第三章 习题

1. （选做） 证明重叠矩阵**S （****）**的本征值总是正的。
2. 直接从RHF的能量表达式



应用变分法推导RHF方程。

1. 从一般HF方程出发推导UHF方程。
2. （选做）推导出对应于UHF的Roothan方程（也称Pople-Nesbet方程）。
3. （选做） 证明



1. （选做） 采用最小基组描述氢分子，并用氢原子1s轨道作为基函数，推导在解离极限（即）时分别采用RHF和UHF时所得的总能量表达式。
2. 采用6-31G\*\*计算H2O分子，基组的大小（*K*）等于多少（写出推算过程）？查看高斯计算的输出结果，验证推算是否正确。