

## Zur statistischen Näherung des Mehrteilchen-problems der Wellenmechanik

Von K. LADÁNYI

Forschungsgruppe für theoretische Physik der Ungarischen Akademie der Wissenschaften, Budapest

(Z. Naturforsch. 13 a, 358 [1958]; eingeg. am 13. März 1958)

In der vorliegenden Arbeit wird eine Verallgemeinerung der von MACKE vorgeschlagenen Variationsmethode im Falle eines kugelsymmetrischen äußeren Potentials angegeben. MACKE geht bekanntlich von der RITZschen Methode aus und nähert die Einteilcheneigenfunktionen mit solchen Variationsansätzen an, bei denen die Orthogonalitätsbedingungen automatisch erfüllt sind<sup>1</sup>. Bei sehr großer Teilchenzahl eignet sich das Verfahren auch zur Begründung der THOMAS-FERMI-Theorie, mit entsprechender Umsicht kann es aber auch bei kleiner Teilchenzahl angewendet werden<sup>2, 3</sup>.

Den ortabhängigen Teil der Einteilcheneigenfunktionen nehmen wir in folgender Form an

$$\psi_i(r) = \frac{1}{r} R_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\vartheta, \varphi), \quad (1)$$

wo  $R_{n_i l_i}$  die radiale Eigenfunktion und  $Y_{l_i m_i}$  die Kugelflächenfunktion im  $i$ -ten Zustand bezeichnet. Wir schreiben  $N_{l_i}$  für die Anzahl der besetzten Zustände mit der Nebenquantenzahl  $l_i$  und machen zwecks annähernder Bestimmung der Energie sowie der  $R_{n_i l_i}$  radialen Eigenfunktionen folgende Variationsansätze

$$R_{n_i l_i} = \frac{1}{\sqrt{N_{l_i}}} u_{l_i}(r) \varphi_{n_i}[y_{l_i}(r)],$$

$$\text{wo } \int_0^\infty u_{l_i}^2 dr = N_{l_i}, \quad \int_0^r u_{l_i}^2 dr = y_{l_i}(r)$$

$$\text{und } n_i = 0, 1, 2, \dots$$

ist, und die Funktionen  $\varphi_{n_i}(y)$  im Bereich  $0 \leq y \leq 1$  ein reelles Orthogonalsystem bilden, d. h. es ist

$$\int_0^1 \varphi_{n_i}(y) \varphi_{n_j}(y) dy = \delta_{n_i n_j}.$$

Es läßt sich leicht nachweisen, daß bei der Erfüllung obiger Bedingungen die Funktionen  $\psi_i(r)$  orthonormiert sind.

Die zweckmäßige Wahl der Funktionen  $\varphi_{n_i}$  bildet eine wichtige Aufgabe. In der vorliegenden Arbeit wird

folgendes orthogonales Funktionensystem benützt:

$$\varphi_{n_i}(y_{l_i}) \begin{cases} = 1, & \text{wenn } n_i = 0, \\ = \sqrt{2} \cos(\pi n_i y_{l_i}), & \text{wenn } n_i \neq 0 \text{ ist.} \end{cases}$$

Bei der Wahl des obigen Systems  $\varphi_{n_i}$  verursacht eine ausreichende analytische Approximation der Funktionen  $u_{l_i}$  in der Nähe des Origos und bei hohen  $r$ -Werten keine besondere Schwierigkeiten; im Falle von ein und zwei Teilchen gelangt man zu den Ergebnissen des HARTREESchen Verfahrens.

Es sei hervorgehoben, daß in der obigen Annäherung die Funktionen  $R_{n_i l_i}$  nicht als die Approximation der HARTREESchen radialen Einteilcheneigenfunktionen  $R_{n_i+1, l_i}^{(H)}$  betrachtet werden können. Die aus den Einteilcheneigenfunktionen (1) aufgebaute Determinante gibt hingegen eine Approximation der Eigenfunktion des Gesamtsystems. Zum Abschluß bemerken wir, daß bei genügend hoher Teilchenzahl die Approximation sämtlicher Funktionen  $R_{n_i l_i}^{(H)}$  mit einer linearen Kombination der Funktionen  $R_{n_i l_i}$  möglich ist.

Zur Bestimmung der Funktionen  $u_{l_i}$  wird die direkte Variationsmethode angewendet. Die auftretenden Integrale können im Falle einer einfachen ersten Näherung auf analytischem, im Falle von höheren Näherungen auf numerischem Wege bestimmt werden.

Um die Zahl der zu variierenden Funktionen zu verringern, können wir folgende Nebenbedingung einführen

$$\frac{u_1^2}{N_1} = \frac{u_2^2}{N_2} = \dots = \frac{u_{l_\mu}^2}{N_{l_\mu}}, \quad (2)$$

wo  $l_\mu$  die maximale Nebenquantenzahl bezeichnet. Im wesentlichen werden also dann zwei Funktionen ( $u_0$  und  $u_1$ ) variiert. Wenn außer Gl. (2) auch die Erfüllung der Bedingung  $u_0^2/N_0 = u_1^2/N_1$  gefordert wird, gelangt man im allgemeinen zu falschen Ergebnissen wegen der schlechten Näherung der Eigenfunktionen mit der Nebenquantenzahl  $l_i = 0$  in der Nähe des Origos.

Die Methode wurde für das Ar-Atom erprobt. Die resultierende radiale Dichte der Elektronen weist Oszillationen auf, ihr Ablauf kann besonders in der Nähe der ersten zwei Maxima als zufriedenstellend betrachtet werden. In der angewandten höchsten Näherung haben wir für die Energie des Ar-Atoms den Wert  $-503,6 \text{ e}^2/a_0$  erhalten, der mit dem halbempirischen Wert  $-525,36 \text{ e}^2/a_0$  gut übereinstimmt. Über Details der Berechnungen werden wir in einer späteren Arbeit berichten.

<sup>1</sup> W. MACKE, Phys. Rev. **100**, 992 [1955]; Ann. Phys., Lpz. **17**, 1 [1955].

<sup>2</sup> N. H. MARCH, Proc. Phys. Soc., Lond. A **70**, 169 [1957].

<sup>3</sup> K. LADÁNYI, Acta Phys. Hung. **7**, 161 und 267 [1957].

Nachdruck — auch auszugsweise — nur mit schriftlicher Genehmigung des Verlags gestattet

Verantwortlich für den Inhalt: A. K l e m m

Satz und Druck: Konrad Triltsch, Würzburg



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.