GVB-LCC theory:



Energy equation: 

Amplitude equation：





**关于Hamiltonian中2-e算符形式**：



where 

because ，but 

**并于在推导Hamiltonian矩阵元中的(+,-)问题**：

共有三处：

1. 推导表示矩阵 
2. 块的移出移进 
3. H中pqsr的分块和与对应块的并扰 