



Übungsblatt 4 Abgabe bis 20.05.19 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 mindestens 1:100 zueinander stehen. Die Barriere für die Rotation um die entsprechende Einfachbindung betrage 4000 J mol^{-1} .

a) Bei welcher Temperatur ist dieses Besetzungsverhältnis erreicht?

b) Reicht für dieses Experiment die Kühlung mit flüssigem Stickstoff (77 K) aus, oder muß man zu noch tieferen Temperaturen gehen?

$$R = k \cdot N_A = 8.3144 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

(30 Punkte)

$$\frac{N_i}{N_j} = e^{\frac{-\Delta E}{kT}}$$

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

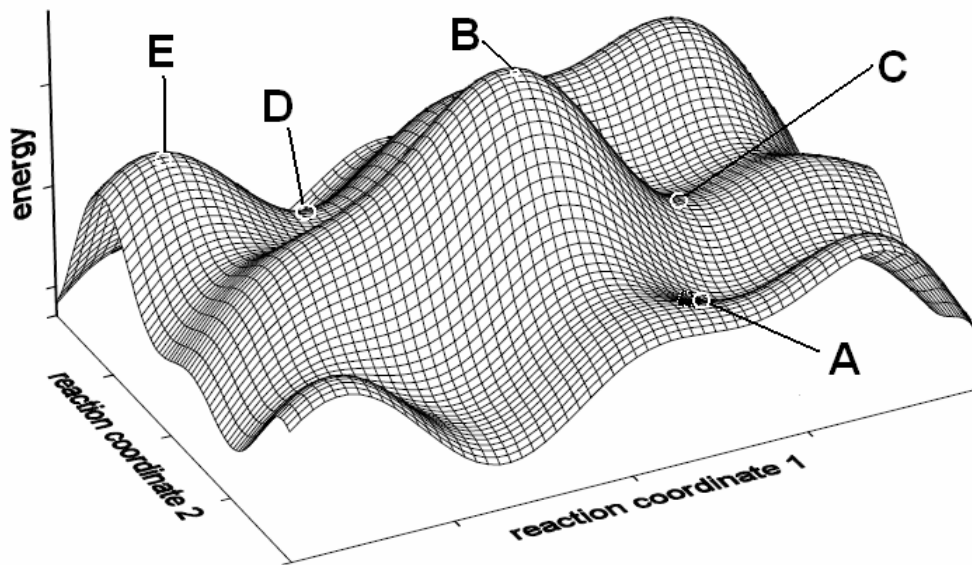
Mit der *steepest descent* Methode

- 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)

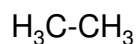


	A	B	C	D	E
Minimum	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Übergangszustand bzw. Sattelpunkt	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>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