

**Diss. Nr. 4180**

**Untersuchungen zum Teilchendichte-Formalismus  
in der Quantenchemie**

ABHANDLUNG

zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften  
der  
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE  
ZÜRICH

vorgelegt von

**BRUNO HILTI**

dipl. Phys. ETH

geboren am 9. März 1936

von Schaan (Fürstentum Liechtenstein)

Angenommen auf Antrag von

Prof. H. Primas, Referent

Prof. Dr. Hs. H. Günthard, Korreferent

Juris Druck + Verlag Zürich  
1970

## ZUSAMMENFASSUNG

Das spingemittelte Teilchendichte-Feld  $Q(r)$  und dessen kanonisch konjugiertes  $P(r)$ -Feld wurden einer kanonischen Transformation, hier die  $n$ -Transformation genannt, unterzogen.

Die  $n$ -Transformation ist durch das zu untersuchende System bestimmt, nämlich Division durch die Quadratwurzel aus der Teilchendichte des Systems, bezw. Multiplikation des  $P(r)$ -Feldes mit derselben. Die  $n$ -Transformation bewirkt eine einfache mathematische Struktur der spingemittelten 2-Dichteverteilungsfunktionen des  $n$ -transformierten Teilchendichte-Feldes.

Für einige für die Quantenchemie repräsentative Beispiele wurden die spingemittelten 2-Dichteverteilungsfunktionen des  $n$ -transformierten Teilchendichte-Feldes explizite hergeleitet und auf deren mathematische Struktur untersucht.

Mit Hinblick auf die Untersuchung von Kohärenzeigenschaften von Makromolekülen wurden die spingemittelten,  $n$ -transformierten 2-Dichteverteilungsfunktionen der extremen Bardeen-Cooper-Schrieffer Singlet-Wellenfunktion vom Range  $R$  in die Arbeit miteinbezogen.

Der dem Born-Oppenheimer Hamiltonoperator entsprechende Operator in der Teilchendichte-Darstellung wurde hergeleitet und die Bewegungsgleichungen der  $Q(r)$ - und  $P(r)$ -Felder aufgestellt.