

## 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. Calcular con un error relativo  $< 2\%$  la constante de normalización  $N$  a partir de la fórmula  $N \int_0^1 (\sin(\pi x))^2 dx = 1$ , utilizando la regla de Simpson.
2. Utilizar el método de Runge-Kutta IV para calcular  $y(x=0.8)$  para la solución de la ecuación diferencial  $dy/dx = \sqrt{x+y}$  que pasa por  $(0.4, 0.41)$ .
3. Calcular la media y la varianza de la función densidad  $f(x) = 3x^2 - 1$ , definida no nula en  $1 < x < 3$ .
4. Desarrollar la transformada de Fourier en tres dimensiones de una función radial:  $F(\mathbf{k}) = \iiint \exp[-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}] f(r) d\mathbf{r}$
5. Discutir las diferencias y similitudes entre un proceso simplemente estocástico y otro biestocástico.
6. Dado el conjunto de operaciones de simetría  $\{I, C_2, \sigma_h\}$ , deduzca justificadamente qué otras operaciones deben estar presentes para que formen un grupo de simetría completo.
7. Construir la representación matricial de las operaciones de simetría del grupo  $D_2$  sobre la base de los orbitales  $p_x, p_y$  y  $p_z$ . ¿Cuál es el carácter de dicha representación?
8. Reduzca a suma de RI la representación producto directo  $E' \times E''$  del grupo  $D_{3h}$ .
9. Utilizando argumentos de simetría molecular deduzca si pueden existir estados degenerados en el anión lineal sulfocianuro,  $\text{SCN}^-$ .
10. Indique si el modo normal de vibración  $\nu_2$  de la molécula de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), con simetría  $\Pi_u^+$ , puede ser activo en espectroscopía IR.