

课堂练习

练习1：证明闭壳层体系中精确交换空穴密度的表达式 $\rho_x(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{2|\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{\rho(\mathbf{r}_1)}$ **满足如下和规则 (sum rule)**

$$\int d\mathbf{r}_2 \rho_x(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -1$$

证明：

练习2：对于闭壳层体系，试证明 $\rho_x(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{2|\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{\rho(\mathbf{r}_1)}$ **，其中**

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_i^{\frac{N}{2}} \psi_i(\mathbf{r}_1) \psi_i^*(\mathbf{r}_2)$$

证明：

练习3：DFT相关能(correlation energy)定义为

$$< \text{Empty Math Block} >$$

试证明 $E_c[\rho] < 0$

证明：

练习4：HF中的交换能与DFT的交换能是否有确定的大小关系？现给出两者的表达式

$$< \text{Empty Math Block} >$$

证明如果 $\rho_0(\mathbf{r}) \simeq \rho_{\text{HF}}(\mathbf{r})$ **，则有** $E_x^{(\text{DFT})} > E_x^{(\text{HF})}$

证明：

练习5：在自旋密度泛函理论的推导中，证明 $m(\mathbf{r}) = \beta_e [\rho^\beta(\mathbf{r}) - \rho^\alpha(\mathbf{r})]$

证明：

练习6：证明在SDFT中，精确交换空穴密度可以表达为

$$\rho_x(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{\sum_\sigma |\rho_1^\sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{\rho(\mathbf{r}_1)}, \text{ 其中 } \rho_1^\sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_i^{N^\sigma} \psi_i^\sigma(\mathbf{r}_1) \psi_i^{\sigma*}(\mathbf{r}_2)$$