

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 I 课程引言

1. 请简要谈一谈你对理论与计算化学在现代化学中扮演的角色的认识，简而言之，这门学科有什么用处，意义何在？
2. 请列举至少三位在量子力学发展过程中做出重要贡献的科学家，并简要介绍他们的贡献。

Chapter II 量子力学基础

3. 证明：(1)厄米算符的本征值是实数;(2)厄米算符的属于不同本征值的本征函数彼此正交。
4. 请写出 MgO 的哈密顿算符。