

## EXAMEN DE FISICOQUÍMICA II. 9 de marzo de 2001

---

### PRIMERA PARTE: QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

Esta primer parte incluye 6 preguntas que corresponden al 60% del total del examen. Dispondrá de un tiempo máximo de 2 hs. para contestarlas. Cada pregunta tiene un valor máximo asignado de 1 punto. **La suficiencia en esta parte del examen se logra obteniendo un mínimo de 3 de los 6 puntos disponibles** para la misma.

- 1) El modelo de Hartree-Fock permite abordar el estudio de sistemas polielectrónicos cuya ecuación de Schrödinger no puede ser resuelta analíticamente. a) Explique cuál es la base física de este modelo y que simplificación del problema se logra con la misma; b) indique porqué es necesario resolver las ecuaciones resultantes en forma iterativa autoconsistente (SCF).
- 2) a) Defina el concepto de orbital molecular (OM), indicando qué tipos de orbitales pueden formarse en una molécula diatómica. b) En el contexto de la Teoría de Orbitales Moleculares, ¿qué características deben tener los orbitales atómicos que se van a combinar para lograr la formación de los orbitales moleculares? c) En base a la experiencia directa que ha obtenido en este curso, indique que propiedades de una molécula es posible predecir una vez que ha calculado sus OM.
- 3) Suponga que se le solicita estudiar tres problemas concretos:
  - i) Estimar la diferencia de energía existente entre dos isómeros de una molécula orgánica pequeña (por ej. alcohol vinílico,  $\text{CH}_2=\text{CHOH}$ ) de la que no conoce distancias y ángulos de enlace.
  - ii) Analizar la densidad electrónica total y el potencial electrostático molecular en una macromolécula de interés biológico (por ej. un ácido nucleico o una proteína) de la que conoce la estructura cristalográfica;
  - iii) Calcular la energía de activación de una transformación química que involucra moléculas de tamaño pequeño.

**Para cada uno de estos tres problemas** indique que tipo de método de los estudiados en este curso elegiría para realizar el estudio, fundamentando en forma detallada los elementos en los que basa su elección. Recuerde analizar los siguientes aspectos: a) ¿es necesario realizar optimización de geometría?; b) ¿es necesario utilizar un método cuántico o es posible encarar el problema con métodos clásicos?; c) en caso que un método clásico sea suficiente, ¿que campo de fuerza específico utilizaría?; d) en caso que sea necesario emplear un método cuántico, discuta el tipo específico de método, y si la correlación electrónica es necesaria para determinar la propiedad con exactitud.

- 4) a) Para cada una de las clases de espectroscopía molecular estudiadas en el curso (microondas, infrarrojo, UV-vis, Raman, NMR, EPR) explique que tipo de transición es la que da origen a la señal, y que características generales debe poseer una molécula para ser activa. b) En caso de desear modelar un espectro UV-vis ¿qué tipo de método teórico sería imprescindible utilizar? (i.e.: ¿clásico? ¿cuántico? ¿con o sin correlación electrónica?). ¿Y para un espectro infrarrojo?
- 5) En el contexto de la Espectroscopía Molecular, explique qué es el momento dipolar de transición, cómo se calcula el mismo y que relación tiene con la intensidad de una transición dada.
- 6) a) ¿Cuál es el objetivo fundamental de la Termodinámica Estadística? b) ¿Qué rol cumple la función de partición molecular en la misma?.

**NOTA: EN EL CASO QUE INCLUYA ECUACIONES EN SUS RESPUESTAS, NO OLVIDE IDENTIFICAR CLARAMENTE CADA UNA DE LAS MAGNITUDES INVOLUCRADAS. DE NO HACERLO, ESTO AFECTA EL PUNTAJE QUE OBTIENE POR SU RESPUESTA!!**

## NUEVO FUNCIONAMIENTO DEL EXAMEN DE FISICOQUIMICA II

A partir del año 2001 cada parte del examen correspondiente a los dos módulos que integran el curso se rendirá en días separados (habitualmente se programará para un viernes el examen sobre el módulo de Química Teórica, y el examen sobre el módulo de Electroquímica será tomado el martes sucesivo).

*El número de preguntas global y su grado de dificultad será el mismo que el utilizado hasta el momento. El tiempo global disponible se ve aumentado en media hora (se asigna un tiempo máximo de 2 hs para las preguntas de QTC y de 1.5 hs para las preguntas y ejercicios de EQ).*

**El día lunes siguiente al examen** del módulo de Química Teórica se publicará en la cartelera del LQTC un listado provisional de resultados en el que se indicarán tres posibilidades:

- a) **APROBADO QTC:** el estudiante ha logrado francamente la suficiencia en este módulo (3 o más puntos sobre los 6 disponibles), de lograrla la suficiencia también en el módulo EQ, aprueba el examen.
- b) **Dudoso QTC:** el estudiante no ha logrado la suficiencia en este módulo, pero se encuentra en la franja de 2.7-2.9/6 puntos. Puede llegar a aprobar el examen en caso de obtener una muy buena calificación en el módulo de EQ.
- c) **APLAZADO QTC:** el estudiante ha obtenido un puntaje notoriamente inferior al suficiente en este módulo, quedando ya determinado el resultado final de APLAZADO, deberá volver a rendir el examen en una fecha posterior.

En base a estos resultados el estudiante podrá decidir la conveniencia o no de presentarse a la segunda parte del examen.

**A partir de las 12 hs del lunes siguiente** a la toma de la primera parte del examen, aquéllos estudiantes que la hayan rendido, podrán consultar telefónicamente en el LQTC su resultado. En un futuro esperamos poder brindar esta información también a través de la página Web del LQTC.

**Las calificaciones finales del examen estarán publicadas dentro de los 10 días hábiles siguientes a la primer parte del examen, como indica el reglamento general de cursos y exámenes de la Facultad de Ciencias.**

**RECOMENDACION ESPECIAL:** Si bien el número de estudiantes que aplaza no es despreciable (un 15-20% aproximadamente en cada fecha), muy pocos acuden al Laboratorio para ver la corrección de su examen o utilizan las clases de consulta para eliminar dudas y aclarar conceptos antes de presentarse al examen. A aquéllos estudiantes que no logren superar la evaluación en esta instancia los exhortamos especialmente a aprovechar estas posibilidades de atención por parte del cuerpo docente como apoyo para lograr un resultado exitoso en su próximo intento.