



## Theoretische Modellierung und Simulation

### Übungsblatt Nr. 10, 10.07.2019

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

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

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen am Freitag, dem 12.07.2019.

---

#### **Aufgabe 19:** Quantenchemische Rechnungen zur Organischen Chemie

In dieser Aufgabe sollen Sie Eigenschaften von Molekülen berechnen, mit denen Sie sich schon im organischen Praktikum beschäftigt haben. Konkret geht es um den Versuch P6, in dem 2-(m-Nitrophenyl)-1,3-dioxolan hergestellt wurde. Als Methode sollen Sie Dichtefunktionaltheorie (DFT) mit dem B3LYP Funktional verwenden, als Basis soll 6-31G gewählt werden.

**Hinweis:** Arbeiten Sie in Gruppen zu zweit zusammen und teilen Sie die Geometrieoptimierungen und IR-Rechnungen sinnvoll untereinander auf

- Optimieren Sie die Struktur des 3-Nitrobenzaldehyd. Untersuchen Sie auch die Schwingungsfrequenzen und elektronischen Eigenschaften. Für das Produkt 2-(m-Nitrophenyl)-1,3-dioxolan finden Sie die optimierte Struktur bereits auf der Homepage, so dass hier die Optimierung wegfällt. Optimieren Sie für Vergleiche auch die Strukturen von Wasser und Ethylenglykol.
- Berechnen Sie die Reaktionsenergie der Acetalbildung. Verläuft die Acetalbildung endotherm oder exotherm? Ist die Reaktion endergonisch oder exergonisch? Welche dieser Fragen können mit Hilfe der durchgeführten quantenchemischen Rechnungen beantwortet werden?
- Wie ändert sich das IR-Spektrum durch die Acetalbildung? Entsprechen die optimierten Strukturen wirklich Energieminima? Vergleichen Sie die berechneten IR-Spektren mit experimentellen IR-Spektren. Was fällt dabei auf? Wie können die Unterschiede erklärt werden?
- Untersuchen Sie auch die elektronischen Eigenschaften (Grenzorbitale, elektrostatische Ladungsverteilung) der Moleküle.