

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 mediante el método de los coeficientes indeterminados la integral definida $\int_0^2 \frac{\sqrt{1+x}}{2+x} dx = c_0 y(0) + c_1 y(0.5) + c_2 y(1) + c_3 y(1.5) + c_4 y(2)$.
2. Resolver por el método de la serie de Taylor la ecuación diferencial $(1-x)y' = x^2 - y$ con la condición inicial $y(x=0) = 1$.
3. Dar la expresión final de la transformada de Fourier extendida a todo el espacio $S(\mathbf{k}) = 1 + \rho \iiint dx dy dz \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) (g(r) - 1)$, en donde $\mathbf{r} = (x, y, z)$, ρ es una constante, \mathbf{k} es una magnitud vectorial tridimensional, y el producto $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ es un producto escalar.
4. Se desea ajustar con una recta un conjunto de N puntos $\{(x_i, y_i)\}$ que obedecen a la ecuación $y = A \exp(-b^{(x^2)})$. Discutir las posibilidades de hacerlo.
5. Una matriz estocástica P (2×2) tiene como elementos diagonales $a_{11} = 1/2$, $a_{22} = 4/5$. Calcular $\lim_{n \rightarrow \infty} P^n$.
6. Deduzca con argumentos de simetría molecular si la molécula de formaldehído puede 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 *cis*-1,2-dicloroetileno sobre la base las componentes μ_x , μ_y y μ_z del momento de dipolo eléctrico de esta molécula. ¿Cuáles son los caracteres de dicha representación?
8. Reduzca a suma de RI la representación producto directo $A_{1u} \times A_{2u}$ del grupo D_{3d} .
9. ¿Cómo se desdoblarían los siete orbitales f de un ion al ser introducido en un entorno de simetría $C_{\infty v}$?
10. Deduzca si el helio y el oxígeno gaseosos pueden dar lugar a espectros de vibración en IR y Raman. ¿Cuántos modos normales de vibración serían activos en ambas técnicas? ¿Estarían polarizadas las posibles bandas Raman?