

## Problemas de Estructura 3

### Hartree–Fock

1. Calcular, utilizando el método de Hartree–Fock, el estado fundamental del Helio. Comparar los resultados (energía, valores medios, Virial, etc.) con los que se obtienen utilizando el programa HF.F de Froese Fischer.
2. Verificar si el método Hartree–Fock (HF) permite obtener un estado ligado del ion  $H^-$ . Comprobar si los resultados coinciden con los que se obtienen utilizando el programa HF.F.
3. Repetir el ejercicio, para el estado doblemente excitado  $2s^2$  del He. Calcular la energía que tiene el electrón que se emite en el caso de producirse la autoionización.
4. Calcular, utilizando HF.F, las energías de los orbitales del Na. Calcular la energía de ionización, la afinidad, la electronegatividad, la dureza, y mediante la derivada de la energía total respecto a la carga (ver notas teóricas), calcular el potencial químico. Verificar si se cumple el teorema de Koopmann. Repetir el ejercicio para otro átomo.
5. Modificar los programas, de manera de poder calcular en HF, la configuración  $1s2s$  del He (calcular todos los términos posibles).
6. Escribir las ecuaciones de Hartree–Fock para los orbitales del estado fundamental del B. (Si te animás, resolvélas!)