

## Übungen zur Quantenmechanik II

11. Übungsblatt

19. Jan. 2006

1. Herleitung der THOMAS-FERMI-Differentialgleichung für Atome:

Diese Gleichung, damit sie für alle Atome gültig ist, hat folgende Form

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = \frac{\Phi^{3/2}}{x^{1/2}} \quad \text{mit den Randbedingungen: } \Phi(0) = 1 \quad \text{und} \quad \Phi(\infty) = 0. \quad (*)$$

Die Koordinaten  $x$  ist ein skaliertes Radius  $x = r/b$  mit

$$b = \frac{1}{2} \left( \frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{a}{Z^{1/3}} = 0,88534 \frac{a}{Z^{1/3}},$$

wobei  $a = \hbar^2/(m e^2)$  der BOHRsche Radius ist und  $Z$  die Kernladungs- bzw. die Elektronenzahl ist. Löst man die Differentialgleichung (\*), dann bestimmt  $\Phi$  das Potential mit

$$V(r) = -\frac{Z e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{b}\right).$$

Man hat damit das elektrische Potential für alle Atome gefunden, jedenfalls in der THOMAS-FERMI Näherung!

Leiten Sie diese Differentialgleichung ab, indem Sie die Energie als Summe von kinetischer und potentieller durch die Dichte  $\rho$  ausdrücken

$$E[\rho] = E_{kin}[\rho] + \frac{1}{2} \iint d^3r_1 d^3r_2 \rho(\vec{r}_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \rho(\vec{r}_2) - \int \frac{Z e^2}{r} \rho(\vec{r}) d^3r. \quad (**)$$

Die potentielle Energie ist die elektrostatische Energie und in einfacher Weise durch die elektronische Dichte  $\rho$  definiert. Die kinetische Energie  $E_{kin}$  ist ebenfalls ein Integral, und zwar über deren Dichte, die für ein FERMIGAS  $\propto \rho^{5/3}$  ist.

a) Bestimmen Sie also  $E_{kin}/V = \epsilon$  in Analogie zur Elektronendichte  $\rho = N/V = (p_f/\hbar)^3/(3\pi^2)$ .

b) Ergänzen Sie in (\*\*) die kinetische Energie  $E_{kin}[\rho] = \int d^3r \epsilon(\rho)$ .

c) Finden Sie mit  $\delta E[\rho]/\delta \rho(\vec{r}) = 0$  die Differentialgleichung von THOMAS und FERMI.

2. Elektronischen Dichte und die Lösung der THOMAS-FERMI-Differentialgleichung:

Nach Latter\* kann man  $\Phi$ , die Lösung von (\*), durch einen "Fit" mit einer Genauigkeit von 0,3% durch folgende Formel ausdrücken (mit  $x = r/b$ ):

$$\Phi(x) = \left[ 1 + 0.02747 x^{1/2} + 1.243 x - 0.1486 x^{3/2} + 0.2302 x^2 + 0.007298 x^{5/2} + 0.006944 x^3 \right]^{-1}$$

Bestimmen Sie damit die elektronische Dichte und lassen Sie Sie von einem Computer zeichnen.

---

\* R. Latter, Phys. Rev. **89**, 510 (1955).