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 la diferencia dividida $y(x_0,x_0)$ para $y = \cos 2x$.

2. Describir las reglas de integración del trapecio y de Simpson y su fundamento.

3. Describir el funcionamiento del predictor-corrector de Euler para una ecuación diferencial $y' = f(x,y)$, con condición inicial (x_0,y_0).

4. Normalizar, calcular la media y la varianza de la densidad de probabilidad
   $f(x) = \text{sen } 2x$ definida en $0 < x < \pi/4$.

5. Proponer un ajuste de mínimos cuadrados para ajustar un conjunto de N puntos (x_i,y_i) mediante una relación $y = a + b \exp(cx)$.

6. Deduzca todas las operaciones de simetría que genera un eje de rotación impropia S_5.

7. Utilizando criterios de simetría molecular determine el grupo de simetría y la dirección del momento de dipolo eléctrico permanente de las moléculas de todos los derivados diclorados del naftaleno.

8. El anión carbonato tiene estructura plano-trigonal. Encontrar las RI para las que son base los tres orbitales σ.

9. ¿Qué transiciones de dipolo eléctrico estarán permitidas desde el estado fundamental de la molécula de benceno?

10. Determine el número, características de simetría y actividad en IR y Raman de las vibraciones normales de la molécula etileno.