

Instrucciones:

Leer el texto proporcionado y responder lo siguiente:

- ¿Cómo son modeladas las moléculas usando Mecánica Molecular?

Los principios de la Mecánica Molecular son:

- Los núcleos y los electrones están agrupados en partículas puntuales.
 - Estas partículas son esféricas (con un radio obtenido de medidas experimentales) y tienen carga (obtenida a partir de la teoría)
 - Las interacciones están basadas en potenciales de la mecánica clásica.
 - Las interacciones determinan la distribución espacial de las partículas y sus energías.
- De los enlaces listados en la Tabla 1, ¿cuál es el más rígido?

El $C_{sp} = C_{SP}$ con un $K_{AB} = 1100$

- 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 θ_{ABC} ?

Primero necesitamos calcular los vectores BA y BC.

El vector BA se calcula como $a - b = (1, 1, 0) - (0, 0, 0) = (1, 1, 0)$.

El vector BC se calcula como $c - b = (0, 1, 1) - (0, 0, 0) = (0, 1, 1)$.

Luego, el coseno del ángulo θ entre los vectores se calcula usando la fórmula del producto escalar:

$$\cos(\theta) = \frac{\vec{BA} \cdot \vec{BC}}{\|\vec{BA}\| \|\vec{BC}\|}$$

donde $\vec{BA} \cdot \vec{BC}$ es el producto escalar de los vectores, y $\|\vec{BA}\|$ y $\|\vec{BC}\|$ son las magnitudes (o longitudes) de los vectores.

Finalmente, el ángulo θ se obtiene tomando el arco coseno (o inverso del coseno) de $\cos(\theta)$.
Por lo tanto, el coseno del ángulo es:

$$\cos(\theta) = 2 \cdot 21 = 21$$

Finalmente, el ángulo θ es el arco coseno de 21, que es **60 grados** o **3π radianes**.

- 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 ω_{ABCD} ?

primero necesitamos calcular los vectores BA, BC y BD.

El vector BA se calcula como $a - b = (-1, 0, 1) - (0, 0, 0) = (-1, 0, 1)$.

El vector BC se calcula como $c - b = (1, 0, 0) - (0, 0, 0) = (1, 0, 0)$.

El vector BD se calcula como $d - b = (2, 1, -1) - (0, 0, 0) = (2, 1, -1)$.

Luego, el coseno del ángulo ω entre los vectores se calcula usando la fórmula del producto escalar:

$$\cos(\omega) = \frac{\vec{BA} \cdot (\vec{BC} \times \vec{BD})}{\|\vec{BA}\| \|\vec{BC} \times \vec{BD}\|}$$

donde $\vec{BA} \cdot (\vec{BC} \times \vec{BD})$ es el producto escalar de BA y el producto vectorial de BC y BD, y $\|\vec{BA}\|$ y $\|\vec{BC} \times \vec{BD}\|$ son las magnitudes (o longitudes) de los vectores.

Primero, calculamos el producto vectorial de los vectores BC y BD:

$$\vec{BC} \times \vec{BD} = (1, 0, 0) \times (2, 1, -1) = (0, 1, 1)$$

Luego, calculamos el producto escalar de los vectores BA y $\vec{BC} \times \vec{BD}$:

$$\vec{BA} \cdot (\vec{BC} \times \vec{BD}) = (-1, 0, 1) \cdot (0, 1, 1) = -1$$

A continuación, calculamos las magnitudes de los vectores:

$$\|\vec{BA}\| = (-1)^2 + (0)^2 + (1)^2 = 2$$

$$\|\vec{BC} \times \vec{BD}\| = (0)^2 + (1)^2 + (1)^2 = 2$$

Por lo tanto, el coseno del ángulo es $\frac{-1}{2}$ que es 120 grados o $\frac{2\pi}{3}$ radianes

- La energía de Lennard-Jones, ¿es de atracción o de repulsión?
La energía de Lennard-Jones puede ser tanto de atracción como de repulsión. Un par de átomos o moléculas neutros están sujetos a dos fuerzas distintas.

- Fuerza atractiva:** Actúa a grandes distancias. Esta es la interacción favorable dipolo inducido-dipolo inducido, también conocida como fuerza de Van Der Waals o fuerza de dispersión

2. **Fuerza repulsiva:** Actúa a pequeñas distancias. Es el resultado de la superposición de los orbitales electrónicos, conocido como la repulsión de Pauli