

Para la molécula asignada:

- 1- Optimice la geometría molecular empleando las bases atómicas: 3-21g y cc-pVDZ y los métodos UHF y CISD. ¿En qué caso se obtiene la “mejor” energía?. Compare con la geometría experimental.
- 2- Obtenga las curvas de disociación empleando los métodos RHF, UHF y CISD para las mismas bases del punto anterior.. Compare las distintas curvas obtenidas teniendo en cuenta el principio variacional. (Recomendamos disociar uno de los átomos de la molécula. Para el método CISD basta con que haga el cálculo con la base 3-21g)
- 3- Tomando la mejor geometría obtenida en el punto 1 y efectuando todos los cálculos a “geometría fija”:
 - a) Calcule la energía de ionización mediante un cálculo “directo”* y compare con el teorema de Koopmans. Utilice las bases atómicas del punto 1. ¿Cuál es la multiplicidad del estado ionizado?
 - b) ¿Cuál esperaría que sea la multiplicidad del estado doblemente ionizado si se supone válida la aproximación de orbitales congelados? Para responder esta pregunta:
 - Analice cuales son las posibles multiplicidades del estado doblemente ionizado (tomando únicamente “las más razonables”).
 - Halle las desigualdades que deben cumplir las integrales bielectrónicas J's y K's en cada caso.
 - Por último, efectuando los cálculos numéricos correspondientes halle la multiplicidad del estado doblemente ionizado.

(*) lógicamente debe emplear el método de Hartree-Fock.