

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 una cota del error de truncamiento cometido al utilizar un polinomio de avance de Newton de tercer grado.
2. Dada la ecuación diferencial $y' = y/x - y^2$ calcular $y(1.2)$ e $y(1.4)$ con la condición inicial $y(1)=1$ utilizando el método de Runge-Kutta (tomar $h=0.2$).
3. Desarrollar la δ de Dirac $\delta(x)$ en serie de Polinomios de Legendre en $-2 \leq x \leq 2$.
4. Dada la función densidad de probabilidades $f(x)=x^4$ si $0 < x < 4$ y $f(x)=0$ en otro caso, normalizarla y calcular su media y varianza.
5. Proponer dos matrices biestocásticas en un espacio de seis estados y determinar sus distribuciones estacionarias.
6. Utilizando criterios de simetría molecular deduzca si pueden ser ópticamente activas las moléculas HCN, HCl, HCCl_3 , H_2CCl_2 y *trans*-dibromoetileno.
7. ¿Cómo se desdoblarían los orbitales f de un ión libre al ser introducido en un entorno de simetría plano-cuadrada D_{4h} ?
8. Construya la representación matricial del grupo de simetría de la molécula de formaldehído, sobre la base de los orbitales híbridos sp^2 del átomo de carbono. Redúzcala a suma de RI.
9. Empleando argumentos de simetría determinar cuál es la máxima degeneración posible en los niveles de energía correspondientes a los OM de la molécula de antraceno.
10. ¿Puede tener bandas Raman polarizadas el anión tetraédrico sulfato, SO_4^{2-} ?