

EXAMEN DE FISICOQUÍMICA II. 18 de agosto de 2000

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

Cada pregunta de las 6 planteadas (que corresponden al 60% del total del examen) 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.**

Lea atentamente el texto de cada pregunta antes de proceder a contestarlas. Para facilitar su corrección rápida responda esta parte del examen en hoja separada a la parte de Electroquímica. Muchas gracias.

- 1) La aproximación de Hartree-Fock resulta fundamental para poder estudiar sistemas polieletrónicos. 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); c) ¿qué tipo de error se comete en el cálculo de la energía al utilizar esa aproximación?
- 2) Explique qué relación existe entre los orbitales atómicos y los moleculares en el contexto de la teoría OM-CLAO (MO-LCAO). Especifique que tipos de orbitales moleculares pueden obtenerse y que factores son los que determinan su formación y características.
- 3) Describa qué elementos fundamentales deben considerarse al momento de elegir una metodología de modelado molecular adecuada para estudiar un problema concreto. b) **escoja uno** de los siguientes problemas a modelar y discuta para el mismo que tipo de cálculos realizaría (single point u optimización de geometría) y con cuál método:
 - Predicción estructural y análisis conformacional de una proteína de 256 residuos y de una molécula de dimensiones medias como la glucosa.
 - Estudio de la energía de activación y energía de reacción en una transformación química que involucra especies orgánicas de tamaño pequeño.
 - Estudio del potencial molecular electrostático de una doble hebra de ADN con 12 pares de bases de la que se dispone de la estructura cristalográfica.
- 4) A diferencia de lo que ocurre con los espectros electrónicos atómicos (líneas de intensidad y longitud de onda bien definidas), al estudiar la absorción UV-vis de las moléculas se obtienen espectros de bandas. Explique a que se debe esta observación, basándose en el principio de Franck-Condon para indicar que elemento determina el máximo de intensidad de la banda obtenida.
- 5) Describa las bases conceptuales de la espectroscopía de resonancia magnético nuclear (RMN) y la utilidad que puede tener esta técnica. ¿Qué diferencia tiene esta técnica con la de EPR?
- 6) Explique cuál es la utilidad de la Termodinámica Estadística, que rol cumple la función de partición en la misma, y que datos necesita conocer para poder calcularla.

NOTA: EN EL CASO QUE INCLUYA ECUACIONES EN SUS RESPUESTAS, NO OLVIDE IDENTIFICAR CLARAMENTE CADA UNA DE LAS MAGNITUDES INVOLUCRADAS.

