



## Theoretische Modellierung und Simulation

### Übungsblatt Nr. 3, 12.05.2015

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

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Chemie-Computer-Labor, O26/198, am Freitag, dem 15.05.2014.

---

#### 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?

