

Título: APLICACION DE LA TEORIA DE MOLLER-PLESSET, NO RESTRINGIDA DE SEGUNDO ORDEN (UMP2) AL CALCULO DE LA ENERGIA DE CORRELACION DE SISTEMAS MOLECULARES.

Nombre: PUENTE SOTILLOS, GRACIANO

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 GALLEGRO ANDREU

Descriptores:

> FISICA

> TEORIA DE LA VALENCIA

> QUIMICA FISICA

El fichero de tesis no ha sido incorporado al sistema.

Resumen: SE HA ESTUDIADO LA APLICABILIDAD Y VALIDEZ DEL ESQUEMA UMP2 PARA EL CALCULO SISTEMATICO DE ENERGIAS DE CORRELACION EN SISTEMAS MOLECULARES SIENDO ESTA LA PRIMERA APLICACION REALIZADA CON EL MISMO PARA ESTE TIPO DE PROBLEMA. LOS RESULTADOS OBTENIDOS HAN SIDO ALTAMENTE SATISFACTORIOS YA QUE SE HA DEMOSTRADO CLARAMENTE QUE EL CITADO FORMALISMO COMPITE VENTAJOSAMENTE CON EL METODO HABITUALMENTE EMPLEADO EL DE INTERACCION DE CONFIGURACIONES (CI) QUE ES MUCHO MAS COMPLEJO Y CUYA APLICACION REQUIERE COSTOSOS Y LABORIOSOS CALCULOS.