



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 3, 14.05.2014

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 Mittwoch, den 21.05.2014.

Aufgabe 7: 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, ...). Wählen Sie auch ein anderes Kraftfeld. Wie stark hängen die Bindungslängen von der Wahl des Kraftfeldes ab?

