

## 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. Ortonormalizar las funciones  $\{1, x, x^3\}$  con función de peso  $w(x) = 1$  en  $0 \leq x \leq 1$ .
2. Calcular  $\Delta^n y_0$  para la función  $y = 1/x$  dada por una tabla  $\{(x_i, y_i)\}$  con argumentos igualmente espaciados ( $h = 1$ ).
3. Calcular mediante la aproximación Runge-Kutta IV el valor  $y(x = 0.8)$  para la solución de la ecuación diferencial de primer orden  $y' = \sqrt{x + y}$  que pasa por  $(0.4, 0.41)$ .
4. Se desea ajustar una función de la forma  $y = A \exp(b(x + c))$  a una tabla de N datos  $\{(x_i, y_i)\}$ . Discutir un proceso de mínimos cuadrados para realizarlo.
5. Calcular el centro de la Gaussiana resultante del producto  $\exp(-ax^2) \exp(-b(x-1)^2) \exp(-c(x+1)^2)$ .
6. Determine el grupo de simetría de las moléculas de todos los posibles derivados diiodados del clorobenceno. Justifique si pueden tener momento de dipolo eléctrico, su dirección, así como actividad óptica.
7. Construya la representación matricial de las operaciones de simetría de la molécula de dibromometano sobre la base de los orbitales  $p_x$ ,  $p_y$  y  $p_z$ . ¿Cuáles son los caracteres de dicha representación?
8. Reduzca a suma de RI la representación matricial del grupo de simetría de la molécula de agua sobre la base de las componentes  $\mu_x$ ,  $\mu_y$  y  $\mu_z$  de su vector momento de dipolo eléctrico permanente.
9. ¿Qué transiciones vibracionales están permitidas en una molécula de simetría  $C_{2h}$  en su estado fundamental por interacción de polarizabilidad molecular?
10. Determine el número, características de simetría y actividad en IR y Raman de las vibraciones normales de la molécula *trans*-dicloroetileno.