

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 la diferencia dividida $y(x_0, x_0)$ de $y = \sin(2x)$.
2. Discutir los errores asociados con la diferenciación numérica de datos tabulares.
3. Explicar el algoritmo del Predictor-Corrector de Euler para resolver una ecuación diferencial de primer orden y primer grado con condición inicial.
4. Dada la función densidad de probabilidad $f(x) = \sin(x)$, $0 < x < \pi$, y $f(x) = 0$ en otro caso, calcular la media, la varianza y la función integral.
5. Calcular el producto de dos funciones Gaussianas monodimensionales con centros y desviaciones típicas: (a, σ_1) , (b, σ_2) .
6. Para la molécula de etano en la conformación *alternada* indique: sus elementos y grupo de simetría puntual, asimismo justifique si puede tener actividad óptica.
7. Construya la representación matricial de las operaciones de simetría del grupo D_2 sobre la base de los cinco orbitales d . Redúzcala a suma de RI.
8. ¿Cómo se perturba la degeneración de los orbitales p (p_x , p_y , p_z) de un átomo central aislado M cuando forma estructuras complejas con otros átomos X del tipo: MX_2 lineal, MX_2 no lineal, MX_3 plana trigonal y MX_5 bipiramidal trigonal?
9. ¿Qué transiciones de dipolo eléctrico estarán permitidas desde el estado fundamental de una molécula de simetría D_{2h} ?
10. Determine el número, características de simetría y actividad en IR y Raman de las vibraciones normales de la molécula plana trigonal de BF_3 .