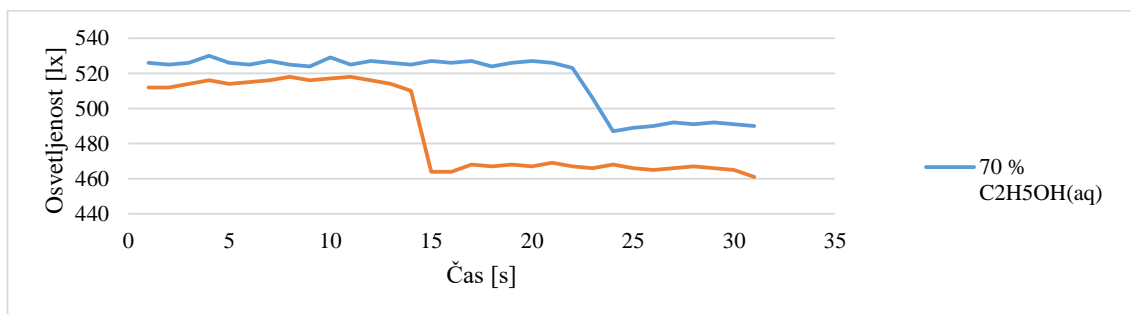
Slika 6: Vpliv koncentracije očetne kisline na osvetljenost suspenzije jajčnega beljaka.

4.2.1 Delovanje kislin v človeškem telesu

V našem telesu najdemo kisline predvsem v želodcu, tu imamo razredčeno klorovodikovo kislino (HCl). Ena od pomembnih funkcij HCl v našem telesu je razgradnja beljakovin za sintezo tkiv in mišic. Prav tako je pomembna funkcija HCl, da pomaga pri aktivaciji encimov, hormonov in živčnih prenašalcev. Želodčna kislina je prebavni sok, ki pomaga pri razgradnji večjih kosov hrane v manjše koščke. Če v našem telesu ni dovolj želodčne kisline, proces prebave ne poteka normalno, kar privede do pekočega občutka, imenovanega zgaga [10]. Zanimivo je dejstvo [10], da pomanjkanje želodčne kisline in slabo prebavo velikokrat pripisujejo preveliki količini želodčne kisline, kar pa ne drži. Če proces prebave ne poteka normalno, delno prebavljeni ogljikovi hidrati in beljakovine začnejo vreti in povzročajo neprijeten in pekoč občutek v požiralniku, zato se nam zdi, da je želodčne kisline preveč.

4.3 VPLIV ALKOHOLOV NA BELJAKOVINE

Prav tako smo dobili pričakovane spremembe prepustnosti svetlobe skozi suspenzijo jajčnega beljaka po dodatku etanola različnih koncentracij. Slika 7 prikazuje eno od treh izvedenih meritev. Po dodatku 70 % etanola je prišlo do manjše spremembe osvetljenosti (35 lx), medtem ko je po dodatku 96 % etanola prišlo do višje spremembe osvetljenosti (54 lx). V primerjavi z dodatkom oetne kisline etanol pri precej višjih koncentracijah povzroči manjšo spremembo prepustnosti svetlobe skozi suspenzijo jajčnega beljaka kot dodatek oetne kisline primerljive koncentracije.



Slika 7: Vpliv koncentracije etanola na osvetljenost suspenzije jajčnega beljaka.

4.3.1 Vpliv alkoholov na celične membrane v našem telesu

Celične membrane so sestavljene iz lipidnega dvosloja in beljakovin. Membrane opravljajo pomembno funkcijo uravnavanja pretoka snovi v celico in iz nje. V primeru membranskih poškodb se celice poškodujejo in postanejo nefunkcionalne. Molekula alkohola etanola je majhna, polarna in vodotopna, zato z lahkoto prehaja skozi celično membrano in dokazano negativno vpliva na celice, saj spremeni njihovo fizikalno in kemično strukturo. Etanol je topen v celični membrani, zato rahlja vezi med lipidi, to pa vodi do utekočinjanja membran in do spremenjenega delovanja. Raziskovalci so ugotovili, da alkoholi negativno vplivajo na sintezo beljakovin in pomembnih hranil [20, 28] kar preprečuje rast mišic in tkiv, nepravilno delovanje hormonov [12, 23, 35, 1, 26] in povzroča oslabelost imunskega sistema [19].

Rezultati laboratorijske vaje so glede na pregledano literaturo pričakovani in iz tega sklepamo, da je eksperiment primeren za izvedbo v sklopu pouka (delo v šoli ali pouk od doma). Metoda pa ni dovolj natančna za znanstveno delo zaradi prevelikega vpliva na rezultat v povezavi z osvetljenostjo prostora, senc v prostoru, natančnosti doziranja sredstev za koagulacijo in lege

merilnika in svetila (ne zaznata vseh sprememb v celotni čaši). Kot alternativo predlagamo, da se pri nadaljnjih raziskavah meritev prosojnosti skozi tekočino uporabi magnetno mešalo.

5 ZAKLJUČEK

Pametni telefon kot orodje za laboratorijsko vajo, opremljen z ustrežno aplikacijo za merjenje in nadzor podatkov, omogoča popolnoma novo in sodobno dimenzijo izobraževanja in poučevanja. Z uporabo mobilnih telefonov in potrebno dodatno opremo ter ustreznimi aplikacijami lahko ustvarimo prenovljene laboratorijske vaje, ki so primerljive z vajami, izvedenimi na tradicionalen način. Ker delo ni vezano le na šolski laboratorij, lahko učenci izvedejo vajo samostojno doma. To je lahko spodbuda za samostojno proučevanje šolskih praks v avtentičnem okolju ter iskanje alternativ, omogoča nadomestitev neopravljenega dela v šoli, in ne nazadnje izpad laboratorijskih praktičnih del v izrednih situacijah, kot je bilo zaprtje šol ob pandemiji Covid-19. Menimo, da lahko učenci zaradi samostojno opravljenega dela pridobijo boljše predstavo o eksperimentalnih rezultatih, ki jih lahko prenesejo v druge kontekste ali jih povežejo s fenomeni izvenšolskega okolja in pridobljenih življenjskih izkušenj. Z laboratorijskimi vajami, pri katerih uporabljamo pametne mobilne telefone, jih razvijamo drugače kot pri vajah, izvedenih na tradicionalen način. Aplikacije, ki jih nudijo pametni mobilni telefoni, učečim omogočajo, da razvijejo sposobnost zbiranja informacij s pomočjo digitalnega medija, sposobnost analize in organiziranja informacij, interpretacije podatkov, dobljenih v tabelarni in grafični obliki.

Po pregledu različnih raziskav smo ugotovili, da je lahko pametni telefon odličen merilni instrument pri različnih eksperimentih, zlasti pri fiziki [2, 3, 5, 27, 18]. Ugotovljeno je bilo, da poskusi, ki vključujejo uporabo pametnih telefonov, učeče motivirajo pri delu, saj jim omogočajo raziskovanje z lastnimi orodji. Prav tako so različni poskusi dostopnejši in aplikacije za izvajanje meritev enostavne za uporabo tudi na terenskih vajah [27].

Cilj te raziskave je bil predstaviti pametne telefone kot orodje za merjenje in nadzor merilnih podatkov. Kot model za predstavitev smo prikazali laboratorijski eksperiment, v katerem smo v izobraževalne cilje vključili smiselno uporabo pametnega telefona, merilnika svetlobe in uporabo prosto dostopne aplikacije Phyphox. Pri vaji smo preverjali razliko osvetljenosti jajčnega beljaka pred koagulacijo in po njej. Teoretično znanje smo prenesli v domač laboratorij, kjer smo razvijali različne kompetence ter sami pridobili izkušnjo z uporabo pametnega telefona v (domačem) laboratoriju. Dobljene rezultate smo osmislili in povezali z delovanjem beljakovin in koagulantov v človeškem telesu.

Glede na vsesplošno uporabo pametnih telefonov in njihovo vedno večjo zmogljivost pričakujemo, da bodo pametne mobilne naprave pomagale tudi pri izobraževanju in izvajanju terenskih vaj in laboratorijskih vaj v domačem in šolskem okolju. Naša prihodnja prizadevanja se bodo osredotočila na dodano vrednost in uporabnost pametnih mobilnih naprav zlasti pri laboratorijskih vajah predmeta biologija.

Literatura

- [1] Badrick, E., Bobak, M., Britton, A., Kirschbaum, C., Marmot, M., & Kumari, M. (2008). The relationship between alcohol consumption and cortisol secretion in an aging cohort. *The Journal of Clinical Endocrinology & Metabolism*, 93(3), 750–757.
- [2] Ballester, E., Castro-Palacio, J. C., Velázquez-Abad, L., Giménez, M. H., Monsoriu, J. A., & Ruiz, L. S. S. (2014, October). Smart physics with smartphone sensors. In *2014 IEEE Frontiers in Education Conference (FIE) Proceedings* (pp. 1-4). IEEE.
- [3] Berg, B., Cortazar, B., Tseng, D., Ozkan, H., Feng, S., Wei, Q., ... & Ozcan, A. (2015). Cellphone-based hand-held microplate reader for point-of-care testing of enzyme-linked immunosorbent assays. *ACS nano*, 9(8), 7857–7866.
- [4] Google Play, <https://play.google.com/store/apps>
- [5] Hernandez, T. C. M., Gonzalez-Valencia, E., Torres, P., Luis, D., & Ramírez, A. (2014). Low-cost spectrometer for educational applications using mobile devices. *Education*, 51(1).
- [6] Hochberg, K., Becker, S., Louis, M., Klein, P., & Jochen, K. (2020). Using smartphones as experimental tools—a follow-up: cognitive effects by video analysis and reduction of cognitive load by multiple representations. *Journal of Science Education and Technology*, 29(2), 303–317.
- [7] Hofstein, A., & Lunetta, V. N. (2004). The laboratory in science education: Foundations for the twenty-first century. *Science education*, 88(1), 28–54.
- [8] <https://eucbeniki.sio.si/kemija9/1108/index2.html>
- [9] Koškin, N. I., Širkevič, M. G. E., Hribar, M., Trontelj, Z., & Gros, M. (1990). *Priročnik elementarne fizike*. Tehniška založba Slovenije.
- [10] Myhill, Sarah. Hypochlorhydria—Lack of Stomach Acid—Can Cause Lots of Problems. Retrieved on 4 May 2012. http://drmyhill.co.uk/wiki/Hypochlorhydria_-_lack_of_stomach_acid_-_can_cause_lots_of_problems.
- [11] Kutun, B., Martens, A., & Schmidt, W. Motivational power of gamification: the effect of playful learning on psychological needs of self-determination theory. *Education and New Developments*.
- [12] Lang, C. H., Liu, X., Nystrom, G., Wu, D., Cooney, R. N., & Frost, R. A. (2000). Acute effects of growth hormone in alcohol-fed rats. *Alcohol and Alcoholism*, 35(2), 148-158.
- [13] Livingstone, S. (2012). Critical reflections on the benefits of ICT in education. *Oxford review of education*, 38(1), 9–24.
- [14] Long, K. D., Yu, H., & Cunningham, B. T. (2014). Smartphone instrument for portable enzyme-linked immunosorbent assays. *Biomedical optics express*, 5(11), 3792–3806.
- [15] Luh Sukariasih, E., Sahara, L., Hariroh, L., & Fayanto, S. Studies The Use Of Smartphone Sensor For Physics Learning.

- [16] McCreath, S. B., & Delgoda, R. (2017). *Pharmacognosy: Fundamentals, applications and strategies*. Academic Press.
- [17] Michael, J. (2006). Where's the evidence that active learning works?. *Advances in physiology education*.
- [18] Monteiro, M., Stari, C., Cabeza, C., & Marti, A. C. (2019, August). Physics experiments using simultaneously more than one smartphone sensors. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1287, No. 1, p. 012058). IOP Publishing.
- [19] O'kenedy, R. (2000). The immune system in sport: getting the balance right. *British journal of sports medicine*, 34(3), 161-161.
- [20] Parr, E. B., Camera, D. M., Areta, J. L., Burke, L. M., Phillips, S. M., Hawley, J. A., & Coffey, V. G. (2014). Alcohol ingestion impairs maximal post-exercise rates of myofibrillar protein synthesis following a single bout of concurrent training. *PLoS One*, 9(2), e88384.
- [21] Phyphox. <https://phyphox.org/sensors/>
- [22] Prins, G. T., Bulte, A. M., & Pilot, A. (2016). An activity-based instructional framework for transforming authentic modeling practices into meaningful contexts for learning in science education. *Science Education*, 100(6), 1092–1123.
- [23] Prinz, P. N., Roehrs, T. A., Vitaliano, P. P., Linnoila, M., & Weitzman, E. D. (1980). Effect of alcohol on sleep and nighttime plasma growth hormone and cortisol concentrations. *The Journal of Clinical Endocrinology & Metabolism*, 51(4), 759–764.
- [24] Seideman, W. E., Cotterill, O. J., & Funk, E. M. (1963). Factors affecting heat coagulation of egg white. *Poultry Science*, 42(2), 406-417.
- [25] Sotler, R., & Dahmane, R. G. (2020). Tvegjanja za nastanek kožnih sprememb in zaščita pred soncem. *RUO. Revija za Univerzalno Odlicnost*, 9(4), 340–356.
- [26] Spencer, R. L., & Hutchison, K. E. (1999). Alcohol, aging, and the stress response. *Alcohol Research & Health*, 23(4), 272.
- [27] Staacks, S., Hütz, S., Heinke, H., & Stampfer, C. (2018). Advanced tools for smartphone-based experiments: phyphox. *Physics education*, 53(4), 045009.
- [28] Study.com - Alcohol and Protein Synthesis – <https://study.com/academy/lesson/alcohol-and-protein-synthesis.html>
- [29] Šorgo, A. (2007). Pomen laboratorijskega dela pri pouku biologije. *Pedagoška obzorja: časopis za didaktiko in metodiko*, letn. 22, št. 3/4, str. 28–37.
- [30] Šorgo, A., & Špernjak, A. (2007). Profesorice bi morale bit zgoraj brez ali kaj spremeniti v pouku biologije. *Vzgoja in izobraževanje* : revija za teoretična in praktična vprašanja vzgojno izobraževalnega dela. [Tiskana izd.]. letn. 38, št. 5, str. 37–40.
- [31] Šorgo, A., Hajdinjak, Z., & Briski, D. (2008). The journey of a sandwich: computer-based laboratory experiments about the human digestive system in high school biology teaching. *Advances in physiology education*, 32(1), 92–99.

- [32] Špernjak, A., & Šorgo, A. (2009). Comparison of attitudinal differences with three different styles of biological laboratory exercises among elementary school students. *Dr. Marjan Blažič, 3 dr. Janja Črčinovic Rozman*, 82.
- [33] Špernjak, A., & Šorgo, A. (2018). Differences in acquired knowledge and attitudes achieved with traditional, computer-supported and virtual laboratory biology laboratory exercises. *Journal of Biological Education*, 52(2), 206–220.
- [34] Tondeur, J., Van Braak, J., & Valcke, M. (2007). Curricula and the use of ICT in education: Two worlds apart?. *British Journal of Educational Technology*, 38(6), 962–976.
- [35] Välimäki, M., Tuominen, J. A., Huhtaniemi, I., & Ylikahri, R. (1990). The pulsatile secretion of gonadotropins and growth hormone, and the biological activity of luteinizing hormone in men acutely intoxicated with ethanol. *Alcoholism: Clinical and Experimental Research*, 14(6), 928–931.
- [36] Vuorikari, R., Punie, Y., Gomez, S. C., & Van Den Brande, G. (2016). *DigComp 2.0: The digital competence framework for citizens. Update phase 1: The conceptual reference model* (No. JRC101254). Joint Research Centre (Seville site).

Vir slike:

- [37] <https://www.nature.com/articles/s41578-020-0184-2/figures/1>

Energija molekulskih grafov

Energy of molecular graphs

Katja Zemljic

Univerza v Mariboru, Pedagoška fakulteta, Koroška cesta 160, Maribor, Slovenija

Povzetek

Predstavljena bo energija molekulskih grafov, ki je definirana kot vsota absolutnih vrednosti lastnih vrednosti matrike sosednosti, ki pripada danemu molekulskemu grafu. Molekulski graf je matematična predstavitev dane molekule, za katerega lahko izračunamo različne matematične invariante. Na podlagi molekulskega grafa se izpelje matrika sosednosti, za katero lahko izračunamo lastne vrednosti. V članku je opisan tudi primer izračuna energije grafa za predstavljene molekulske grafe, ki so izpeljane iz izomerov z enako molekulsko formulo. Pri predstavitvi energije grafa smo se osredotočili na preproste družine grafov, da se izognemo uteženim grafom.

Gljučne besede: teorija grafov, kemijska teorija grafov, energija grafa, matrika sosednosti, molekulski graf

Abstract

The energy of molecular graphs, defined as the sum of the absolute values of the eigenvalues of the adjacency matrix corresponding to a given molecular graph, is presented. A molecular graph is a mathematical representation of a particular molecule for which various mathematical invariants can be calculated. Based on the molecular graph, an adjacency matrix is derived for which we can calculate the eigenvalues. Also, an example of calculating the energy of a graph for the presented molecular graphs derived from isomers of the same molecular formula is presented. In presenting the energy of a graph, we have focused on simple families of graphs to avoid weighted graphs.

Key words: graph theory, chemical graph theory, graph energy, adjacency matrix, molecular graph

1 Uvod

V članku se osredotočamo na področje kemijske teorije grafov, ki z matematičnega vidika sodi na področje teorije grafov. Energija grafa predstavlja eno izmed invariant grafa, ki je povezana s fizikalno-kemijskimi lastnostmi molekul. Definirana je kot vsota absolutnih vrednosti vseh lastnih vrednosti matrike sosednosti poljubnega grafa. Osredotočimo se na energijo grafa v povezavi z molekulskimi grafi, torej grafi, ki pripadajo posameznim molekulam. Več različnih molekul ima lahko enak molekulski graf zato se uporabljajo v takih primerih uteženi grafi. V tem članku je energija grafa opisana le na preprostih družinah grafov, zato se ne osredotočamo na utežene grafe.

V naslednjem poglavju je navedenih nekaj osnovnih definicij teorije grafov, ki jih potrebujemo za nadaljnje razumevanje. V tretjem poglavju je na kratko obravnavana kemijska teorija grafov, predvsem so predstavljeni molekulski grafi, ki jih potrebujemo za matriko sosednosti in izračun energije grafa. V četrtem poglavju je podana definicija energije grafa in primer izračuna energije grafa za štiri izomere z molekulsko formulo C_5H_{10} . V zaključku je predstavljenih nekaj idej o vključenosti dane teme na različnih ravneh izobraževanja in tudi nadaljnji razmisleki za nadaljnje raziskovanje na tem področju.

2 Osnovni pojmi teorije grafov

V tem poglavju je opisanih nekaj osnovnih definicij iz teorije grafov, večina definicij in lastnosti grafov je povzetih po virih [3,4,5,6]. Več definicij in informacij na to temo se najde v [6].

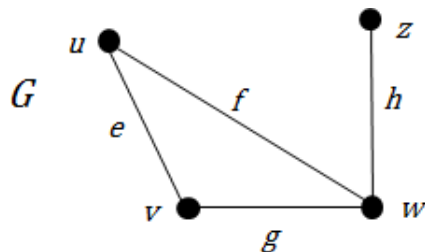
Graf $G = (V(G), E(G))$ je urejeni par, kjer $V(G)$ predstavlja neprazno končno množico in $E(G)$ množico neurejenih parov $\{u, v\}$, kjer sta $u, v \in V(G)$. Množico $V(G)$ imenujemo množica vozlišč in množico $E(G)$ množica povezav. Povezavo $e = \{u, v\}$ grafa G pogosto zapišemo kar kot uv . Vozlišči u in v pri tem imenujemo krajišči povezave e . Za vozlišči u in v pravimo, da sta sosednji.

Graf H je podgraf grafa G , če velja $V(H) \subseteq V(G)$ in $E(H) \subseteq E(G)$. Podgraf H je vpeti podgraf grafa G , če je $V(H) = V(G)$.

Zaporedje povezav med vozliščema v_1 in v_n v grafu G oblike $v_1v_2, v_2v_3, v_3v_4, \dots, v_{n-1}v_n$, pri čemer so vozlišča v_1, \dots, v_n paroma različna, imenujemo pot. Število povezav poti je enako dolžini poti. Zaporedje povezav oblike $v_1v_2, v_2v_3, v_3v_4, \dots, v_{n-1}v_n, v_nv_1$, pri čemer so vozlišča v_1, \dots, v_n paroma različna, imenujemo cikel. Graf G je povezan, če obstaja pot med poljubnim parom vozlišč, sicer je nepovezan. Nepovezani graf razpade na nekaj povezanih podgrafov, ki jih imenujemo komponente grafa. Drevo je povezani graf brez ciklov. Polni graf je graf, v katerem je sta vsaki dve različni vozlišči sosednji. Prazni graf je graf brez povezav.

Dve ali več povezav, ki povezujejo isti par vozlišč, imenujemo vzporedne povezave. Povezavo, ki povezuje vozlišče s seboj, imenujemo povratna povezava ali zanka. Graf brez zank in večkratnih povezav imenujemo enostavni graf. Poznamo usmerjene in neusmerjene grafe. Graf je neusmerjen, kadar par vozlišč, ki predstavlja povezavo, ni urejen, in usmerjen, kadar je prvo od vozlišč začetek, drugo pa konec povezave.

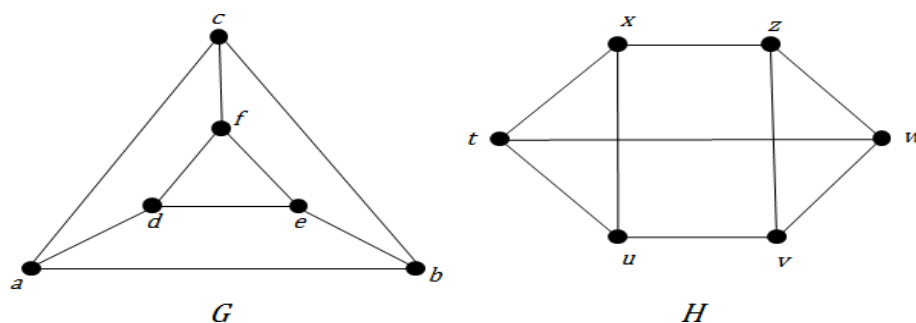
Na sliki 1 je prikazan graf $G = (V(G), E(G))$, kjer je $V(G) = \{u, v, w, z\}$ in $E(G) = \{uv, uw, vw, wz\}$. Vpeljemo oznake za naslednje povezave: $e = uv$, $f = uw$, $g = vw$ in $h = wz$.



Slika 1: Graf G .

Na sliki 1 opazimo, da je graf G povezan brez vzporednih povezav in brez zank, zato spada med enostavne grafe.

Naj bosta G in H grafa. Preslikava $f: V(G) \rightarrow V(H)$ je izomorfizem, če je bijekcija in za vsak par vozlišč $u, v \in V(G)$ velja $uv \in E(G) \Leftrightarrow f(u)f(v) \in E(H)$. V tem primeru pravimo, da sta grafa G in H izomorfna, kar označimo z $G \cong H$. Slika 2 prikazuje izomorfna grafa G in H . Preslikava $i: V(G) \rightarrow V(H)$, določena z $i(a) = t, i(b) = u, i(c) = x, i(d) = w, i(e) = v$ in $i(f) = z$, je primer izomorfizma.

Slika 2: Primer izomorfnih grafov G in H .

Stalnica ali invarianta grafa je vsako grafu prirejeno število, ki je enako za vse med seboj izomorfne grafe.

Da lahko vpeljemo pojem matrike sosednosti, ki ga potrebujemo za izračun energije grafa, moramo najprej definirati pojem matrike. Realna matrika dimenzije $m \times n$ je tabela $m \times n$ realnih števil, urejenih v m vrstic in n stolpcov:

$$A_{m \times n} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

ali krajše:

$$A = [a_{ij}], 1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n.$$

Število a_{ij} je element matrike, podatka i in j sta indeksa, saj je z njima točno določen položaj elementa v matriki: element a_{ij} leži v i -ti vrstici in j -tem stolpcu.

Matrika je kvadratna, kadar ima isto število stolpcov in vrstic. Kvadratna matrika je simetrična matrika, kadar je enaka svoji transponirani matriki, kar lahko zapišemo kot $A = A^T$. Elementi simetrične matrike se ohranijo pri zrcaljenju čez glavno diagonalo, ki poteka od levega zgornjega dela matrike do desnega spodnjega dela matrike. Za elemente simetrične matrike velja $a_{ij} = a_{ji}$.

Determinanta matrike je funkcija, ki vsaki realni matriki priredi realno število. Več o tem si lahko preberete tudi v [7].

Naj bo A realna matrika dimenzije $n \times n$. Kompleksno število λ je lastna vrednost matrike A , če obstaja tak vektor $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$, da velja $Ax = \lambda x$. Vektor x v tem primeru imenujemo lastni vektor za lastno vrednost λ . Ničelni vektor $x = 0$ ne more biti lastni vektor, medtem ko je lastna vrednost lahko enaka 0. Enačbo za lastne vrednosti in lastne vektorje lahko zapišemo tudi v obliki $(A - \lambda I)x = 0$, kjer I označuje identiteto (to je $n \times n$ matrika, ki ima po diagonali povsod 1 in drugod 0). Znano je, da ima ta enačba neničelno rešitev natanko tedaj, ko je determinanta matrike $A - \lambda I$ enaka 0. Lastne vrednosti matrike A so torej rešitve enačbe

$$\det(A - \lambda I) = 0. \quad (1)$$

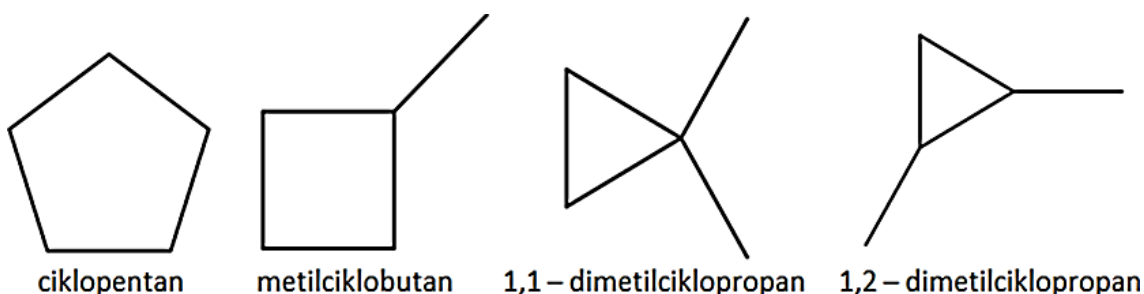
3 Kemijska teorija grafov

V tem članku se osredotočamo na uporabo teorije grafov v kemiji, kar imenujemo tudi kemijska teorija grafov [8]. Več definicij lahko najdemo tudi v [3].

Za dano molekulo tvorimo kemijski oziroma molekulski graf na naslednji način: vozlišča grafa predstavljajo atomi dane molekule (ne nujno vsi), v našem primeru so to ogljikovi atomi. Dve vozlišči sta sosednji natanko tedaj, ko med danima atomoma obstaja kemijska vez.

Kemijska teorija grafov je področje teorije grafov, ki obravnava molekulske grafe in z njimi povezane matematične koncepte, uporabne v kemiji. V tem članku je predstavljenih nekaj primerov molekulskih grafov nasičenih cikličnih ogljikovodikov.

Poglejmo si primer skeletnih grafov štirih monocikloalkanov z molekulsko formulo C_5H_{10} , prikazanih na sliki 3. Ta primer smo izbrali, ker ima dana molekulska formula več izomerov, a vseeno ni prevelikega števila izomerov.



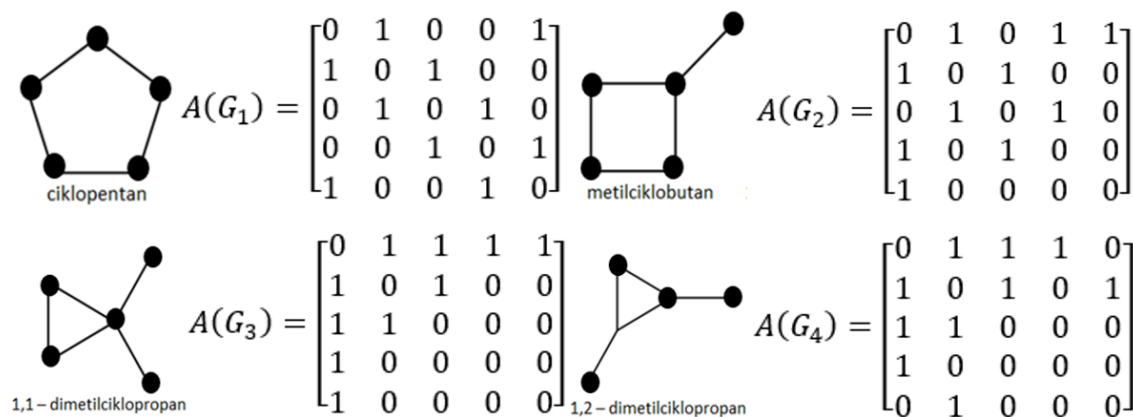
Slika 3: Skeletne formule monocikloalkanov z molekulsko formulo C_5H_{10} .

Preden bomo izračunali energijo posameznega molekulskega grafa, si bomo ogledali še matriko sosednosti, ki je ena izmed preprostejših načinov predstavitve grafa in je primerna za grafe, ki nimajo prevelikega števila vozlišč.

Naj bo G graf z n vozlišči, ki jih označimo kot v_1, \dots, v_n . Matrika sosednosti $A(G)$ je kvadratna matrika razsežnosti $n \times n$, v kateri je element v j -tem stolpcu i -te vrstice enak 1, če sta vozlišči v_i in v_j sosednji, in enak 0, v kolikor vozlišči nista sosednji. Za matriko sosednosti opazimo naslednje lastnosti:

- Matrika sosednosti polnega grafa ima povsod enice, samo na diagonali ima ničle, medtem ko je matrika sosednosti za prazen graf ničelna matrika.
- Glavna diagonala vsake matrike sosednosti, ki pripada grafu brez zank, ima same ničle.
- Matrika sosednosti neusmerjenega grafa je simetrična. Izkaže se, da so njene lastne vrednosti realna števila.

Poglejmo si primer monocikloalkanov z molekulsko formulo C_5H_{10} . Z G_1 označimo molekulski graf ciklopentana, z G_2 molekulski graf metilciklobutana, z G_3 molekulski graf 1,1-dimetilciklopropana in z G_4 molekulski graf 1,2-dimetilciklopropana. Na sliki 4 vidimo molekulske grafe ciklopentana, metilciklobutana, 1,1-dimeticiklopropana in 1,2-dimetilciklopropana. Prav tako so na sliki 4 prikazane tudi njihove matrike sosednosti.



Slika 4: Molekulski grafi in matrike sosednosti molekulskih grafov pripadajočih monocikloalkanom z molekulsko formulo C_5H_{10} .

4 Energija grafa

Naj bo G graf z vozlišči v_1, v_2, \dots, v_n . Lastne vrednosti grafa G so lastne vrednosti njegove matrike sosednosti $A(G)$. Ker je matrika sosednosti $A(G)$ simetrična, so vse lastne vrednosti $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ realna števila. Lastne vrednosti tvorijo spekter grafa G , ki ga označimo z $Spec(G)$.

Za poljuben graf G izračunamo energijo grafa kot vsoto absolutnih vrednosti vseh lastnih vrednosti matrike grafa G :

$$E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|. \quad (2)$$

Energijo grafa je Ivan Gutman prvič definiral leta 1978 [2]. Ideja za opredelitev in poimenovanje »energija« je imela kemijsko ozadje. Kadar obravnavamo molekulske grafe, je energija grafa tesno povezana z aromatičnostjo obravnavanih molekul. Pred skoraj 90 leti je Hücklova molekularna orbitalna teorija (HMO) pokazala, da so energijski nivoji π -elektronov aromatičnih ogljikovodikov povezani z lastnimi vrednostmi Hamiltonove matrike, ki je določena z matriko sosednosti molekulskega grafa, enotske matrike oziroma identitete in dveh dodatnih parametrov. Z energijo grafa je prav tako tesno povezana Coulsonova integralna formula. Več o tem si lahko preberete tudi v [3] ali še podrobneje v [9].

Da bi se izognili nesporazumom, poudarimo, da graf (kot matematični objekt) ne more imeti nobene vrste realne (fizikalne) energije. Kljub temu vezno energijo π -elektronov lahko izračunamo iz molekulskega grafa. V [1] so zapisane omejitve, katerim mora molekularni graf ustrezati, da lahko izračunamo njegovo energijo, prav tako pa so zapisani tudi nekateri primeri. Ne glede na vse predstavljene omejitve za večino molekulskih grafov, predstavljenih v [1], energija grafa dobro modelira energijo π -elektronov. Zato so koncept energije grafa posplošili, kot je zapisan v formuli (2) in se računa po tej formuli za molekulske grafe. Formula (2) je pomembna, ker povezuje skupno π -elektronsko energijo z lastnimi vrednostmi grafa.

Na sliki 4 vidimo matrike sosednosti za molekulske grafe pripadajočih monocikloalkanom z molekulsko formulo C_5H_{10} . Poglejmo si še izračun energij teh grafov. Kot je opisano, je potrebno najprej izračunati lastne vrednosti.

Primer 4.1

Za izračun determinant in lastnih vrednosti pri primeru je uporabljen internetni program WolframAlpha.

a) Matrika sosednosti ciklopentana je $A(G_1) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$.

Da izračunamo lastne vrednosti, moramo rešiti enačbo (1).

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) &= \det \begin{bmatrix} 0 - \lambda & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 - \lambda & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 - \lambda & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 - \lambda & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 - \lambda \end{bmatrix} = -\lambda^5 + 5\lambda^3 - 5\lambda + 2 = \\ &= -(\lambda - 2) \cdot (\lambda^4 + 2\lambda^3 - \lambda^2 - 2\lambda + 1) = \\ &= -(\lambda - 2) \cdot \left(\lambda + \frac{\sqrt{5} + 1}{2}\right) \cdot \left(\lambda - \frac{\sqrt{5} - 1}{2}\right) \cdot \left(\lambda + \frac{\sqrt{5} + 1}{2}\right) \\ &\quad \cdot \left(\lambda - \frac{\sqrt{5} - 1}{2}\right) = 0 \end{aligned}$$

Lastne vrednosti te matrike sosednosti so:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 2, \\ \lambda_{2,3} &= \frac{1}{2} \cdot (\sqrt{5} - 1), \\ \lambda_{4,5} &= \frac{1}{2} \cdot (-\sqrt{5} - 1). \end{aligned}$$

Energijo grafa izračunamo po formuli (2).

$$E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| = 2 + 2 \cdot \left| \frac{1}{2} \cdot (\sqrt{5} - 1) \right| + 2 \cdot \left| \frac{1}{2} \cdot (-\sqrt{5} - 1) \right| = 2 + 2\sqrt{5} \cong 6,472.$$

b) Matrika sosednosti metilciklobutana je $A(G_2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$.

$$\begin{aligned}
 \det(A - \lambda I) &= \begin{vmatrix} 0 - \lambda & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 - \lambda & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 - \lambda & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 - \lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 - \lambda \end{vmatrix} = -\lambda^5 + 5\lambda^3 - 2\lambda = \\
 &= -\lambda \cdot (\lambda^4 - 5\lambda^2 + 2) = \\
 &= -\lambda \cdot \left(\lambda - \sqrt{-\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}} \right) \cdot \left(\lambda + \sqrt{-\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}} \right) \cdot \left(\lambda - \sqrt{\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}} \right) \\
 &\quad \cdot \left(\lambda + \sqrt{\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}} \right) = 0
 \end{aligned}$$

Lastne vrednosti te matrike sosednosti so:

$$\begin{aligned}
 \lambda_1 &= 0, \\
 \lambda_2 &= \sqrt{-\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}}, \\
 \lambda_3 &= -\sqrt{-\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}}, \\
 \lambda_4 &= \sqrt{\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}}, \\
 \lambda_5 &= -\sqrt{\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}}.
 \end{aligned}$$

Energija grafa je:

$$\begin{aligned}
 E(G) &= \sum_{i=1}^n |\lambda_i| = \left| \sqrt{-\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}} \right| + \left| -\sqrt{-\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}} \right| + \left| \sqrt{\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}} \right| + \left| -\sqrt{\sqrt{\frac{17}{4} + \frac{5}{2}}} \right| = \\
 &= 2 \sqrt{\frac{5}{2} - \frac{\sqrt{17}}{2}} + 2 \sqrt{\frac{5}{2} + \frac{\sqrt{17}}{2}} \cong 5,596.
 \end{aligned}$$

c) Matrika sosednosti 1,1-dimetilciklopropana je $A(G_3) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$.

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) &= \begin{vmatrix} 0 - \lambda & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 - \lambda & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 - \lambda & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 - \lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 - \lambda \end{vmatrix} = -\lambda^5 + 5\lambda^3 + 2\lambda^2 - 2\lambda = \\ &= -\lambda \cdot (\lambda^4 - 5\lambda^2 - 2\lambda + 2) = -\lambda \cdot (\lambda + 1) \cdot (\lambda^3 - \lambda^2 - 4\lambda + 2) \\ &\cong -\lambda \cdot (\lambda + 1) \cdot (\lambda + 1,814) \cdot (\lambda - 0,471) \cdot (\lambda - 2,343) = 0 \end{aligned}$$

Lastne vrednosti te matrike sosednosti so:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, \\ \lambda_2 &= -1, \\ \lambda_3 &\cong -1,814, \\ \lambda_4 &\cong 0,471, \\ \lambda_5 &\cong 2,343. \end{aligned}$$

Energija grafa je:

$$E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \cong |-1| + |-1,814| + |0,471| + |2,343| \cong 5,628.$$

d) Matrika sosednosti 1,1-dimetilciklopropana je $A(G_4) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$.

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) &= \begin{vmatrix} 0 - \lambda & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 - \lambda & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 - \lambda & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 - \lambda & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 - \lambda \end{vmatrix} = -\lambda^5 + 5\lambda^3 + 2\lambda^2 - 3\lambda = \\ &= -\lambda \cdot (\lambda^4 - 5\lambda^2 - 2\lambda + 3) \\ &= -\lambda \cdot \left(\lambda + \frac{\sqrt{13} - 1}{2}\right) \cdot \left(\lambda - \frac{\sqrt{13} + 1}{2}\right) \cdot \left(\lambda + \frac{\sqrt{5} + 1}{2}\right) \cdot \left(\lambda - \frac{\sqrt{5} - 1}{2}\right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Lastne vrednosti te matrike sosednosti so:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, \\ \lambda_2 &= \frac{-\sqrt{13} + 1}{2}, \\ \lambda_3 &= \frac{\sqrt{13} + 1}{2}, \\ \lambda_4 &= \frac{-\sqrt{5} - 1}{2}, \\ \lambda_5 &= \frac{\sqrt{5} - 1}{2}. \end{aligned}$$

Energija grafa je:

$$E(G) = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| = \left| \frac{-\sqrt{13} + 1}{2} \right| + \left| \frac{\sqrt{13} + 1}{2} \right| + \left| \frac{-\sqrt{5} - 1}{2} \right| + \left| \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right| \cong 5,842.$$

Na podlagi teh štirih izomerov z molekulsko formulo C_5H_{10} vidimo, da se energije posameznih grafov razlikujejo, vendar so vse med 5,596 in 6,472. Najvišjo energijo grafa ima ciklopentan, medtem ko ima najnižjo metilciklobutan. Vzorec je zagotovo premajhen, da bi lahko na podlagi tega delali zaključek, kako vplivajo na energijo grafa vezane metilne skupine in krajšanje glavne verige.

5 ZAKLJUČEK

V članku obravnavamo molekulske oziroma kemijske grafe nekaterih monocikloalkanov, ki jih lahko v okviru kemijske teorije grafov preučujemo povsem matematično. Tema vsekakor ni primerna za osnovno šolo, saj je treba poznati grafe, matrike, determinante, lastne vrednosti in reševanje polinomskih enačb. Za obravnavanje energije grafa je namreč nujno poznavanje teh pojmov. Čeprav tema zveni zahtevno za srednjo šolo ali gimnazijo, se lahko približa predvsem nadarjenim gimnazijcem s področja kemije in matematike. Energija grafa bi bila lahko zanimiva tema za raziskovalne naloge na gimnazijskem nivoju, saj je možna zelo dobra povezava dveh naravoslovnih področij. V tem članku je bila energija grafa predstavljena zgolj na primeru nasičenih ogljikovodikov, natančneje na cikličnih alkanih. Če bi vzeli nenasičene ogljikovodike, bi morali uporabiti utežene grafe. Sicer pa je postopek za izračun energije grafa enak, torej najprej dani molekuli priredimo molekulski graf, nato zapišemo uteženo matriko sosednosti, izračunamo njene lastne vrednosti in na koncu izračunamo energijo grafa kot vsoto absolutnih vrednosti vseh lastnih vrednosti matrike sosednosti. Zanimivo bi bilo med seboj primerjati aciklične in ciklične ogljikovodike z enakim številom ogljikovih atomov, kot tudi aciklične in ciklične izomere med seboj. Na podlagi izomerov je en primer že predstavljen v tem članku, a bi se lahko to razširilo na večje število molekul, na primer vsaj do 20 ogljikovih atomov v molekuli. Na podlagi tega bi se lahko nato ugotovilo, kako se energija grafa spreminja med posameznimi izomeri. Prav tako bi se lahko v prihodnosti naredila primerjava energije grafov med alkani, alkeni in alkini in tudi med alkeni ali alkini z eno dvojno oziroma trojno vezjo, pri čemer bi upoštevali, na katerem mestu v sami molekuli se dvojna ali trojna vez pojavi. Zanimivo bi bilo preveriti tudi različne alkane z eno metilno skupino, ki je vezana na različnih mestih v molekuli.

Literatura

- [1] I. Gutman, O. E. Polansky, *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*. Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo: Springer-Verlag, 1986.
- [2] I. Gutman, *The energy of a graph*. Ber. Math-Statist. Sect. Forchungsz. Graz **103** (1978), 1–22 .
- [3] K. Zemljič. *Energija grafa: magistrsko delo*. Univerza v Mariboru, Fakulteta za naravoslovje in matematiko, 2019.
- [4] R. Balakrishnan, The energy of a graph. *Lin. Algebra Appl.* **387** (2004), 287–295 .
- [5] R. J. Wilson, J. J. Watkins (prevod: Janez Žerovnik), *Uvod v teorijo grafov*, DMFA, Ljubljana, 1997.
- [6] S. Barnard, J. M. Child, *Higher Algebra*. London: MacMillan, 1952.
- [7] S. Lang, *Introduction to Linear Algebra (Second Edition)*. New York, Berlin, Heidelberg, Tokyo: Springer-Verlag, 1986.
- [8] S. Wagner, H. Wang, *Introduction to Chemical Graph Theory*, CRC Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, 2019.
- [9] X. Li, Y. Shi, I. Gutman, *Graph Energy*. New York: Springer Science & Business Media, 2012.

VABILO AVTORJEM

Dianoia (grško δίανοια) po Platonu označuje védenje, razmišljanje o modelih stvarnosti, o naravoslovno-matematičnih in tehničnih temah. Uporabljajo ga matematiki (modeliranje) in znanstveniki (formuliranje problema), inženirji (načrtovanje sistema). Opredeljuje kompetenco, proces ali rezultat diskurzivnega razmišljanja, za razliko od neposrednega razumevanja obravnavane tematike. Aristotel to védenje naprej razdeli na teoretično (episteme) in praktično (phronesis).

Dianoia po Platonu torej označuje vmesni nivo človeškega spoznanja, prehod od intuitivnih občutkov do najglobljega spoznanja dejanskosti. Tako je idealna oznaka za objave v pričujoči reviji, ki povezujejo teoretična, znanstvena izhodišča z njihovo uporabno namembnostjo. Študentje, avtorji teh člankov, ste na prehodu od učenja k delu, od teoretičnega h konkretnemu, ki vas bo pripeljalo do kruha, do dela, s katerim boste odigrali svojo vlogo v družbi. Na tem prehodu pa poleg znanja, ki ga ponuja redno izobraževanje, potrebujete tudi izkušnje s konkretnih izzivov in mehke kompetence sodelovanja v ekipah delodajalcev, k čemur vas spodbuja in vam pri tem pomaga revija Dianoia.

V reviji bomo objavljali poljudne in strokovne članke s področja naravoslovja, matematike ali znanosti, ki uporabljajo znanja teh področij. Ciljna publika bralcev so v prvi vrsti delodajalci, ki tovrstna znanja potrebujejo in želijo izvedeti, kaj je kdo zanimivega razmislil na njihovem področju. V drugi vrsti so ciljna publika študentje, ki iščejo zamisli za svojo poklicno pot in lahko v reviji najdejo navdih za lastna raziskovanja in iskanje stikov s trgom dela.

Za kakovost izdelkov bo skrbel uredniški odbor in uredniški svet, v katerih so vrhunski strokovnjaki, povezani s področji, ki jih revija obravnava. Članki bodo anonimno recenzirani, o objavi pa na podlagi recenzije odloča uredniški odbor. Priporočljivo je, da avtorji besedilo spremenijo v skladu s priporočili recenzentov in da popravljeni članek z utemeljitvijo sprejema ali zavrnitve sprememb ponovno pošljejo v pregled. Uredništvo lahko objavo članka zavrne, če vsebinsko ali po merilih kakovosti ne ustreza standardom revije, o čemer avtorje obvestimo v najkrajšem možnem času.

S prispevkom v reviji bodo avtorji spodbujali širjenje znanja s področja naravoslovja in matematike ter tehnike oziroma izobraževanja teh področij in svoje poglede prenašali na trg dela in na prihajajoče generacije.

NAVODILA AVTORJEM

Avtorje prosimo, da pri pripravi članka upoštevajo naslednja navodila.

Če je članek napisan v slovenščini, naj ima angleški prevod naslova, povzetka in ključnih besed. Veseli bomo tudi prispevkov v angleščini, ki pa morajo imeti naslov, razširjen povzetek v obsegu 300 – 400 besed in ključne besede v slovenščini. Ključnih besed naj bo do šest.

Prispevki naj bodo zanimivi za širši krog bralcev. Ključna je intuitivna predstavitev zamisli in rezultatov, podrobnosti pa lahko ostanejo prihranjene za morebitni znanstveni članek, ki bi bil nadgradnja članka, objavljenega v reviji Dianoia.

Članek naj vsebuje naslov, ime avtorja (avtorjev) in sedež ustanove, kjer avtor(ji) dela(jo). Sledi naj povzetek, z največ 150 besedami, seznam ključnih besed in besedilo, ki ne presega 3000 besed. Besedilo naj bo zapisano v urejevalniku besedil MS Word 2010 oz. kasnejši ali LaTeX in naj uporablja objavljeno predlogo. Slike in tabele morajo biti oštevilčene in imeti natančen opis, da jih lahko razumemo brez preostalega besedila. Slike v elektronski obliki naj bodo visoke kakovosti v formatu PNG ali JPEG.

Prispevek v PDF obliki pošljite na naslov dianoia@um.si z zadevo: »Za revijo Dianoia«. Če bo sprejet v objavo, vas bomo prosili za izvorno obliko prispevka.