Universität Bielefeld **Dozent: Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster**
Theoretische Festkörperphysik **Tutor: Dr. Mykhaylo Evstigneev**
Sommersemester 2011 **Blatt 13**

Aufgabe 20: Thomas-Fermi-Modell des Atoms (17 Punkte)

Ein Atom besteht aus einem Z-fach positiv geladenen Atomkern und der in umgebenden Elektronenhülle. In Hartree-Näherung ist das Potential für ein einzelnes Elektron am Orte $\mathbf{r}$ daher gegeben durch

$$V(\mathbf{r}) = \int d^3r' \, \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \, n(\mathbf{r}') - \frac{Ze^2}{r} \, , \tag{1}$$

wobei $n(\mathbf{r})$ die Elektronendichte ist. In Thomas-Fermi-Näherung nimmt man an, dass das Potential $V(\mathbf{r})$ so langsam variiert, dass es in einer Umgebung von $\mathbf{r}$ praktisch konstant ist. Dann hat man bei $\mathbf{r}$ ein lokales, homogenes Elektronengas vorliegen. Verwenden Sie in der Aufgabe die Konvention $\hbar = 1$.

a) Begründen Sie, dass aus diesen Annahmen folgt:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\{2m\,[E_{\rm F} - V(\mathbf{r})]\}^{3/2}}{3\pi^2} \, , \tag{2}$$

wobei $E_{\rm F}$ die Energie des höchsten besetzten Niveaus ist. (3 Punkte)

b) Begründen Sie, dass für ein neutrales Atom $E_{\rm F} = 0$ gilt. (2 Punkte)

c) Zeigen Sie, dass sich aus (1) die Poisson-Gleichung ergibt und leiten Sie daraus und aus **b)** unter der Annahme sphärischer Symmetrie für $r > 0$ die Thomas-Fermi-Gleichung

$$-\frac{3\pi}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2 \frac{\partial V(r)}{\partial r}\right] = 4e^2\,[-2mV(r)]^{3/2} \tag{3}$$

her. (4 Punkte)

d) Zeigen Sie, dass sich daraus mit der Substitution

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}\,\Phi(x)\,, \qquad r = Z^{-1/3}bx\,, \qquad b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} a_0\,, \qquad a_0 = \frac{1}{me^2} \tag{4}$$

die Differentialgleichung

$$\frac{d^2}{dx^2}\,\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}\,\Phi^{3/2}(x) \tag{5}$$

ergibt mit den Randbedingungen

$$\Phi(0) = 1\,, \qquad \Phi(x \to \infty) \to 0\,. \tag{6}$$

(4 Punkte)

e) Lösen Sie die Differentialgleichung (5) mit den Randbedingungen (6) und plotten Sie $\Phi(x)$ bzw. $V(r)$ und $4\pi r^2 n(r)$. (6 Punkte)