

## 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. En una serie de diez datos  $(x_i, y_i)$  aquéllos para  $y_i$  ( $i=3, 5, 9$ ) vienen afectados con errores  $\alpha$ ,  $\beta$ , y  $\gamma$ , respectivamente. Obtener la propagación de estos errores en la tabla de diferencias.
2. Evaluar entre  $0 < x < \pi/2$  la integral de  $f(x) = x^{-4/3} \sin(x)$  con diferentes métodos.
3. Dada una ecuación diferencial del tipo  $ay'' + by' + cy = f(x)$  con condiciones iniciales  $(x_0, y_0, y'_0)$  presentar un método para integrarla numéricamente.
4. Estudiar si son funciones densidad de probabilidad aceptables: a)  $f(x) = 2x - 2$  definida para  $0 < x < 1$ ; b)  $f(x) = |x|$  definida en  $-1 < x < +1$ .
5. Para un conjunto de N observaciones  $(x_i, y_i)$  se determinan las rectas de regresión “x sobre y” e “y sobre x”. Deducir las correspondientes ecuaciones normales. ¿Cuántos puntos comunes poseen ambas rectas y en qué casos?
6. Escriba de la forma más simple el conjunto de operaciones que genera un eje  $S_5$ .
7. Construir la representación matricial de las operaciones de simetría del grupo  $S_4$  sobre la base de los orbitales  $p_x$ ,  $p_y$  y  $p_z$ . ¿Cuál es el carácter de dicha representación?
8. Determine las especies de simetría del grupo  $D_{5d}$  para las que son base los orbitales  $d$ .
9. Justifique por qué están prohibidas las transiciones de dipolo eléctrico  $d \rightarrow d$  en complejos de metales de transición de estructura octaédrica.
10. ¿Podría dar lugar a modos normales de vibración activos tanto en IR como en Raman la molécula de dióxido de carbono?