
PSI* nr 3

10.II.2005

Drodzy chemicy kwantowi,
Przypominam, że PSI* jest pismem elektronicznym Sekcji Chemii Kwantowej Polskiego Towarzystwa Chemicznego. PTChem jeszcze o tym piśmie nie wie, ale ważne jest tylko jedno: mamy forum, mamy łączność. Zachęcam do przesyłania mi informacji, co się zdarzyło w naszym środowisku, co ma się zdarzyć, z czegoś poszukujemy, że chcemy coś wyjaśnić, itp.

Lucjan Piel

piela@chem.uw.edu.pl

“DRUGI KOD GENETYCZNY”

Konkurs CASP czyli ...Mistrzostwa Świata w przewidywaniu struktury przestrzennej białek. Co dwa lata nowa edycja. 200 laboratoriów teoretycznych próbuje, a struktura jest w tajemnicy właśnie mierzona. W perspektywie: “rozkodowanie” genomu ludzkiego, nowe leki. Zagadnienie nazywane jest czasem “drugim kodem genetycznym”. W tle: miliardy dolarów dla tego kraju lub tej firmy, która potrafi to wykorzystać.

Wyniki sprzed dwóch lat: Polska (miejsca: I,II,III,VI,IX). Na I miejscu dr Krzysztof Ginalski z ICM UW. Oto wyniki najnowszego (koniec 2004) CASP6:

NF scoring (NF - New Folds)

Group ID#, Name

100 Baker
021 Kolinski@Bujnicki
450 Ginalski
166 Karplus
176 Skolnick_Zhang

In CM category (Comparative modeling)

450 Ginalski
491 Venclovas
021 Kolinski@Bujnicki
176 Skolnick-Zhang

FR/H category (Fold recognition/ Homology)

450 Ginalski
035 GeneSilico
272 CBRC-3D
100 Baker
021 Kolinski@Bujnicki
604 Baker
003 Jones
561 Fisher
176 Skolnick-Zhang

Wiecej w : <http://biocomp.chem.uw.edu.pl/files/casp/index.html.en>

Komentarz Redakcji: mozemy w przyszosci zapomniec o Malyszu, o Zwirce i Wigurze, ale nie powinniśmy zapomniec o tym... Czy nasze Panstwo potrafi wykorzystac swoja szanse?

RANKING SWIATOWY "TOP CODER"

Trwa nieustajacy ranking swiatowy Wydzialow Informatyki. Wlasnie z drugiego miejsca na prowadzenie wyszedl Uniwersytet Warszawski. Oto aktualna lista (jej poczatek):

1. Uniwersytet Warszawski
2. MIT
3. Stanford
4. Caltech
5. U.Waterloo
6. Zhe Jiang Univ.
7. Belarusian State
8. Illinois Urbana-Champaign
9. Michigan Ann Arbor
10. Sofia State Univ.

Wiecej szczegolow:

http://www.topcoder.com/stat?&c=school_avg_rating

Komentarz Redakcji: taki sam jak poprzednio...

PROMOCJA = ZERO

Takie informacje jak wyzej nie powinny byc podawane w PSI* (choc jest to czasopismo elitarne i trzymajace reke na pulsie wydarzen). Polskie osiagniecia sa, tylko nie ma systemu, który by je wyciagal na swiatlo dzienne. Wiadomosc od dziennikarzy: z polskich uczelni tylko AGH stworzyl porzadny system informacji dla mediow. Tu nawet nie tyle chodzi o przenikniecie informacji, co o spowodowanie reorganizacji nauki, aby takie osiagniecia przyjac i wykorzystac. Takie info można wykorzystac nawet politycznie, w koncu na listach nie ma ani Putina, ani Chiraca, ani Bundeskanzlera i wielu innych.

ZAGADKA ROZWIAZANA – W TRYPLECIE SPINY SA NIEROWNOLEGLE

W Psi*2 byla zagadka: Prosze podac scisla wartosc kata miedzy spinami dwoch elektronow w stanie singletowym i spinami dwoch elektronow w stanie trypletowym.

Pisze dr Jacek Jakowski (Univ.Utah, dawniej z UW):

Rozwiazanie:

Nalezy zastosowac regule trojkata do dodawania wektorow spinow:

$$s_1 + s_2 = s_{\text{tot}}$$

Dlugosci s_1 i s_2 dla spinu pojedynczego elektronu sa sobie rowne

$$|s_1| = |s_2| = \sqrt{1/2 * (1 + 1/2)} = \sqrt{3/4}$$

1) singlet

całkowity spin s_{tot} w stanie singletowym wynosi 0 zatem $|s_{tot}|=0$ co oznacza, że s_1 musi być dokładnie przeciwnie skierowany do s_2 zatem wartość kąta wynosi 180 stopni

2) tryplet

w stanie trypletowym kwadrat całkowitego spinu wynosi $1*(1+1)=2$. Zatem długość całkowitego

wektora spinu wynosi $|s_{tot}| = \sqrt{2}$

Aby znaleźć wartość szukanego kąta należy więc rozwiązać trójkąt o bokach

$|s_1|=|s_2|=\sqrt{3/4}$ i $|s|=\sqrt{2}$.

Szukany kąt jest dopełnieniem do 180 stopni kąta przeciwległego do boku $|s_{tot}|$ i wynosi więc $2*\arccos(|s_{tot}|/(2*|s_1|)) = 2*\arccos(\sqrt{2/3}) = 70.529$ stopnia

LP: To jest dobra odpowiedź. Zdziwiałem się, że doszło to do mnie dopiero niedawno (po wyprowadzeniu podobnym do tego z rozwiązania p.dra Jacka Jakowskiego), że ten kąt jest STALY, można powiedzieć jest stała Wszechświata. Z singletem jest prosto: spiny są antyrownoległe i to wychodzi tak, jak uzyskał p.Jacek. Z trypletem jest ciekawiej. Mówimy o równoległych spinach, a one za diabła nie chcą być równoległe. Mamy trzy komponenty stanu trypletowego. Komponenta z $M_S=1$ to dwa spiny elektronowe tworzące kąt 54.736 stopni z osią kwantowania i 70.529 stopnia ze sobą. Komponenta z $M_S=-1$ to dwa spiny elektronowe tworzące kąt $125.264=180-54.736$ z osią kwantowania i 70.529 stopnia ze sobą. I stan z $M_S=0$ to dwa spiny tworzące kąty: 54.736 i 125.264 z osią kwantowania i 70.529 stopnia ze sobą. Najciekawsze, że w tym ostatnim przypadku mamy: $54.736+54.736+70.529=180$ stopni czyli oba spiny leżą w płaszczyźnie przechodzącej przez osie kwantowania.

W REWANZU ZAGADKA JACKA

Na egzamin z chemii kwantowej przychodzi student, który nie jest zbyt dobrze przygotowany. Egzamin nie idzie mu zbyt dobrze. Do odpowiedzi zostało mu już ostatnie pytanie od odpowiedzi na

które zależy czy zdal czy też oblał. Student musi wybrać jedną z odpowiedzi (a), (b) lub (c), tylko jedna z nich jest właściwa.

Niestety student nie ma pojęcia która z odpowiedzi jest prawdziwa, postanawia więc strzelać i wybiera jedną z odpowiedzi. Profesor widząc wahanie i czując sympatię do tego studenta bardzo chciałby

mu pomóc. Niestety profesor nie może powiedzieć która odpowiedź jest prawdziwa gdyż byłoby to nieuczciwe

względem pozostałych studentów, postanawia więc

ułatwić studentowi nieco "strzelanie" i skreśla jedną z pozostałych dwóch odpowiedzi (oczywiście

robi to w taki sposób aby pozostawić możliwość właściwej odpowiedzi) oraz proponuje studentowi

możliwość zmiany odpowiedzi. W tym momencie są już tylko dwie możliwości do wyboru, z których jedna

prowadzi do pozytywnie zakończonego egzaminu zaś druga do oblań. Co powinien zrobić student aby

zmaksymalizować szansę wybrania właściwej odpowiedzi a tym samym na pozytywne zakończenie egzaminu?

- pozostać przy uprzednio dokonanej wyborze

- zmienić swój wybór na drugą z pozostałych możliwości

PROSBA SPECJALNA PROF.SADLEJA

Andrzej Sadlej poprosił mnie, abym zamieścił informacje o tym, jakie ma on dobre serce. Edytka Malolepsza kończy u mnie doktorat. Dalem jej jako termin napisania rozprawy 3 miesiące. AJS natychmiast do niej napisał, że aby skrócić jej cierpienia poprosił mnie, abym termin ten skrócił do dwóch miesięcy.

CALL FOR PAPERS

Drodzy, przesyłajcie mi krótkie wiadomości do publikacji w Psi*. Może ktos, chce coś pozyczyć, poradzić się. Najbardziej cieszyłbym się, gdyby zaczęły się dyskusje o chemii, ale nie za bardzo specjalistyczne.