

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. Discuta los problemas que conlleva una diferenciación numérica.
2. Evalúe por el método de los coeficientes indeterminados la integral siguiente

$$\int_0^1 y(x) dx = \int_0^1 \frac{\sqrt{x}}{1+x^3} dx = c_0 y(0) + c_1 y(1/3) + c_2 y(2/3) + c_3 y(1)$$

3. Explique el concepto de delta de Dirac en dimensiones 1 y 3.
4. Normalice y encuentre la función integral de la densidad de probabilidad

$$f(x) = 5x^3 + x, \quad \text{definida en } 0 < x < 2$$

5. Explique los conceptos de matriz estocástica y matriz biestocástica dando un ejemplo de cada una.
6. Determine el grupo de simetría de las moléculas de todos los posibles derivados fluorados del metano. Justifique con argumentos de simetría molecular si pueden tener momento de dipolo eléctrico permanente, su dirección, así como actividad óptica.
7. Una molécula de simetría T_d se perturba dando lugar a un sistema de simetría D_2 . ¿Cómo se desdoblarían sus estados de energía?
8. Reduzca a suma de RI la representación producto directo $A_1 \times B_1 \times E_2$ del grupo C_{6v} .
9. ¿Qué transiciones vibracionales están permitidas en una molécula de simetría S_4 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 *para*-diclorobenceno.