

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. Obtener la fórmula de Filon para $\int_0^{2\pi} f(x) \sin x \, dx \approx c_0 f(0) + c_1 f(\pi) + c_2 f(2\pi)$.
2. Encontrar una raíz positiva de $3\exp(-2x) + x - 6 = 0$ con precisión de cinco decimales.
3. Dada la densidad de probabilidad $f(x) = \sqrt{x}$ definida en $[0,1]$ calcular su media y su función integral.
4. Generar números pseudoaleatorios en $(0,1)$ con el algoritmo $z_n = \lambda z_{n-1} (\text{mód } M)$; $\lambda = 5$, $z_1 = 1$, $M = 16$.
5. Estudiar las propiedades del proceso estocástico definido por la matriz (3×3) en la que $p_{12} = p_{23} = p_{31} = 1$, con el resto de los elementos nulos.
6. Determine y escriba de la forma más simple posible el conjunto de operaciones de simetría que genera un eje de rotación impropio S_8 .
7. Determine los elementos de simetría y el grupo de simetría puntual de las moléculas de: CO_2 , HCN , HCCl_3 , H_2CCl_2 , clorobenceno y naftaleno.
8. Reduzca a suma de RI la representación producto directo $A_{1u} \times A_{2u} \times E_u$ del grupo D_{4h} .
9. ¿Cómo se desdoblarían los orbitales p de un ion al ser introducido en un entorno de simetría C_{3h} ?
10. Determine el número, características de simetría y actividad en IR y Raman de los modos normales de vibración del anión oxalato en su conformación *alternada*. Considere iguales los enlaces C-O de cada grupo carboxílico.