

EQUAÇÃO DE ROOTHAN: CONJUNTO DE FUNÇÕES DE BASE (VI)

- A SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES HARTREE-FOCK PODE SER OBTIDA POR MÉTODOS NUMÉRICOS NO CASO DE ÁTOMOS:

$$\hat{f} \psi_i = \epsilon_i \psi_i$$

ESTA EQUAÇÃO PERMITE ENCONTRAR OS MELHORES SPIN-ORBITAIS POSSÍVEIS PARA UMA FUNÇÃO DE ONDA DO TIPO HF

EX: VALORES DE ENERGIA OBTIDOS POR MÉTODOS NUMÉRICOS PARA ÁTOMOS

$$E(\text{He}) = -2,86 \text{ u.a.}$$

$$E(\text{Be}) = -14,57 \text{ u.a.}$$

$$E(\text{Ne}) = -128,55 \text{ u.a.}$$

$$E_{\text{exp}}(\text{He}) = -2,90 \text{ u.a.}$$

CONCLUSÃO: A FUNÇÃO DE ONDA EXATA PARA UM SISTEMA MULTIELETRÔNICO NÃO PODE SER ESCRITA COMO UM DETERMINANTE DE SPIN-ORBITAIS MONOELETRÔNICOS \Rightarrow CORRELAÇÃO ELETRÔNICA

- PARA MOLÉCULAS, UMA SOLUÇÃO NUMÉRICA NÃO É VIÁVEL.

ENTRETANTO, SE TIVERMOS UM CONJUNTO COMPLETO DE FUNÇÕES, PODEMOS EXPANDIR OS ORBITAIS ESPACIAIS EM TERMOS DESTES CONJUNTO. PORÉM, UM CONJUNTO COMPLETO IMPLICA UM NÚMERO INFINITO DE FUNÇÕES. ASSIM, NA PRÁTICA, UTILIZA-SE UM CONJUNTO DE K FUNÇÕES PARA REPRESENTAR ESTES ORBITAIS DA MELHOR FORMA POSSÍVEL:

$$\chi_i(\vec{r}_1) \approx \sum_{j=1}^K c_{ji} \phi_j(\vec{r}_1) \quad i = 1, 2, 3, \dots, K$$

É NECESSÁRIO ENCONTRAR O VALOR DOS COEF. c_{ji} NO CÁLCULO HF

- ESTAS FUNÇÕES SÃO NORMALMENTE DE DOIS TIPOS:

① FUNÇÕES DE SLATER: (STFs):

$$\phi_i(r, \theta, \phi) = N r^{n-1} e^{-\alpha r} Y_l^m(\theta, \phi)$$

$N \Rightarrow$ CTE DE NORMALIZAÇÃO
 $\alpha \Rightarrow$ EXPONENTE CARACTERÍSTICO

$n, l, m \Rightarrow$ NÚMEROS QUÂNTICOS

$Y_l^m \Rightarrow$ HARMÔNICO ESFÉRICO

INTEGRAIS DE MUITOS CENTROS NÃO POSSUEM EXPRESSÕES ANALÍTICAS COM STFS

- NORMALMENTE UTILIZADAS PARA ÁTOMOS
- RESULTAM EM DIFICULDADES COMPUTACIONAIS NO CÁLCULO DE INTEGRAIS DE MUITOS CENTROS (MOLÉCULAS)

② FUNÇÕES GAUSSIANAS:

$$\Phi_i(r, \theta, \phi) = N r^{n-1} e^{-\alpha_i r^2} Y_l^m(\theta, \phi)$$

- PERMITEM A OBTENÇÃO DE INTEGRAIS DE MUITOS CENTROS DE UMA FORMA RÁPIDA
- NORMALMENTE, É NECESSÁRIO UTILIZAR UM NÚMERO GRANDE DE FUNÇÕES GAUSSIANAS PARA ATINGIR RESULTADOS SATISFATÓRIOS.
- TAMBÉM É POSSÍVEL UTILIZAR FUNÇÕES GAUSSIANAS CONTRAÍDAS:

$$\Phi_s = \sum_j d_{js} \Phi_j$$

NO CASO DE CADA FUNÇÃO CONTRAÍDA, OS COEFICIENTES d_{js} SÃO MANTIDOS SEMPRE CONSTANTES.

③ ONDAS PLANAS: PARA SÓLIDOS CRISTALINOS

- EQUAÇÕES DE ROOTHAN NO FORMALISMO RHF:

$$\hat{f} \chi_i = \epsilon_i \chi_i \quad (2)$$

ONDE:

$$\hat{f} = \hat{h} + \sum_{j=1}^{n/2} (2\hat{J}_j - \hat{K}_j)$$

- SUBSTITUINDO A COMBINAÇÃO LINEAR ① NA EQ. ②.

$$\hat{f} \sum_{j=1}^k c_{ji} \Phi_j = \epsilon_i \sum_{j=1}^k c_{ji} \Phi_j$$

- PARA DETERMINAR OBTOR EQUAÇÕES APROPRIADAS DEVE-SE MULTIPLICAR À ESQUERDA POR Φ_r^* E INTEGRAR:

$$\int \Phi_r^* \hat{f} \sum_{j=1}^k c_{ji} \Phi_j d\tau = \epsilon_i \int \Phi_r^* \sum_{j=1}^k c_{ji} \Phi_j d\tau$$

- AS FUNÇÕES DE BASE NÃO SÃO NECESSARIAMENTE ORTOGONAIS ENTRE SI, EMBORA SEJAM NORMALIZADAS. ③

ASSIM:

$$\sum_{j=1}^K c_{ji} \int \Phi_r^* \hat{H} \Phi_j d\tilde{r} = \epsilon_i \sum_{j=1}^K c_{ji} \int \Phi_r^* \Phi_j d\tilde{r}$$

F_{rj}
 S_{rj}

ENTÃO:

$$\sum_{j=1}^K c_{ji} (F_{rj} - \epsilon_i S_{rj}) = 0$$

$$r = 1, 2, 3, \dots, K$$

F_{rj} e S_{rj} sãO ELEMENTOS DE MATRIZES $K \times K$

• PARA QUE HAJA UMA SOLUÇÃO NÃO-TRIVIAL (SOLUÇÃO TRIVIAL \Rightarrow TODOS OS COEF. $c_{ji} = 0$) É NECESSÁRIO QUE:

$$\det (F_{rj} - \epsilon_i S_{rj}) = 0$$

NÃO NECESSÁRIO

• VEJA QUE:

$$\sum_{j=1}^K c_{ji} F_{rj} = \epsilon_i \sum_{j=1}^K c_{ji} S_{rj}$$

$$r = 1, 2, 3, \dots, K$$

EXEMPLO

• PODE SER ESCRITO COMO:

$$FC = SC \mathcal{E}$$

$F \Rightarrow$ MATRIZ DE FOCK ($K \times K$)

$S \Rightarrow$ MATRIZ DE SOBREPOSIÇÃO ($K \times K$)

$C \Rightarrow$ MATRIZ DE COEFICIENTES ($K \times K$)

$\mathcal{E} \Rightarrow$ MATRIZ DIAGONAL DAS ENERGIAS ORBITAIS ($K \times K$)

EXEMPLO:

CONSIDERE

$K=3$

$$\sum_{j=1}^K C_{ji} F_{rj} = \epsilon_i \sum_{j=1}^K C_{ji} S_{rj} \quad r=1,2,3$$

$$F_{11} C_{1i} + F_{12} C_{2i} + F_{13} C_{3i} = \epsilon_i (S_{11} C_{1i} + S_{12} C_{2i} + S_{13} C_{3i})$$

$$F_{21} C_{1i} + F_{22} C_{2i} + F_{23} C_{3i} = \epsilon_i (S_{21} C_{1i} + S_{22} C_{2i} + S_{23} C_{3i})$$

$$F_{31} C_{1i} + F_{32} C_{2i} + F_{33} C_{3i} = \epsilon_i (S_{31} C_{1i} + S_{32} C_{2i} + S_{33} C_{3i})$$

• PARA $i=1$:

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{21} \\ C_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \cdot C_{11} \\ \epsilon_1 \cdot C_{21} \\ \epsilon_1 \cdot C_{31} \end{pmatrix} \quad (1)$$

• GENERALIZANDO:

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \epsilon_1 \cdot C_{11} & \epsilon_2 \cdot C_{12} & \epsilon_3 \cdot C_{13} \\ \epsilon_1 \cdot C_{21} & \epsilon_2 \cdot C_{22} & \epsilon_3 \cdot C_{23} \\ \epsilon_1 \cdot C_{31} & \epsilon_2 \cdot C_{32} & \epsilon_3 \cdot C_{33} \end{pmatrix}$$

$$FC = SCE$$

$$\det(F_{rj} - \epsilon_i S_{rj}) = 0$$

$$\begin{vmatrix} F_{11} - \epsilon_i S_{11} & F_{12} - \epsilon_i S_{12} & F_{13} - \epsilon_i S_{13} \\ F_{21} - \epsilon_i S_{21} & F_{22} - \epsilon_i S_{22} & F_{23} - \epsilon_i S_{23} \\ F_{31} - \epsilon_i S_{31} & F_{32} - \epsilon_i S_{32} & F_{33} - \epsilon_i S_{33} \end{vmatrix} = 0$$

$$R: \{ \epsilon_i \}$$

SUBSTITUINDO OS ϵ_i NA EQ. (1) ENCONTRAMOS OS COEFICIENTES

MATRIZ DE FOCK

SOMA SOBRE ORBITAIS OCUPADOS

• VEJA QUE:

$$\hat{f}(1) = \hat{h}_1 + \sum_{j=1}^{n/2} (2\hat{J}_j(1) - \hat{K}_j(1))$$

H_{rs}^{CORE}	DEPENDE DAS
	FUNÇÕES DE BASE r e s

• ENTÃO:

$$F_{rs} = \langle \Phi_r(1) | \hat{f}(1) | \Phi_s(1) \rangle = \langle \Phi_r(1) | \hat{h}_1 | \Phi_s(1) \rangle + \sum_{j=1}^{n/2} [2 \langle \Phi_r(1) | \hat{J}_j(1) | \Phi_s(1) \rangle - \langle \Phi_r(1) | \hat{K}_j(1) | \Phi_s(1) \rangle]$$

• VEJA QUE:

$$\hat{J}_j(1) \Phi_s(1) = \Phi_s(1) \int \frac{\chi_j(2)^* \chi_j(2)}{r_{12}} d\vec{r}_2$$

OPERADOR DE FOCK EM TERMOS DOS ORBITAIS ESPACIAIS

• MAS, $\chi_j = \sum_{\ell=1}^K c_{\ell j} \Phi_{\ell}$. ENTÃO:

$$\hat{J}_j(1) \Phi_s(1) = \Phi_s(1) \int \frac{\sum_{\ell=1}^K c_{\ell j}^* \Phi_{\ell}^*(2) \sum_{m=1}^K c_{mj} \Phi_m(2)}{r_{12}} d\vec{r}_2$$

$$= \sum_{\ell=1}^K \sum_{m=1}^K c_{\ell j}^* c_{mj} \int \frac{\Phi_{\ell}^*(2) \Phi_m(2)}{r_{12}} d\vec{r}_2 \cdot \Phi_s(1)$$

• ENTÃO

$$\textcircled{1} = \sum_{\ell=1}^K \sum_{m=1}^K c_{\ell j}^* c_{mj} \iint \frac{\Phi_r(1)^* \Phi_{\ell}(2)^* \Phi_s(1) \Phi_m(2)}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$\textcircled{1} = \sum_{\ell=1}^K \sum_{m=1}^K c_{\ell j}^* c_{mj} (rs | \ell m)$$

$$\hat{K}_j(1) \Phi_S(1) = \chi_j(1) \int \frac{\chi_j(2)^* \Phi_S(2)}{r_{12}} d\vec{r}_2$$

$$= \sum_{m=1}^K C_{mj} \Phi_m(1) \int \frac{\sum_{l=1}^K C_{lj}^* \Phi_l(2) \Phi_S(2)}{r_{12}} d\vec{r}_2$$

• ENTÃO:

$$\textcircled{2} = \sum_{l=1}^K \sum_{m=1}^K C_{lj}^* C_{mj} \iint \frac{\Phi_l(1)^* \Phi_l(2)^* \Phi_m(1) \Phi_S(2)}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$\textcircled{2} = \left[\sum_{l=1}^K \sum_{m=1}^K C_{lj}^* C_{mj} (r m | l S) \right]$$

• VAMOS DEFINIR OS ELEMENTOS DA MATRIZ DENSIDADE:

$$P_{lm} = 2 \sum_{j=1}^{n/2} C_{lj}^* C_{mj}$$

SOMENTE PARA OS j ORBITAIS OCUPADOS

• ASSIM:

$$F_{rs} = H_{rs}^{\text{CORE}} + \sum_{j=1}^{n/2} \sum_{l=1}^K \sum_{m=1}^K C_{lj}^* C_{mj} [2(rs|lm) - (rm|ls)]$$

$$F_{rs} = H_{rs}^{\text{CORE}} + \sum_{l=1}^K \sum_{m=1}^K \left[\sum_{j=1}^{n/2} C_{lj}^* C_{mj} \cdot 2 \right] [(rs|lm) - \frac{(rm|ls)}{2}]$$

$$F_{rs} = H_{rs}^{\text{CORE}} + \sum_{l=1}^K \sum_{m=1}^K P_{lm} [(rs|lm) - \frac{1}{2} (rm|ls)]$$

SOMENTE PARA OS j ORBITAIS OCUPADOS

ESTES SÃO OS $n/2$ ORBITAIS ESPACIAIS DE MENOR ENERGIA

RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ROOTHAN

$$FC = SCE$$

① ORTOGONALIZAÇÃO DA BASE (VEJA ANEXO A)

• VAMOS PROCURAR UMA MATRIZ X TAL QUE:

$$X^T S X = \mathbb{1}$$

$$\Phi_j = \sum_i X_{ij} \Phi_i$$

$\Phi_j \Rightarrow$ BASE ORTOGONAL

$\Phi_i \Rightarrow$ BASE NÃO-ORTOGONAL

X^T \Rightarrow TRANSPOSTO CONJUGADO DA MATRIZ X

$$X_{ij}^+ = (X_{ji})^*$$

\Leftarrow INVERTE-SE LINHAS E COLUNAS
E TOMA-SE O COMPLEXO CONJUGADO DE CADA ELEMENTO.

ORTOGONALIZAÇÃO SIMÉTRICA

$$X = S^{-1/2}$$

• VEJA QUE A MATRIZ S É HERMITIANA E SIMÉTRICA (S_{ij} NORMALMENTE É UM NÚMERO ENTRE 0 E 1).

$$S_{ij} = S_{ji} \Rightarrow \text{NÚMERO REAL, OU SEJA, } S_{ij} = (S_{ji})^* = S_{ji}$$

• ENTÃO $S^{-1/2}$ TAMBÉM SERÁ HERMITIANA E SIMÉTRICA.

$$(S^{-1/2})^+ = S^{-1/2}$$

$$\underbrace{(S^{-1/2})^+}_{S^{-1/2}} \underbrace{S}_{S} \underbrace{S^{-1/2}}_{S^{1/2}} = \mathbb{1}$$

O PRODUTO DE UMA MATRIZ POR SUA INVERSA É UMA MATRIZ UNITÁRIA

• ASSIM:

$$FC = SCE$$

• MULTIPLICANDO À ESQUERDA POR X^T

$$X^T FC = X^T SCE$$

$$\mathbb{1} = X X^{-1} \quad \mathbb{1} = X X^{-1}$$

ANEXO A
 • CONSIDERANDO QUE EXISTE UMA TRANSFORMAÇÃO ENTRE UMA BASE NÃO-ORTOGONAL (Φ_j) E UMA BASE ORTOGONAL (Φ_j') DO TIPO:

$$\Phi_j' = \sum_i X_{ij} \Phi_i$$

• ENTÃO:

$$\int \Phi_j'^*(1) \Phi_k'(1) d\vec{r}_1 = \int \sum_a X_{aj}^* \Phi_a^*(1) \sum_b X_{bk} \Phi_b(1) d\vec{r}_1 = \delta_{jk}$$

$$= \sum_a X_{aj}^* \sum_b X_{bk} \underbrace{\int \Phi_a^*(1) \Phi_b(1) d\vec{r}_1}_{S_{ab}} = \sum_a \sum_b X_{aj}^* X_{bk} S_{ab}$$

$$= \sum_a \sum_b X_{aj}^* S_{ab} X_{bk} = \delta_{jk}$$

$$\boxed{X^T S X = \mathbb{1}}$$

$$\underbrace{X^+ F X}_{F'} \underbrace{X^{-1}}_{C'} C = \underbrace{X^+ S X}_{1} \underbrace{X^{-1}}_{C'} C \quad \& \quad \epsilon$$

ENTÃO:

$$F' C' = C' \epsilon$$

• VEJA QUE, MULTIPLICANDO À ESQUERDA POR X:

$$C' = X^{-1} C$$

$$X C' = \underbrace{X X^{-1}}_{1} C = C$$

$$C = X C'$$

② DIAGONALIZAÇÃO DE F' :

$$F' C' = C' \epsilon \quad (4)$$

$$F'^+ = F'$$

O OPERADOR DE FOCK É HERMITIANO

F' ⇒ MATRIZ HERMITIANA ←

C' ⇒ MATRIZ DE AUTOVECTORES

ϵ ⇒ MATRIZ DE AUTOVALORES

• COMO F' É UMA MATRIZ HERMITIANA, É POSSÍVEL SEMPRE ESCOLHER AUTOVECTORES (C') ORTONORMAIS. SE OS AUTOVECTORES SÃO ORTONORMAIS, A MATRIZ C' É UMA MATRIZ UNITÁRIA:

$$C'^+ = C'^{-1}$$

POIS

$$C' C'^+ = C'^+ C' = 1$$

VEJA ANEXO B

• ASSIM, MULTIPLICANDO A EQ. (4) À ESQUERDA POR C'^+ :

$$C'^+ F' C' = \underbrace{C'^+ C'}_{1} \epsilon$$

$$\epsilon = C'^+ F' C'$$

A
N
O
B

VECTORES ORTOGONAIS E NORMALIZADOS (ORTONORMAIS):

$$\sum_{l=1}^K c_{li}^* c_{lj} = \delta_{ij}$$

$$\chi_i = \sum_j c_{ji} \phi_j$$

INTERPRETAÇÃO PARA C^1

$$\int \chi_i^* \chi_j d\vec{r}_1 = \int \sum_{l=1}^K c_{li}^* \phi_l^* \sum_{m=1}^K c_{mj} \phi_m = \delta_{ij}$$

$$= \sum_{l=1}^K \sum_{m=1}^K c_{li}^* c_{mj} \int \phi_l^* \phi_m = \delta_{ij}$$

δ_{lm}

$\phi^1 \Rightarrow$ BASE ORTONORM

$$\sum_{l=1}^K c_{li}^* c_{lj} = \delta_{ij}$$

$$C^{1\dagger} C^1 = \mathbb{1}$$

$$\begin{pmatrix} c_{11}^* & c_{21}^* & c_{31}^* \\ c_{12}^* & c_{22}^* & c_{32}^* \\ c_{13}^* & c_{23}^* & c_{33}^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

• OU SEJA, A MATRIZ QUE DIAGONALIZA F' É A MATRIZ C' E A MATRIZ DIAGONALIZADA É E .

• MÉTODO AUTOCONSISTENTE HARTREE - FOCK:

- ① ESCOLHA UMA FUNÇÃO DE BASE, $\{\Phi_i\}$:
- ② CALCULE AS INTEGRAIS H_{rs}^{CORE} , S_{rs} E $(rs|tu)$
- ③ A PARTIR DA MATRIZ S , OBTENHA A MATRIZ DE ORTOGONALIZAÇÃO, X
- ④ PROPONHA VALORES PARA OS COEFICIENTES C_{ij} E CALCULE A MATRIZ IP (EX: $F_{rs} = H_{rs}^{CORE}$)
- ⑤ OBTENHA A MATRIZ F
- ⑥ ENCONTRE $F' = X^\dagger F X$
- ⑦ DIAGONALIZE F' E ENCONTRE C' E E
- ⑧ ENCONTRE $C = X C'$
- ⑨ CALCULE A NOVA MATRIZ $IP = 2 C C^\dagger$
- ⑩ O CÁLCULO CONVERGIU ($E_{HF} = CTE$, NÃO HOUVE MUDANÇAS SIGNIFICATIVAS EM IP , ETC)?
 SIM \Rightarrow A ÚLTIMA MATRIZ C DEFINE SUA FUNÇÃO DE ONDA
 NÃO \Rightarrow RETORNE AO PASSO ⑤.

ORTOGONALIZAÇÃO SIMÉTRICA: MÉTODO DE LÖWDIN

• NESTE CASO:

$$X^T \S X = \mathbb{1} \quad X = X^T = \S^{-1/2}$$

• PROCEDIMENTO:

1º DIAGONALIZA-SE A MATRIZ \S :

$$\mathbb{O}^T \S \mathbb{O} = \mathbb{D} = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_k \end{pmatrix}$$

\mathbb{O} ID MATRIZ DE TRANSFORMAÇÃO UNITÁRIA: $\boxed{\mathbb{O}^T = \mathbb{O}^{-1}}$
QUE DIAGONALIZA \S

$$\underbrace{\mathbb{O} \mathbb{O}^T}_{\mathbb{1}} \S \underbrace{\mathbb{O} \mathbb{O}^T}_{\mathbb{1}} = \underbrace{\mathbb{O}}_{\mathbb{1}} \mathbb{D} \underbrace{\mathbb{O}^T}_{\mathbb{1}}$$

$$\boxed{\S = \mathbb{O} \mathbb{D} \mathbb{O}^T}$$

• PARA ENCONTRAR A MATRIZ \S^n :

$$\S^2 = \S \S = \underbrace{\mathbb{O} \mathbb{O}^T \mathbb{O} \mathbb{O}^T}_{\mathbb{1}} = \mathbb{O} \mathbb{D}^2 \mathbb{O}^T$$

$$\S^n = \S \cdot \S \dots \S = \mathbb{O} \mathbb{D} \cdot \mathbb{D} \dots \mathbb{D} \mathbb{O}^T = \mathbb{O} \mathbb{D}^n \mathbb{O}^T$$

2º ELEVA-SE CADA ELEMENTO DA MATRIZ \mathbb{D} À POTÊNCIA NECESSÁRIA:

$$\mathbb{D}^{-1/2} = \begin{pmatrix} d_1^{-1/2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2^{-1/2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_k^{-1/2} \end{pmatrix}$$

• ENTÃO:

$$\boxed{\S^{-1/2} = \mathbb{O} \mathbb{D}^{-1/2} \mathbb{O}^T}$$

• HA' OUTROS MÉTODOS DE ORTOGONALIZAÇÃO: SCHMIDT.

DIAGONALIZAÇÃO: MÉTODO DE JACOBI

- SUPONHA UMA MATRIZ A SIMÉTRICA:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad a_{ij} = a_{ji}$$

- VAMOS PROCURAR UMA MATRIZ DE TRANSFORMAÇÃO \mathcal{O} TAL QUE:

$$\mathcal{O}^T A \mathcal{O} = \text{ID}$$

- IMAGINE QUE a_{12} SEJA O MAIOR VALOR FORA DA DIAGONAL DA MATRIZ A :

$$\mathcal{O}_1 = \begin{pmatrix} \cos \alpha_1 & \sin \alpha_1 & 0 \\ -\sin \alpha_1 & \cos \alpha_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \leftarrow \text{OK}$$

$$\text{ONDE } \text{tg}(2\alpha) = \frac{2 a_{ij}}{(a_{jj} - a_{ii})}$$

$$\text{SE } a_{jj} = a_{ii} \text{ ENTÃO } \alpha = \frac{\pi}{4} \quad \leftarrow 45^\circ$$

- ENTÃO:

$$\mathcal{O}_1^T A \mathcal{O}_1 = \begin{pmatrix} a_{11}' & 0 & a_{13}' \\ 0 & a_{22}' & a_{23}' \\ a_{31}' & a_{32}' & a_{33}' \end{pmatrix}$$

- AGORA SUPONHA QUE O MAIOR VALOR FORA DA DIAGONAL SEJA a_{13}' :

$$\mathcal{O}_2 = \begin{pmatrix} \cos \alpha_2 & 0 & -\sin \alpha_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha_2 & 0 & \cos \alpha_2 \end{pmatrix} \quad \leftarrow \text{OK}$$

• ENTÃO :

$$\mathbb{O}_2^+ \mathbb{O}_1^+ A \mathbb{O}_1 \mathbb{O}_2 = \begin{pmatrix} d_{11}'' & d_{12}'' & 0 \\ d_{21}'' & d_{22}'' & d_{23}'' \\ 0 & d_{32}'' & d_{33}'' \end{pmatrix}$$

A TRANSFORMAÇÃO \mathbb{O}_2 PODE FAZER COM QUE ESTE VALOR NÃO SEJA MAIS NULO, MAS ELE PROVAVELMENTE SERÁ MUITO PEQUENO

• VAMOS REPETINDO ESTE PROCEDIMENTO ATÉ QUE TODOS OS VALORES FORA DA DIAGONAL SEJAM DESPREZÍVEIS

• ENTÃO : $\mathbb{O} = \mathbb{O}_1 \cdot \mathbb{O}_2 \cdot \mathbb{O}_3 \dots \mathbb{O}_N$

$$\boxed{\mathbb{O}^+ A \mathbb{O} = \mathbb{D}}$$