

ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3 EXAMEN FINAL

Mayo 2021

Pregunta 1.

- a) Concepto y determinación de estados mono-determinantes spin-adaptados.
- b) Formulación general y el ejemplo de estados de dos partículas.
- c) Describir un estado de 3 partículas en el esquema RHF y UHF. Cuál sería el spin en cada caso.

Pregunta 2.

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

Distinguir CI truncado y full CI.