

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. Determinar la expresión de la diferencia dividida $y(x_0, x_1, x_1)$ para $y = \cos x$.
2. Comentar los diferentes tipos de error existentes en una derivación numérica.
3. Encontrar numéricamente la raíz de la ecuación $3\exp(-x) + x - 3 = 0$.
4. Normalizar, calcular la media y la función integral (si es posible) de las funciones candidatas a función densidad definidas en los intervalos que se indican: a) $f(x) = x \ln x$, $0 < x \leq 2$; b) $f(x) = \sin x$, $0 \leq x \leq \pi$.
5. Estudiar el proceso estocástico en un espacio de cuatro estados definido por una matriz de transición a un paso con elementos $a_{12} = a_{23} = a_{34} = a_{41} = 1$, y resto de elementos nulos.
6. Usando criterios de simetría molecular, determine si pueden ser ópticamente activas las conformaciones eclipsada y alternada del 1,2-difluoretano.
7. Construya la tabla de multiplicación de las operaciones de simetría del grupo D_{2h} .
8. Construya la representación matricial del grupo C_{2h} sobre la base de los OA p_x , p_y y p_z . Redúzcala a suma de RI.
9. ¿Cómo afectaría a los términos espectrales correspondientes a una configuración electrónica sd la interacción con un entorno planocuadrado?
10. Considerando la simetría de la molécula de H_2O deduzca si puede dar lugar a bandas de absorción en espectroscopia IR, o bien a bandas Raman. ¿Cuántas?. ¿Tendrían polarización en Raman?.