

## 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. Discutir las similitudes y diferencias entre los tres tipos clásicos de integración Gaussiana (Legendre, Laguerre, Hermite).
2. Discutir los problemas asociados a la diferenciación numérica.
3. Dada la ecuación diferencial  $dy/dx = \exp(-x) - y$ , con condición inicial (0,0) y espaciado  $h=0.1$ , aplicar el método Runge-Kutta IV para  $x = 0.1; 0.2$ , y comparar con el resultado exacto  $y(x) = x \exp(-x)$ .
4. Calcular la media y la función integral de la densidad de probabilidad  $f(x) = x / 6 + k$ , definida no nula en  $0 \leq x \leq 3$ .
5. Discutir las características de los procesos estocásticos cíclicos.
6. Determine el grupo de simetría de las moléculas de todos los posibles derivados diclorados del etileno. Justifique si pueden tener momento de dipolo eléctrico permanente, su dirección, así como actividad óptica.
7. El anión carbonato ( $\text{CO}_3^{2-}$ ) tiene una estructura plana. Encontrar las RI para las que son base los tres orbitales  $\sigma \text{C-O}$ .
8. Reduzca a suma de RI la representación del grupo de simetría de la molécula **triangular** de cloruro de nitrosilo, NOCl ( $\text{Cl-N=O}$ ), sobre la base de las componentes  $(\mu_x, \mu_y, \mu_z)$  de su vector momento de dipolo eléctrico permanente.
9. ¿Qué transiciones vibracionales están permitidas en una molécula de simetría  $D_{2h}$  en su estado fundamental por interacción de dipolo eléctrico?
10. Determine el número, características de simetría y actividad en IR y Raman de las vibraciones normales de la molécula de formaldehído.