

对于复杂的大分子的计算，目前由于受到计算机条件的限制，从头算还有困难，故往往采用各种近似方法。在半经验方法的计算中，从电子结构的一些试验资料估计最难以计算的一些积分。当使用模型法计算分子电子结构时，不再从原始的完正 Hamilton 量出发，而是从最简单的模型 Hamilton 量出发。这种 Hamilton 量只是粗略地考虑了分子中相互作用，通常包含一些待定的参数。

半经验法引入的化简极大地简化了必须的计算工作量，并且可能计算一些更复杂分子的电子结构。这种计算所得到的资料带有定性的和半定量的特性。实际上，如果该方法用于一些它力所能及的问题，计算结果的精确度通常足以说明所研究分子的性质，肯定或否定某中物理化学假定。

尽管在半经验方法中依据试验值对一些计算所进行的参数化补偿了计算方案的不足。但是，却不能苛求半经验方法面面俱到，使分子的各种电子性质的计算都有同样好的结果。因此，通常保证分子的某些电子结构性质好的计算方案对于另外一些电子结构性质有可能导出不适当的结果。于是，对于每种半经验方法，可以因各类具体参数化方案的不同而变的多样化。

在相当大程度上，每类参数化都是局限于分子的一些性质或一定种类分子的计算。因此，半经验方法不是以描述分子的全部特性为基本内容，而是着眼于比较同系物的某些性质。当足以正确地引入参数时，可以得到复杂化合物电子结构的定性或定量的资料，同系物分子的某些特性的变化规律，以及建立他们同试验观测的物理与化学性质的联系，显然，这些问题都是现代化学关注的中心。