



**Übungsblatt 4** Abgabe bis 29.05.17 vor der Übung

**Vorname, Name:**

**Matrikelnummer:**

1. Um zwei verschiedene Konformere in einem spektroskopischen Experiment unterscheiden zu können, müssen diese zumindest in einem Besetzungsverhältnis von 1:100 zueinander stehen. Die Barriere für die Rotation um die entsprechende Einfachbindung betrage  $4000 \text{ J mol}^{-1}$ .

- a) Bei welcher Temperatur ist dieses Besetzungsverhältnis erreicht ?
- b) Reicht für dieses Experiment die Kühlung mit flüssigem Stickstoff (77 K) aus ?

$R = k \cdot N_A = 8.3144 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$  (30 Punkte)  $\frac{N_i}{N_j} = e^{\frac{-\Delta E}{kT}}$

2. Markieren Sie die jeweils richtige(n) Aussagen. (8 Punkte)

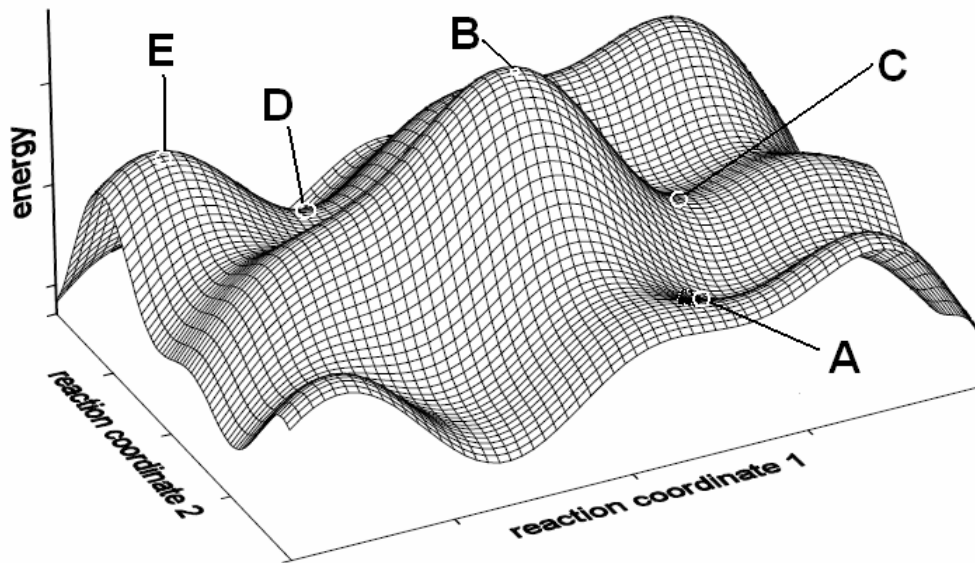
Mit der *steepest descent* Methode

- a) gelangt man praktisch immer in ein Minimum
- b) gelangt man in das nächstgelegene Minimum
- c) gelangt man in das globale Minimum

Um das globale Minimum zu finden eignen sich folgende Optimierungsverfahren:

- a) *simulated annealing*
- b) *steepest descent*
- c) Genetischer Algorithmus

3. a) Weisen Sie den Punkten A-E auf der Energiehyperfläche die korrekte(n) Bezeichnung(en) zu (Ankreuzen). (10 Punkte)

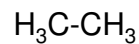


	A	B	C	D	E
Minimum	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Übergangszustand bzw. Sattelpunkt	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Sattelpunkt höherer Ordnung	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

b) Zeichnen Sie die Spur ein, die eine *steepest descent* Optimierung beginnend an Punkt C in Richtung A nehmen würde. Verwenden Sie als Schrittweite die Diagonale zwischen den Gitterpunkten (10 Punkte)

c) Was könnte passieren, wenn Sie eine Optimierung ohne Richtungsvorgabe am Punkt B starten ? (10 Punkte)

4. a) Wieviele Bindungen (A-B) weisen die folgenden Moleküle auf ? (13 Punkte)



b) Wieviele Bindungswinkel (A-B-C) gibt es in den obigen Molekülen ? (19 Punkte)  
 (Hinweis: C-B-A = A-B-C und zählt nur einmal) Tipp: Zeichnen Sie die Strukturformeln und nummerieren Sie die Atome.