

Cuestionario mayo 2021

1-

a -Escriba la energía de un estado monodeterminantal de N electrones, indicando cuál es el significado de cada término.

b- Escriba el valor medio del operador de Fock, y compare la suma de energías de los spin orbitales ocupados con la energía de un determinante de N electrones.

2- Compare los métodos RHF y UHF. Ejemplificar en sistemas de 2 y 3 electrones.

3- Métodos correlacionados. Describa brevemente que es

a- Configuración de Interacciones

b- Perturbaciones de sistemas de muchos cuerpos

c- Funcional de la densidad.

Indique cuál de ellos es autoconsistente.