

## Exercise on “Introduction to Computational Chemistry”

Hint: if you find some problems in homework, you could ask TA or discuss with other people, However, Don't copy the other's work, the score of same work is zero.

### Chapter III 价键理论

1. 请将下式中  $H_2$  的波函数写为矩阵形式。

$$\phi_{H_2} = (a(1)b(2) + b(1)a(2))(\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2))$$

该波函数对应的势能面与实验结果相比，仍有较大偏差，为什么？请写出波函数中缺少的项。

### Chapter IV 分子轨道理论

2. 请用休克尔分子轨道理论计算并解释  $C_3H_3^+$  具有芳香性，而  $C_4H_4$  无芳香性。

### Chapter V HF 方法

3. 请解释 Hartree method 与 Hatree-Fock method 中用到的单电子近似，并写出此时势能项的表达式。