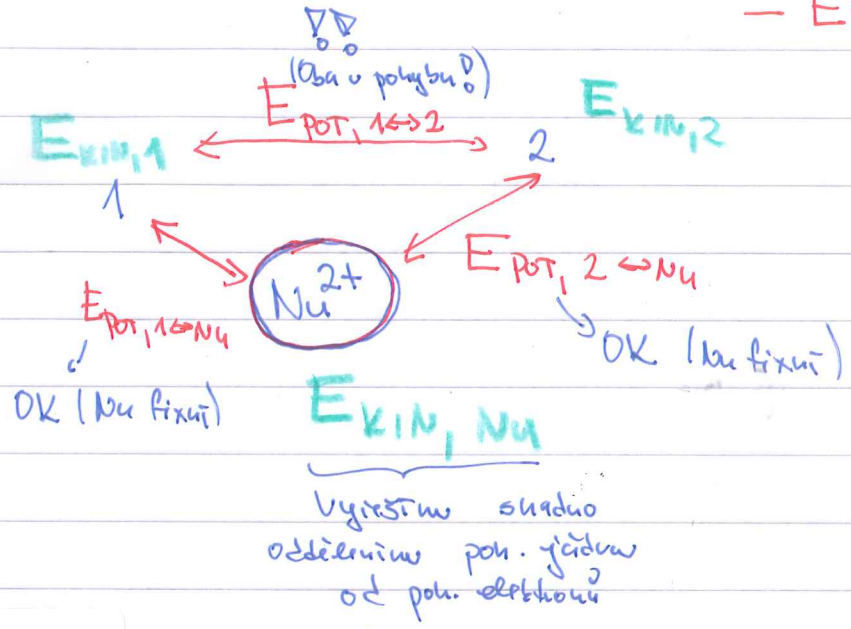


1.3. ATOMY S VÍCE ELEKTRONY

Nejjednodušší př.:

atom He

E_{KIN}
 $- E_{POT}$



Využívám snadno oddělení poh. jádru od poh. elektronů

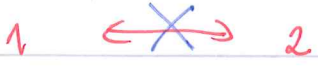
A:



1.3.1. ORBITÁLNÍ APROXIMACE

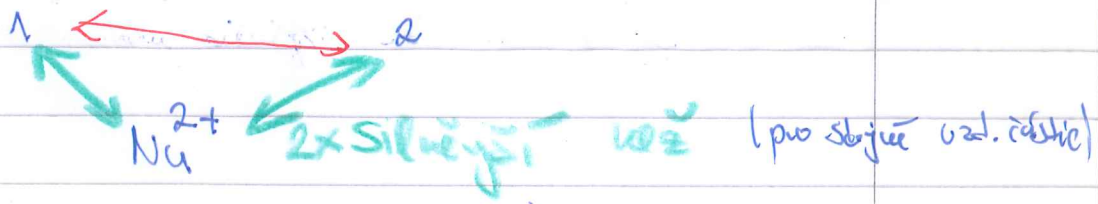
stáčí e^-

Když jsou interakci



pro začátek zanedbatelná (A. neinteragují s elektronem)

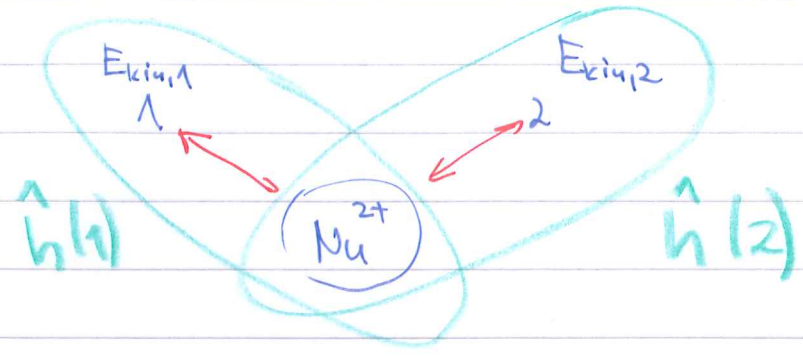
Důležitý to zcela nesmyslný krok.



T.j. hlavní člen $E_{POT} (Nu \leftrightarrow e)$ započítáme hned a vedlejší člen $(e \leftrightarrow e)$ poskládáme jako tzv. PORUCHU.

Pak ale $\hat{H}(1,2) = \hat{h}(1) + \hat{h}(2)$

protože mohou vzájemně

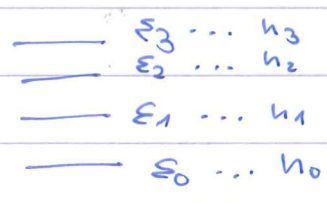


Když jsou částice NEINTERAGUJÍCÍ, TAK
SOUČET ENERGÍ
 $E(1,2) = E(1) + E(2)$
a $\Psi(1,2) = \Psi(1) \cdot \Psi(2)$

Obecný princip

Analogie: Č4660 základy FEH: 3. STATISTICKÁ TD

$E_{TOT} = n_0 \cdot \epsilon_0 + n_1 \cdot \epsilon_1 + \dots + n_2 \cdot \epsilon_2 + \dots$



$\epsilon_i = \epsilon_k^{(el)} + \epsilon_l^{(vib)} + \epsilon_m^{(rot)} + \epsilon_n^{(trans)}$

$q = q_{el} \times q_{vib} \times q_{rot} \times q_{trans}$

particuli funkce

FAKTORIZACE PART. FUNKCE

Analogie: Teorie pravděpodobnosti:

Jsou-li A a B nezávislé jevy s pr. P_A a P_B,
pak $P(A \cap B) = P_A \times P_B$

V Praxi se používá méně drastická, tzv. ORBITÁLNÍ APROXIMACE

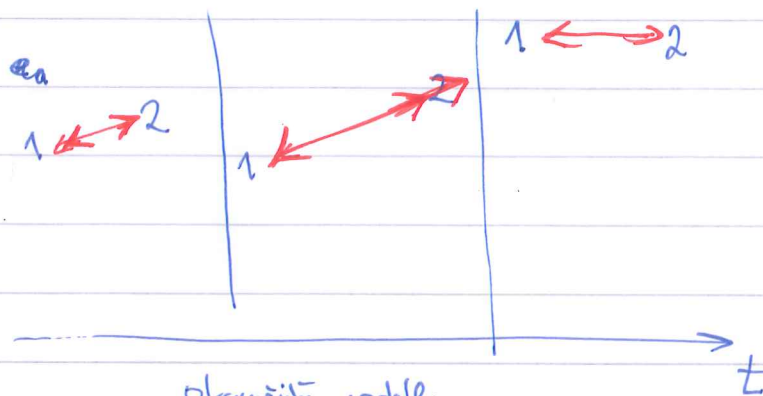
e^-

Okamžitou Interakci



stahne Nahradime jejitw časovym priměrem

REALITA



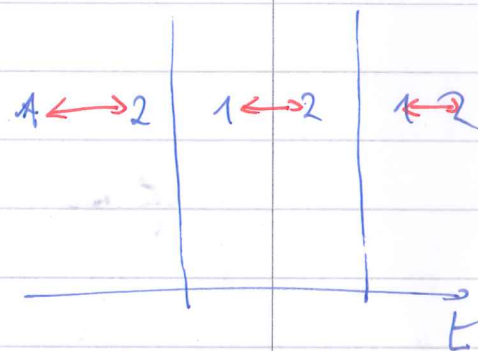
Okamžitá vzdel.

+ PŘESNĚ

- NELZE MATEM. ŘEŠIT

- NELZE SI HOČ PŘEDSTAVIT

POPIS



Okamžitá vzdel.

buďe pořad novou výjatek přim. hodnot

- APROXIMACE

+ LZE DABŘE ŘEŠIT

+ LZE SI PŘEDSTAVIT

(pořad vnitřní, ud. el)

+ LZE VYTVOŘIT

NADSTAVBY

KTERÉ ZAHŔNOU I OPRAVY

konc 21/10/2015

$E(1) + E(2)$ vs E_{TOT}

po atom He

(5) Vidíme, že i pro mnohielektrové atomy má význam kalospoč v 1. příkř.)
přesnost s jednotel. vln. funkce

~~Obecně~~ traidi 1 el VT se umjřit ORBITAL -> pro N přiscae vln. funkce elektrona

pro mnohuel. vln. atomy
kauce se pojim orbital
zacládã na UŽITEČNĚ APROXIMACI