

## Wiązania chemiczne

- Proszę skopiować pliki potrzebne do sprawdzianu:

**cp -r /tmp/tmp\_teofp/final-project/ ~/**

Geometryczne konfiguracje cząsteczek podane są w plikach **.inp**.

Pliki **.inp** zorganizowane są w następujący sposób:

nr. linii	zawartość linii
1	liczba atomów
2 - ...	nazwa atomu + współrzędne atomu w jednostkach atomowych

Pliki w formacie **.inp** znajdują się w katalogu **~/final-project/** (który należy skopiować jak pokazano powyżej): **1.inp, 2.inp, 3.inp, 4.inp, 5.inp, CH4.inp**.

- **Nowy plik w formacie .xyz** : Program musi przeczytać z klawiatury nazwę wejściowego pliku w formacie **.inp** i utworzyć z niego plik w formacie **.xyz** (należy również zmienić współrzędne z jednostek atomowych na Å: 1 Å = 1.8997 Bohr)

Pliki **.xyz**, które trzeba utworzyć, są zorganizowane w następujący sposób:

nr. linii	zawartość linii
1	liczba atomów
2	komentarz (albo pusta linia)
3 - ...	nazwa + współrzędne atomu w jednostkach Å

- **Wiązania chemiczne**: Na podstawie utworzonego pliku w formacie **.xyz** program musi odczytać początkowe dane (charakterystykę cząsteczki), na podstawie czego program powinien drukować pomiędzy którymi atomami występują wiązania chemiczne (kierując się poniższą tabelą typowych długości wiązań). Dane o których muszą być wydrukowane do nowego pliku **bonds.out** w następującym formacie: w każdej linii pliku jedno wiązanie:

**numer-atomu : numer-atomu**

Na przykład:

**1 : 2**

(Numeracja atomów musi być zgodnie z plikiem **.xyz** i zaczynać się od 1)

Wiązania nie mogą powtarzać się: **1 : 20** jest równoważne **20 : 1**, dlatego w pliku wyjściowym tylko jedno z tych wiązań musi być podane.

### Typowe długości wiązań:

C — H	1.09 Å	C — F	1.33 Å	O — H	0.96 Å
C — C	1.54 Å	C — Cl	1.77 Å	C — O	1.43 Å
C = C	1.34 Å	C — Br	1.93 Å	C = O	1.23 Å
C ≡ C	1.20 Å	C — I	2.14 Å		

Należy wziąć pod uwagę, że długości wiązań w różnych cząsteczkach mogą różnić się od wskazanych powyżej, a różnica w górę nie przekracza 0.12 Å, a różnica w dół oczywiście wskazuje na obecność wiązania.

Wzór do obliczenia odległości między atomami A i B:

$$d = \sqrt{(x_A - x_B)^2 + (y_A - y_B)^2 + (z_A - z_B)^2} \quad (1)$$

Przykładowy plik wejściowy oraz pliki wyjściowe znajdą Państwo skopiowanym katalogu w folderze test (`~/final-project/test`): **CH4.inp**, **CH4.xyz**, **bonds-CH4.out**. Plik **CH4.inp** również znajduje się w katalogu (`~/final-project/`), mogą Państwo używać go, aby przetestować swój program i sprawdzić czy wszystko działa poprawnie — zgodnie z wyjściowymi plikami w folderze **test**.