

Cuestionario del Tema 2

1.- ¿Cuál de los siguientes items NO puede ser encontrado en una superficie de energía potencial conformacional?:

Seleccione la respuesta correcta:

- A. Estados excitados
- B. Mínimo local
- C. Mínimo global
- D. Puntos de ensilladura
- E. Barrera energética

2.- Hay diferentes algoritmos para llevar a cabo una minimización. ¿Cuál de los siguientes métodos NO es un algoritmo de minimización?

Seleccione la respuesta correcta:

- A. el de máxima pendiente "*steepest descent*"
- B. el Campo de fuerza
- C. el Newton-Raphson
- D. el del gradiente conjugado

3.- Un análisis conformacional se da por terminado cuando...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. no hay cambios sustanciales en la geometría de la molécula
- B. el cálculo muestra que ya se ha encontrado el mismo confórmero anteriormente
- C. no es posible encontrar un confórmero de menor energía

4.- Enumere los tres algoritmos matemáticos que posee BrandyMol para optimizar las estructuras moleculares

5.- La exploración sistemática para obtener la superficie de energía potencial conformacional de una molécula...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. no es eficiente para moléculas muy grandes
- B. es eficiente para moléculas muy grandes

6 La fuerza del enlace entre el carbono sp^3 y los halógenos decrece en el orden $F > Cl > Br > I$. ¿Cuáles son las Constantes de Fuerza en Kcal/mol de estos enlaces en el Fichero de Campo de Fuerzas *MM3BrandyMol.prm*?

7.- ¿Cuáles de los siguientes métodos no son útiles para la optimización de un mínimo local?

Seleccione las respuestas correctas:

- A. Método de Branch-and-Bound
- B. Método de Búsqueda Sistemática
- C. Método de Optimally Conditioned Variable Metric
- D. Método de Newton-Raphson
- E. Método de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
- F. Método de Gradiente conjugado
- G. Método de Basin Hopping
- H. Método de Descenso de Máxima pendiente
- I. Métodos Heurísticos

8.- Con una resolución de 10 grados para el ángulo de torsión, los conformeros del *n*-butano estarán representados por...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. 18 conformaciones
- B. 54 conformaciones
- C. 36 conformaciones

9.- Una estructura minimizada es un buen modelo de partida para...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. análisis energéticos
- B. análisis geométricos y energéticos
- C. análisis geométricos

10.- ¿Por qué es necesario definir tantos tipos de átomos en el Campo de Fuerzas?

11.- ¿Cuál es la mejor definición de Análisis Conformacional?. Análisis Conformacional es...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. el cálculo de las energías de las moléculas
- B. la enumeración sistemática de las posibles geometrías de una molécula
- C. el marco que integra información sobre las geometrías de una molécula y sus correspondientes energías

12.- Una barrera baja de energía de activación se corresponde con...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. constantes de velocidad grandes
- B. constantes de velocidad pequeñas

13.- El mínimo global es la conformación...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. de menor energía una vez que la molécula se ha minimizado
- B. de mayor energía una vez que la molécula se ha minimizado
- C. con menor número de repulsiones estéricas

14.- La superficie de energía potencial conformacional es...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. una representación de los diferentes conformeros con sus respectivos ángulos de torsión
- B. una representación de las conformaciones de menor energía de una molécula
- C. una representación de la energía en función de los ángulos de torsión

15.- La interconversión entre conformeros ocurre a través del camino de...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. Mayor energía
- B. Menor energía
- C. Misma Energía

16.- Empareje cada enlace con la Constante de Fuerza que posee en el Campo de Fuerzas MM3BrandyMol

	Respuestas:
Enlace C(sp ³)-I	5.30
Enlace C(sp ²)-H	5.15
Enlace O(alcohol)-C(sp ³)	5.70
Enlace C(sp ³)-N(sp ³)	2.15

17.- Un aumento de la temperatura permite a los conformeros...

Seleccione la respuesta correcta:

- A. cruzar barreras energéticas
- B. disminuir el número de colisiones
- C. relajarse con mayor facilidad