

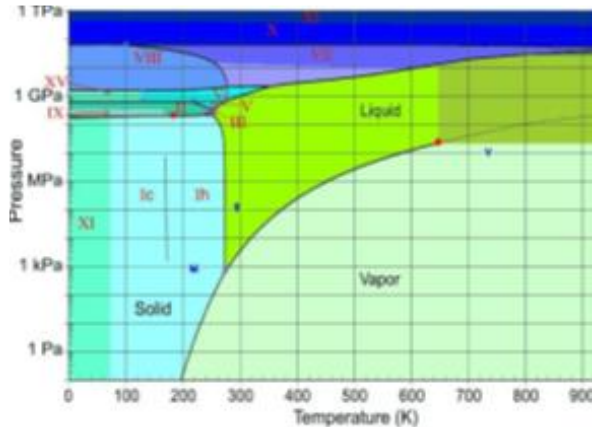
1.- a) Analice la estructura y propiedades de una molécula de agua las propiedades del enlace puente de hidrógeno: discuta su concepto y propiedades.

b) ¿Qué técnicas experimentales pueden usarse para detectar la posición de los O y para detectar la posición de los protones (H^+) en el agua? ¿Por qué? ¿Qué diferencia observa entre el hielo y el agua líquida?

2.- En la figura 1 se observa el diagrama de fases del agua.

a) ¿En qué región se desenvuelve la vida? ¿Qué requerimientos deberían cumplirse para poder extender el rango?

b) ¿Qué puede decir de los extremófilos y qué sobre proteínas anticongelantes?



3.- En la figura 1.9 (*Biofísicoquímica* de J.R. Grigera) se muestran esquemáticamente dos estructuras de hielo en dos dimensiones con diferente conformación protónica. Tomando el esquema de la figura realice:

a) Una operación de rotación de alguna molécula, ajustando el resto a efectos de satisfacer las reglas de Bernal.

b) Un desplazamiento de protón en una molécula, también ajustando el resto a efectos de satisfacer las reglas de Bernal.

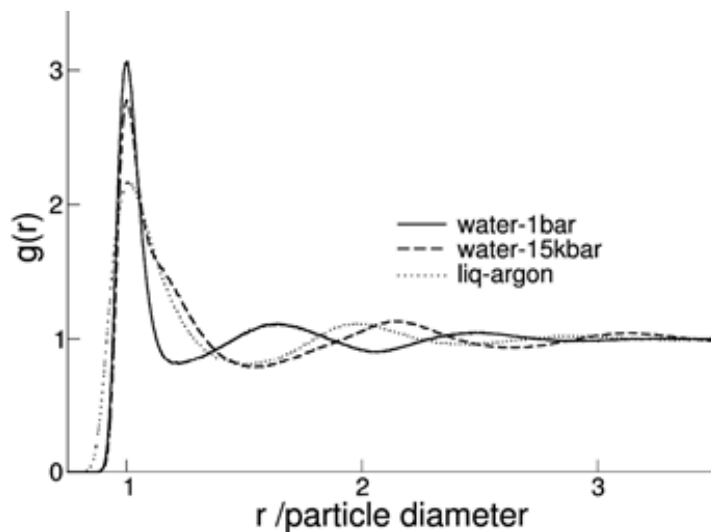
c) Analice las dos redes obtenidas y plantee las diferencias o similitudes entre el mecanismo de rotación y el de desplazamiento de protón. Discuta los resultados y sus posibles consecuencias en el comportamiento del hielo o estructuras de agua similares.

4.- Dado un oxígeno y sus cuatro primeros vecinos, dé todas las posibles formas en que se pueden acomodar los hidrógenos. Esquematizar. ¿Cuál es el más probable estadísticamente? (NOTA: En cada uno de los enlaces O-O puede haber un solo H y puede ocupar solo dos lugares cerca del O de referencia o lejos. Los H son indistinguibles entre sí)

5.- a) En la figura se ilustra la función de distribución radial obtenida para agua líquida y se compara con la del argón líquido. Interprete y discuta sabiendo que el argón posee la estructura de un líquido simple.

b) ¿Cómo espera que sea el patrón de difracción $[g(r)]$ para el hielo? Dibújelo y compárelo con el de agua líquida. ¿Y para el estado gaseoso?

c) ¿Qué puede decir de la estructura del agua en el estado sólido y en el estado líquido? ¿Qué evidencias experimentales conoce que indiquen una coordinación tetraédrica para el hielo? ¿Y para el agua? ¿A qué llama "Nº de Coordinación" del agua?



En la abscisa se usa una escala reducida que permite hacer una comparación directa. $R = r / \sigma$ donde σ es el diámetro de Van der Waals de las moléculas (0,28 nm para el agua y 0,34 nm para el argón).