



XV ^{QUI}/_{CHI} TEL 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

Estudio de una función Hartree-Fock Generalizada: I

La función Omega

Y. G. Smeyers¹, J. M. Martín-González², G. Delgado-Barrío¹,
F. Ruiz Egea², L. Doreste Suárez².

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

RESUMEN

En este trabajo se propone una función de onda de capa abierta que es función propia de spin y que está constituida por 2^n determinantes de Slater, siendo n el número de posibles pares de electrones, y $2n$ ó $2n+m$ el número total de electrones del sistema.

Se presentan cálculos comparativos con otros modelos Hartree-Fock generalizados como el Hartree-Fock semiprojectado (H. P.H.F.) y Hartree-Fock proyectado (P.H.F.) y se encuentra que la función omega conduce a energías más bajas.

Finalmente, se estudia la equivalencia al modelo de interacción de configuraciones, analizando la función mediante -- los coeficientes del desarrollo.