



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 4, 20.05.2009

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

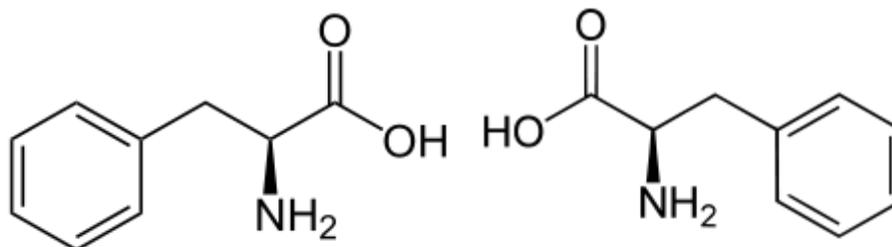
Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Linux Chemie-Computer-Labor

Aufgabe 6: C-C Bindungen

Bestimmen Sie mit Hilfe des UFF Kraftfeldes die C-C und C-H Bindungslängen in a) Ethan (C_2H_6), b) Ethen (C_2H_4), c) Ethin (C_2H_2), und d) 1,3-Butadien ($CH_2=CH-CH=CH_2$). Benutzen Sie dazu Ihr Lieblingssoftwarepaket (GAUSSIAN, Materials Studio, ...).

Aufgabe 7: Phenylalanin

Phenylalanin ist eine chirale, aromatische α -Aminosäure mit hydrophober Seitenkette, die in ihrer L-Form in der Natur als Proteinbestandteil vorkommt und für den Menschen eine essentielle proteino gene, d.h. am Eiweißaufbau beteiligte Aminosäure ist.



(S)-Phenylalanin (links) bzw. (R)-Phenylalanin (rechts)

Erstellen Sie beide enantiomere Formen von Phenylalanin und optimieren Sie ihre Geometrien mit dem UFF Kraftfeld. Vergleichen Sie die Strukturen und ihre Gesamtenergien. Beginnen Sie mit verschiedenen Anfangskonformationen. Erhalten Sie jedesmal das gleiche Minimum?