

EXAMEN DE FISICOQUÍMICA II. 15 de febrero de 2002

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) Compare pros y contras de las dos grandes teorías cuánticas estudiadas para la construcción de los orbitales moleculares (TOM y TEV). Explique en cada caso como se representa el enlace, cómo se vincula el orbital molecular con los orbitales atómicos y que ventajas y que limitaciones principales presenta cada una de ellas en la descripción de la estructura molecular.
- 3) Suponga que se le solicita estudiar tres problemas concretos:
 - i) Estimar cuál de los isómeros cis y trans de la molécula de N-metilacetamida ($\text{CH}_3\text{-NH-C=O-CH}_3$) es más estable, determinando las diferencias en su estructura (distancias y ángulos de enlace).
 - ii) Analizar la densidad electrónica total y el potencial electrostático molecular en una macromolécula de interés biológico (por ej. el sitio activo de una enzima) de la que conoce la estructura cristalográfica;
 - iii) Calcular la energía de activación de una transformación química que involucra moléculas de tamaño pequeño (por ejemplo el proceso de disociación del formaldehído para dar hidrógeno molecular y monóxido de carbono $\text{H}_2\text{C=O} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CO}$).

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) ¿que tipo de método -cuántico o clásico- se debe/puede emplear?; c) si opta por un método clásico especifique el campo de fuerza; d) si opta por un método cuántico, indique tipo específico de método y si la correlación electrónica es necesaria para determinar la propiedad con exactitud.

- 4) Considere todas las clases de espectroscopía molecular estudiadas en el curso (Microondas, Raman rotacional, IR, UV-visible, NMR, EPR) a) indique a que tipo de transición molecular corresponde el proceso de interacción con la radiación; b) ordénelas de menor a mayor en base a la magnitud del cambio de energía requerido para el proceso; c) indique que tipo de información puede determinar con una de ellas.
- 5) a) Indique que a que tipo de proceso espectroscópico (absorción, emisión, espontáneo, estimulado por la radiación, zona del espectro, etc.) corresponden los fenómenos de Fluorescencia y Fosforescencia. b) Explique las diferencias existentes entre ambos tipos de procesos haciendo uso de esquemas de los estados electrónicos involucrados en los mismos.
- 6) a) ¿Cuál es el objetivo fundamental de la Termodinámica Estadística? b) ¿Qué propiedades puede calcular con la misma? c) ¿Qué información necesita conocer para poder calcularlas?

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 rinde en días separados (habitualmente se programará para un viernes el examen sobre el módulo de Estructura y Propiedades Moleculares EPM, y el examen sobre el módulo de Electroquímica EQ 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 EPM y de 1.5 hs para las preguntas y ejercicios de EQ).

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

- a) **SUFICIENTE EPM:** el estudiante ha logrado francamente la suficiencia en este módulo (3 o más puntos sobre los 6 disponibles), de lograr la suficiencia también en el módulo EQ, aprueba el examen.
- b) **Dudoso EPM:** 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) **INSUFICIENTE EPM:** el estudiante ha obtenido un puntaje notoriamente inferior al suficiente en este módulo, quedando ya determinado el resultado final de APLAZADO, si lo desea puede rendir la parte de Electroquímica, pero independientemente del resultado obtenido en la misma deberá volver a rendir el examen total de Físicoquímica II 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, aquellos estudiantes que la hayan rendido, también podrán consultar sus resultados desde la página Web del LQTC (<http://luna.fcien.edu.uy>)

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 de ellos 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 aquellos 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.