

EXAMEN DE FISICOQUÍMICA II. 25 de febrero del 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 posibles para la misma.**

Lea atentamente el texto de cada pregunta antes de proceder a contestarlas, y por favor responda esta parte del examen en hoja separada a las del módulo de Electroquímica para facilitar su corrección. Muchas gracias.

1) a) Explique que se entiende por spin de una partícula, indicando como se clasifican las partículas subatómicas en función de que su spin sea entero o semientero. b) indique como calcula la multiplicidad de spin de un átomo o molécula, y diga cuanto vale la misma para el caso de un átomo con número impar de electrones y para una molécula con configuración de capa cerrada.

2) a) Explique que diferencia hay entre realizar un cálculo single-point y una optimización de geometría; b) ejemplifique en que caso conviene o es imprescindible aplicar uno u otro tipo de cálculo.

3) A continuación se proporciona una lista de problemas que se desea estudiar con modelos de la Química Teórica y Computacional. En la columna de la derecha encontrará un menú de niveles de cálculos disponibles en el programa que puede usar para realizar estos estudios. Indique que método elegiría en cada caso, justificando el/los motivo/s en los que basa su elección. (Nota: puede proponer más de una metodología para determinar una misma propiedad).

PROPIEDAD A DETERMINAR	METODOLOGIAS DISPONIBLES
p1) Estudio de la energía relativa y estructura de los distintos conformeros de una molécula orgánica mediana.	m1) Mecánica Molecular, campo de fuerza MM+ m2) Mecánica Molecular, campo de fuerza AMBER
p2) Determinación del potencial electrostático molecular del sitio activo de una enzima de 150 residuos.	m3) Metodo semiempírico PM3 m4) ab initio HF/6-321G m5) Metodo mixto de frontera
p3) Determinación de la energía de activación para una reacción química que involucra pequeñas moléculas orgánicas	m6) MP2/6-31G* (solo single-point) m7) CI

4) a) En el contexto de la espectroscopía molecular electrónica, explique a que se debe (dejando de lado los efectos de diseño experimental) que los espectros registrados sean de bandas y no de líneas bien definidas. b) ¿el principio de Franck-Condon le permite obtener alguna información sobre la intensidad de la banda registrada? ¿Cuál? Justifique su respuesta.

5) a) ¿A qué tipo de transición corresponde un espectro de microondas y qué propiedad física de las moléculas resulta fundamental para poder interpretar estos espectros?

6) Explique que tipo de información puede obtener a partir de un tratamiento basado en la Termodinámica Estadística, indicando el rol que cumplen las funciones de partición en este tipo de estudios.

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