

Задачі

```
import sys, math
```

```
## CONSTRAINTS
```

1. Запишіть детермінант Слейтера для основного стану системи трьох частинок (прикладом може бути основний стан атома Li).
Яка мультиплетність основного стану?

```
# threshold beyond average of covalent radii to determine bond cutoff
bond_thresh = 1.2
```

2. Знайдіть вираз електронної густини для цього випадку через орбіталі використовуючи формулу:

```
# "Inorganic Chemistry", 6th ed., pgs 1013-1014
cov_rads = { 'H' : 0.37, 'C' : 0.77, 'O' : 0.73, 'N' : 0.75, 'F' : 0.71,
             'P' : 1.10, 'S' : 1.03, 'Cl' : 0.99, 'Br' : 1.14, 'I' : 1.33, 'He' : 0.30,
             'Ne' : 0.84, 'Ar' : 0.90, 'Kr' : 1.10, 'Xe' : 1.30, 'Rn' : 1.40, 'Li' : 0.75,
             'Mg' : 0.72, 'Al' : 1.30, 'Si' : 1.08, 'K' : 1.38, 'Ca' : 1.00, 'Sc' : 0.75,
             'Ti' : 0.86, 'V' : 0.79, 'Cr' : 0.73, 'Mn' : 0.67, 'Fe' : 0.61, 'Co' : 0.64,
             'Ni' : 0.55, 'Cu' : 0.46, 'Zn' : 0.60, 'Ga' : 1.22, 'Ge' : 1.22, 'As' : 1.22,
             'Se' : 1.17, 'Kr' : 1.03, 'X' : 0.00 }
```

$$\rho(x, y, z) = 3 \int_{V_2} \int_{V_3} \int_{\sigma_1} \int_{\sigma_2} \int_{\sigma_3} |\Phi(\vec{\xi}_1, \vec{\xi}_2, \vec{\xi}_3)|^2 dV_2 dV_3 d\sigma_1 d\sigma_2 d\sigma_3.$$

3. Зробіть висновки з попереднього розв'язку: як має виглядати електронна густина для системи N_e електронів (виведення для загальному випадку робити не треба)?