

INSTRUCCIONES

1. Cumplimente este formulario y entréguelo con el examen.
 2. Responda de manera razonada y concisa en papel sellado del Centro donde realiza la prueba.
 3. Cada pregunta puntúa con un máximo de 1 punto.
 4. **Material auxiliar:** Calculadora no programable y la addenda Métodos Teóricos de la Química Física (Relaciones y Tablas Matemáticas)
-

1. Comentar el fundamento de las técnicas de integración numérica Gaussiana y dar ejemplos de ellas.
2. Explicar el fundamento de los métodos Predictor-Corrector para resolver ecuaciones diferenciales de primer orden utilizando el método de Euler.
3. Desarrollar en serie de Fourier la función de periodo 2π definida como $y(x) = -1, 0 < x < \pi, y(x) = +1, \pi < x < 2\pi$.
4. Discutir con detalle el concepto de regresión de la media en una distribución de probabilidades discreta y bidimensional.
5. Plantear el problema del camino aleatorio con persistencia, comentar sus características, y reducirlo a un proceso de Markov convencional (memoria de un paso).
6. Determine las operaciones de simetría inversas a las siguientes operaciones: $i, S_3^2, C_3, C_5^2, S_7^3$, y σ_h .
7. ¿Para qué RI del grupo C_{3v} son base los orbitales p_x, p_y y p_z ?
8. ¿Cómo se desdoblan las especies de simetría E_g y E_u del grupo D_{4h} al pasar al D_{2h} ?
9. Reduzca a suma de RI la representación producto directo de las especies de simetría $E_g \times E_u$ del grupo D_{4h} .
10. Determine el número y características de simetría de las vibraciones normales de la molécula de cloroformo.