

### **Final de Estructura de la Materia 3**

El final consistirá en la entrega de esta consigna en forma escrita (no más de 3 páginas) y la preparación de una presentación de 20-30 minutos donde se relacionan trabajos publicados en la actualidad con el material estudiado a lo largo de las clases teóricas del curso. El paper será elegido por ustedes y aprobado por mi previo a la presentación. (se enviará el link de un documento Excel donde incluirán nombre libreta y paper elegido).

#### **Consigna**

Aproximación irrestricta de Hartree Fock de capa abierta

- Describa las principales aproximaciones para llegar a las ecuaciones de Pople-Nesbet
- ¿Como se resuelven?
- ¿Qué es la contaminación de espín? Calcular  $\langle S^2 \rangle_{\text{UHF}}$