ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

EXAMEN FINAL

**Pregunta 1**.

a) Concepto y determinación de estados mono-determinantales spin-adaptados.

b) Formulación general y el ejemplo de estados de dos partículas.

c) cómo trataría un estado de 3 partículas a nivel RHF y UHF. Ejemplificar en base mínima

**Pregunta 2**. Disociación de la molécula de H2 en base mínima: casos Hartree-Fock e Interacción de Configuraciones.

Incluir CI truncado y Full CI.