

MODELOWANIE MOLEKULARNE (06.05.09)

1. Dokończyć ćw. 2 oraz 3 z poprzednich zajęć
(www.chemia.uj.edu.pl/~michalak/PCK2009/)

UWAGA: Przed przystąpieniem do ćw. 3 (część 2) należy ściągnąć przykładowy input programu ADF ze strony www.chemia.uj.edu.pl/~wkulig

2. Za pomocą programu *molden* zbudować następujące molekuly:
 - a) metan
 - b) alkohol etylowy
 - c) n-butan (w konformacji naprzeciwległej, naprzemianległej oraz skośnej (gauche))
 - d) 1,3-butadien (w konformacji *cis* i *trans*)

UWAGA! Program *molden* uruchamiamy poprzez wpisanie w powłoce polecenia *molden&*

3. Otworzyć instrukcje do ćw. 4 oraz 5 i postępować zgodnie z nimi
(www.chemia.uj.edu.pl/~michalak/PCK2009/)