

EXAMEN DE FISICOQUÍMICA II. 4 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) ¿Cuál es la base física sobre la que descansa la aproximación de Hartree-Fock? b) ¿Es posible resolver la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno sin recurrir a dicha aproximación? Justifique su respuesta.
- 2) En el contexto de la Teoría de Orbitales Moleculares, explique en forma detallada cuáles son los elementos fundamentales de los orbitales atómicos a tener en cuenta para la formación de un orbital molecular.
- 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) Explique que es una regla de selección, diferenciando entre reglas de selección generales y específicas.
b) Teniendo en cuenta las reglas de selección generales, indique si la molécula H_2 es activa en infrarrojo y/o Raman.
- 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) ¿Cómo se define la entropía en el contexto de la T.E.? Coincide lo observado en el modelo estadístico con el límite clásico del tercer principio de la Termodinámica?

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

