

EXAMEN DE FISICOQUÍMICA II. 25 de junio 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) Enuncie el principio de Pauli y explique cuál es su origen empleando para deducirlo el determinante de Slater.
- 2) Explique en que base física descansa la aproximación de Born-Oppenheimer y que consecuencia tiene la aplicación de esta aproximación sobre la resolución de la ecuación de Schrödinger de una molécula.
- 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 se da un menú de niveles de cálculos disponibles en el programa a usar para 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) Estructura de las distintas conformaciones de una molécula orgánica pequeña.	m1) Mecánica Molecular, campo de fuerza MM+
p2) Diferencia HOMO-LUMO en una proteína de 150 aminoácidos.	m2) Mecánica Molecular, campo de fuerza AMBER
p3) Espectro UV-visible del eteno ($H_2C=CH_2$)	m3) Semiempírico PM3 m4) ab initio HF/6-31G m5) MP2/6-31G* (solo single-point) m6) Interacción de configuraciones

- 4) a) ¿De que factores depende la intensidad de una señal espectroscópica? b) ¿Cómo puede clasificar las distintas transiciones posibles en una molécula en función de que la intensidad de la señal espectroscópica asociada sea o no cercana a cero?
- 5) Indique qué clase de transición está involucrada en cada uno de los siguientes tipos de espectroscopía, y que utilidad puede tener cada una de ellas para determinar aspectos estructurales de una molécula:
a) Microondas; b) Infrarrojo; c) Raman; d) Resonancia Magnético Nuclear (NMR o RMN); e) Resonancia de Spin electrónico (ESR o EPR).
- 6) ¿Qué es una función de partición molecular? Indique qué datos son necesarios para calcularla y que información sobre un sistema macroscópico puede obtener a partir de ella.

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

