

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 los diferentes tipos de error que conllevan los cálculos numéricos de interpolación, integración y diferenciación.
2. Evaluar por el método de los coeficientes indeterminados la integral siguiente

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

3. Explicar el concepto de delta de Dirac en dimensiones 1 y 3.
4. Normalizar y encontrar la función integral de la densidad de probabilidad

$$f(x) = 2x^4 + x, \quad \text{definida en } 0 < x < 3$$

5. Una matriz de transición a un paso tiene por elementos $p_{11} = p_{12} = p_{13} = 1/3$; $p_{21} = 2/3$; $p_{22} = 1/3$; $p_{23} = 0$; $p_{31} = p_{33} = 1/4$; $p_{32} = 1/2$. Calcular la distribución estacionaria.
6. Determine el grupo de simetría puntual de la molécula de peróxido de hidrógeno. Sus enlaces O-H no son coplanarios. Teniendo en cuenta sus elementos de simetría deduzca si puede ser ópticamente activa.
7. Construya la representación matricial del grupo de simetría de la molécula de fosgeno, COCl_2 , sobre la base de los orbitales híbridos sp^2 del átomo de carbono. Redúzcala a suma de RI.
8. ¿Cómo se desdoblan los orbitales d de un ión libre al ser introducido en un entorno de simetría icosaédrica?
9. ¿Qué transiciones vibracionales están permitidas en una molécula de simetría S_4 desde su estado fundamental por interacción de dipolo eléctrico?
10. Indique el número, propiedades de simetría y actividad espectroscópica de las vibraciones normales de las moléculas de O_2 y N_2 . ¿Darán lugar a bandas Raman polarizadas?