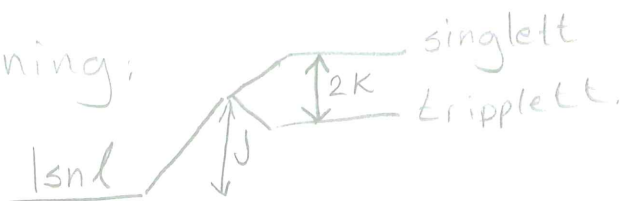


Fermioner har antisymmetriska vågfunktioner \Rightarrow Pauliprincipen.

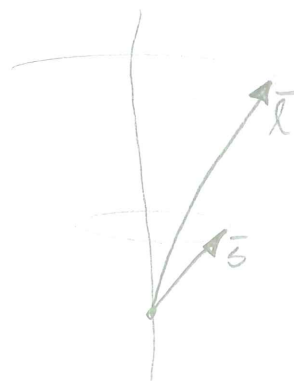
Degenererad störningsräkning:

$$\Delta E = J \pm K$$



I alla (både klassiska och kvantmekaniska) system är rörelsemängds-
momentet bevarat. $\Rightarrow \vec{j} = \vec{l} + \vec{s} = \text{konstant}$

Läs om Glebsch-Jordan-koefficienter.



Schrödingerekvationen för N elektroner

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{j>i}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right\}$$

Centralfältsapproximationen (CFA) (radiell \hat{H}).

Vi gör några approximationer:

- sfärisk symmetri

Ingen påverkan från valens-
elektronen på "kärnans" våg-
funktion.

Hamiltonoperatoren blir en produkt av enelektronoperatörer:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{CF}(r_i) \right) = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i$$

Detta betyder att vi kan göra en separation av alla vågfunktioner

$$\Psi_{\text{atom}} = \Psi_1(1) \cdot \Psi_2(2) \cdot \dots \cdot \Psi_N(N) \quad (\text{approximation 1})$$

$$H_{CF} \Psi_{\text{atom}} = \sum_{i=1}^N H_i \Psi_{\text{atom}} = \sum_{i=1}^N \epsilon_i \Psi_{\text{atom}} = E_{\text{tot}} \Psi_{\text{atom}}$$

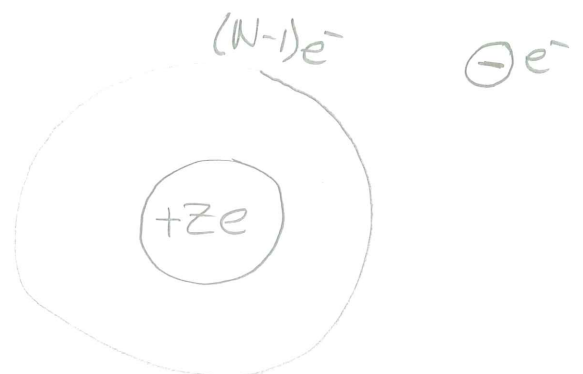
$$\Psi_i(i) = R_{n_i, l_i}(r_i) \cdot Y_{l_i, m_i}(\theta, \varphi) \cdot \Psi_{\text{spinn}}^{m_s}(i) \quad (\text{approx. 2})$$

Exempel: Alkalimetaller.

slutna underskal \Rightarrow sfäriskt symmetrisk laddning.

$$r \rightarrow 0 \Rightarrow \bar{E}(r) \rightarrow \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{r}$$

$$r \rightarrow \infty \Rightarrow \bar{E}(r) \rightarrow \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{r}$$



Self consistent field technique

- ① Gissa $R_{n,l_i}(r)$ (ex. vätelikt)
- ② Beräkna $V_{CF}(r)$
- ③ Lös $H_i \Psi_i = \epsilon_i \Psi_i \Rightarrow R_{n,l_i}$ och ϵ_i
- ④ Gå till 2.

Begreppet Konfiguration

CFA ger att vi kan skriva:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s \Rightarrow E = 2\epsilon(1s) + 2\epsilon(2s) + 6\epsilon(2p) + \epsilon(3s)$$

CFA ger oss medelenergierna i en konfiguration men eftersom den inte tar korrelationen mellan elektronerna så får boxarna bredd.