

Aufgabe 13

In dieser Übung wollen wir uns mit den beiden Programmen Chem3D und GAMESS vertraut machen. Als Beispiel wollen wir die beiden Tautomere Acetaldehyd $\text{CH}_3\text{-CHO}$ und Hydroxyethen $\text{CH}_2\text{=CHOH}$ vergleichen. Starten Sie zunächst Chem3D und zeichnen im ChemDraw-Feld das Molekül Acetaldehyd. Bevor Sie eine Rechnung machen, sollten Sie einen Namen vergeben. Dazu gehen Sie unter Datei auf "Speichern unter", ersetzen das "untitled-1" vor dem Punkt durch z.B. "Keto-1" und speichern ab. Denken Sie daran, vor jeder neuen Rechnung einen neuen Namen zu vergeben, so dass die alten Ergebnisse nicht überschrieben werden.

Führen Sie nun mit GAMESS jeweils eine Geometrieoptimierung mit den folgenden Basissätzen durch:

- 3-21G
- 6-31G
- 6-31G, zusätzlich bei Polarisation auswählen d und p
- TZV, zusätzlich bei Polarisation auswählen d und p

Notieren Sie sich die Werte für die Energie sowie für die C=O Bindungslänge (im Fenster internal Coordinates).

Wiederholen Sie nun die selben Rechnungen für das Tautomere, vergessen Sie nicht, auch diesen Rechnungen jeweils vorher einen Namen zu geben (z.B. Enol-1 etc.). Betrachten Sie für jeden Basissatz die Energiedifferenz zwischen beiden Tautomere. Vergleichen Sie das mit der Energieänderung mit steigender Größe des Basissatzes. Was schließen Sie daraus?

Aufgabe 14

Vergleichen Sie in ähnlicher Weise wie in der obigen Aufgabe die beiden Isomere Propen und Cyclopropan.

Aufgabe 15

Führen Sie HF-Rechnungen mit der Basis 6-31G für die zyklischen Alkane Cyclopropan bis Cyclohexan durch. Die Strukturen sind im "Baukasten" von Chem3D enthalten. Wie verhalten sich die Energien als Funktion der Molekülgröße? Wie nimmt die benötigte Rechenzeit zu? (Diese Information finden Sie am Ende der Output-Files). Was hätten Sie erwartet?