МАРИО ЗЛАТОВИЋ*, СВЕТОЗАР Р. НИКЕТИЋ, Хемијски факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг 16, Пошт. фах 158, YU-11001 Београд, Југославија**

ХЕМИЈА НА ИНТЕРНЕТУ (ИЛИ ИНТЕРНЕТ У ХЕМИЈИ)

ИЗВОД

Описани су основни принципи рада и најпознатије функционалне Интернет апликације WWW, као и примери могућег њиховог примењивања: од књига и стручних и научних часописа до новинских чланака у дневној и недељној штампи намењених широкој публици свих узраста и нивоа образовања.

1. УВОД

Посао у којем се данас налазе многи људи, а који је у последњих неколико година постао веома популаран, назива се "сурфовање по Интернету". Ова реч је настала од енглеских речи "surf" (што значи "јурити") и "Internet". Сурфовање по Интернету је, заправо, коришћење рачунарских мрежа широм света, како би се дошло до жељених информација. Ове информације могу бити у облику текста, слика, звука, анимација, видеа, итд. Оне могу бити смештене на рачунарима било где у свету. Сурфовање по Интернету је, дакле, врло занимљиво, а понекад и корисно. Међутим, оно може бити и веома скупо, ако се не зна како се правилно користи Интернет. Циљ овог рада је да се укратко опишу основне карактеристике Интернета, као и да се укаже на неке могућности примене Интернета у хемији. Због тога ће прво бити речи о историјату Интернета, затим ће бити описане основне карактеристике Интернета, а онда ће бити речи о неким могућностима примене Интернета у хемији. Коначно, биће речи о неким проблемима који се јављају при коришћењу Интернета.

2. ШТА ЈЕ ИНТЕРНЕТ

Интернет је хетерогена мрежа великог броја рачунарских мрежа раширених по целом свету. Настао је у САД средином седамдесетих година као "експериментални" војни пројекат ARPA[*] (Advanced Research Project Agency). Циљ је био да се успостави мрежа рачунара који ће бити отпорни на евентуалне ратне разарања. Наиме, у случају рата, Америка је тада веровала да ће њена територија бити подвргнута нуклеарном бомбардовању, па је било неопходно направити такву рачунарску мрежу која ће моћи да функционише и у случају да неки њени делови буду уништени. Тако је настала мрежа која је касније названа ARPANET. Убрзо је ова мрежа почела да се користи и у мирнодопске сврхе, а нарочито у академској заједници. Тако је настала мрежа која је касније названа NSFNET (National Science Foundation NETwork). Ова мрежа је била знатно бржа од ARPANET-а, а њена пропусна моћ је износила 56 kbps. Убрзо је NSFNET прерастао у мрежу која је повезивала све универзитете у САД, као и многе универзитете широм света. Ова мрежа је касније названа INTERNET. Данас Интернет представља мрежу која повезује преко 10 000 мањих мрежа широм света. Процењује се да Интернет користи више од 20 милиона корисника широм света. Број корисника Интернета се сваке године удвостручује. Интернет је, заправо, мрежа мрежа. Он повезује рачунарске мреже различитих величина, различитих архитектура и различитих намена. Интернет је, дакле, хетерогена мрежа. Сваки рачунар који је повезан на Интернет може да комуницира са сваким другим рачунаром који је повезан на Интернет. Да би се омогућила функционисање Интернета, било је потребно направити стандарде који ће дефинисати како ће се рачунари међусобно повезивати и како ће размењивати информације. Ови стандарди се називају протоколи. Протоколи дефинишу како ће се информације слати, примати, проверавати, итд. Најпознатији протоколи који се користе на Интернету су TCP/IP протоколи. Ови протоколи су развијени у оквиру Интернета, а њихов развој је још увек у току. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од рачунарске платформе. Због тога је могуће повезати било које рачунаре на Интернет, без обзира на њихову архитектуру, оперативни систем, итд. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од физичке мреже која се користи за повезивање рачунара. Због тога је могуће повезати било које рачунаре, без обзира на то да ли се они налазе у локалној мрежи, или су повезани преко телефонске линије, сателита, оптичког кабла, итд. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од апликације која се користи. Због тога је могуће користити Интернет за било коју врсту комуникације између рачунара. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од оперативног система. Због тога је могуће повезати рачунаре који користе различите оперативне системе, као што су UNIX, Windows, Macintosh, OS/2, VMS, итд. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од хардвера. Због тога је могуће повезати рачунаре различитих произвођача, као што су IBM, Apple, Sun, HP, DEC, итд. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од софтвера. Због тога је могуће користити Интернет за било коју врсту комуникације између рачунара, без обзира на то да ли се користи Windows, Macintosh, UNIX, VMS, итд. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од апликације. Због тога је могуће користити Интернет за било коју врсту комуникације између рачунара, без обзира на то да ли се користи електронска пошта, FTP, Telnet, WWW, итд. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од физичке мреже. Због тога је могуће користити Интернет за било коју врсту комуникације између рачунара, без обзира на то да ли се користи Ethernet, Token Ring, FDDI, ATM, итд. Ови протоколи су развијени тако да буду независни од рачунарске платформе. Због тога је могуће користити Интернет за било коју врсту комуникације између рачунара, без обзира на то да ли се користи PC, Mac, Sun, HP, DEC

них софт верски х пак ета, бил о да је специ јално намењен креирањ у HTML до кумената (MS FrontPage, Netscape Navigator Gold, Hot-Dog Pro) или је општије намене (MS Office 97, Corel Office 97, Ami Pro) и многи други по седују могућности за обраду текста на не ресно лиц ма рачунарима (Microsoft Word, WordPerfect, итд.). LaTeX до кументи се директно преводе у хипертекст (HTML формат) помоћу LaTeX2HTML програма.

Идеја на којој се заснива промет хипертекстова на WWW је брилијантна и крајње једноставна: **прегледање у једном интерактивном документу могућ у другим хипертекстуалним документима!** У спо ставља њеном о ваким х огичких веза и мењу хипертекстуалних д окумената о ни се могу, у једној или мањој мери, интегрисати, и тој ест ој о што чини WWW изворишно као свеобухватни сплет међусобно повезаних хипертекстуалних до кумената. Притоме се, наравно, по једини начини "комади" хипертекста налазе на одређеном серверима, али и ти сервери у грађ ском смислу не морају бити ни у каквој вези. Штавише, међусобно повезане HTML документе могу писати и одржавати разни аутори на разним машинама у мрежи.

Ова идеја разјашњава функционисање WWW "browser"а када прономењено и прикажемо на нашем екрану једни (хипертекстуални) документ, ми можемо по жељи да тражимо за другим (хипертекст уалним) документима који се у њему налазе - једноставно само активирањем миша на делу текста који је за тим сврху посебно означен (најчешће подвучене и/или другој боји или и једно и друго) - при чему не морамо да знамо где се референцирани документ налази (на истом серверу или на другом континенту). О вој е могућно да сви о ваки документ има своју "адресу" (URL) а референцирање у HTML документу може да буде управљено помоћу URL података пре ко којег WWW "browser" налази тражену информацију ма где она била. Референца (URL адреса) у хипертекстуалном документу се популарно назива **"link"** (од енгл. речи за "везу" или "карика") и очигледних разлога, а сам садржај који одговара датој URL адреси и који се при казује на екрану корисничког рачунара назива се, на енглеском, **"page"** (што значи и "страница").

Да би сатима се одреде намењ о: прво, како да нађемо почетни HTML документ који на сајтовима сервисе? Друго, како да сами формирамо HTML документ који би могао да буде о ј интересантан за остале WWW кориснике? О вој руто питањ е је поџ једнако о значајно и за академске и комерцијалне корисничке рачунаре и назива

Табела 3. Неке хемијске базе података на Интернету

Назив	URL адреса
Chemical Abstracts	http://info.cas.org
Beilstein	http://www.beilstein.org
Brookhaven PDB	http://pdb.pdb.bnl.gov/cgi-bin/browse
ChemFinder	http://chemfinder.camsoft.com/
WebMol	http://schiele.organik.uni-erlangen.de/service/webmol.html
DIALOG	http://www.dialog.org/
Базе општијих публикација	
Рачунарски речник	http://wfn-shop.princeton.edu/foldoc
Биографски речник	http://www.tiac.net/users/parallax
Webstersов речник	http://c.gp.cs.cmu.edu:5103/prog/webster
Merriam-Webster OnLine dictionary	http://www.m-w.com/
Grolier-ова енциклопедија	http://www.grolier.com/

6.5 Дискусионе групе

До сада дискусионих група се бавио хемијом и места за њихово навођење немамо. Ако вас интересује, можете потражити има ли и нечега што вас посебно занима за http://ftl.cenet/lists/, или мало конкурентније и на http://ftl.cenet/lists/science.html. Наравно, претрага одговара ће вам дати потпун списак и сасвим је могућ е да вам нешто промакне.

6.6 Конференције (научни скупови)

Релативно нова појава у свету конференција на Интернету. На њима се публикују радови који су обично и нешто већи обима него за класичне постерске презентације (ближе крајњим оригиналним научним радовима). Поступак је веома сличан оном у случају стандардних конференција: добар рецензирани радове који су прихваћени у форми погодној за публиковање на Интернету, и рад бива постављен (ако је добијао позитивну рецензију) на неки од страница конференције. Дискусија се обавља путем e-mail-а (за сада, можда ће касније надређивати и NetConferencing а можда касније и видео) обично у тзв. мрежним дневницима одређеног конгреса. Веома репутативан је сајт који обезбеђује Конференцијама хетероцикличних хемија (Electronic Conference on Heterocyclic Chemistry или ECHET) одржаној од 24. јуна до 22. јула 1996. (http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/echet96/-index.html). Од 30.06. до 31.07. ее одржавана и Електронска конференција за хемију органометалних једињења (*Electronic Conference on Organometallic Chemistry*), трећа конференција коју организују студенти са Универзитета у Лондону (Department of Chemistry, Imperial College) (http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/ectoc-3/).

Веома је важно поменути групу истраживача са Универзитета у Лондону који воде истраживања професора Хенрија Рзепа (Henry S. Rzepa). Они су једни од најактивнијих сарадника дали су велики допринос промоцији Интернета у хемији и хемијске Интернету. Осим тога, захваљујући њиховој експертизи познато је под називом MIME (акроним од енгл. Multipurpose Internet Mail Extension). То је тачан опис врсте садржаја неког документа који је наведен у заглављу самог документа. Мало ће спомени професор Хенри Рзепа се још 1994. године заложио да се установи хемијски MIME стандард који би био прихваћен и описује специфичних садржаја као што је нпр. формат записа (топологија и геометрија молекула, спектроскопски подаци, подаци квантно-механичке анализе, подаци молекулског моделирања, кристалне структуре, итд.). Хемијски MIME стандард би олакшао размену података између различитих програма, али и на томе интересовани рад је већа група заинтересованих истражавача под координацијом професора Рзепе.

Оно што је само до сада урађено на стандардизацији описа хемијског садржаја у документима је могућно наћи на Интернет мрежи подстакло је развој и примену софтвера који (на транспарентан начин за корисника) препознаје и приказује специфичне хемијске садржаје - најчешће уз помоћ одговарајућих структурних фрагмената молекула.

(4) "Електронски" уџбеници у хемији и биохемији.

(5) Квантно-хемијски, молекулско-механички, и молекулско-динамички садржаји.

(6) VRML у хемији.

(7) Java у хемији.

Поменута стандардизација описа хемијских документата подразумева и стандардизацију њихових особина молекулских система, што је веома тешко или немогуће постићи на конвенционалан начин. Уз свесно **ауторско** компоненте HTML-а омогућава приказ молекулских вибрација, конформационих промена, механизама хемијских реакција, међумолекулских интеракција и многих других кинематичких и динамичких