



# XV QUI TEL CHI PORTUGAL 84

## RESUMOS

de conferências e painéis apresentados no  
xv congresso dos químicos teóricos de expressão latina



3-6 de setembro 1984

VIANA DO CASTELO  
PORTUGAL

## Análisis de una función Hartree-Fock Generalizada. II

## La función Omega y la correlación electrónica

L. Doreste Suárez<sup>1</sup>, G. Delgado Barrio<sup>2</sup>, J. M. Martín González<sup>1</sup>, E. Ruiz Egea<sup>1</sup>, Y. G. Smeyers<sup>2</sup>.

1. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Las Palmas de Gran Canaria. Canary Islands. Spain.
2. Instituto de Estructura de la Materia C.S.I.C. Serrano, 119. Madrid-6. Spain.

## RESUMEN

En este trabajo se analiza la función de onda de capa abierta Omega, y se presenta la matriz densidad de primer orden reducida, así como los orbitales naturales y sus correspondientes números de ocupación. Usando estos orbitales se halla la densidad electrónica en el caso del átomo de Berilio.

Finalmente, se presenta la matriz densidad de segundo orden sin spin de este modelo, y utilizándola conjuntamente con la de primer orden se hace un análisis punto a punto de la correlación electrónica introducida.