

Evento evaluativo final (25%)

Junio, 2025
Profesor: Carlos Jiménez

Estudiante: _____

Documento: _____

I. Nomenclatura y generalidades de compuestos orgánicos.

1) (10%) Grupos funcionales y nomenclatura IUPAC.

a) Brinde un ejemplo de los siguientes grupos funcionales, mostrando una estructura de forma explícita en cada caso, que contenga solamente el grupo funcional solicitado, es decir, que no tenga varios grupos funcionales.

Grupos funcionales solicitados: *Aldehído, alqueno, ácido carboxílico, amida, alcohol.*

Sugerencia: Puede usar ChemSteck para dibujarlos o PubChem.

b) Tome un compuesto del *punto 1a*. Para cada elemento del compuesto, identifique si cumple o no la regla del octeto. Muestre los electrones solitarios según corresponda.

c) Use un (1) grupo funcional de su elección y, para la estructura establecida por usted, **enumere** los átomos de carbono y **determine el nombre** del compuesto en nomenclatura IUPAC.

2) (10%) Explique en qué consiste la hibridación sp^3 , sp^2 y sp en sistemas carbonosos. Brinde un ejemplo de cada una donde se observe la geometría en función de la hibridación. Explique.

3) (5%) Use tres compuestos orgánicos de su interés. Puede tratarse de medicamentos, compuestos presentes en seres vivos, en alimentos, plantas o compuestos sintéticos. Ingrese a PubChem y busque la información respectiva de los compuestos usados, su respectivo CID es y los usos de cada compuesto.

Descargue y los archivos en formato .sdf para usarlos posteriormente.

Compuesto	CID	Usos del compuesto (incluya referencias)

II. Minimización estructural mediante uso de teoría de funcionales de la densidad (DFT).

4) (10%) De acuerdo con lo visto en clase y complementado con consultas, diga qué y qué representa:

a) La ecuación de Schrödinger.

b) El Hamiltoniano

c) La función de onda

d) Diga qué es la aproximación de Born-Oppenheimer.

e) Mencione qué es el Hamiltoniano electrónico, qué significado, importancia utilidad y aplicación tiene.

f) Diga cuáles son los métodos Hartree-Fock and post Hartree-Fock. Use el material visto en clase (se encuentra en Uvirtual) y complemente con consultas que considere pertinentes.

g) Diga qué es teoría de funcionales de la densidad (DFT). Explique en qué consiste el *intercambio* y la *correlación*.

5) (10%) Use los compuestos del *punto 3*, además de los códigos GPAW y ASE.

a) Realice proceso de optimización (minimización de cada compuesto) usando DFT, particularmente el código GPAW. Explique cada línea de código usada, tanto desde el concepto como desde la ejecución y procesos que se realizan. **Sea tan detallado como lo considere pertinente.**

b) Para cada compuesto, mencione cuántos pasos se realizaron en el proceso de minimización. Visualice proceso de minimización usando ASE.

III. Minimización estructural, cálculo de frecuencias y visualización de orbitales moleculares, mediante uso de método semiempírico.

6) (15%) Use los compuestos del *punto 3*, además de los códigos xTB y ASE.

a) Realice proceso de optimización y cálculo de frecuencias para los tres compuestos del *punto 3*, además de las siguientes dos moléculas: H₂O (agua) y NH₃ (amoníaco). Explique paso a paso cómo realiza los cálculos. **Sea tan detallado como lo considere pertinente.** Visualice las frecuencias en el programa Jmol y explique los modos vibracionales más representativos.

b) Visualice los orbitales moleculares HOMO y LUMO de tres sistemas moleculares: NH₃, H₂O y compuesto X (elija uno de los tres del *punto 3*, optimizado con xTB). Para ello, use el programa *Multiwfn*. Se desea realizar reacción química del compuesto X con NH₃ ó H₂O. **Explique qué reactividad se espera** cuando el compuesto X reacciona con NH₃ (ó H₂O, usted elije). Recuerde que HOMO y LUMO le permiten guiar la reactividad entre dos reactivos en una reacción química.

c) Para los dos reactivos en su reacción química elegida en *punto 6b*, indique cuál compuesto es nucleófilo y cuál electrófilo. Explique.

IV. Determinación de viabilidad de reacción química orgánica y cálculo de potenciales termodinámicos, mediante uso de método semiempírico.

7) (10%) Use su análisis de los *puntos 6b* y *6c*, para plantear un mecanismo de reacción. Use flechas para indicar movimiento de electrones tal como se vio en clase. Realice proceso paso a paso, hasta formar un producto eléctricamente neutro. Es decir, plantee todos los posibles pasos del mecanismo de reacción.

8) (20%) Para su reacción planteada en el *punto 7*, determine los potenciales termodinámicos (ΔG , ΔH , ΔS), usando el *Script* que usted modificó en la práctica 3 del seguimiento del curso. Solo use reactivos y productos, no intermediarios de reacción. Recuerde que la termodinámica es una función de estado, es decir, solo interesan los puntos iniciales (reactivos) y finales (productos) pero no el camino (los intermediarios). Calcule ΔG , ΔH , ΔS para la reacción del *punto 7*, a diferentes temperaturas 250 K, 300 K, 350 K, 400 K, 450 K y 500 K.

Explique los resultados obtenidos, teniendo en cuenta además los conceptos de G, H y S.

V. Uso de PubChem y RDKit

9) (10%) Presente sus resultados de la última práctica, relacionados con el uso y potencialidades de PubChem y RDKit.