**QUÍMICA COMPUTACIONAL**

**QM206**

**PARCIAL II**

Los problemas se pueden resolver en grupos con un número máximo de 4 estudiantes. Para cada uno deben presentar sus resultados por separado en Google.colab. Se evaluará la presentación, fundamentación teórica, desarrollo del programa, gráficas, resultados obtenidos.

**PROBLEMA 1**

Los siguientes datos fueron obtenidos de un experimento para determinar las fracciones molares de una mezcla de pentano y dodecano a diferentes temperaturas. En la tabla x1 representa la fracción molar del pentano en el líquido y y1 a la fracción molar del pentano en la fase de vapor. T/K es la temperatura en Kelvin de cada medición

x1 T/K y1

0.000000 474.03 0.000000

0.011400 463.81 0.318400

0.042800 453.60 0.530700

0.084700 425.76 0.822800

0.188500 389.51 0.983200

0.233400 367.58 0.990000

0.385400 345.35 0.998300

0.421000 338.24 0.999000

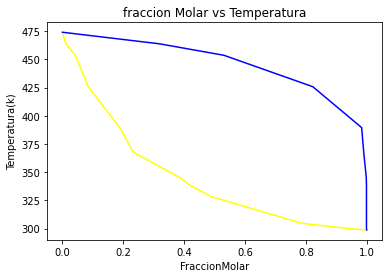
0.488200 328.52 0.999000

0.787200 304.69 0.999000

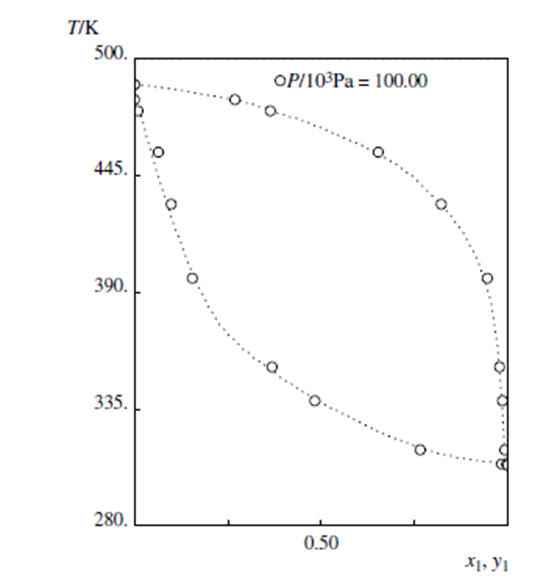
0.959200 299.59 0.999000

1.000000 298.88 1.000000

* Grafique estos datos con T/K en la ordenada y las fracciones molares x1 y y1 en la abscisa. Procure una buena presentación para la gráfica



El gráfico resultante debe ser similar al siguiente:



<https://colab.research.google.com/drive/1_JMRnodh_I4tFSSzDevwoDKRXdjov2tj?userstoinvite=noriel.samudio%40unachi.ac.pa#scrollTo=9oHCHI1S0zmC>

**PROBLEMA 2**

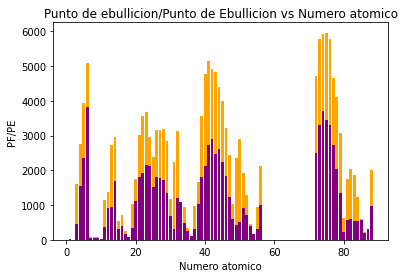
En la siguiente tabla se encuentran una serie de datos de los elementos de la tabla periódica.

<https://docs.google.com/spreadsheets/d/1WUZstMoBDohgOIxHd7V2UzlMIaqhVoBVpLev02aeAMA/edit?usp=sharing>

a. Convierta este archivo a el formato CSV y súbalo a su github

b. Diseñe un programa que lea estos datos y los coloque en un dataframe

c. Grafique Punto de Ebullición (PE) y Punto de fusión (PF) vs Número Atómico NA



<https://colab.research.google.com/drive/1GkSmbSnAkts0P28tDHG4IgQL3loJ1us6#scrollTo=2wxVrYS27ycm>

**PROBLEMA 3**

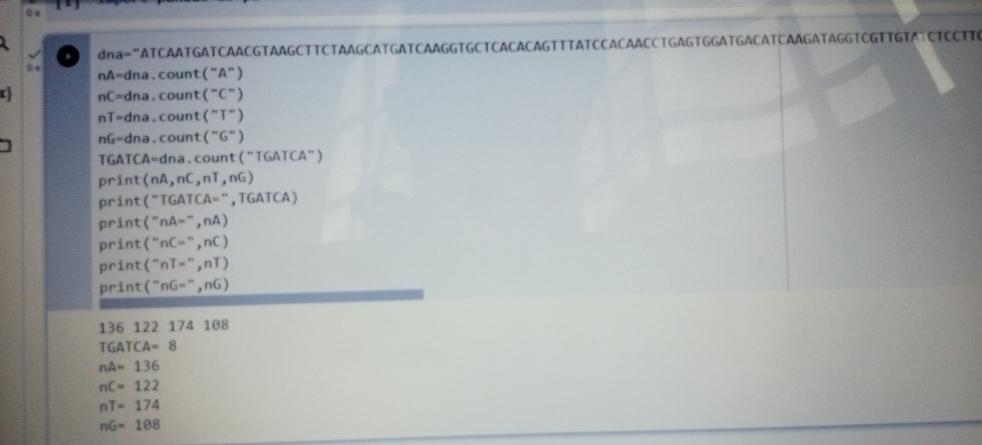
Para la secuencia de DNA

ATCAATGATCAACGTAAGCTTCTAAGCATGATCAAGGTGCTCACACAGTTTATCCACAACCTGAGTGGATGACATCAAGATAGGTCGTTGTATCTCCTTCCTCTCGTACTCTCATGACCACGGAAAGATGATCAAGAGAGGATGATTTCTTGGCCATATCGCAATGAATACTTGTGACTTGTGCTTCCAATTGACATCTTCAGCGCCATATTGCGCTGGCCAAGGTGACGGAGCGGGATTACGAAAGCATGATCATGGCTGTTGTTCTGTTTATCTTGTTTTGACTGAGACTTGTTAGGATAGACGGTTTTTCATCACTGACTAGCCAAAGCCTTACTCTGCCTGACATCGACCGTAAATTGATAATGAATTTACATGCTTCCGCGACGATTTACCTCTTGATCATCGATCCGATTGAAGATCTTCAATTGTTAATTCTCTTGCCTCGACTCATAGCCATGATGAGCTCTTGATCATGTTTCCTTAACCCTCTATTTTTTACGGAAGAATGATCAAGCTGCTGCTCTTGATCATCGTTTC

· Escriba un programa de Python que calcule el número total de bases nitrogenadas

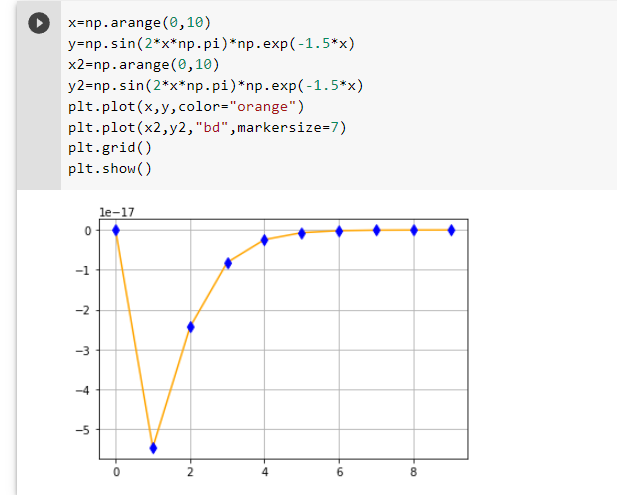
· Luego, escriba una función que calcule el número de A, C, T y G que hay en esta secuencia

· Calcule las veces que se repite el patrón TGATCA en la secuencia de DNA



**PROBLEMA 4**

· Grafique la función f(x)=3.0\*r2\*exp(-1.5\*x)\*sin(2\*x\*PI) en el intervalo (0,10)



<https://colab.research.google.com/drive/1GkSmbSnAkts0P28tDHG4IgQL3loJ1us6#scrollTo=2wxVrYS27ycm>