

Aproximação Hartree-Fock para camadas fechadas

A aproximação Hartree-Fock para o estado fundamental de um sistema (átomo ou molécula) com N elétrons (metade deles com spin para cima e a outra metade com spin para baixo) começa pela forma dada ao estado deste sistema. A aproximação consiste em descrevê-lo por um único determinante, dado por:

$$\Psi_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1)\alpha(1) & \phi_1(\mathbf{x}_1)\beta(1) & \dots & \phi_{N/2}(\mathbf{x}_1)\beta(1) \\ \phi_1(\mathbf{x}_2)\alpha(2) & \phi_1(\mathbf{x}_2)\beta(2) & \dots & \phi_{N/2}(\mathbf{x}_2)\beta(2) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \phi_1(\mathbf{x}_N)\alpha(N) & \phi_1(\mathbf{x}_N)\beta(N) & \dots & \phi_{N/2}(\mathbf{x}_N)\beta(N) \end{vmatrix}$$

A energia $E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle$ é um funcional das funções de uma partícula ϕ_n ,

com $n = 1, \dots, N/2$ e $H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \sum_{\xi}^{N_z} \frac{Z_{\xi} e^2}{r_{\xi i}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)}^N \frac{e^2}{r_{ij}}$ com ξ correndo

Exercício da lista

sobre os N_z núcleos e i, j sobre os N elétrons. A energia do sistema é (mostre):

$$E_0 = \sum_{i=a}^{N/2} 2h_{aa} + \sum_{ab}^{N/2} (2J_{ab} - K_{ab}) \begin{cases} h_{aa} = \int d^3x_1 \psi_a^*(\mathbf{x}_1) \left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} - \sum_{\xi}^{N_z} \frac{Z_{\xi} e^2}{r_{\xi 1}} \right) \psi_a(\mathbf{x}_1) \\ J_{ab} = \int d^3x_1 \int d^3x_2 |\psi_a(\mathbf{x}_1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_b(\mathbf{x}_2)|^2 \\ K_{ab} = \int d^3x_1 \int d^3x_2 \psi_a^*(\mathbf{x}_1) \psi_b^*(\mathbf{x}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_b(\mathbf{x}_1) \psi_a(\mathbf{x}_2) \end{cases}$$

Aproximação Hartree-Fock para camadas fechadas

Para obter a melhor solução com essas hipóteses, é preciso aplicar o método variacional para a energia com respeito às funções ϕ_j , sujeitas as condições de contorno $\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$. É possível mostrar que as funções ϕ_j que minimizam a energia satisfazem a chamada equação de Hartree-Fock

$$f(\mathbf{x}_1)\phi_j(\mathbf{x}_1) = \epsilon_j\phi_j(\mathbf{x}_1) \text{ com } f(\mathbf{x}_1) = h(\mathbf{x}_1) + \sum_{a=1}^{N/2} (2J_a(\mathbf{x}_1) - K_a(\mathbf{x}_1))$$

onde $\begin{cases} h(\mathbf{x}_1) = -\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} - \sum_{\xi}^{N_z} \frac{Z_{\xi} e^2}{r_{\xi 1}} \text{ com } r_{\xi 1} = |\mathbf{x}_{\xi} - \mathbf{x}_1| \\ J_a(\mathbf{x}_1) = \int d^3x_2 \phi_a^*(\mathbf{x}_2) r_{12}^{-1} \phi_a(\mathbf{x}_2) \\ K_a(\mathbf{x}_1)\phi_b(\mathbf{x}_1) = \left[\int d^3x_2 \phi_a^*(\mathbf{x}_2) r_{12}^{-1} \phi_b(\mathbf{x}_2) \right] \phi_a(\mathbf{x}_1). \end{cases}$

ver, na nossa página, a contribuição do João (2020)

Verifique que $\begin{cases} h_{aa} = \int d^3x_1 \phi_a^*(\mathbf{x}_1) h(\mathbf{x}_1) \phi_a(\mathbf{x}_1) \\ J_{ab} = J_{ba} = \int d^3x_1 \phi_b^*(\mathbf{x}_1) J_a(\mathbf{x}_1) \phi_b(\mathbf{x}_1) \\ K_{ab} = K_{ba} = \int d^3x_1 \phi_b^*(\mathbf{x}_1) K_a(\mathbf{x}_1) \phi_b(\mathbf{x}_1). \end{cases}$

Exercício da lista

Note que $E_0 \neq \sum_{i=1}^N \epsilon_i$ (justifique) e calcule:

1) $E_0^{N+1} - E_0^N = \epsilon_{N+1} \rightarrow$ **Afinidade eletrônica (AE)** \rightarrow enésima+1 solução da Eq. HF de Ne^-

2) $E_0^{N-1} - E_0^N = -\epsilon_{\text{buraco}} \rightarrow$ **Potencial de ionização (PI)** \rightarrow solução do e^- retirado da Eq. HF de Ne^-

Coloque (AE) ou retire (PI) linha e coluna do determinante do slide 1

Partículas Idênticas: Segunda Quantização

O termo segunda quantização foi cunhado nos primórdios da mecânica quântica ao estendê-la para teoria quântica de campos. As funções de onda viravam operadores e estes respeitavam equações de Schrödinger (daí a origem do nome).

O Formalismo

- O formalismo, conhecido por 2^a quantização, começa definindo um estado de muitas partículas por: $|n_1, n_2, \dots, n_i \dots\rangle$, onde n_i especifica o número de partículas com autovalor k_i de algum operador.
- O espaço destes kets é conhecido como o espaço de Fock. A primeira coisa a fazer é construir a simetria de permutação de partículas neste espaço.
- Antes é importante ressaltar que *a hipótese fundamental para construir o espaço de Fock é que qualquer estado de partículas “interagentes” pode ser escrito em uma base de partículas independentes (autokets de operadores de uma partícula com autovalor k_i).*

- Dois estados especiais $\left\{ \begin{array}{l} \text{Vácuo ou ausência de partículas: } |0\rangle \equiv |0, 0, \dots, 0 \dots\rangle \\ \text{Estado com 1 partícula: } |0, 0, \dots, n_i = 1 \dots\rangle \equiv |k_i\rangle \end{array} \right.$
- Os kets de Fock são normalizados à 1, inclusive o vácuo ($\langle 0|0\rangle = 1$).

Partículas Idênticas: Segunda Quantização

O Formalismo (continuação)

- Em seguida definimos um “operador de campo” a_i^\dagger que aumenta em um o número de partículas com autovalor k_i , isto é:

$$a_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \propto |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \Rightarrow \begin{cases} \text{critérios de normalização} \\ \text{definirão mais tarde a} \\ \text{constante multiplicativa} \end{cases}$$

- Define-se que a ação do operador de criação no vácuo fornece um ket já normalizado, isto é: $a_i^\dagger |\mathbf{0}\rangle = |0, 0, \dots, n_i = 1, \dots\rangle = |k_i\rangle$ com $\langle k_i | k_i \rangle = 1$. Isto nos leva à $1 = \langle k_i | k_i \rangle = [\langle \mathbf{0} | a_i] [a_i^\dagger | \mathbf{0} \rangle] = [\langle \mathbf{0} | [a_i a_i^\dagger | \mathbf{0} \rangle] \Rightarrow a_i a_i^\dagger | \mathbf{0} \rangle = | \mathbf{0} \rangle$ ou seja $a_i |k_i\rangle = a_i |0, 0, \dots, n_i = 1, \dots\rangle = | \mathbf{0} \rangle \Rightarrow a_i$ operador que aniquila uma partícula com autovalor k_i .

- Postula-se que
$$\begin{cases} a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \propto |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \\ a_i |\mathbf{0}\rangle = 0 \\ a_i |k_j\rangle = |0, 0, \dots, n_i = 0, \dots, n_j = 1, \dots\rangle = 0 \text{ para } i \neq j \end{cases}$$

- $a_i |k_j\rangle = \delta_{ij} |\mathbf{0}\rangle$ combina
$$\begin{cases} a_i |k_i\rangle = |\mathbf{0}\rangle \\ e \\ a_i |k_j\rangle = 0 \text{ para } i \neq j \end{cases}$$

Partículas Idênticas: Segunda Quantização

A ação de permutar duas partículas pode ser vista pela comparação entre colocar primeiro uma partícula em k_i e depois outra em k_j com colocar primeiro uma partícula em k_j e depois em k_i . Sendo assim, para um sistema de duas partículas esperamos que $a_i^\dagger a_j^\dagger |\mathbf{0}\rangle = \pm a_j^\dagger a_i^\dagger |\mathbf{0}\rangle$ onde o sinal $+$ ($-$) é para bósons (férmions). Consideraremos que a mesma lógica vale para um sistema de N partículas,

$$\text{isto é: } \begin{cases} a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \Rightarrow \text{bósons} \\ a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \Rightarrow \text{férmions} \end{cases}$$

onde usamos a definição de anti-comutador $\{A, B\} = AB + BA$

Tomando o adjunto das equações acima, temos:
$$\begin{cases} [a_i, a_j] = 0 \Rightarrow \text{bósons} \\ \{a_i, a_j\} = 0 \Rightarrow \text{férmions} \end{cases}$$

Note que para férmions, o princípio de exclusão de Pauli está automaticamente incorporado no formalismo, pois $a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = 0 \xrightarrow{i=j} a_i^\dagger a_i^\dagger = 0$, isto é, *é proibido colocar duas partículas no mesmo estado.*

Em seguida definiremos um operador que conta partículas. Se tivermos

$[a_i, a_i^\dagger] = 1$, o oscilador Harmônico nos ensina que serve $N_i = a_i^\dagger a_i$

No caso de bósons esta condição por si só define o operador que conta partículas. Analogia completa com o contador de quanta de energia do oscilador harmônico. Será que isso funciona para anti-comutadores que definem o sistema de férmions? Para férmions, o número de partículas em um dado estado k_i só pode ser 0 ou 1.

$$\text{Assim, } N_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \begin{cases} a_i^\dagger a_i |n_1, n_2, \dots, n_i = 0, \dots\rangle = 0 |n_1, n_2, \dots, n_i = 0, \dots\rangle \\ \text{onde usamos que } a_i \text{ atuando no zero fornece zero} \\ a_i^\dagger a_i |n_1, n_2, \dots, n_i = 1, \dots\rangle = 1 |n_1, n_2, \dots, n_i = 1, \dots\rangle \\ \text{onde usamos que } a_i^\dagger a_i = 1 - a_i a_i^\dagger \text{ e } a_i^\dagger \text{ atuando no} \\ \text{“um” também fornece zero.} \end{cases}$$

Com isso para ambos os tipos de partículas idênticas, férmions e bósons, podemos definir o operador que conta partículas por: $N = \sum_i a_i^\dagger a_i$

RESUMO

Bósons	Férmions
$a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$	$a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0$
$a_i a_j - a_j a_i = [a_i, a_j] = 0$	$a_i a_j + a_j a_i = \{a_i, a_j\} = 0$
$a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$	$a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}$

Variáveis dinâmicas em segunda Quantização

Como construir um operador na linguagem de segunda quantização que faça mais do que contar partículas? A resposta é simples se o que procuramos é um operador aditivo, como por exemplo a energia cinética do sistema (soma das energias cinéticas das partículas individuais). Num caso como esse, se o sistema estivesse, por exemplo, em um estado de Fock $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$, que expressa que as partículas associadas à n_1 têm energia cinética k_1 , à n_2 têm energia cinética k_2 , induzindo que, genericamente, n_i partículas têm energia cinética $n_i k_i$. Assim, esperaríamos que a energia cinética do sistema fosse

$$\sum_i n_i k_i, \Rightarrow \text{autovalor do operador } \mathcal{K} = \sum_i k_i N_i = \sum_i k_i a_i^\dagger a_i.$$

E se o ket de Fock estivesse escrito em uma base $\{|l_i\rangle\}$, onde K não é diagonal, isto é $K|l_i\rangle \neq k_i|l_i\rangle$ ou seja, uma base diferente da $\{k_i\}$ onde $K|k_i\rangle = k_i|k_i\rangle$.

Nestas condições, como ficaria \mathcal{K} ? Lembre que se as duas bases são completas,

$$\text{vale } |k_i\rangle = \sum_j |l_j\rangle \langle l_j|k_i\rangle \text{ dando origem à um novo postulado } a_i^\dagger = \sum_j b_j^\dagger \langle l_j|k_i\rangle$$

$$\text{o que implica em } a_i = \sum_j \langle l_j|k_i\rangle^* b_j = \sum_j \langle k_i|l_j\rangle b_j. \text{ Usaremos estas duas relações}$$

para calcular \mathcal{K} da caixa verde.

Variáveis dinâmicas: operadores aditivos de uma partícula

A partir de $\begin{cases} a_i^\dagger = \sum_j b_j^\dagger \langle l_j | k_i \rangle \\ a_i = \sum_j \langle k_i | l_j \rangle b_j \end{cases}$ podemos re-escrever $\mathcal{K} = \sum_i k_i a_i^\dagger a_i$

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \sum_i k_i \sum_{mn} b_m^\dagger \langle l_m | k_i \rangle \langle k_i | l_n \rangle b_n = \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \sum_i \langle l_m | k_i \rangle k_i \langle k_i | l_n \rangle \\ &= \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \sum_i \langle l_m | \left[K | k_i \rangle \langle k_i | \right] | l_n \rangle = \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \langle l_m | K | l_n \rangle \end{aligned}$$

Esta fórmula serve para escrever qualquer operador aditivo na linguagem de segunda quantização. Exemplos mais comuns: energia cinética, momento linear, energia potencial fruto de um potencial externo que atua em todas as partículas, etc. Ou seja qualquer operador que atua individualmente nas partículas. Pode-se dizer que esta expressão vale para operadores que não expressem interações entre as partículas.

Com isso, já temos a ferramenta para uma Hamiltoniana de partículas que não se enxergam $\mathcal{H} = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i$ com $h|\epsilon_i\rangle = \epsilon_i|\epsilon_i\rangle \rightarrow$ estado $|\Psi\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$.

No estado fundamental (baixa temperatura), teríamos:

(1) uma em cada nível até preencher os níveis de mais baixa energia (férmions)

$$|\Psi\rangle = |1, 1, \dots, 1, 0, \dots\rangle.$$

(2) todas as n partículas ocupando o nível 1 (bósons), $|\Psi\rangle = |n, 0, \dots\rangle$.

Variáveis dinâmicas: operadores de partículas interagentes

De fato, na maioria das vezes as partículas interagem. Começamos a tratar o assunto, postulando a existência de operadores aditivos de duas partículas, ou seja, considerando que as interações podem ser contabilizadas (somadas) aos pares. Suponha que a matriz V_{ij} especifica o “autovalor” de duas partículas interagentes que se encontram nos estados de uma partícula $|k_i\rangle$ e $|k_j\rangle$. Na linguagem de 2a quantização a interação entre as partículas de um dado

sistema é dada por:
$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} V_{ij} N_i N_j + \frac{1}{2} \sum_i V_{ii} N_i (N_i - 1)$$

onde o primeiro termo soma as interações entre partículas que se encontram em estados individuais distintos (alguns autores somam em i e j com $i > j$).

O segundo termo soma as interações das partículas que se encontram no mesmo estado individual i (existem $n(n-1)/2 = C_{n,2}$ formas de tomarmos pares distintos entre n partículas). Ao tomarmos V_{ij} real, garantimos que \mathcal{V} é Hermiteano. Note que podemos escrever o segundo termo na forma

$$\frac{1}{2} \left(\sum_i V_{ii} N_i N_i - \sum_{ij} V_{ij} N_i \delta_{ij} \right)$$
 que juntando com o primeiro termo, pode-

se relaxar a condição $i \neq j$ para obter:
$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} (N_i N_j - N_i \delta_{ij})$$

Variáveis dinâmicas: operadores de partículas interagentes

Se definirmos $\Pi_{ij} \equiv N_i N_j - N_i \delta_{ij}$, o chamado operador de distribuição de

$$\text{pares, podemos escrever } \mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} (N_i N_j - N_i \delta_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} \Pi_{ij}$$

Usando a tabela do slide 4, podemos escrever

$$\Pi_{ij} = N_i N_j - N_i \delta_{ij} = a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} = a_i^\dagger \left(\delta_{ij} \pm a_j^\dagger a_i \right) a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij}, \text{ ou seja}$$

$$\Pi_{ij} = \pm a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j = (\pm)(\pm) a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \text{ onde usamos que } a_i a_j = \pm a_j a_i. \text{ Com isso}$$

$$\text{podemos escrever } \Pi_{ij} = a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \Rightarrow \mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i$$

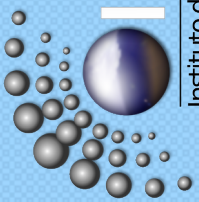
Note que não existe contribuição do termo da diagonal, $i = j$ para férmions.

A partir de $\begin{cases} a_i^\dagger = \sum_j b_j^\dagger \langle l_j | k_i \rangle \\ a_i = \sum_j \langle k_i | l_j \rangle b_j \end{cases}$ podemos re-escrever \mathcal{V} em uma outra base:

$$\frac{1}{2} \sum_{mnpq} \sum_{ij} V_{ij} b_m^\dagger \langle l_m | k_i \rangle b_n^\dagger \langle l_n | k_j \rangle \langle k_j | l_q \rangle b_q \langle k_i | l_p \rangle b_p = \frac{1}{2} \sum_{mnpq} \langle mn | V | pq \rangle b_m^\dagger b_n^\dagger b_q b_p$$

$$\text{onde } \langle mn | V | pq \rangle = \sum_{ij} V_{ij} \langle l_m | k_i \rangle \langle k_i | l_p \rangle \langle l_n | k_j \rangle \langle k_j | l_q \rangle$$

Para adquirir intuição, em seguida trataremos o caso, onde os $|k_i\rangle$ são os autokets de posição, $|\mathbf{x}\rangle$, e os $|l_i\rangle$ são os de momento linear, $|\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}\rangle$.



Variáveis dinâmicas: operadores de partículas interagentes

Neste caso, V_{ij} representaria a interação de duas partículas, uma partícula em \mathbf{x} e outra em \mathbf{x}' . Um exemplo imediato, seriam dois elétrons (cada um com carga e interagindo pelo potencial coulombiano.

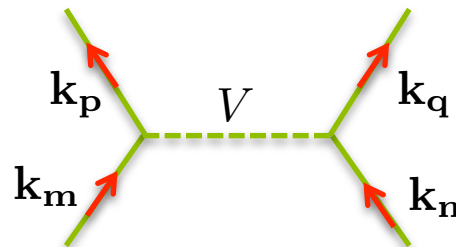
$$\text{Neste caso } \begin{cases} V_{ij} \rightarrow V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ \sum_{ij} \rightarrow \int d^3x \int d^3x' \end{cases}$$

O potencial na nova base fica $\langle mn|V|pq\rangle = \sum_{ij} V_{ij} \langle l_m|k_i\rangle \langle k_i|l_p\rangle \langle l_n|k_j\rangle \langle k_j|l_q\rangle \rightarrow$

$$\langle \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n | V | \mathbf{k}_p \mathbf{k}_q \rangle = \int d^3x \int d^3x' e^{i(\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_m) \cdot \mathbf{x} + i(\mathbf{k}_q - \mathbf{k}_n) \cdot \mathbf{x}'} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$

$$\text{Note que } \langle \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n | V | \mathbf{k}_p \mathbf{k}_q \rangle = \langle \mathbf{k}_n \mathbf{k}_m | V | \mathbf{k}_q \mathbf{k}_p \rangle.$$

Representação gráfica do potencial é dada na figura. Note $\begin{cases} (m, p) \rightarrow \text{partícula 1} \\ (n, q) \rightarrow \text{partícula 2} \end{cases}$



Partículas Idênticas: exercícios extras

(1) Mostre que $\begin{cases} [N_i, a_i] = -a_i \\ [N_i, a_i^\dagger] = a_i^\dagger \end{cases} \Rightarrow$ válidas para bósons e férmions

(2) Mostre que $C = e^{i\alpha} \sqrt{n_i}$ em $a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = C |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$

onde $\begin{cases} \text{bósons} \\ e^{i\alpha} = 1 \\ \text{férmions} \\ e^{i\alpha} = \begin{cases} +1 & \text{se } \# \text{ de estados ocupados anteriores a } i \text{ é par} \\ -1 & \text{se } \# \text{ de estados ocupados anteriores a } i \text{ é ímpar} \end{cases} \end{cases}$

(3) Mostre que $C = e^{-i\alpha} \sqrt{1 \pm n_i}$ em $a_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = C |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle$

onde $\begin{cases} e^{-i\alpha} = 1 \therefore C = \sqrt{1 + n_i} \rightarrow \text{bósons} \\ e^{-i\alpha} = \begin{cases} +1 & \text{se } \# \text{ de estados ocupados anteriores a } i \text{ é par} \\ -1 & \text{se } \# \text{ de estados ocupados anteriores a } i \text{ é ímpar} \end{cases} \\ \therefore C = \pm \sqrt{1 - n_i} \rightarrow \text{férmions} \end{cases}$

Partículas Idênticas: exercícios extras

(4) Suponha que $\Psi_0 = |110\dots\rangle$, escrito na linguagem de 2a quantização, seja uma aproximação do estado fundamental do átomo de Hélio, de tal forma que as funções de uma partícula satisfazem as equações de Hartree-Fock do slide 2. Com isso em mente,

(a) como você representaria, a partir de Ψ_0 , na linguagem de 2a. quantização, as funções: (i) Ψ_1 ; (ii) Ψ_2 ; (iii) Ψ_3 e (iv) Ψ_4 do slide 10 da aula 20? Repita o procedimento, começando por Ψ_0 , representando todos a partir do vácuo $|0\rangle$.

(b) calcule, usando linguagem de 2a quantização, E_0 e os elementos de matriz dos itens a, b, c e d do slide 11 da aula 20.

(c) calcule o potencial de ionização e a afinidade eletrônica, definidos no final do slide 2 desta aula, na linguagem de 2a. quantização.