

MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA

Apellidos:

Nombre:

Expediente:

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, Addenda: Relaciones y Tablas Matemáticas (UNED)
-

1. Comentar los problemas asociados con la diferenciación numérica.
2. Desarrollar en serie de Fourier la función $f(x)=|x|$ definida en $-\pi \leq x \leq +\pi$.
$$y(x) = a_0/2 + \sum_n (a_n \cos nx + b_n \sin nx).$$
3. Diagonalizar la matriz (2×2) con elementos $a_{ij}=(i+j)^2$. Encontrar valores y vectores propios.
4. Escribir la representación en cluster de la función de probabilidades de cuatro variables $f(x_1, x_2, x_3, x_4)$ comentando el significado de cada término.
5. La distribución estacionaria de un proceso de Markov, con memoria a un paso y en un espacio de N estados, es equiprobable $\Pi = (1/N, 1/N, 1/N, \dots, 1/N)$. Discutir sus características y posibles utilidades.
6. Determine las operaciones inversas a las siguientes operaciones de simetría: C_2, C_3, i, S_3, S_6 , y S_8^3 .
7. Determine el grupo de simetría puntual al que pertenece la molécula de etano en la conformación alternada, indicando si puede tener actividad óptica, momento de dipolo eléctrico permanente y su dirección en caso afirmativo.
8. Reduzca a suma de RI la representación producto directo $E' \times A'' \times E''$ del grupo D_{3h} .
9. ¿Cómo se desdoblan los orbitales d de un ion en un entorno de simetría D_{4d} ?
10. Determine la actividad en IR y Raman de los modos normales del ion nitrato, de estructura plano-simétrica.