

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

```
# threshold beyond which we consider two atoms bonded  
bond_thresh = 1.2
```

```
# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms), from
```

```
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed, Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014
```

```
cov_radii = { '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' : 1.00, 'Li' : 1.18, 'Be' : 0.88, 'Na' : 1.02,  
              'Mg' : 0.72, 'Al' : 1.30, 'Si' : 1.18, '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 }
```

Властивості молекул

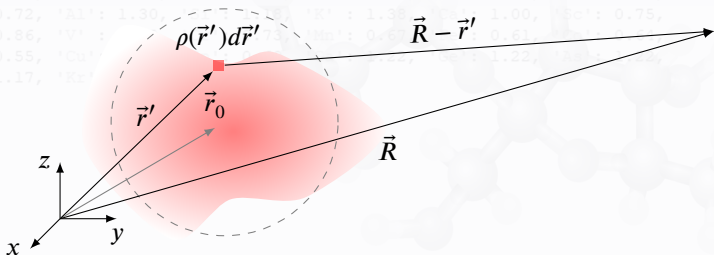
Лекції з квантової хімії

Пономаренко С. М.

Розкладання за мультиполями

- Молекули породжують електричне поле.
- Електричний потенціал $\phi^p(\vec{R})$ створюється розподілом заряду $\rho(\vec{r})$ молекули:

$$\phi^p(\vec{R}) = \int \frac{\rho(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{R} - \vec{r}'|}$$



Розкладання за мультиполями

- Молекули породжують електричне поле.

- Електричний потенціал $\phi^p(\vec{R})$ створюється розподілом заряду $\rho(\vec{r})$ молекули:

$$\phi^p(\vec{R}) = \int_{\vec{r}'} \frac{\rho(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{R} - \vec{r}'|}$$

Розкладемо в ряд потенціал в околі точки $\vec{r}' = \vec{r}_0$:

$$\begin{aligned} \phi^p(\vec{R}) = & \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}_0|} \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') d\vec{r}' + \\ & + \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial r'_{\alpha}} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}'|} \right)_{\vec{r}' = \vec{r}_0} \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') (r'_{\alpha} - r_{0,\alpha}) d\vec{r}' + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial^2}{\partial r'_{\alpha} \partial r'_{\beta}} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}'|} \right)_{\vec{r}' = \vec{r}_0} \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') (r'_{\alpha} - r_{0,\alpha}) (r'_{\beta} - r_{0,\beta}) d\vec{r}' + \dots \end{aligned}$$

Розкладання за мультиполями

- Інтеграли $\int x^n f(x) dx$ – момент n -го порядку функції $f(x)$.
- Електричні моменти функції розподілу заряду $\rho(\vec{r})$:

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS Електричний заряд
```

$$q = \int \rho(\vec{r}') d\vec{r}'$$

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

```
Дипольний момент
```

$$\mu_\alpha(\vec{r}_0) = \int \rho(\vec{r}') (r'_\alpha - r_{0,\alpha}) d\vec{r}'$$

```
# covalent (cr) radii by atomic element (Angstroms) from
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed, Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014
cov_radii = { 'H' : 0.37, 'C' : 0.77, 'O' : 0.73, 'N' : 0.75, 'F' : 0.71,
```

```
Момент 2-го порядку
```

$$Q_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) = \int \rho(\vec{r}') (r'_\alpha - r_{0,\alpha})(r'_\beta - r_{0,\beta}) d\vec{r}'$$

$$\begin{aligned} \phi^p(\vec{R}) = & \frac{q}{|\vec{R} - \vec{r}_0|} + \sum_\alpha \left(\frac{\partial}{\partial r'_\alpha} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}'|} \right)_{\vec{r}'=\vec{r}_0} \mu_\alpha(\vec{r}_0) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial^2}{\partial r'_\alpha \partial r'_\beta} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}'|} \right)_{\vec{r}'=\vec{r}_0} Q_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) + \dots \end{aligned}$$

- Знаючи мультипольні моменти функції $\rho(\vec{r}')$ можна розрахувати потенціал $\phi^p(\vec{R})$ в довільній точці \vec{R} .

Розкладання за мультиполями

- Величина повного заряду не залежить від вибору \vec{r}_0 для будь-якої молекули.
- Дипольний момент для нейтральної молекули не залежить від вибору \vec{r}_0 . (Для іонів — залежатиме.)
- Момент 2-го порядку залежить від вибору \vec{r}_0 для нейтральних та заряджених молекул.
- На практиці, зазвичай, працюють з п'ятьма незалежними компонентами моменту 2-го порядку, який називається квадрупольним моментом. Перевизначити компоненти у цьому випадку можна наступним чином:

$$\Theta_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') \left(3(r'_\alpha - r_{0,\alpha})(r'_\beta - r_{0,\beta}) - \delta_{\alpha\beta}(\vec{r}' - \vec{r}_0)^2 \right) d\vec{r}'$$

Квадрупольний момент молекули у якої дипольний момент дорівнює нулю не залежить від вибору \vec{r}_0 .

Потенціальна енергія в електричному полі

- Потенціальна енергія зарядів $\rho(\vec{r})$ в електричному полі:

$$E(\vec{\mathcal{E}}) = \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}) d\vec{r}$$

- Розкладемо потенціал в ряд в околі точки \vec{r}_0 :

$$\phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}') = \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}_0) + \sum_{\alpha} (r'_{\alpha} - r_{0,\alpha}) \left. \frac{\partial \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}')}{\partial r'_{\alpha}} \right|_{\vec{r}'=\vec{r}_0} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (r'_{\alpha} - r_{0,\alpha})(r'_{\beta} - r_{0,\beta}) \left. \frac{\partial^2 \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}')}{\partial r'_{\alpha} \partial r'_{\beta}} \right|_{\vec{r}'=\vec{r}_0} + \dots$$

- Похідні потенціалу $\phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}')$ в точці \vec{r}_0 :

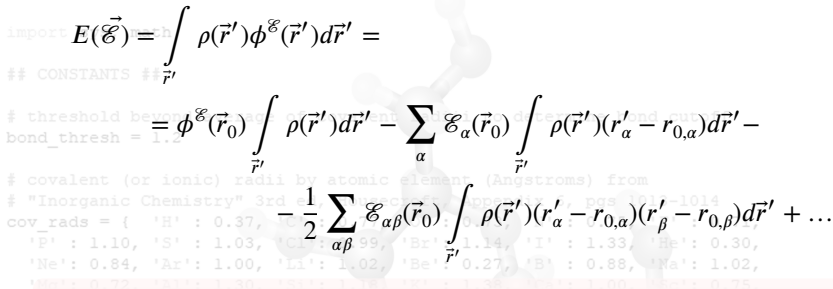
$$\mathcal{E}_{\alpha}(\vec{r}_0) = - \left. \frac{\partial \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}')}{\partial r'_{\alpha}} \right|_{\vec{r}'=\vec{r}_0}$$

Поле

$$(\vec{\nabla} \mathcal{E}_{\alpha})_{\beta}(\vec{r}_0) = \mathcal{E}_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) = - \left. \frac{\partial^2 \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}')}{\partial r'_{\alpha} \partial r'_{\beta}} \right|_{\vec{r}'=\vec{r}_0}$$

Гradient поля

Потенціальна енергія в електричному полі



$$\begin{aligned}
 E(\vec{\mathcal{E}}) &= \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}') d\vec{r}' = \\
 &= \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}_0) \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') d\vec{r}' - \sum_{\alpha} \mathcal{E}_{\alpha}(\vec{r}_0) \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') (r'_{\alpha} - r_{0,\alpha}) d\vec{r}' - \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mathcal{E}_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') (r'_{\alpha} - r_{0,\alpha})(r'_{\beta} - r_{0,\beta}) d\vec{r}' + \dots
 \end{aligned}$$

Інтеграли — мультипольні моменти.

$$\begin{aligned}
 E(\vec{\mathcal{E}}) &= \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}') d\vec{r}' = \\
 &= q\phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}_0) - \sum_{\alpha} \mathcal{E}_{\alpha}(\vec{r}_0) \mu_{\alpha}(\vec{r}_0) - \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mathcal{E}_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) Q_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) + \dots
 \end{aligned}$$

Потенціальна енергія в електричному полі

Мультіпольні моменти розподілу заряду $\rho(\vec{r}')$ можна використати для:

- знаходження потенціалу ϕ^{ρ} , що створюється цим розподілом $\rho(\vec{r}')$;
- для розрахунку енергії взаємодії зарядів $\rho(\vec{r}')$ із зовнішнім полем $\phi^{\mathcal{E}}$.

Інтеграли — мультипольні моменти.

$$\begin{aligned}
 E(\vec{\mathcal{E}}) &= \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') \phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}') d\vec{r}' = \\
 &= q\phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}_0) - \sum_{\alpha} \mathcal{E}_{\alpha}(\vec{r}_0) \mu_{\alpha}(\vec{r}_0) - \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mathcal{E}_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) Q_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) + \dots
 \end{aligned}$$

Потенціальна енергія в електричному полі

Вираз для енергії взаємодії

Енергія взаємодії зарядів з полем

$$E(\vec{\mathcal{E}}) = q\phi^{\mathcal{E}}(\vec{r}_0) - \sum_{\alpha} \mathcal{E}_{\alpha}(\vec{r}_0)\mu_{\alpha}(\vec{r}_0) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mathcal{E}_{\alpha\beta}(\vec{r}_0)Q_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) + \dots$$

дає альтернативні означення для мультипольних моментів:

дипольний момент

$$\mu_{\alpha}(\vec{r}_0) = -\frac{dE(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}_{\alpha}(\vec{r}_0)},$$

момент 2-го порядку

$$Q_{\alpha\beta}(\vec{r}_0) = -2\frac{dE(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}_{\alpha\beta}(\vec{r}_0)}$$

разом з означеннями постійних (за відсутності поля) моментів

$$\mu_{\alpha}^{\text{perm}}(\vec{r}_0) = \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}')(r'_{\alpha} - r_{0,\alpha}) d\vec{r}', \quad Q_{\alpha\beta}^{\text{perm}}(\vec{r}_0) = \int_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}')(r'_{\alpha} - r_{0,\alpha})(r'_{\beta} - r_{0,\beta}) d\vec{r}'$$

Індекс «perm» означає «постійні» моменти (на відміну від «індукованих»).

Індуковані дипольні моменти

- Електрони легкі і рухливі тому заряд молекули буде перерозподілятися в присутності зовнішнього електричного поля таким чином, що загальна енергія стає мінімальною — розподіл заряду буде поляризованим.

- В результаті електричні моменти розподілу заряду зміняться і їх значення залежатимуть від напруженості поля:

$$\mu_{\alpha}(\vec{\mathcal{E}}) = \mu_{\alpha}^{\text{perm}} + \mu_{\alpha}^{\text{ind}}(\vec{\mathcal{E}})$$

Розкладання дипольного моменту в ряд

$$\mu_{\alpha}(\vec{\mathcal{E}}) = \mu_{\alpha}^{\text{perm}} + \sum_{\beta} \alpha_{\alpha\beta} \mathcal{E}_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma} \beta_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{E}_{\beta} \mathcal{E}_{\gamma} + \dots,$$

Дипольні поляризованість та гіперполяризованість

поляризованість

$$\alpha_{\alpha\beta} = \left. \frac{d\mu_{\alpha}}{d\mathcal{E}_{\beta}} \right|_{\vec{\mathcal{E}}=0}$$

гіперполяризованість

$$\beta_{\alpha\beta\gamma} = \left. \frac{d\mu_{\alpha}}{d\mathcal{E}_{\beta} d\mathcal{E}_{\gamma}} \right|_{\vec{\mathcal{E}}=0}$$

Індуковані дипольні моменти

- Інфінітезимальна зміна енергії при інфінітезимальній зміні поля $d\mathcal{E}_\alpha$ (дипольна складова)

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

$$dE = -\mu(\vec{\mathcal{E}})d\vec{\mathcal{E}}$$

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

```
bond_thresh = 0.5
```

```
# covalent (or ionic) radii by atomic element (Angstroms) from
```

```
# "Inorganic Chemistry" 3rd ed, Housecroft, Appendix 6, pgs 1013-1014
```

```
cov_radii = { 'H' : 0.37, 'C' : 0.77, 'O' : 0.73, 'N' : 0.75, 'F' : 0.71,
```

```
'P' : 1.10, 'S' : 1.05, 'Cl' : 0.99, 'Br' : 1.14, 'I' : 1.33, 'He' : 0.30,
```

```
'Ne' : 0.84, 'Ar' : 1.00, 'Li' : 1.02, 'Be' : 0.27, 'B' : 0.88, 'Na' : 1.02,
```

```
'Mg' : 0.72, 'Al' : 1.30, 'Si' : 1.18, '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' : 0.58, 'Zn' : 0.53, 'Ga' : 0.52, 'As' : 1.22,
```

```
'Se' : 1.17, 'Kr' : 1.03, 'Xe' : 1.08, 'Rn' : 1.05, 'Ac' : 1.20,
```

$$E(\vec{\mathcal{E}}) - E_0 = - \int_0^{\vec{\mathcal{E}}} \mu(\vec{\mathcal{E}}) d\vec{\mathcal{E}} =$$

$$= - \sum_{\alpha} \mu_{\alpha}^{\text{perm}} \mathcal{E}_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{E}_{\alpha} \mathcal{E}_{\beta} - \frac{1}{6} \sum_{\beta\gamma} \beta_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{E}_{\alpha} \mathcal{E}_{\beta} \mathcal{E}_{\gamma} + \dots$$

- Властивості за відсутності поля ($\vec{\mathcal{E}} = 0$) можна отримати диференціюючи енергію:

$$\mu_{\alpha}^{\text{perm}} = - \left. \frac{dE}{d\mathcal{E}_{\alpha}} \right|_{\vec{\mathcal{E}}=0} \quad \alpha_{\alpha\beta} = - \left. \frac{d^2 E}{d\mathcal{E}_{\alpha} d\mathcal{E}_{\beta}} \right|_{\vec{\mathcal{E}}=0} \quad \beta_{\alpha\beta\gamma} = - \left. \frac{d^3 E}{d\mathcal{E}_{\alpha} d\mathcal{E}_{\beta} d\mathcal{E}_{\gamma}} \right|_{\vec{\mathcal{E}}=0}$$

моментів за збуренням!

властивість = **відгук** молекули на **збурення** (\mathcal{F})

'Ne': 0.84, 'Ar': 1.00, 'Li': 1.02, 'Be': 0.27, 'B': 0.88, 'Na': 1.02

'Mg': 0.72, 'Al': 1.30, 'Si': 1.18, 'K': 1.38, 'Ca': 1.00, 'Sc': 0.75

'Ti': 0.86, 'V' : 0.79, 'зміна енергії Mn': 0.67, 'Fe': 0.62, 'зміна геометрії молекули,'

'Ni': 0.55, 'Cu': 0.46, 'Zn': 0.60, 'Ga': 1.22, 'Ge': 1.22, 'As': 1.22, 'Se': 1.22, 'Br': 1.22, 'I': 1.22, 'Ag': 1.22, 'Au': 1.22, 'Pt': 1.22, 'Pd': 1.22, 'Rh': 1.22, 'Ru': 1.22, 'Os': 1.22, 'Ir': 1.22, 'Co': 1.22, 'Fe': 1.22, 'Mn': 1.22, 'Cr': 1.22, 'V': 1.22, 'Ti': 1.22, 'Al': 1.22, 'Si': 1.22, 'P': 1.22, 'S': 1.22, 'Cl': 1.22, 'F': 1.22, 'O': 1.22, 'N': 1.22, 'C': 1.22, 'B': 1.22, 'Be': 1.22, 'Li': 1.22, 'H': 1.22

вплив електричного

```
'Se': 1.17, 'Kr': 1.03, 'X' : 0.00}
```

$$E(\vec{\mathcal{F}}) = E(0) + \left(\frac{dE}{d\vec{\mathcal{F}}} \right)_{\vec{\mathcal{F}}=0} \vec{\mathcal{F}} + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2 E}{d\vec{\mathcal{F}}^2} \right)_{\vec{\mathcal{F}}=0} \vec{\mathcal{F}}^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3 E}{d\vec{\mathcal{F}}^3} \right)_{\vec{\mathcal{F}}=0} \vec{\mathcal{F}}^3 + \dots$$

властивості

Магнітні властивості

- Взаємодію з магнітним полем можна записати через магнітні дипольні, квадрупольні, ... моменти (магнітного монополя немає).
- Оскільки магнітна взаємодія є значно меншою за величиною, ніж електрична, зазвичай розглядається лише дипольний член:

$$m_{\alpha} = - \frac{dE(\vec{\mathcal{B}})}{d\mathcal{B}_{\alpha}}$$

- Індукований магнітний момент $m_{\alpha}(\vec{\mathcal{B}}) = m_{\alpha}^{\text{perm}} + m_{\alpha}^{\text{ind}}$
- $m_{\alpha}(\vec{\mathcal{B}}) = m_{\alpha}^{\text{perm}} + \sum_{\beta} \xi_{\alpha\beta} \mathcal{B}_{\beta} + \sum_K \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}^K m_{\beta}^K + \dots$
- Окрім зовнішніх полів, на електронну оболонку діє магнітне поле ядерних спінів.
- Намагнічованість $\xi_{\alpha\beta}$ — характеристика молекули. (Відповідна макроскопічна величина називається магнітною сприйнятливістю.)
- m_{β}^K — магнітний момент K -го ядра молекули, $\sigma_{\alpha\beta}^K$ — ядерний магнітний тензор.

Магнітні властивості

- Дипольний момент μ_α для незбуреної системи залежить від повного електронного моменту імпульсу \vec{L} , та електронного спіну \vec{S} (в атомних одиницях):

$$\vec{m} = -\frac{1}{2} (\vec{L} - g_e \vec{S})$$

- Для молекул в орбітально невідроджених станах ми завжди можемо вибрати хвильові функції дійсними, і тому такі молекули не мають постійного орбітального магнітного моменту.
- Молекула у є синглетному стані має нульове значення спіну, а тому у молекули немає ні спіну, ні орбітального постійного магнітного моменту.
- Серед молекул з відкритою оболонкою лише лінійні молекули з непарною кількістю електронів мають постійні орбітальні магнітні моменти.
- Ядерні спінові магнітні дипольні моменти щонайменше на три порядки менші за електронні спінові магнітні моменти.

Ядерні магнітні моменти

- Збуренням також може бути магнітне поле спіну \mathcal{J} ядра

```
import sys, math
```

```
## CONSTANTS ##
```

$$E(\mathcal{J}) = E_0 - \frac{1}{2} \sum_{\beta} \alpha_{\alpha\beta} \mathcal{J}_{\alpha} \mathcal{J}_{\beta} - \frac{1}{6} \sum_{\beta\gamma} \beta_{\alpha\beta\gamma} \mathcal{J}_{\alpha} \mathcal{J}_{\beta} \mathcal{J}_{\gamma} + \dots$$

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

```
bond_thresh = 1.2
```

- Властивості за відсутності поля ($\vec{\mathcal{J}} = 0$) можна отримати диференціюючи енергію:

```
# covalent (or ionic) radii of atomic element (Angstroms) from
```

```
# "Inorganic Chemistry", by Greenwood and Earnshaw, Appendix 6, pgs 1013-1014
```

```
cov_radii = { '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' : 1.00, 'Li' : 1.02, 'Be' : 0.42, 'B' : 0.88, 'Na' : 1.02,
              'Mg' : 0.72, 'Al' : 1.30, 'Si' : 1.11, 'K' : 1.38, 'Ca' : 1.00, 'Sc' : 0.75,
              'Ti' : 0.86, 'V' : 0.79, 'Cr' : 0.73, 'Mn' : 0.65, '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' : 1.16, 'Br' : 1.14, 'Kr' : 0.88, 'Rb' : 1.47, 'Sr' : 1.19, 'Y' : 1.02,
              'Zr' : 0.86, 'Nb' : 0.71, 'Mo' : 0.69, 'Tc' : 0.66, 'Ru' : 0.63, 'Rh' : 0.61,
              'Pd' : 0.61, 'Ag' : 0.60, 'Cd' : 0.58, 'In' : 0.61, 'Sn' : 0.58, 'Sb' : 0.56,
              'Te' : 0.55, 'I' : 0.54, 'Xe' : 0.51, 'Ba' : 1.35, 'La' : 1.07, 'Ce' : 1.02,
              'Pr' : 1.00, 'Nd' : 0.98, 'Pm' : 0.96, 'Sm' : 0.94, 'Eu' : 0.92, 'Gd' : 0.90,
              'Tb' : 0.88, 'Dy' : 0.86, 'Ho' : 0.84, 'Er' : 0.82, 'Tm' : 0.80, 'Yb' : 0.78,
              'Lu' : 0.76, 'Hf' : 0.75, 'Ta' : 0.73, 'W' : 0.71, 'Re' : 0.69, 'Os' : 0.67,
              'Ir' : 0.65, 'Pt' : 0.63, 'Au' : 0.61, 'Hg' : 0.59, 'Tl' : 0.57, 'Pb' : 0.55,
              'Bi' : 0.53, 'Po' : 0.51, 'At' : 0.49, 'Rn' : 0.47, 'Fr' : 0.45, 'Ra' : 0.43,
              'Ac' : 0.41, 'Th' : 0.39, 'Pa' : 0.37, 'U' : 0.35, 'Np' : 0.33, 'Pu' : 0.31,
              'Am' : 0.29, 'Cm' : 0.27, 'Bk' : 0.25, 'Cf' : 0.23, 'Es' : 0.21, 'Fm' : 0.19,
              'Md' : 0.17, 'No' : 0.15, 'Lr' : 0.13 }
```

- Немає внеску від першої похідної, оскільки немає нічого, з чим міг би взаємодіяти магнітний момент, тоді як друга похідна щодо двох різних ядерних спінів — це ЯМР.
- Константа зв'язку J (константа Планка з'являється завдяки конвенції про константи зв'язку в герцах, а коефіцієнт $1/\hbar^2$ зникає, оскільки ми неявно розглядаємо лише різні пари ядра).

Квантово-механічні вирази для властивостей

Перехід від класичних виразів до квантово-механічних можна здійснити трьома шляхами:

- Якщо електричні моменти виражаються через густину розподілу заряду $\rho(\vec{r}) \Rightarrow$ необхідно квантово-механічний вираз для $\rho(\vec{r})$.
- Якщо електричні моменти виражені як похідні енергії взаємодії із зовнішнім полем \Rightarrow необхідно квантово-механічний вираз для енергії.
- Теорема Гельмана-Фейнмана: похідні енергії — очікувана величина похідної гамільтоніана \Rightarrow необхідно квантово-механічний оператор відповідної властивості.

Іншими словами, для розрахунку молекулярних властивостей можна здійснити один з трьох підходів:

- На основі розподілу заряду.
- Як похідні енергії по відповідній властивості (теорія відгуку).
- Як похідні очікуваного значення оператора, часто називають методами пропагаторів.