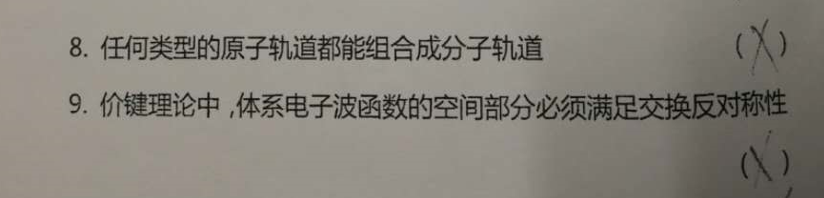
# 未决问题



目录

[未决问题 1](#_Toc102076528)

[模板题：VB理论 3](#_Toc102076529)

[群： 4](#_Toc102076530)

[各分子点群对称性特征以及如何判断； 5](#_Toc102076531)

[对称元素和对称操作 5](#_Toc102076532)

[模板题：HMO近似 6](#_Toc102076533)

[《分子图》 6](#_Toc102076534)

[注意如何把虚数系数化作实数系数。 6](#_Toc102076535)

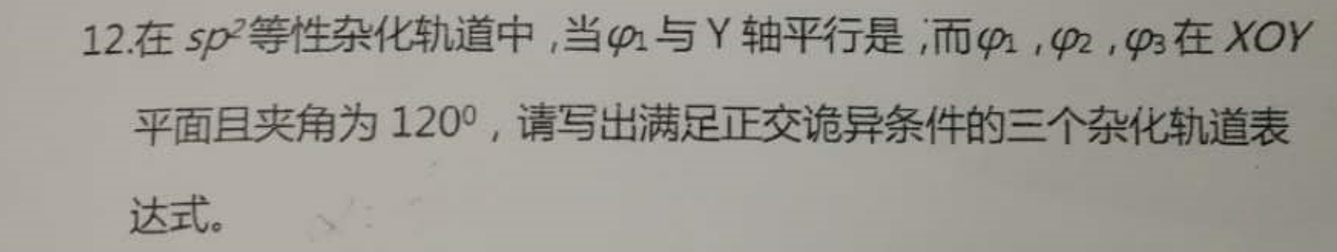
[点群的特征标表和乘法表的推导 7](#_Toc102076536)

[模板题 多原子分子分子轨道的构建 8](#_Toc102076537)

[各种理论的发展和应用范围 10](#_Toc102076538)

[运动状态作为基函数。 11](#_Toc102076539)

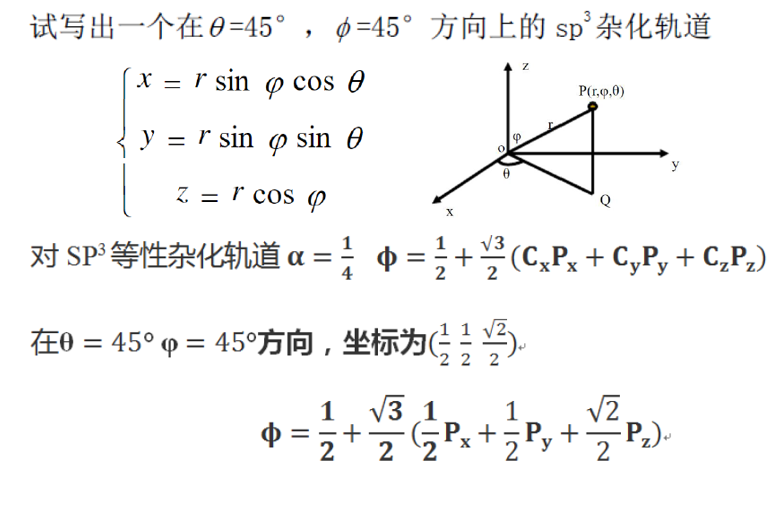
# 模板题：VB理论 杂化



首先要注意正交

αl=1/(1+n), spn杂化；

s轨道的系数是**根号下αl**



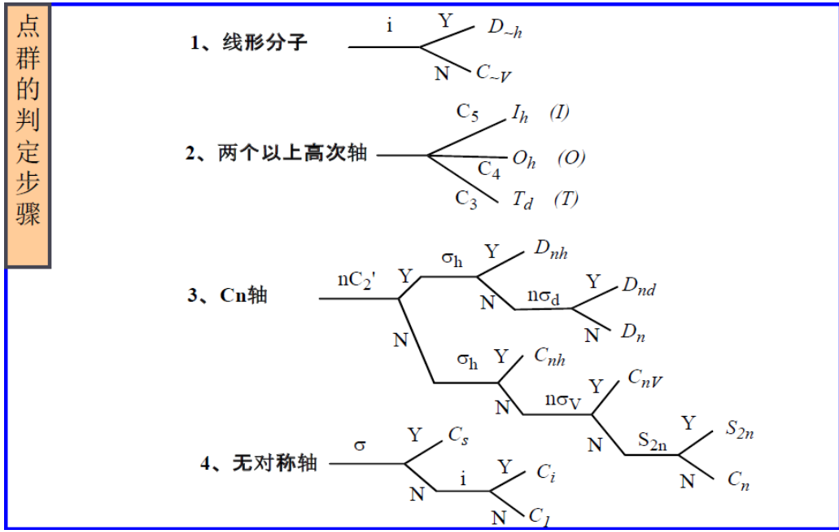
注意该方向上单位向量坐标即为系数。 括号内再归一化一下。

# 群：

封闭性；结合律，恒等**元素**，逆**元素**

# 各分子点群对称性特征以及如何判断；

# 对称元素和对称操作

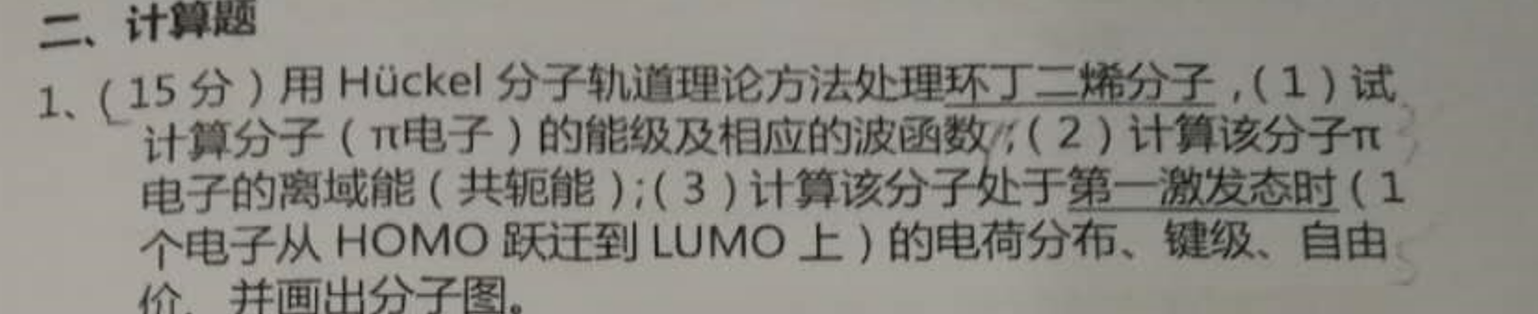
****

注意Dnh优先于Dnd，就好比Cnh优先于Cnv。

对于无穷，Dh与Cv

## 各种群都是几阶的？

# 模板题：HMO近似



原初久期方程是：**|h-εS|=0**,

**同一时**：h是库伦积分，=α，s=1；

**相邻时**：h是共振积分，=β，s=0

**不相邻**时：h、s均等于0

……

求出x后，将久期方程改矩阵：

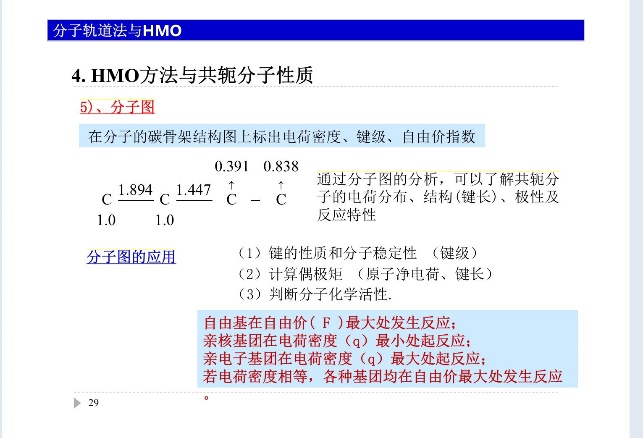
（**h-εS**）（ci）=0，求出系数组c；

Ψ=Σciφ——**“相应波函数”**

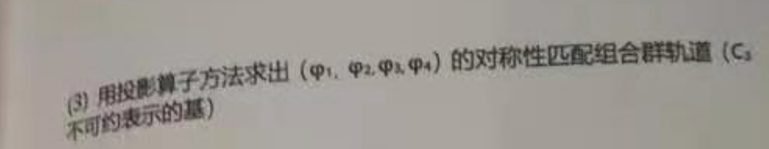
**能级：α+xβ**？

离域能：注意是**定域派键-离域派键**，最后是个正值（-β），越大越稳定。

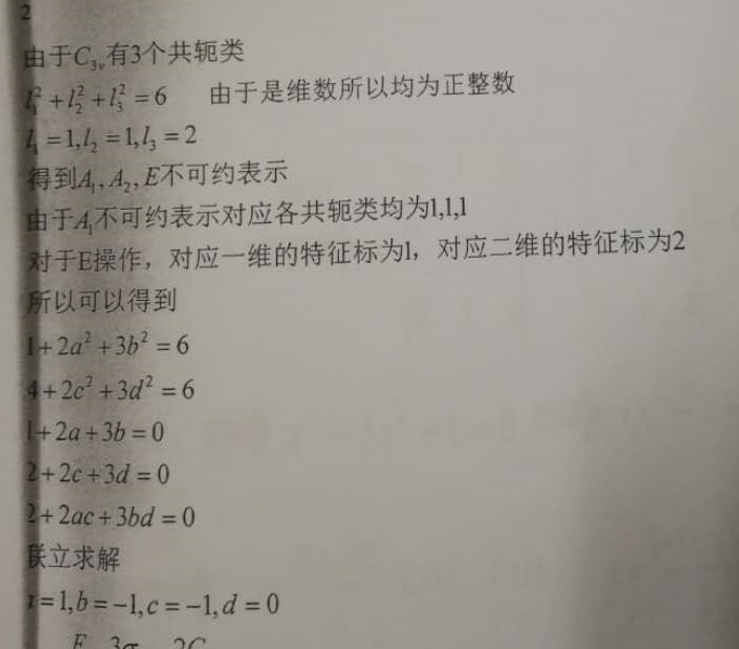
## 《分子图》：“碳骨架结构图”，电荷密度、键级和自由价指数



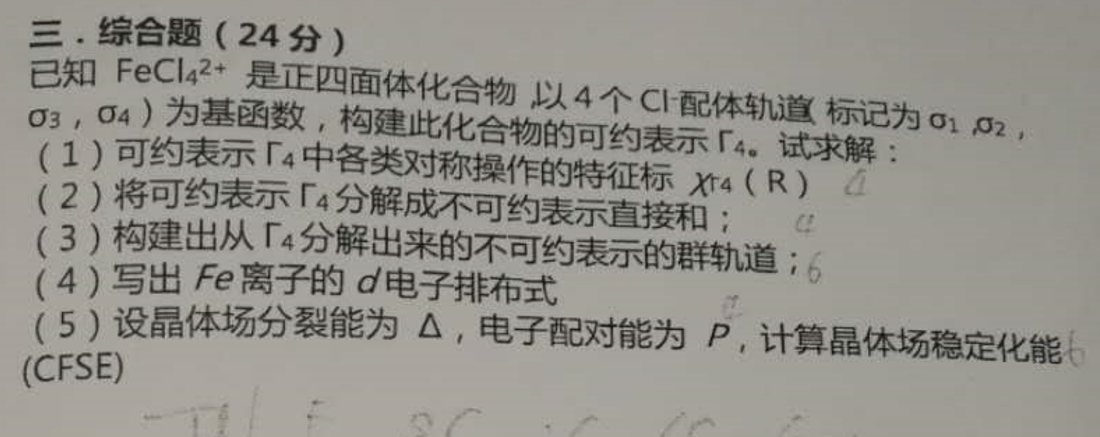
## 注意如何把虚数系数化作实数系数。



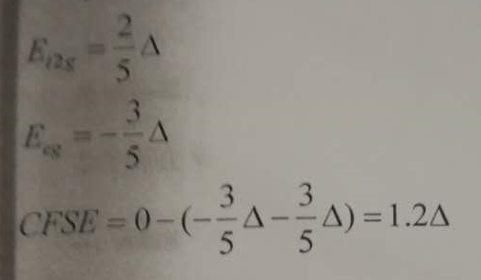
# 点群的特征标表和乘法表的推导

**？？？？为啥就一定是A1**

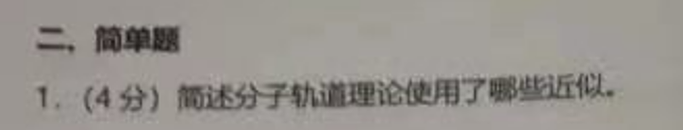
# 模板题 多原子分子分子轨道的构建



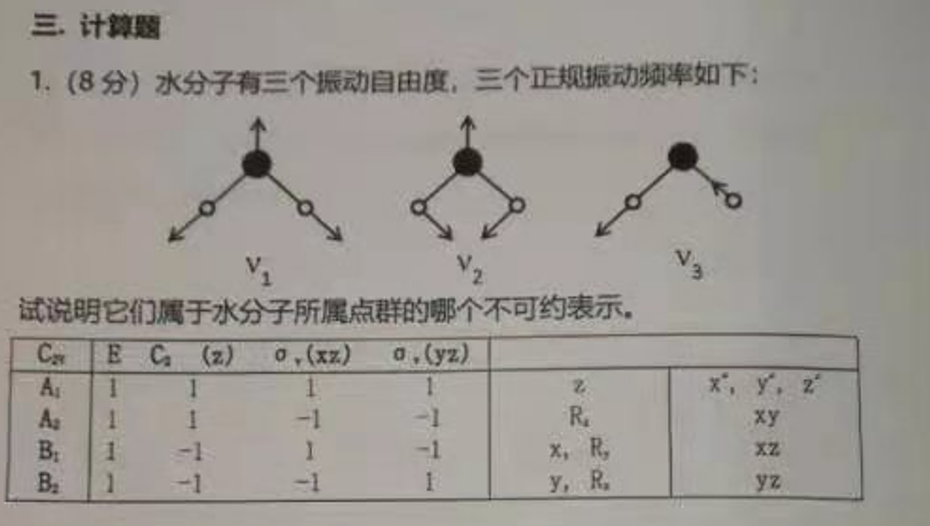
第三问，投影算子，然后记得**归一化**；然后**多重简并的记得轮转！**



**注意CFSE的正负值处理**

****

# 各种理论的发展和应用范围

****

# 运动状态作为基函数。

**（注意特征标表xyz和RxRyRz的意思）**