

GUIA PRÁCTICA N° 5

1) Describir brevemente las diferencias y similitudes entre el método de Hartree-Fock y la Teoría de la Funcional Densidad para un sistema de N electrones en un determinado potencial externo, en cuanto a los siguientes temas (en el orden que consideren más conveniente):

a) Principio variacional

b) Función de onda de muchos cuerpos

c) Energía de interacción electrón-electrón :

- directa o Hartree

- intercambio

- correlación

d) Autointeracción

e) Exactitud (en el caso de DFT comentar sobre las aproximaciones que son necesarias realizar para resolver las ecuaciones).