



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 3, 02.05.2012

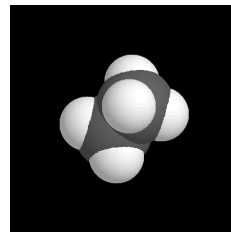
Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Linux Chemie-Computer-Labor, O26/198, am Freitag, den 11.05.2012

Aufgabe 5: Molekularmechanik

a) Berechnen Sie mit Hilfe der beiden Kraftfelder UFF und Dreiding die Gesamtenergie von Ethan (C_2H_6) in der optimierten Struktur, d.h. in der Struktur mit der minimalen Gesamtenergie. Führen Sie die Rechnungen, falls möglich, sowohl mit *GAUSSIAN* als auch mit *Materials Studio* durch. Gibt es Unterschiede? Was besagt diese Gesamtenergie?



b) Berechnen Sie die Energie des Ethan-Moleküls als Funktion des Diederwinkels mit beiden Kraftfeldern. Wie groß ist der Unterschied der Energie in der ekliptischen und der gestaffelten Konformation?

