## 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 $ho_x(m{r}_1,m{r}_2)=-rac{2|
ho(m{r}_1,m{r}_2)|^2}{
ho(m{r}_1)}$ 满足如下和规则(sum rule)

$$\int dm{r}_2
ho_x(m{r}_1,m{r}_2) = -1$$

证明:

练习2:对于闭壳层体系,试证明 $ho_x(m{r}_1,m{r}_2)=-rac{2|
ho(m{r}_1,m{r}_2)|^2}{
ho(m{r}_1)}$ ,其中

$$ho(oldsymbol{r}_1,oldsymbol{r}_2)=\sum\limits_i^{rac{N}{2}}\psi_i(oldsymbol{r}_1)\psi_i^*(oldsymbol{r}_2)$$

证明:

练习3: DFT相关能(correlation energy)定义为

 $< Empty\ Math\ Block >$ 

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

 $< Empty\ Math\ Block >$ 

证明如果 $ho_0(m{r})\simeq
ho_{
m HF}(m{r})$ ,则有 $E_x^{(DFT)}>E_x^{(HF)}$ 

证明:

练习5:在自旋密度泛函理论的推导中,证明 $m(m{r})=eta_e[
ho^eta(m{r})ho^lpha(m{r})]$ 

证明:

练习6:证明在SDFT中,精确交换空穴密度可以表达为

$$ho_x(m{r}_1,m{r}_2) = -rac{\sum_{\sigma}|
ho_1^{\sigma}(m{r}_1,m{r}_2)|^2}{
ho(m{r}_1)}$$
,其中 $ho_1^{\sigma}(m{r}_1,m{r}_2) = \sum_i^{N^{\sigma}}\psi_i^{\sigma}(m{r}_1)\psi_i^{\sigma*}(m{r}_2)$