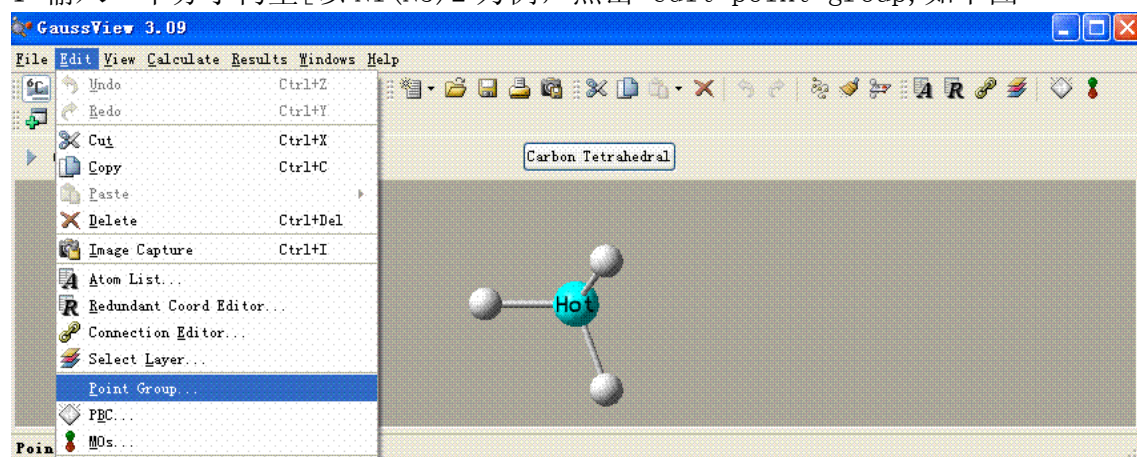
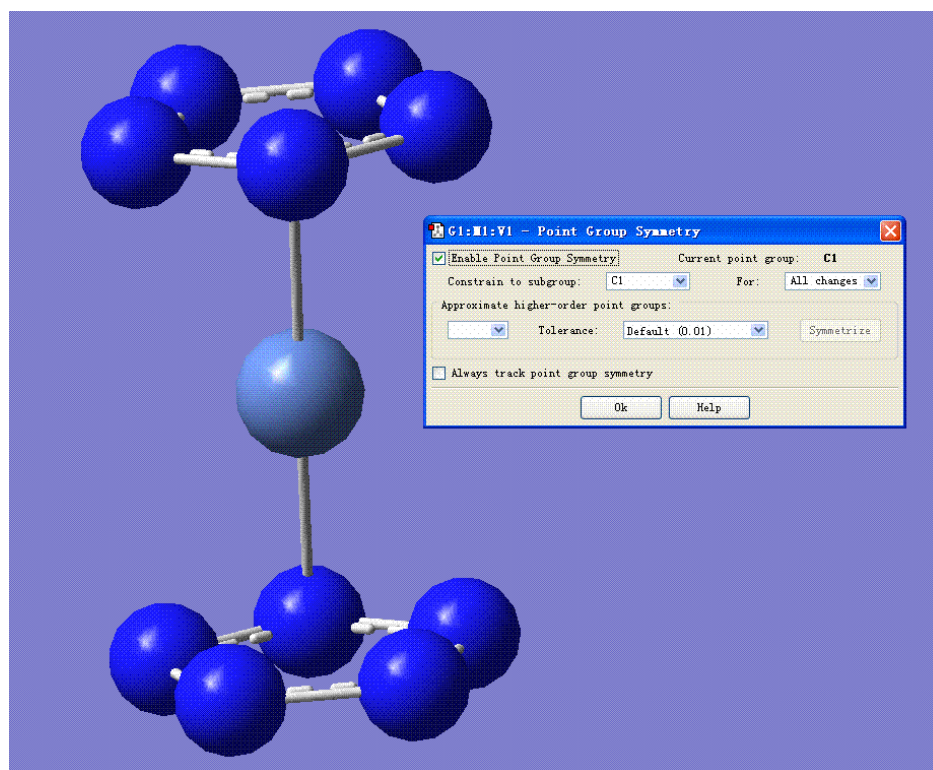


用 Gview 设定体系的对称性

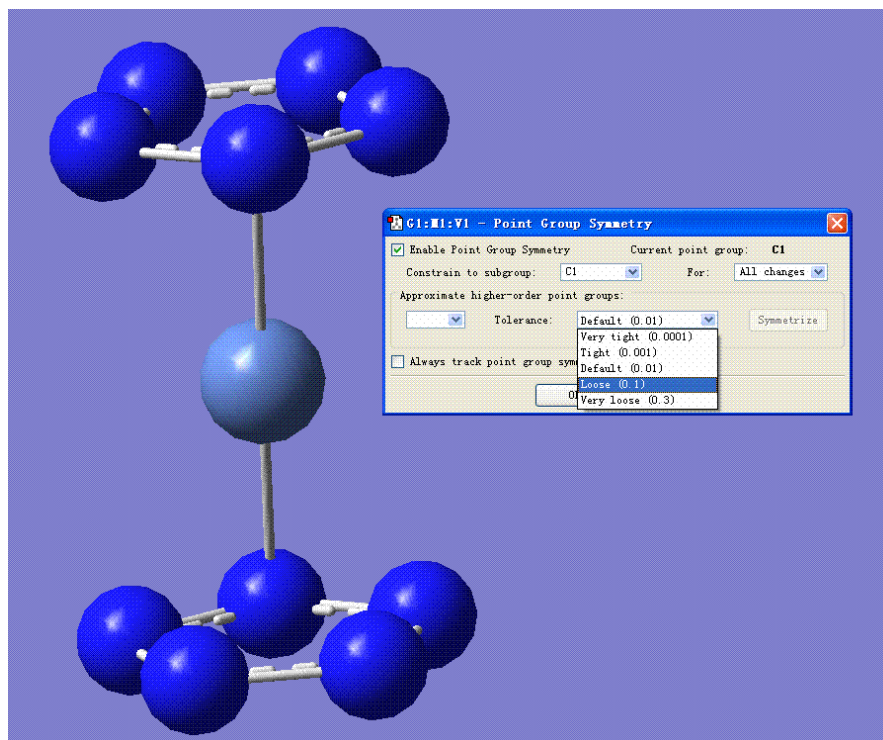
1 输入一个分子构型[以 Ni(N5)2 为例, 点击 edit-point group, 如下图



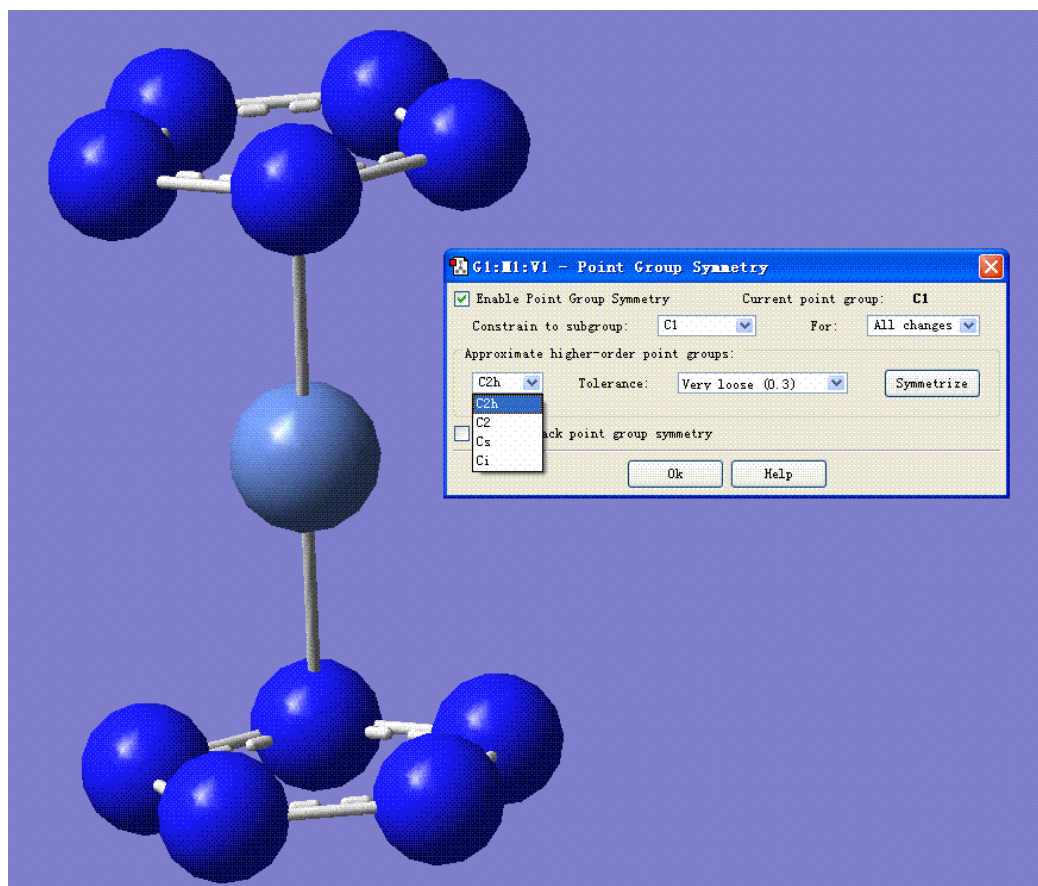
2 出现如下图的窗口, 选中下图对话框的左上角的方框, 对体系施加体系对称性;



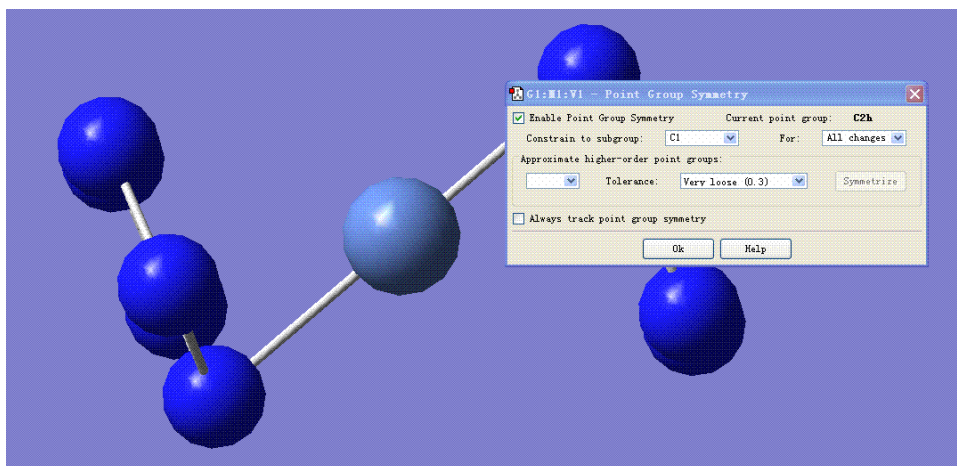
3 体系当前的对称性是 C1，选用更松的判定标准，如下图：



4 改变判定标准后，可以发现体系可能的对称性有好几个，选定想要的对称性：



5 点击 symmetries，然后 'OK' 就可以了



感谢董昊的帮助！