Lectura 5.

Mecánica Molecular.

Nombre: García Quiroz Gustavo Ivan

Grupo: 7CV3

Fecha: 09/03/2025

Instrucciones

Leer el texto proporcionado y responder lo siguiente:

1. ¿Cómo son modeladas las moléculas usando Mecánica Molecular?

En la Mecánica Molecular, las moléculas son modeladas como un conjunto de esferas de diferente masa conectadas por muelles. Estas esferas representan los átomos, y los muelles representan los enlaces químicos. Las interacciones entre los átomos se describen mediante potenciales clásicos, como interacciones de enlace, flexión, torsión, van der Waals y electrostáticas. Estas interacciones determinan la distribución espacial de las partículas y sus energías.

2. De los enlaces listados en la Tabla1, ¿cuál es el más rígido?

El enlace más rígido es el Csp ≡ Csp (enlace triple entre carbonos), ya que tiene la constante de fuerza más alta K_{AB} $(\text{kcal mol}^{-1}\ \text{Å}^{-2})$.

3. En la Figura 2, supongamos que los puntos tienen las siguientes coordenadas:a=(1,1,0), b=(0,0,0), c=(0,1,1). ¿Qué valor tiene el ángulo ΘABC ?

Para calcular el angulo de θ_{ABC} primero se determinan los vectores $BA\ y\ BC$:

$$BA = a - b = (1,1,0)$$

$$BC = c - b = (0,1,1)$$

Luego se calcula

$$BA \ \cdot BC = (1)(0) + (1)(1) + (0)(1) = 1$$

$$|BA| = \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2} = \sqrt{2}$$

$$|BC| = \sqrt{0^2 + 1^2 + 1^2} = \sqrt{2}$$

$$\cos(\theta_{ABC}) = \frac{BA \cdot BC}{|BA| \cdot |BC|} = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{2}} = \frac{1}{2}$$

$$\theta_{ABC} = cos^{-1}\left(\frac{1}{2}\right) = 60^{\cdot}$$

4. En la figura 3, supongamos que los puntos tienen las siguientes coordenadas: a=(-1,0,1), b=(0,0,0), c=(1,0,0), d=(2,1,-1). ¿Qué valor tiene el ángulo ωABCD?

El ángulo de torsión ω_{ABCD} se calcula como el ángulo entre los planos formados por los átomos a, b, c y b, c, d.

- Primero, se calculan los vectores normales a los planos:

$$\vec{n}_1 = B\vec{A} \times B\vec{C} = (-1,0,1) \times (1,0,0) = (0,1,0)$$

$$\vec{n}_2 = CB^{\rightarrow} \times CD^{\rightarrow} = (-1,0,0) \times (1,1,-1) = (0,1,1)$$

- Luego, se calcula el ángulo entre los vectores normales:

$$\cos(\omega_{ABCD}) = \frac{\vec{n}1 \cdot \vec{n}2}{|\ \vec{n}1\ |\cdot|\ \vec{n}2\ |} = \frac{0 \cdot 0 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1}{1 \cdot \sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\omega_{ABCD} = cos^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = 4\dot{5}^{\cdot}$$

5. La energía de Lennard-Jones, ¿es de atracción o de repulsión?

La energía de Lennard-Jones tiene **ambos componentes**:

- Un término de **atracción** (proporcional a $\frac{1}{r^6}$) que domina a distancias mayores.
- Un término de **repulsión** (proporcional a $\frac{1}{r^{12}}$) que domina a distancias muy cortas.

  Por lo tanto, la energía de Lennard-Jones es atractiva a distancias mayores y repulsiva a distancias muy cortas.