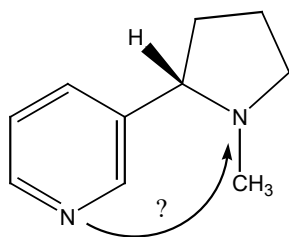


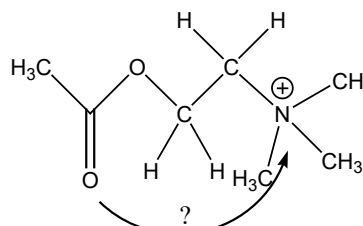
Modelowanie cząsteczkowe – Ćwiczenie 2

Data

Ćwiczenie polega na określeniu odległości pomiędzy dwoma azotami w (S)-nikotynie i porównanie z odległością pomiędzy tlenem karbonylowym i azotem w acetylocholinie w celu uzyskania odpowiedzi na pytanie: Czy (S)-nikotyna może zastąpić acetylocholinę w jej miejscu receptorowym?



(S)-nikotyna



acetylocholina

Narysuj wzory strukturalne (S)-nikotyny i acetylocholinie. Wyznacz wartość ładunków cząsteczkowych w (S)-nikotynie i acetylocholinie przy wykorzystaniu metody półempirycznej AM1 i przenieś je do pola siłowego MM+. Dokonaj analizy konformacyjnej (S)-nikotyny i acetylocholinie w polu siłowym MM+.

obrót	(S)-nikotyna Energia konformeru	Odległość pomiędzy azotami	acetylocholina Energia konformeru	Odległość pomiędzy tlenem i azotem
45				
90				
135				
180				
225				
270				
315				
360				

Osoby: