



DANHZ3010-15SA - Física Computacional

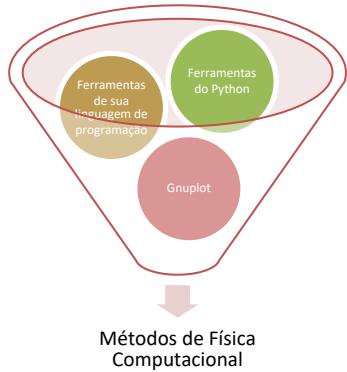
Pedro Alves da Silva Autreto



MOODLE
UFABC

Procure por FC – Física Computacional

Semana 10

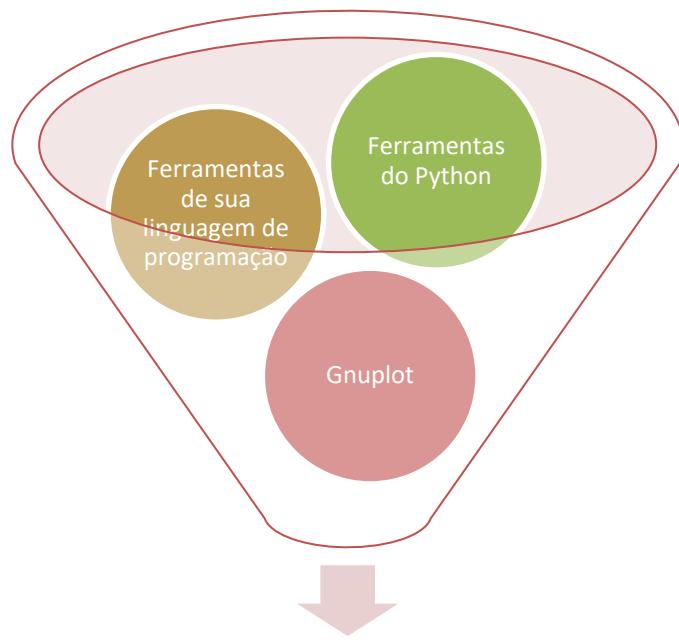


Resolver
derivadas/integral

resolver equações
e sistemas de
equações

resolver equações
diferenciais

Semana 10



Resolver Equações e Sistemas de Equações

- Idéias básicas;
- Substituição;
- Pivotamento
- Problema de autovalores e autovetores

Resolver integral

- Método trapezóide;
- Método Simpson;
 - Romberg;
- Quadratura gaussiana;
- Derivadas

resolver
equações
diferenciais

Teoria Orbital Molecular

[C] O orbital molecular de mais baixa energia será uma CLOA:

$$\psi = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2 + c_3 \phi_3 + \dots + c_N \phi_N = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i , \quad (1)$$

onde os ϕ_i são os N orbitais atômicos envolvidos nas ligações químicas (e são funções reais) e os c_i são os coeficientes que levarão à combinação correta (e são números reais). Por exemplo, para a molécula de hidrogênio, H_2 , temos a seguinte CLOA:

$$\psi = c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2$$

sendo que ϕ_1 é o orbital atômico 1s do hidrogênio 1 e ϕ_2 é o orbital atômico 1s do hidrogênio 2.

[C] Para que este orbital molecular seja uma solução para o problema, ele deve ser uma solução da ESIT do sistema em questão:

$$H\psi = E\psi . \quad (2)$$

Teoria Orbital Molecular

[C] Vamos manipular a ESIT do sistema de modo a obter uma expressão para a energia em função dos parâmetros $\{c_i\}$.

Em primeiro lugar, multipliquemos ambos os lados da ESIT, pela esquerda, por ψ^* (de fato podemos multiplicar por ψ pois estamos supondo que $\{\varphi_i\}$ é um conjunto de funções reais e $\{c_i\}$ um conjunto de números reais):

$$\psi \mathbf{H} \psi = \psi E \psi = E \psi \psi = E \psi^2 , \quad (3)$$

Agora integremos os dois lados de (3) sobre todo o espaço:

$$\int \psi \mathbf{H} \psi d\nu = E \int \psi^2 d\nu , \quad (4)$$

ou

$$E = \frac{\int \psi \mathbf{H} \psi d\nu}{\int \psi^2 d\nu} . \quad (5)$$

Teoria Orbital Molecular

$$\psi = c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 + c_3 \varphi_3 + \dots + c_N \varphi_N = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i , \quad (1)$$

Agora substituímos (1) em (5):

$$E = \frac{\int \left(\sum_r c_r \varphi_r \right) \mathbf{H} \left(\sum_s c_s \varphi_s \right) dv}{\int \left(\sum_r c_r \varphi_r \right) \left(\sum_s c_s \varphi_s \right) dv} , \quad (6)$$

$$E = \frac{\sum_r \sum_s c_r c_s \int \varphi_r \mathbf{H} \varphi_s dv}{\sum_r \sum_s c_r c_s \int \varphi_r \varphi_s dv} . \quad (7)$$

Teoria Orbital Molecular

$$E = \frac{\sum_r \sum_s c_r c_s \int \varphi_r \mathbf{H} \varphi_s dv}{\sum_r \sum_s c_r c_s \int \varphi_r \varphi_s dv} . \quad (7)$$

Por conveniência, introduzimos as definições:

$$H_{rs} = \int \varphi_r \mathbf{H} \varphi_s dv \quad (8)$$

e

$$S_{rs} = \int \varphi_r \varphi_s dv . \quad (9)$$

Substituindo (8) e (9) em (7), temos:

$$E = \frac{\sum_r \sum_s c_r c_s H_{rs}}{\sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs}} \quad (10)$$

Teoria Orbital Molecular

$$E = \frac{\sum_r \sum_s c_r c_s H_{rs}}{\sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs}} \quad (10)$$

Vemos que a energia E é uma função do conjunto $\{c_i\}$. Se $E=E(\{c_i\})$ possuir um mínimo em relação ao coeficiente c_t , então temos que:

$$\frac{\partial E}{\partial c_t} = 0 . \quad (11)$$

A eq. (10) pode ser reescrita como:

$$\sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs} E = \sum_r \sum_s c_r c_s H_{rs} . \quad (12)$$

Teoria Orbital Molecular

A eq. (10) pode ser reescrita como:

$$\sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs} E = \sum_r \sum_s c_r c_s H_{rs} . \quad (12)$$

Diferenciando ambos os lados de (12) em relação a um certo c_t , temos:

$$\frac{\partial}{\partial c_t} \left(E \sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs} \right) = \frac{\partial}{\partial c_t} \left(\sum_r \sum_s c_r c_s H_{rs} \right) . \quad (13)$$

Desenvolvendo as derivadas parciais para as somatórias, ficamos com:

$$\frac{\partial E}{\partial c_t} \sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs} + E \frac{\partial}{\partial c_t} \left(\sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs} \right) = \frac{\partial}{\partial c_t} \left(\sum_r \sum_s c_r c_s H_{rs} \right) , \quad (14)$$

Prove!

Usando (11) e aplicando as derivadas parciais aos produtos $c_r c_s$, temos:

$$E \sum_s c_s S_{is} + E \sum_r c_r S_{ri} = \sum_s c_s H_{is} + \sum_r c_r H_{ri} . \quad (15)$$

Teoria Orbital Molecular

Desenvolvendo as derivadas parciais para as somatórias, ficamos com:

$$\frac{\partial E}{\partial c_i} \sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs} + E \frac{\partial}{\partial c_i} \left(\sum_r \sum_s c_r c_s S_{rs} \right) = \frac{\partial}{\partial c_i} \left(\sum_r \sum_s c_r c_s H_{rs} \right), \quad (14)$$

Usando (11) e aplicando as derivadas parciais aos produtos $c_r c_s$, temos:

$$E \sum_s c_s S_{is} + E \sum_r c_r S_{ri} = \sum_s c_s H_{is} + \sum_r c_r H_{ri}. \quad (15)$$

No entanto, a partir de (8) e (9), pode-se mostrar que²:

$$S_{rs} = S_{sr}, \quad (16)$$

$$H_{rs} = H_{sr}. \quad (17)$$

Substituindo-se (16) e (17) em (15), temos:

$$2E \sum_r c_r S_{ir} = 2 \sum_r c_r H_{ir} \quad (18)$$

Teoria Orbital Molecular

Substituindo-se (16) e (17) em (15), temos:

$$2E \sum_r c_r S_{tr} = 2 \sum_r c_r H_{tr} \quad (18)$$

ou

$$\sum_r c_r (H_{tr} - ES_{tr}) = 0 \quad . \quad (19)$$

Como temos que calcular $\frac{\partial E}{\partial c_t}$ para cada t , acabamos com N equações do tipo (19):

$$\begin{array}{cccccc} c_1(H_{1,1} - ES_{1,1}) & +c_2(H_{1,2} - ES_{1,2}) & \dots & +c_N(H_{1,N} - ES_{1,N}) & = 0 \\ c_1(H_{2,1} - ES_{2,1}) & +c_2(H_{2,2} - ES_{2,2}) & \dots & +c_N(H_{2,N} - ES_{2,N}) & = 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & . \\ c_1(H_{N,1} - ES_{N,1}) & +c_2(H_{N,2} - ES_{2,N}) & \dots & +c_N(H_{N,N} - ES_{N,N}) & = 0 \end{array} \quad (20)$$

Teoria Orbital Molecular

$$\begin{aligned} c_1(H_{1,1} - ES_{1,1}) &+ c_2(H_{1,2} - ES_{1,2}) &\dots &+ c_N(H_{1,N} - ES_{1,N}) &= 0 \\ c_1(H_{2,1} - ES_{2,1}) &+ c_2(H_{2,2} - ES_{2,2}) &\dots &+ c_N(H_{2,N} - ES_{2,N}) &= 0 \\ \vdots &\quad \vdots &\quad \vdots &\quad \vdots &\quad \vdots \\ c_1(H_{N,1} - ES_{N,1}) &+ c_2(H_{N,2} - ES_{2,N}) &\dots &+ c_N(H_{N,N} - ES_{N,N}) &= 0 \end{aligned} . \quad (20)$$

[C] As equações (20) podem ser rescritas na forma matricial como:

$$(\tilde{H} - E\tilde{S})\tilde{c} = 0 , \quad (21)$$

onde \tilde{H} e \tilde{S} são matrizes quadradas $N \times N$ e \tilde{c} é uma matriz coluna (vetor) de N elementos.

[C] Sabe-se que o sistema de equações (20) terá uma solução não-trivial se, e somente se:

$$\det(\tilde{H} - E\tilde{S}) = 0 . \quad (22)$$

Método de Ligações Fortes

[C] O Método das Ligações Fortes (MLF) (em inglês, conhecido como “tight binding”) é uma das aproximações mais simples entre as que podem ser adotadas para a solução do sistema de equações (20) da seção “Orbitais Moleculares: Combinação Linear de Orbitais Atômicos”.

[C] A abordagem do MLF é a de que os elétrons continuam fortemente ligados aos átomos de origem e que somente as ligações mais fortes, ou seja, aquelas entre orbitais atômicos próximos, tem de fato uma influência grande na estrutura eletrônica do material.

[D] As aproximações do MLF de primeiros vizinhos (MLF_{1V}) são:

1^a: Para um determinado orbital atômico φ_r :

$$H_{rr} = \int \varphi_r \mathbf{H} \varphi_r dv = \alpha_r = \text{constante} ,$$

Método de Ligações Fortes

2^a: Para dois orbitais atômicos φ_r e φ_s :

$$H_{rs} = \int \varphi_r \mathbf{H} \varphi_s dv = \beta_{rs} = \text{constante}$$

se φ_r for vizinho imediato de φ_s ; H_{rs} será nulo em qualquer outro caso. β_{rs} é chamado de “integral de *hopping*”, entre outros nomes.

3^a: $S_{rs} = \delta_{rs}$,

sendo que δ_{rs} é a função “delta de Kroenecker” que tem seus valores dados por:

$$\delta_{rs} = 1 \text{ se } r=s; \delta_{rs} = 0 \text{ se } r \neq s.$$

Assim:

$$S_{rr} = 1; S_{rs}=0 \text{ para } r \neq s.$$

Esta aproximação é conhecida como “aproximação da sobreposição nula”.

Método de Ligações Fortes

$$\begin{array}{cccccc} c_1(H_{1,1} - ES_{1,1}) & +c_2(H_{1,2} - ES_{1,2}) & \dots & +c_N(H_{1,N} - ES_{1,N}) & = 0 \\ c_1(H_{2,1} - ES_{2,1}) & +c_2(H_{2,2} - ES_{2,2}) & \dots & +c_N(H_{2,N} - ES_{2,N}) & = 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & . \\ c_1(H_{N,1} - ES_{N,1}) & +c_2(H_{N,2} - ES_{2,N}) & \dots & +c_N(H_{N,N} - ES_{N,N}) & = 0 \end{array} \quad (20)$$

[C] Com as aproximações do MLF_{1V}, as equações (20) da seção “Orbitais Moleculares: Combinação Linear de Orbitais Atômicos” assumem a forma:

$$\begin{array}{cccccc} c_1(\alpha_1 - E) & c_2\beta_{1,2} & \dots & c_N\beta_{1,N} & = 0 \\ c_1\beta_{2,1} & c_2(\alpha_2 - E) & \dots & c_N\beta_{2,N} & = 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & = 0 & . \\ c_1\beta_{N,1} & c_2\beta_{N,2} & \dots & c_N(\alpha_N - E) & = 0 \end{array} \quad (1)$$

Método de Ligações Fortes

[C] Com as aproximações do MLF_{IV}, as equações (20) da seção “Orbitais Moleculares: Combinação Linear de Orbitais Atômicos” assumem a forma:

$$\begin{array}{cccccc} c_1(\alpha_1 - E) & c_2\beta_{1,2} & \dots & c_N\beta_{1,N} & = 0 \\ c_1\beta_{2,1} & c_2(\alpha_2 - E) & \dots & c_N\beta_{2,N} & = 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots & = 0 \\ c_1\beta_{N,1} & c_2\beta_{N,2} & \dots & c_N(\alpha_N - E) & = 0 \end{array} . \quad (1)$$

[C] O conjunto (1) se apresenta como um típico problema de autovalores e autovetores. Ele somente possuirá uma solução não-trivial se:

$$\det \begin{bmatrix} (\alpha_1 - E) & \beta_{1,2} & \dots & \beta_{1,N} \\ \beta_{2,1} & (\alpha_2 - E) & \dots & \beta_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots \\ \beta_{N,1} & \beta_{N,2} & \dots & (\alpha_N - E) \end{bmatrix} = 0 . \quad (2)$$

Método de Huckel

[C] O Método Hückel (MH) é bastante similar ao Método das Ligações Fortes , sendo que foi aprimorado por pesquisadores interessados no estudo de moléculas para aplicações em estudos de química.

[C] Nem todas as moléculas são tratadas pelo MH. Tratam-se somente as moléculas que são planares e possuem ligações π (por exemplo, uma molécula de benzeno). Para estes sistemas, as ligações σ são muito fortes e praticamente não permitem que os elétrons que delas tomem parte se envolvam em fenômenos eletrônicos, tais como emissão de luz, por exemplo. Este é o motivo pelo qual somente se incluem nos cálculos os elétrons advindos dos orbitais atômicos p_z : somente eles terão participação ativa na maioria dos fenômenos de origem eletrônica nos quais estas moléculas possam se envolver (como por exemplo, reações químicas). Além disto, por questões de simetria, as ligações π de uma molécula praticamente não se misturam com as ligações σ , formando dois sistemas de elétrons praticamente separados dentro da mesma molécula. Assim sendo, é razoável desconsiderar nos cálculos os elétrons envolvidos nas ligações σ . E como ligações π advém de combinações lineares de orbitais atômicos do tipo p_z , somente estes orbitais atômicos entram nos cálculos.

Método de Huckel

[C] O MH procura fixar um conjunto bem determinado de parâmetros α e β para cada orbital atômico p_z de um dado átomo em um determinado estado de hibridização e de ligação π (simples, aromática ou dupla).

[D] As aproximações do MH são:

1^a: Para o orbital $p_z^{(x)}$ de um determinado átomo do tipo x :

$$H_{p_z^{(x)} p_z^{(x)}} = \int p_z^{(x)} \mathbf{H} p_z^{(x)} dv = \alpha_x = \text{constante}.$$

2^a: Para dois orbitais atômicos p_z que formem uma ligação π , cada um localizado em um átomo diferente, sendo que um deles é do tipo x e outro do tipo x' :

$$H_{p_z^{(x)} p_z^{(x')}} = \int p_z^{(x)} \mathbf{H} p_z^{(x')} dv = \beta_{xx'} = \text{constante}.$$

Método de Huckel

[D] Dentro da aproximação do MH, os parâmetros comumente adotados são:³

$$\alpha_x = \alpha_0 + h_x \beta_0$$

e

$$\beta_{xx'} = k_{xx'} \beta_0 ,$$

sendo que:

- $\alpha_0 = \alpha_C$ para a molécula de benzeno e usualmente dita como valendo zero;
- $\beta_0 = \beta_{C,C}$ para o benzeno e usualmente adotado como valendo -2,5 eV.

Método de Huckel

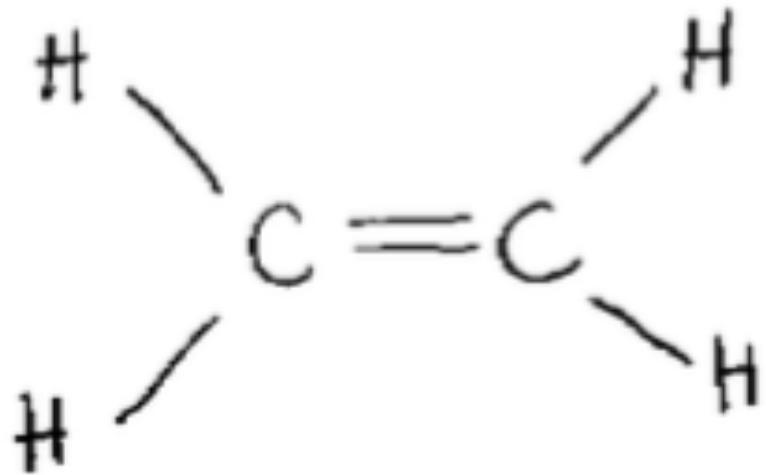
[C] Abaixo segue uma tabela com os parâmetros tradicionalmente usados e disponíveis no MH:

x	Elemento	h_x	k_{Cx}
B	boro	$h_B=-1$	$k_{C-B}=0,7$
C	carbono	$h_C=0$	$k_{C-C}=0,9$ $k_{CC}=1,0$ $k_{C=C}=1,1$
N	nitrogênio	$h_N=0,5$ $h_N^{oo}=1,5$ $h_{N^+}=2,0$	$k_{C-N}=0,8$ $k_{CN}=1,0$ $k_{N-O}=0,7$
O	oxigênio	$h_O=1,0$ $h_O^{oo}=2,0$ $h_{O^+}=2,5$	$k_{C-O}=0,8$ $k_{C=O}=1,0$
F	flúor	$h_F=3,0$	$k_{C-F}=0,7$
Cl	cloro	$h_{Cl}=2,0$	$k_{C-Cl}=0,4$
Br	bromo	$h_{Br}=1,5$	$k_{C-Br}=0,3$

Ligaçāo aromática

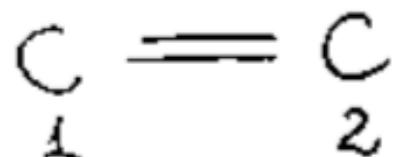
Método de Huckel

Usando o método de Huckel, calcule os níveis de energia mais externos do Etileno.



Método de Huckel

Como já vimos, somente as ligações π importam; portanto, as ligações C-H não são consideradas. Resta:



Temos portanto somente uma ligação π a ser considerada entre os dois átomos de carbono. Entram no cálculo o orbital atômico p_z de cada carbono. O sistema a ser calculado é:

$$\det \begin{bmatrix} \alpha_c - E & \beta_{c=c} \\ \beta_{c=c} & \alpha_c - E \end{bmatrix} = 0,$$

sendo que:

- $\alpha_c - E = 0 - E = -E$,
- $\beta_{c=c} = k_{c=c}\beta_0 = 1,1 \cdot (-2,5 \text{ eV}) = -2,75 \text{ eV}$.

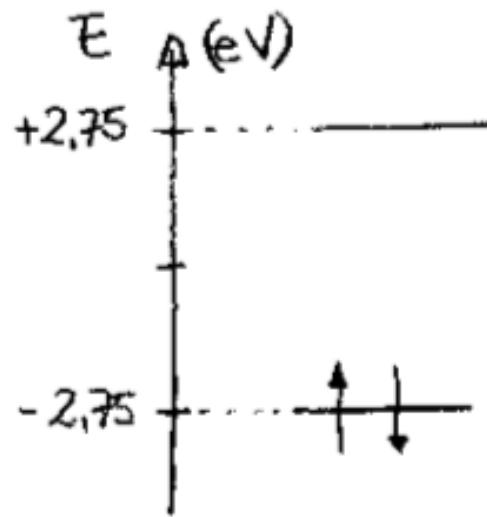
Método de Huckel

Assim:

$$\det \begin{bmatrix} -E & -2,75 \\ -2,75 & -E \end{bmatrix} = 0,$$

$$E^2 - 2,75^2 = 0, E^2 = 2,75^2, E = \pm 2,75.$$

Ou seja, $E_1 = -2,75$ eV; $E_2 = +2,75$ eV. Abaixo vemos o diagrama de níveis de energia.



Método de Huckel

Vemos que o orbital molecular π de mais baixa energia fica duplamente ocupado pois o etileno possui 2 elétrons π .

Agora que as energias do sistema estão determinadas, temos que calcular os orbitais moleculares correspondentes. Temos que:

$$\psi_i = c_{i,1}\varphi_1 + c_{i,2}\varphi_2,$$

sendo que φ_1 e φ_2 representam os orbitais atômicos p_z dos carbonos 1 e 2. i vale 1 para E_1 e 2 para E_2 . Não confundir a numeração dos orbitais atômicos com a dos orbitais moleculares: E_1 e E_2 dizem respeito às energias dos orbitais moleculares 1 e 2 e não dos orbitais atômicos 1 e 2, que por sinal valem α_C .

Para o cálculo do conjunto $(c_{1,1}, c_{1,2})$ usaremos a notação mais simples (c_1, c_2) . Teremos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} -E & -2,75 \\ -2,75 & -E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

Método de Huckel

Para $E=-2,75$:

$$\begin{cases} 2,75c_1 - 2,75c_2 = 0 \\ -2,75c_1 + 2,75c_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 - c_2 = 0 \\ -c_1 + c_2 = 0 \end{cases} \therefore c_1 = c_2.$$

Assim:

$$\int (c_1^2 \varphi_1^2 + c_2^2 \varphi_2^2 + 2c_1 c_2 \varphi_1 \varphi_2) dv = 1,$$

$$c_1^2 \int \varphi_1^2 dv + c_2^2 \int \varphi_2^2 dv + 2c_1 c_2 \int \varphi_1 \varphi_2 dv = 1.$$

Como no MH, $S_{rs} = \delta_{rs}$, temos que:

$$\int \varphi_1^2 dv = 1, \quad \int \varphi_2^2 dv = 1, \quad \int \varphi_1 \varphi_2 dv = 0.$$

Logo:

$$c_1^2 + c_2^2 = 1.$$

Como $c_1=c_2$, temos $2c_1^2=1 \Rightarrow c_1=c_2=2^{-1/2}$. Assim:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2).$$

Repetindo os mesmos cálculos para $E=+2,75$ eV, chegaremos a:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 - \varphi_2).$$

Método de Huckel

Logo:

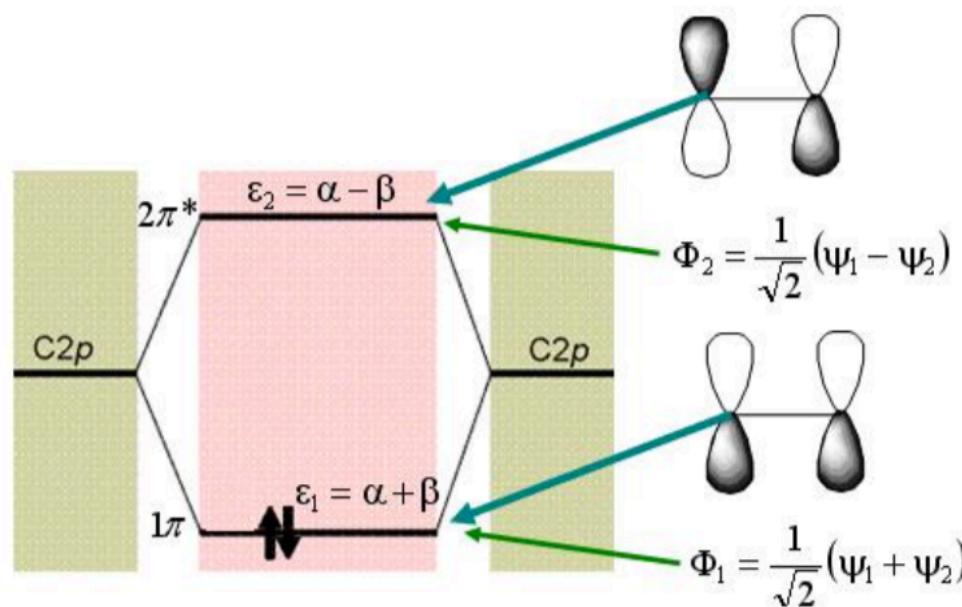
$$c_1^2 + c_2^2 = 1.$$

Como $c_1=c_2$, temos $2c_1^2=1 \Rightarrow c_1=c_2=2^{-1/2}$. Assim:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2).$$

Repetindo os mesmos cálculos para $E=+2,75$ eV, chegaremos a:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_2).$$



População eletrônica

[C] Se existem M elétrons no sistema considerado de N orbitais atômicos, então o mesmo orbital atômico pode acomodar “partes” ou “pedaços” de diferentes elétrons, que estão acomodados em diferentes orbitais moleculares.

Podemos então definir uma população eletrônica total (PET_k) do orbital atômico φ_k como sendo :

$$\text{PET}_k = \sum_{j=1}^N c_{jk}^2 \cdot n_j,$$

sendo que n_j é o número de elétrons que ocupam o orbital molecular ψ_j (2, 1 ou 0).

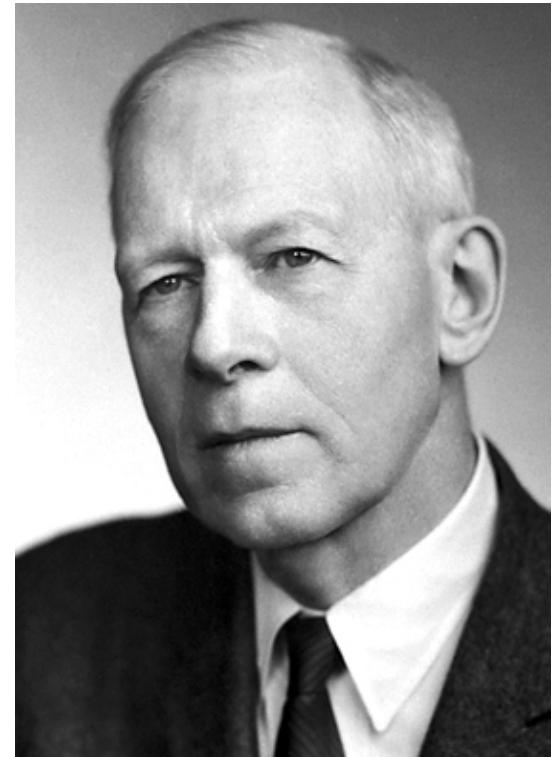
Observe que o valor de PET_k pode variar entre 0 e M , sendo ambos estes limites pouco prováveis. Pode parecer estranho, mas, ao contrário da PE_{jk} , PET_k pode ser > 2 . Isto porque, como já sabemos, em um sistema multiatômico, os elétrons são acomodados nos orbitais moleculares, construídos a partir de combinações lineares de orbitais atômicos, e não nestes últimos. Assim, os orbitais atômicos neste caso são somente entes constituintes do orbital molecular e não estão sujeitos às regras de preenchimentos de orbitais.

Robert Sanderson Mulliken



Prize motivation: "for his fundamental work concerning chemical bonds and the electronic structure of molecules by the molecular orbital method"

Nobel 1966



07/06/1896 – 31/10/1986

Eletronegatividade pela Tabela Periódica

Eletronegatividade é definida (por Pauling) como a medida da habilidade de um atomo em uma molécula de atrair elétrons para si.

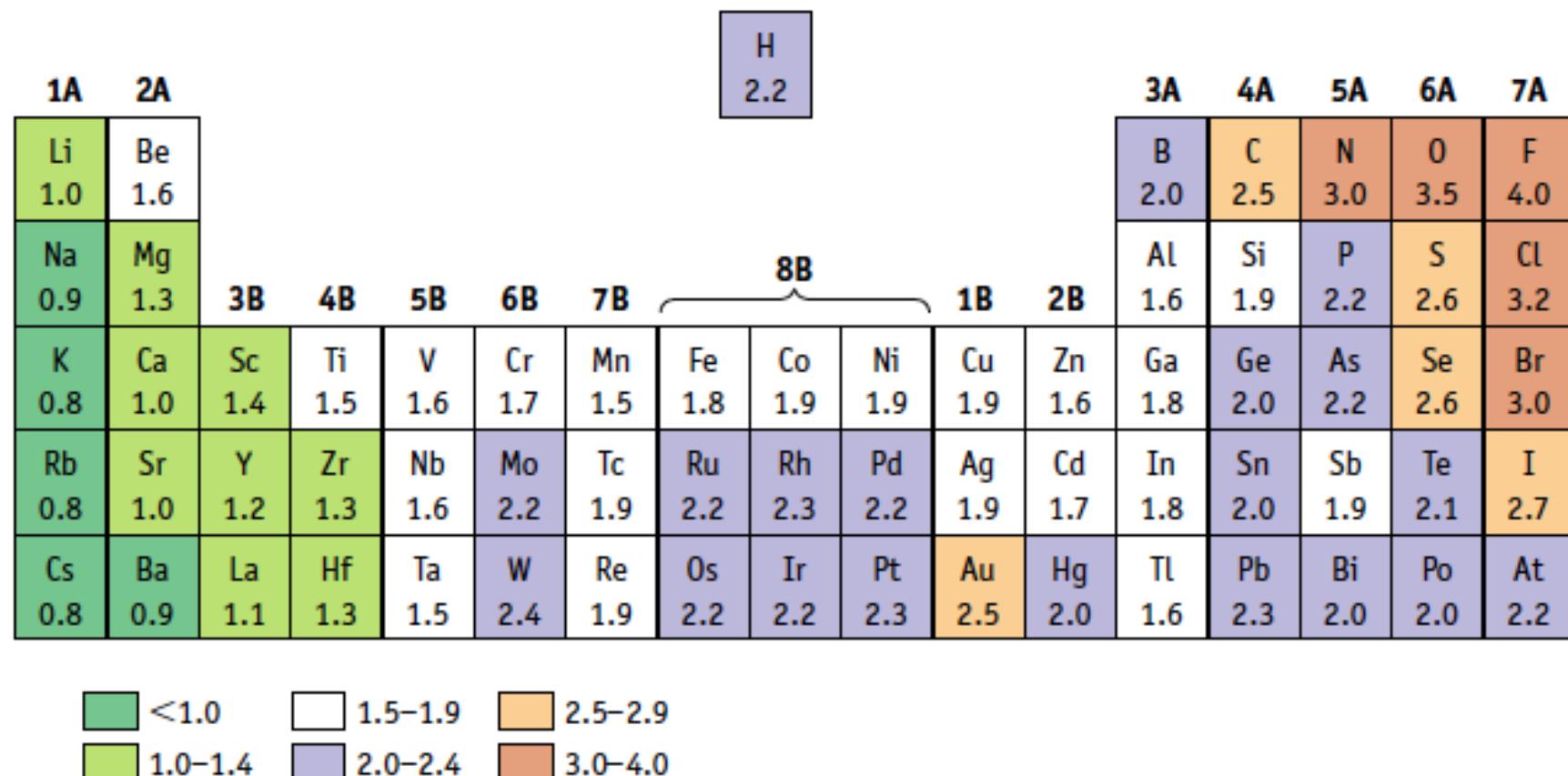
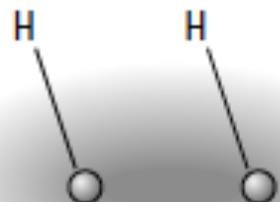
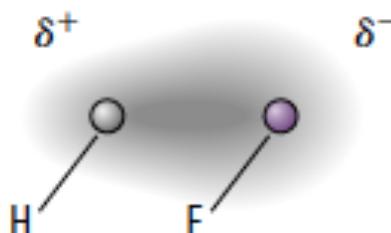


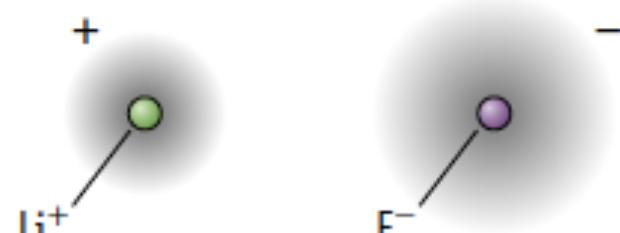
FIGURE 8.11 Electronegativity values for the elements according to Pauling. Trends for electronegativities are the opposite of the trends defining metallic character. Nonmetals have high values of electronegativity; the metalloids have intermediate values, and the metals have low values. Values for these elements as well as for the noble gases and for the lanthanides and actinides are available in the following handbook: Emsley, J., *The Elements*, 3rd edition, Clarendon Press, Oxford, 1998.



H_2 , totally covalent
 $\Delta\chi = 0$

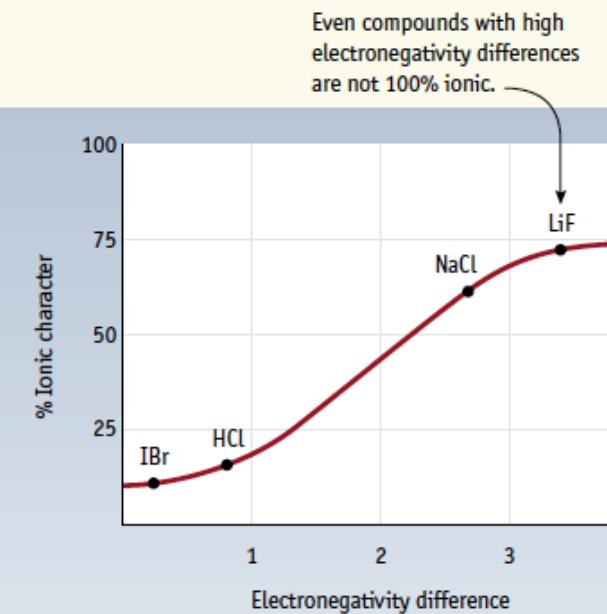


HF, polar covalent
 $\Delta\chi = 4.0 - 2.2 = 1.8$



LiF, ionic
 $\Delta\chi = 4.0 - 1.0 = 3.0$

O Cárater Iônico, Covalente ou metálico é dado pela simetria da distribuição eletrônica em relação a posição dos núcleos.



Ordem de ligação

[C] A “ordem de ligação” (OL) é um índice que nos dá a ideia de quão forte é uma interação entre 2 orbitais atômicos. A OL é proporcional à quantidade de elétrons (“cimento”) que liga dois orbitais atômicos.

[D] A OL parcial (OLP), P_{rs}^j , é o índice que nos diz quão forte é a interação entre os orbitais atômicos r e s no orbital molecular j :

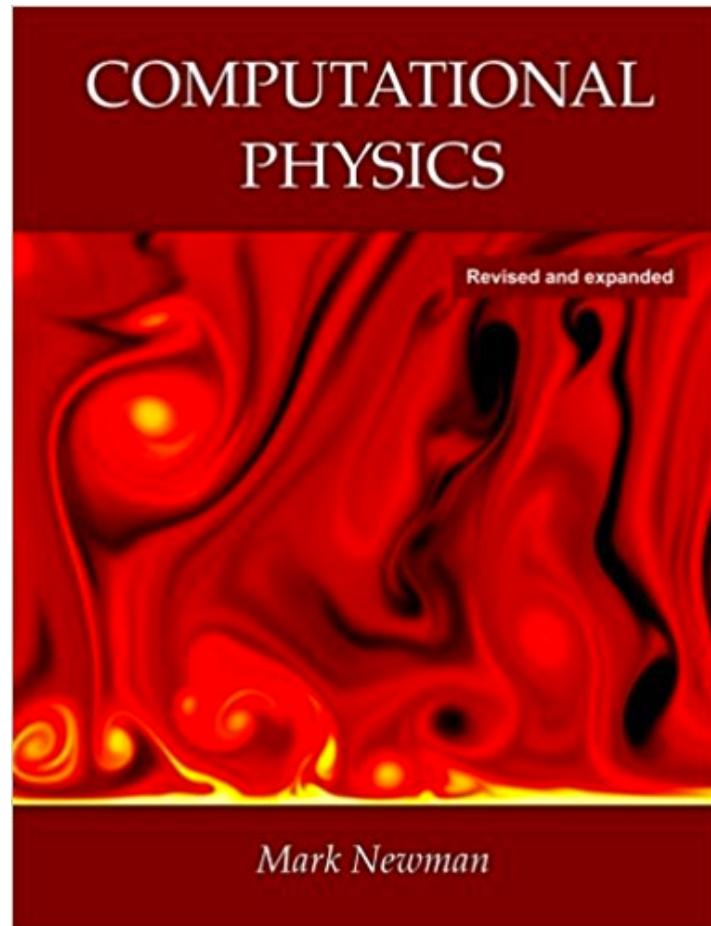
$$P_{rs}^j = c_{jr} c_{js} .$$

[D] A OL propriamente dita, P_{rs} , é o índice que nos dá uma noção de quão forte é a ligação química real entre os orbitais atômicos r e s :

$$P_{rs} = \sum_{j=1}^N n_j \cdot P_{rs}^j = \sum_{j=1}^N n_j c_{jr} c_{js} .$$

sendo que n_j possui o mesmo significado definido anteriormente: é o número de elétrons que ocupam o orbital molecular ψ_j (2, 1 ou 0).

Leitura e “Mão na massa”



MARK, N. , Computational Physics

(<http://www-personal.umich.edu/~mejn/cp/index.html>)