

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. ¿Se puede ajustar un polinomio de colocación $p(x) = ax^3 + bx^4$ con dos puntos (x, y) ? ¿En qué condiciones?
2. Utilizar el método de Euler para calcular los puntos de la solución de $y' = -xy^3$ en $0 \leq x \leq 1$ con espaciado 0,2 y condición inicial $y(0) = 2$.
3. Calcular $\int_0^1 dx \ x/(1+x)$ mediante la regla de Simpson con una precisión de 10^{-2} .
4. Normalizar y calcular la media y la varianza de la densidad de probabilidad

$$f(x) = \begin{cases} 2x + x^3 & 0 < x < 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

5. Una matriz de transición a un paso tiene por elementos $p_{11} = p_{13} = p_{32} = 1/2$; $p_{21} = p_{22} = p_{23} = 1/3$; $p_{31} = p_{33} = 1/4$; $p_{12} = 0$. Calcular la distribución estacionaria.
6. Indique los elementos de simetría y el grupo de simetría puntual al que pertenecen las conformaciones *eclipsada* y *alternada* de la molécula de etano.
7. Construya la tabla de multiplicación del grupo de simetría puntual D_2 .
8. Los orbitales p_x , p_y y p_z forman base para una representación del grupo D_{2h} . Redúzcala a suma de RI usando directamente la información contenida en las tablas de caracteres de dicho grupo de simetría.
9. Considerando como grupo generatriz el C_3 encuentre a qué especies de simetría deben pertenecer los OM-CLOA de los grupos CO en la parte $Mn(CO)_3$ de la molécula de ciclopentadienil manganeso tricarbonilo.
10. Utilizando criterios de simetría molecular ¿pueden observarse en espectroscopía Raman los modos normales de vibración de la molécula de CO_2 activos en IR?