

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 $y(x_0, x_0)$ para $y = \cos 2x$.
2. Describir las reglas de integración del trapecio y de Simpson y su fundamento.
3. Describir el funcionamiento del predictor-corrector de Euler para una ecuación diferencial $y' = f(x, y)$, con condición inicial (x_0, y_0) .
4. Normalizar, calcular la media y la varianza de la densidad de probabilidad $f(x) = \sin 2x$ definida en $0 < x < \pi/4$.
5. Proponer un ajuste de mínimos cuadrados para ajustar un conjunto de N puntos (x_i, y_i) mediante una relación $y = a + b \exp(cx)$.
6. Deduzca todas las operaciones de simetría que genera un eje de rotación impropia S_5 .
7. Utilizando criterios de simetría molecular determine el grupo de simetría y la dirección del momento de dipolo eléctrico permanente de las moléculas de todos los derivados diclorados del naftaleno.
8. El anión carbonato tiene estructura plano-trigonal. Encontrar las RI para las que son base los tres orbitales σ .
9. ¿Qué transiciones de dipolo eléctrico estarán permitidas desde el estado fundamental de la molécula de benceno?
10. Determine el número, características de simetría y actividad en IR y Raman de las vibraciones normales de la molécula etileno.