

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. Aplicar el método de los coeficientes indeterminados para calcular

$$\int_0^1 \frac{1+\sqrt{x}}{2+\sqrt{x}} = c_0 y(0) + c_1 y(1/3) + c_2 y(2/3) + c_3 y(1)$$

2. Diagonalizar la matriz (2×2) con elementos $a_{11} = 2$, $a_{12} = a_{21} = -3$, $a_{22} = 1$.
3. Calcular la función integral de la densidad de probabilidad: $f(x) = 2x + 2$ si $0 < x < 1$, $f(x) = 0$ en otro caso, así como el valor medio de la distribución.
4. Se desea ajustar una tabla de N datos $\{(x_i, y_i)\}$ mediante una función del tipo $y = 1/(ax^2 + bx + c)$. Discutir un proceso de mínimos cuadrados para calcular a , b y c .
5. Calcular la distribución estacionaria de la matriz estocástica a un paso (2×2) con elementos diagonales $p_{11} = 1/3$ y $p_{22} = 1/4$.
6. Dado el conjunto de operaciones de simetría $\{I, C_4, \sigma_h\}$, deduzca justificadamente qué otras operaciones deben estar presentes para que formen un grupo de simetría completo.
7. Construya la tabla de multiplicación del grupo C_{2h} . ¿Es abeliano este grupo?
8. Utilizando argumentos de simetría molecular deduzca cuál es la máxima degeneración posible de los estados de la molécula de acetileno.
9. Utilizando orbitales de simetría, deduzca las expresiones de los orbitales híbridos sp^2 .
10. Indique si el modo normal de vibración ν_1 de la molécula de cetena ($O=C=C=C=O$), con simetría Σ_g^+ , es activo en espectroscopía Raman y, en caso afirmativo, si dará lugar a una banda Raman polarizada.