

**Título:** MODIFICACION DEL METODO HARTREE-FOCK PARA CONCLUIR LOS EFECTOS DE LA CORRELACION.

**Nombre:** MARTIN BRAVO M. ANGELES

**Universidad:** Universidad de Valladolid

**Fecha de lectura:** 01/01/1977

**Programa de doctorado:** DESCONOCIDO

**Dirección:**

> **Director:** JOSÉ LARGO CABRERIZO

**Tribunal:**

> **presidente:** SALVADOR SENENT PÉREZ

> **secretario:** FERNANDO MATA PEREZ

> **vocal:** HERRAEZ ZARZA MIGUEL ANGEL

> **vocal:** ÁNGEL ALBEROLA FIGUEROA

> **vocal:** RAFAEL GALLEGO ANDREU

**Descriptores:**

> FISICA

> TEORIA DE LA VALENCIA

> QUIMICA FISICA

**El fichero de tesis** no ha sido incorporado al sistema.

**Resumen:** SE PROPONE UNA MODIFICACION DEL ESQUEMA DE HATREE-FOCK PARA DAR CUENTA DE LA ENERGIA DE CORRELACION SIN MAS QUE MODIFICAR LA DEFINICION DEL POTENCIAL EFECTIVO AL OBJETO DE NO PERDER LA FACIL VISUALIZACION DE LA FUNCION DE ONDA MONODETERMINANTAL. SE HA ESTUDIADO UN POSIBLE FACTOR CORRECTIVO Y LOS PROMETEDORES RESULTADOS OBTENIDOS ABOGAN POR LA CONTINUACION DE ESTA INTERESANTE Y ORIGINAL LINEA DE INVESTIGACION. ASIMISMO SE HA ESTUDIADO LA FORMA EN QUE EL MODELO PROPUESTO MODIFICA LA FUNCION DE DISTRIBUCION DE LA DISTANCIA INTERELECTRONICA CUYA DEFINICION GENERAL HA SIDO HECHA EN ESTE TRABAJO.