

## 第四章 习题

1. 考虑采用最小基组描述的  $H_2$ 
  - 1) 推导出 Full CI 的相关能表达式。
  - 2) 推导二阶多体微扰理论 (即 MP2) 的相关能表达式。
  - 3) 分析 FCI 和 MP2 相关能表达式之间的关系。
  - 4) 分析  $H_2$  解离极限时, Full CI 和 MP2 总能量会有什么样的极限行为。
2. 以两个相距足够远的  $H_2$  构成的复合体系为例, 验证 MP2 总能量满足大小一致性。
3. 推导以 HF 为零阶参考的多体微扰理论 (即 MPPT) 中对基态 N 电子波函数的一阶修正的表达式。