Prof. Martin Schütz
Uni Regensburg
WS 2014/15

Aufgabe 1: 2-Teilchen-Dichtefunktion

Die 2-Teilchendichtefunktion $\rho_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ ist definiert als:

$$\rho_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = N\,(N-1) \int \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \cdots, \vec{x}_N)\Psi^*(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \cdots, \vec{x}_N)\, d\vec{x}_3 \cdots d\vec{x}_N \quad (1)$$

Zeigen Sie unter der Annahme, dass die Wellenfunktion Ψ durch eine einzige Slater-Determinante

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{p_i \in \mathcal{P}_N} \varepsilon_{P_i}\, P_i\,(\chi_1(1)\chi_2(2)\cdots\chi_n(N)) \quad (2)$$

$$\text{alternative Schreibweise: } \Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i=1}^{N!} (-1)^{P_i}\, P_i\,(\chi_1(1)\chi_2(2)\cdots\chi_n(N)) \quad (3)$$

mit den orthonormalen Spinorbitalen $\chi_i(x)$ beschrieben wird und ohne Verwendung der Slater-Condon Regeln, dass gilt:

$$\rho_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \rho_1(\vec{x}_1)\rho_1(\vec{x}_2) - \rho_1(\vec{x}_1; \vec{x}_2)\rho_1(\vec{x}_2; \vec{x}_1), \quad (4)$$

mit der *generalisierten* 1-Elektrondichte (= 1-Teilchendichtematrix!)

$$\rho_1(\vec{x}; \vec{x}') = \sum_{j=1}^{n} \chi_j(\vec{x})\chi_j^*(\vec{x}'), \quad (5)$$

$$\rho_1(\vec{x}) = \rho_1(\vec{x}; \vec{x}) \quad (\rightsquigarrow \text{1-Elektrondichte(funktion)}). \quad (6)$$