

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. Evaluar el efecto del operador diferencia de avance en $\Delta(\sin 2k)$.
2. Describir el fundamento del método de integración numérica por coeficientes indeterminados. Poner un ejemplo para ilustrarlo.
3. Calcular la función integral y la mediana de la densidad de probabilidades $f(x) = \sin 2x$, definida en $0 < x < \pi/4$.
4. Proponer un cálculo de mínimos cuadrados para ajustar un conjunto de N puntos (x, y, z) mediante la relación $z = a + bx + cy$.
5. Plantear un proceso biestocástico en un espacio de 10^6 estados y discutir la forma de la distribución estacionaria.
6. Utilizando criterios de simetría determine el grupo de simetría de las moléculas de *cis*- y *trans*-1,2-difluorciclopropano, la dirección de su momento de dipolo eléctrico permanente y si pueden tener actividad óptica
7. ¿Cómo se desdoblarían los orbitales f de un ion libre al ser introducido en un entorno de simetría planocuadrada?
8. Utilizando argumentos de simetría molecular deduzca cuál es la máxima degeneración posible de los estados de la molécula de antraceno
9. ¿Qué transiciones entre estados de vibración están permitidas en una molécula de simetría D_{2h} a partir de su estado fundamental por interacción de polarizabilidad molecular?
10. Determine el número, simetría y actividad en IR y Raman de las vibraciones normales de la molécula de peróxido de hidrógeno (agua oxigenada) con enlaces O-H **no coplanarios**.