

## 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. Integrar utilizando el desarrollo en serie de la exponencial  $\int_1^3 x^{-1} \exp(x) dx$ , obteniendo una precisión de dos decimales.
2. Se quiere ajustar una función  $y = a_0 + a_1 x^4$  con dos puntos  $(x, y)$ . Encontrar las condiciones que deben satisfacerse para que el ajuste sea único.
3. Hallar una función tabular  $y_k$  para la que  $\Delta y_k = k^2$ . ( $k$  es entero).
4. Investigar las propiedades de la matriz de transición (4×4) a un paso con elementos  $p_{11} = 1/4$ ,  $p_{14} = 3/4$ ,  $p_{22} = p_{33} = p_{42} = 1/3$ ,  $p_{23} = p_{34} = p_{44} = 2/3$ , con el resto de elementos nulos.
5. Calcular el producto  $\exp(-A(x-a)^2) \cdot \exp(-B(x-b)^2)$  e interpretar el resultado.
6. Construya la tabla de multiplicación de las operaciones de simetría del grupo  $S_4$ .
7. Reduzca a suma de RI la representación matricial de las operaciones de simetría del grupo  $D_{2d}$  sobre la base de los tres orbitales  $p$ .
8. Empleando argumentos de simetría determinar cuál es la máxima degeneración posible en los niveles de energía correspondientes a los OM de la molécula de dióxido de carbono.
9. Construya la tabla de correlación entre las especies de simetría de los grupos  $C_2$  y  $C_{2v}$ .
10. Por consideraciones de simetría, ¿las transiciones  $A_1 \rightarrow B_1$ ,  $A_1 \rightarrow B_2$  y  $A_1 \rightarrow E_2$  entre estados de vibración de una molécula de simetría  $D_{4d}$  serían activas en IR, Raman o en ninguna de ambas técnicas espectroscópicas?