

很多性质都是基于原子电荷的，目前可以计算的原子性质有以下：

- 原子电荷有很多种，目前实现了Mulliken电荷和lowdin电荷，都在atomCharge.py中实现
- 自旋布局是开壳层分子中原子的 $\alpha$ 电子数- $\beta$ 电子数，本质上是基于电荷计算的结果atomSpin.py
- 原子轨道能是根据所有分子轨道中原子电荷的比例对分子轨道能量加权求和，结果依赖于电荷atomEnergy.py
- fukui函数和parr函数是不同价态分子电荷或自旋的差值，结果依赖于电荷delProps.py
- 轨道投影法修改分子轨道系数矩阵，但还是要代入上述的基于电荷的分析方法dirProps.py
- pi电子数是利用轨道投影法指定方向为垂直于分子平面方向的方向电子数piProps.py
- 自由价是根据与原子相邻的pi键级计算出的，与原子电荷没关系freeValence.py

## 原子轨道能

将每个分子轨道的电子分布到基函数上，每个基函数在不同轨道电子数比例 $\times$ 分子轨道能量=基函数轨道能，原子对应基函数的电子轨道能加和即为原子轨道能

密度矩阵 $P$ 与重叠矩阵 $S$ 的乘积的对角线元素为每个基函数的电子数量，以 $b$ 代表基函数指标

$$N_b = (PS)_{b,b}$$

$$P_{b,:} = P_{b,:} S_{:,b}$$

$$P_{b,:} = \sum_{i=1}^{n_b} P_{b,i} S_{i,b}$$

$$\sum_{i=1}^{n_b} \sum_{j=1}^{n_o} (C_{b,j} C_{j,b}) S_{i,b}$$

其中 $i$ 代表与该基函数 $b$ 作用的基函数指标， $n_b$ 代表基函数的数量， $j$ 代表分子轨道， $n_o$ 代表占据轨道数量，整个分子的电子数量为：

$$N = \sum_{b=1}^{n_b} \sum_{i=1}^{n_b} \sum_{j=1}^{n_o} (C_{b,j} C_{j,b}) S_{i,b}$$

第 $b$ 个基函数在第 $j$ 个分子轨道中的电子数量为：

$$N_{b,j} = \sum_{i=1}^{n_b} (C_{b,j} C_{j,b}) S_{i,b}$$

其中 $b$ 和 $j$ 为常数；第 $j$ 个轨道的电子数量为：

$$N_{j} = \sum_{b=1}^{n_b} \sum_{i=1}^{n_b} (C_{b,j} C_{j,b}) S_{i,b}$$

其中 $j$ 为常数，该值等于1或2,记为 $N_e$

第 $j$ 个分子轨道中，第 $b$ 个基函数电子数量的占比为：  $r_{b,j} = N_{b,j} / N_e$

则第 $b$ 个基函数的电子在第 $j$ 个分子轨道中的能量为：  $E_{b,j} = r_{b,j} \times e_j$

其中 $e_j$ 为第 $j$ 个分子轨道的能量，则第 $b$ 个基函数的电子的轨道能为：  $E_b = \sum_{j=1}^{n_o} E_{b,j}$

对原子 $a$ 的所有基函数能量加和，得到原子的轨道能量

$$E_a = \sum_{b \in a} E_b$$