

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. Determine numéricamente el máximo de una función $(r, g(r))$ conocidos cuatro puntos de su vecindad: (1.00, 1.871); (1.04, 2.071); (1.08, 2.785); (1.12, 2.453).
2. Diagonalice la matriz $A(3 \times 3)$ que tiene todos sus elementos nulos, salvo $a_{12} = a_{21} = 1$.
3. Calcule numéricamente con tres cifras correctas la integral entre $0 < x < 1$ de la función $\exp(-x) \ln x$.
4. En un sistema de 100 espines, en ausencia de campos externos, ¿cuál es la probabilidad de que: a) entre 40 y 70 apunten “arriba”; b) menos de 45 apunten “abajo”.
5. Plantee una cadena de Markov biestocástica en un espacio de 10^6 estados y determine su distribución estacionaria de probabilidades.
6. Determine el grupo de simetría de la molécula de H_2O_2 (enlaces O-H no coplanarios). Deduzca si puede tener momento de dipolo eléctrico permanente y su dirección en caso afirmativo.
7. Utilizando criterios de simetría deduzca si pueden ser ópticamente activas las moléculas diatómicas y triatómicas.
8. Reduzca a suma de RI la representación producto directo $T_1 \times T_2$ del grupo T_d .
9. ¿Qué transiciones electrónicas y vibrónicas están permitidas en una molécula de simetría C_{2h} por interacción de dipolo eléctrico?
10. Por consideraciones de simetría molecular deduzca si es posible distinguir el *cis* y *trans*-dicloroetileno mediante espectroscopia IR y Raman.