

EXAMEN DE FISICOQUÍMICA II. 13 de agosto de 2001

PRIMERA PARTE: MODULO DE ESTRUCTURA Y PROPIEDADES MOLECULARES

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. Ante consultas planteadas al respecto, se hace especial énfasis sobre el hecho que la aprobación del examen de la asignatura Fisicoquímica II requiere obtener la mitad de los puntos disponibles en cada parte (EPM y Electroquímica) rendidas dentro del mismo período de exámenes (en el presente caso el lunes 13 y el viernes 17 de agosto respectivamente, quien no se presenta a la segunda parte reprueba el examen).

- 1) Al resolver la Ecuación de Schrödinger (ES) para un electrón en un átomo de Hidrógeno o hidrogenoide: a) ¿cómo se llama la función de onda que obtiene? b) ¿cuáles son los números cuánticos que determinan la **forma** de estas funciones de onda y el valor de energía asociado a cada una de ellas? c) ¿existe degeneración? (fundamente) ¿ocurre lo mismo en el caso que el átomo sea polieletrónico? d) ¿Qué aproximación fundamental le permite resolver la ES para los casos con dos o más electrones?.
- 2) a) Indique que tipo de orbitales moleculares pueden formarse en una molécula diatómica, representando gráficamente las principales características que le permiten reconocer a cada uno de ellos. b) ¿cuáles son las dos grandes teorías que se emplean para explicar la formación del enlace químico dentro de un tratamiento cuántico de la estructura molecular? Compare principales similitudes y diferencias existentes entre ellas.
- 3) Describa en forma esquemática los distintos tipos de métodos de modelado estudiados en este curso que le permiten analizar la estructura y propiedades moleculares. En cada caso especifique: a) base física del método; b) costo relativo del cálculo; c) tipo de propiedades moleculares que es posible calcular y cuáles no puede describir; d) proporciones un ejemplo concreto de problema para el cual Ud. recomendaría su uso.
- 4) a) Utilice el tratamiento de Einstein para explicar cuales son los factores de los que depende la intensidad de una señal espectroscópica. b) En base a los elementos anteriores indique si espera observar fenómenos de absorción estimulada y/o emisión estimulada y/o emisión espontánea asociados a los cambios entre estados rotacionales, vibracionales y electrónicos.
- 5) a) Explique qué son las reglas de selección en Espectroscopía y de que tipo pueden ser las mismas. b) discuta si las moléculas H_2 , CO y CH_4 pueden ser detectadas en los siguientes tipos de espectroscopía: Microondas, Raman rotacional, Infrarrojo, UV-vis y NMR.
- 6) a) ¿Cuál es el propósito de la Termodinámica Estadística? b) ¿Qué es y qué rol cumple la configuración dominante en este tipo de tratamiento?

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!!