Das Thomas-Fermi Atommodell (oder Ion

(Einheiten: $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$, $|e| = 1$)

- fester Kern bei $\vec{x} = 0$ der Ladung Z,
- Hülle von N Elektronen, beschrieben durch Dichte $n(\vec{x})$,
- Energie der Dichte: Funktional

$E[n] =$

$$= \int d^3x \, \gamma \frac{3}{5} n(\vec{x})^{5/3} - \int d^3x \frac{Z n(\vec{x})}{|\vec{x}|} + \frac{1}{2} \int d^3x \, d^3y \frac{n(\vec{x}) n(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|}$$

mit $\gamma = (3\pi^2)^{2/3}$

1. Term: Kinetische Energie der Elektronen, als ob Zusammenhang $n \to E_0/V$ lokal gelten würde

2. Term: Anziehung Elektronen $\Leftrightarrow$ Kern

3. Term: Abstossung der Elektronen (ignoriert Korrelationen)

• Gesucht: Minimisierende Dichte $n(\vec{x})$ für $E[n]$ unter Nebenbedingungen

• $n(\vec{x}) \geq 0$, • $\int d^3x\, n(\vec{x}) = N$

• Lösung bestimmt durch

$$\delta E \equiv \frac{d}{dt} E[n + t\delta n]\Big|_{t=0+} \geq 0$$

für alle mit den Nebenbedingungen verträglichen Variationen $\delta n(\vec{x})$:

• $\delta n(\vec{x}) \geq 0$ falls $n(\vec{x}) = 0$

• $\int d^3x\, \delta n(\vec{x}) = 0$

• Euler-Lagrange Gl.

$$\gamma\, n(\vec{x})^{2/3} = (\mu - \phi(\vec{x}))_+ \qquad (1)$$

(TF-Gleichung)

mit

$$\phi(\vec{x}) = -\frac{Z}{|\vec{x}|} + \int d^3y\, \frac{n(\vec{y})}{|\vec{x}-\vec{y}|} \qquad (2)$$

(elektrisches Potential des Atoms)

(1,2): selbstkonsistentes Gleichungspaar

- sphärisch symmetrische Lösungen

Ansatz:

$$(\mu - \phi(r))_+ =: \frac{Z}{r}\chi(r)$$

mit $\chi(r) \geq 0$, $\chi(0) = 1$. Dann:

$$n(r) = \frac{Z}{4\pi r}\chi''(r) \quad , \quad (r>0, \chi>0)$$

→ TF-Gleichung:

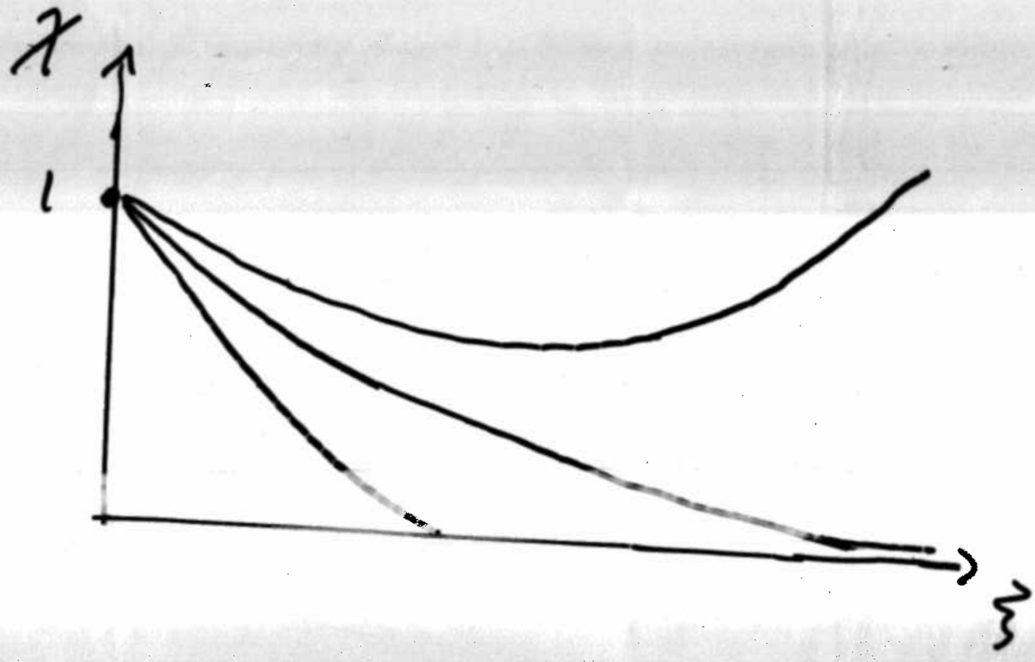
$$\chi''(r) = \frac{4}{3\pi} Z^{-1/2} r^{-1/2} \chi(r)^{3/2},$$

$$(r>0, \chi>0)$$

Lösungen von

$$\chi''(\xi) = \xi^{-1/2}\chi(\xi)^{3/2}$$

($\chi > 0$, $\xi \geq 0$) mit $\chi(0) = 1$ parametrisiert durch $\chi'(0)$:



Falls $\chi(\xi) = 0$ für $\xi < \infty$, so $\chi'(\xi) \neq 0$

(ansonsten $\chi \equiv 0$)