

Numer pary	Imię i nazwisko	Wydział: rok: grupa:
Data	Nazwisko prowadzącego	Uwagi Zaliczenie

F1. Wyznaczanie momentu dipolowego wybranych biomolekuł

Zagadnienia

Prawo Culomba, wykres zależności siły od odległości, natężenie pola elektrycznego, charakterystyka wiązania jonowego i kowalencyjnego, stała dielektryczna środowiska, współrzędne punktu w układzie kartezjańskim, iloczyn wektorowy i skalarny, moment dipolowy jako wektor.

Literatura

Jaroszyk Rozdział 4.1 do 4.2.1.; **Przestalski** Rozdział II.1. Siła elektryczna; Rozdział I.4. Działania na wektorach; Rozdział III.3. Oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe i międzycząsteczkowe.

Przebieg ćwiczenia

1. Otwórz program **LabViewer**, tak aby program zajmował cały ekran monitora.
2. Kliknij myszą na **FILE/OPEN** w menu górnym wybierz glicynę klikając lewym przyciskiem myszy na nazwę molekuly. Do ustawienia molekuly na ekranie służą ikony zebrane po lewej stronie ekranu. Ikona obrotu, przesunięcia w płaszczyźnie ekranu i ikona zoom (powiększenie / pomniejszenie). Każde z tych narzędzi uruchamia się lewym przyciskiem myszy i trzymając go przesuwamy myszą wykonując żadaną operację.
3. Po załadowaniu molekuly i po wyświetleniu jej na ekranie ustaw ją w takiej pozycji na ekranie aby najlepiej widzieć jej kształt. Użyj do tego narzędzia obrotu wybranego z menu po lewej stronie. Kliknij na ikonę obrotu a następnie naciskając lewy klawisz przesuвай myszą po ekranie i ustaw molekulę w żadanej pozycji.
4. Na odwrotnej stronie tej kartki przerysuj molekulę z ekranu z zaznaczonymi pozycjami atomów.
5. Teraz z górnego menu wybieramy **VIEW/Display Style** i otwiera się menu przedstawienia graficznego molekuly. Wybierzmy **Sticks** i kliknijmy **O.K.** Molekula na ekranie zmieniła wygląd. Zalecane jest wypróbowanie innych opcji wyglądu molekuly.
6. Wróćmy do prezentacji typu **Line /no bond order/** z menu **VIEW/Display Style**.
7. Z menu górnego **TOOLS/Labels/Add** wybierz **Object Atom / Attribute Name** i naciśnij **OK**. Przy atomach molekuly pojawiają się nazwy i numery atomów. Wpisz symbole i związane z nimi numery atomów do Tabeli 1.
8. Po użyciu funkcji **TOOLS/Label/Add Object Atom / Attribute XYZ** przy atomach pojawiają się ich współrzędne kartezjańskie XYZ w jednostkach zwanych angstromami, Å. Do Tabeli 1 wpisz **tylko** składowe X i Y każdego atomu z dokładnością do 0.1 Å.

$$1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$$
9. Wykorzystując to samo narzędzie **TOOLS/Label/Add Object Atom /** jako Attribute zaznacz **PartialCharge** i teraz przy pozycjach atomów pojawiają się wartości ładunków cząstkowych, które wpisz, z dokładnością do 0.01, do odpowiedniej rubryki w Tabeli 1.

Tabela 1. Współrzędne **x,y** i ładunki elektryczne **q** oraz momenty dipolowe dla odczytane przy pomocy programu LabViewer

Symbol atomu i jego numer	Współrzędna x [Å]	Współrzędna y [Å]	Ładunek cząstkowy q	Iloczyn qx	Iloczyn qy

 $\Sigma q_i =$ $\Sigma q_i x_i =$ $\Sigma q_i y_i =$

10. Dla każdego atomu oblicz iloczyny **qx** i **qy** i wpisz je do odpowiednich rubryk.

Zwróć uwagę na znaki ładunków, współrzędnych i iloczynów.

11. Dodaj algebraicznie wartości w kolumnie **qx** i osobno w kolumnie **qy**. Oblicz wartości składowych momentu dipolowego zgodnie z poniższymi wzorami:

$$\mu_x = 4.803 \Sigma q_i x_i \text{ [D]}$$

$$\mu_y = 4.803 \Sigma q_i y_i \text{ [D]}$$

$$\mu_x =$$

$$\mu_y =$$

12. Wartość całkowitą momentu dipolowego obliczmy zgodnie ze wzorem:

$$\mu = \sqrt{(\mu_x^2 + \mu_y^2)}$$

$$\mu =$$

13. Na wykonanym rysunku molekuly zaznacz układ współrzędnych. Początek układu ustal na atomie o współrzędnych (0,0) lub najbliższemu tej wartości. Oś **X** narysuj od wybranego atomu w kierunku dowolnego atomu o współrzędnych (X,0) a oś **Y** w kierunku atomu o współrzędnych (0,Y).

14. Zaznacz na narysowanych osiach współrzędnych obliczone składowe momentu dipolowego μ_x oraz μ_y (uwzględniając ich znaki). Wyznacz graficznie (poprzez dodawanie wektorów) kierunek całkowitego momentu dipolowego molekuly μ .

15. Zwróć uwagę, jaką wartość ma całkowity ładunek cząsteczki Σq_i . Czy badana cząsteczka jest **jonem** czy też jest **neutralna** (podkreśl Twoją odpowiedź). Wyjaśnij dlaczego.