

# 作业

编写求解 $\text{HeH}^+$ 双原子体系的Restricted Closed-shell Hartree-Fock 方程的SCF程序, 两个原子的距离设为精确值 $R=1.4632$  a.u.。该体系有两个电子, 采用STO-3G minimal basis set (每个原子各一个基函数), 具体形式可从<https://bse.pnl.gov/bse/portal> 下载。

- 要求:
- 1) 以小组形式完成, 每组3个人, 可以一个人为一组;
  - 2) 语言不限, 推荐使用python, 对主要变量、数组及定义的函数有说明, 程序流程有说明;
  - 3) 输出迭代过程中每步的电子总能;
  - 4) 输出最后收敛的总能 (电子总能+核核库伦排斥能), 重叠积分矩阵 $S$ , 动能矩阵 $T$ , 电子与核吸引能矩阵  $V_{ne}$ , 双电子积分矩阵 $V_{ee}$ ;
  - 5) 输出轨道能量;
  - 6) 画出电子数密度在实空间的分布。

参考: A. Szabo 和 N.S. Ostlund 写的*Modern Quantum Chemistry*的第三章 (HF主要公式以及程序步骤) 和附录A (高斯函数积分)。