

Z druhé strany, pro $r \rightarrow \infty$, přejde (20) v rovnici

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_{kl}}{dr^2} = [V(r) - E_{kl}] u_{kl}(r) \quad (23)$$

a mají-li existovat vázané stavy, musí být pro rostoucí r rozdíl $(V(r) - E_{kl}) > 0$. Funkce $u_{kl}(r)$ bude tedy pro $r \rightarrow \infty$ exponenciálně růst nebo klesat, přičemž rostoucí řešení je opět třeba odmítnout jako fyzikálně nepřijatelné.

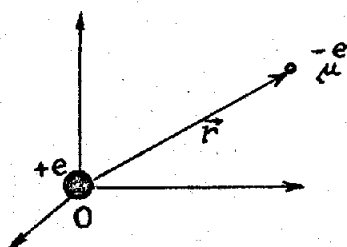
2. Atom vodíku

2.1) Řešení rovnice pro radiální část vlnové funkce

Nejjednodušší atomový systém - atom vodíku - je tvořen elektrostaticky vázanou dvojicí proton-elektron. Z odst. VIII.5.1.2 již víme, že problém dvou částic lze vždy rozdělit na dvě nezávislé úlohy: pohyb těžiště soustavy a pohyb fiktivní částice s redukovanou hmotností $\mu = m_e m_p / (m_e + m_p)$ vzhledem k počátku, který je v těžišti soustavy. V našem případě je hmotnost protonu m_p mnohem větší než hmotnost elektronu m_e . Potom ale

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p} \right) \quad (23)$$

kde korekční člen $m_e/m_p \approx 1/1800$, takže těžiště soustavy je prakticky v témže místě kde proton a zmíněná fiktivní částice může být s velmi dobrou přesností ztotožněna s elektronem. To je také důvod, proč v dalším budeme (mírně nepřesně) mluvit o částici s hmotností μ jako o elektronu a proton budeme považovat za pevný v počátku souřadnic (obr.29).



Obr.29

K řešení atomu vodíku. Proton s hmotností m_p a nábojem $+e$ považujeme za pevný v počátku a fiktivní částici s hmotností $\mu \approx m_e$ a nábojem $-e$ v dobrém přiblížení ztotožníme s elektronem.

Potenciální energie vzájemného elektrostatického působení v soustavě

$$V(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|} \quad (24)$$

má sférickou symetrii, takže jde o konkrétní případ systémů uvažovaných v předchozím odstavci. Stačí se proto omezit jen na řešení rovnice (18), resp. (20), pro radiální část vlnové funkce.

S potenciální energií (24) dostaneme pro $u_{kl}(r)$ rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1(1+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] u_{kl}(r) = E_{kl} u_{kl}(r) \quad (25)$$

s okrajovou podmínkou

$$u_{kl}(0) = 0 \quad (26)$$

Další postup řešení je v hlavních rysech shodný s postupem, který jsme uplatnili u harmonického oscilátoru a stručněji zopakovali v předchozí kapitole při řešení úlohy o momentu hybnosti; zde ho proto uvedeme jen heslovitě.

Je výhodné přepsat (25) tak, aby délka byla měřena v jednotkách

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} \quad (27a)$$

a energie v jednotkách

$$E_I = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \quad (27b)$$

Tyto veličiny jsme získali v kap.I (vztahy (I.18),(I.19)) při řešení Bohrova modelu atomu vodíku; a_0 je poloměr 1.Bohrovy orbity a $E_I = -E_1$ je ionizační energie pro elektron v základním stavu atomu H.

Zavedeme tedy bezrozměrné veličiny

$$\rho = r / a_0 \quad (27c)$$

$$\lambda_{kl} = \sqrt{-E_{kl}/E_I} \quad (27d)$$

(výraz pod $\sqrt{}$ je kladný, neboť se zajímáme o vázané stavy pro něž je $E_{kl} < 0$).

V těchto proměnných přejde rovnice (25) v

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1(1+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{kl}^2 \right] u_{kl}(\rho) = 0 \quad (28)$$

Pro $\rho \rightarrow \infty$ se tato rovnice redukuje na (zanedbáme členy $\sim \rho^{-2}$ a ρ^{-1})

$$\frac{d^2 u_{kl}}{d\rho^2} = \lambda_{kl}^2 u_{kl} \quad (29)$$

s řešením $\exp(\pm \lambda_{kl} \rho)$. Exponentu se znaménkem + musíme vyloučit, neboť nevyhovuje požadavkům kladeným na vlnové funkce.

Úplné řešení rovnice (28) potom hledáme ve tvaru

$$u_{kl}(\rho) = f_{kl}(\rho) \exp(-\lambda_{kl} \rho) \quad (30)$$

kde funkce $f_{kl}(\rho)$ musí být taková, aby pro $\rho \rightarrow \infty$ platilo $u_{kl} \rightarrow 0$. Dosazením (30) do (28) obdržíme pro $f_{kl}(\rho)$ rovnici

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{kl} \frac{d}{d\rho} + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{1(1+1)}{\rho^2} \right) \right] f_{kl}(\rho) = 0 \quad (31)$$

K rovnici (31) nutno ještě dodat okrajovou podmínku (26) ve tvaru

$$f_{kl}(0) = 0 \quad (32)$$

Funkce $f_{kl}(\rho)$ se nyní hledá ve tvaru řady

$$f_{kl}(\rho) = \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} a_q \rho^q, \quad (33)$$

v níž předpokládáme $a_0 \neq 0$. Z podmínky (32) dále vyplývá, že musí být $s > 0$. Řadu (33) dosadíme do rovnice (31) a levou stranu uspořádáme podle mocnin proměnné ρ ; má-li být rovnice splněna pro všechna ρ , musí být koeficienty u všech mocnin ρ rovny nule. Koeficient u nejnižší mocniny (tj. u ρ^{s-2}) tak dá

$$[-1(1+1) + s(s-1)] a_0 = 0 \quad (34)$$

Pro $a_0 \neq 0$ má rovnice dvě řešení:

$$s = 1 + 1, \quad s = -1;$$

přítom pouze první z nich splňuje požadavek $s > 0$. Dosadíme hodnotu $s = 1+1$ do výrazů pro koeficienty u všech zbývajících mocnin ρ a z požadavku rovnosti nule koeficientu u obecné mocniny ρ^{q+s-2} , získáme rekurentní formuli pro a_q

$$a_q = \frac{2[(q+1)\lambda_{kl} - 1]}{q(q+2)} a_{q-1} \quad (35)$$

Pro dané a_0 z ní lze vypočítat všechna zbývajících a_q . Koeficient a_0 stanovíme na konec tak, aby byla splněna normalizační podmínka (22).

Pro velká q je poměr následujících koeficientů

$$a_q/a_{q-1} \sim 1/q.$$

Protože stejný poměr dává Taylorův rozvoj funkce e^ρ , je možné předpokládat, že by se $f_{kl}(\rho)$, vyjádřená nekonečnou řadou (33), chovala pro velká ρ jako e^ρ . To je však v rozporu s požadavkem, který jsme na ni kladli. Obtíž zmizí, když řada bude konečná (bude polynomelem). K tomu je třeba takové přirozené číslo k , aby čitatel v (35) byl roven nule pro $q=k$; potom budou všechny koeficienty řady, počínaje a_k , rovny nule.

Pro dané l budeme rozlišovat odpovídající hodnoty λ_{kl} právě tímto k (musí být $k=1,2,\dots$, neboť vždy je $a_0 \neq 0$).

Tak dostáváme

$$\lambda_{kl} = \frac{1}{k+1} \quad (36)$$

Pro dané l jsou pak podle (27d) možné pouze tyto hodnoty energie vázaných stavů

$$E_{kl} = -\frac{E_I}{(k+1)^2} \quad (37)$$

Funkce $f_{kl}(\rho)$ je polynomem s nejnižší mocninou ρ^{l+1} a nejvyšší ρ^{k+1} ; jeho koeficienty se vypočtou pomocí formule (35). Snadno dokážete, že

$$a_q = (-1)^q \left(\frac{2}{k+1} \right)^q \cdot \frac{(k-1)!}{(k-q-1)!} \cdot \frac{(2l+1)}{q!(q+2l+1)!} \cdot a_0 \quad (38)$$

$u_{kl}(\rho)$ je potom dána vztahem (30) a a_0 se stanoví z normalizační podmínky (22a) (předtím se ovšem musíme vrátit k proměnné r). Konečným výsledkem jsou radiální funkce $R_{kl}(r)$, které získáme z (19). Tak obdržíme např.

$$R_{k=1,l=0}(r) = 2(a_0)^{-3/2} \exp(-r/a_0) \quad (39a)$$

$$R_{k=2,l=0}(r) = 2(2a_0)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) \exp(-r/2a_0) \quad (39b)$$

$$R_{k=1,l=1}(r) = (2a_0)^{-3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} \exp(-r/2a_0) \quad (39c)$$

Získané výsledky ukazují, že pro vodíkový atom hrají veličiny E_I (ionizační energie), a_0 (Bohrův poloměr) významnou roli, neboť udávají řád velikosti energií a prostorového rozložení hustoty pravděpodobnosti pro vázané stavy elektronu. Přepíšeme je takto:

$$E_I = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu c^2 \quad (40a)$$

$$a_0 = \frac{1}{\alpha} \lambda_c, \quad (40b)$$

kde bezrozměrná veličina

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (41)$$

je tzv. konstanta jemné struktury a veličina λ_c definovaná vztahem

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{\mu c} \quad (42)$$

je velmi blízká ($\mu \approx m_e$) Comptonově vlnové délce pro elektron:

$$\frac{\hbar}{m_e c} \approx 0,386 \text{ pm}$$

Výraz (40b) ukazuje, že a_0 je řádově stokrát větší než λ_c , zatímco z formule (40a) vyplývá, že vazební energie elektronu v atomu H leží mezi $10^{-4} \mu c^2$ až $10^{-5} \mu c^2$, kde μc^2 je prakticky rovno klidové energii elektronu

$$m_e c^2 \approx 0,511 \text{ MeV}.$$

Provedené odhady ospravedlňují užití nerelativistické Schrödingery rovnice pro řešení atomu vodíku. Nicméně, relativistické efekty, byť malé, existují (jsou např. pozorovatelné ve spektrech) a jejich vliv na získané řešení může být započten pomocí poruchového počtu.

2.2) Energiové hladiny s vlnové funkce

Pro dané l existuje nekonečně mnoho možných energiových hladin, které odpovídají $k = 1, 2, 3, \dots$ (srov. (37)). Každá z nich je minimálně $(2l + 1)$ -násobně degenerovaná; tato degenerace je důsledkem sférické symetrie potenciálového pole, které se při řešení promítla do faktu, že radiální rovnice (18), resp. (20), závisí na l , nikoliv však na kvantovém čísle m . V coulombovském poli (24) se navíc ukázala náhodná degenerace: energie (37) závisí pouze na součtu $(k+l)$, takže vlastní hodnoty energie $E_{k,l}$, $E_{k',l'}$, odpovídající různým radiálním rovnicím ($l \neq l'$) jsou stejné, jestliže $k+l = k'+l'$. Položíme-li

$$n = k + l, \quad (43)$$

budou různé energiové stavy indexovány $n = 1, 2, 3, \dots$ a (37) přejde v

$$E_n = -\frac{4}{n^2} E_I \quad (44)$$

Podle (43) je ekvivalentní specifikace vlastních funkcí dvojicemi (k, l) , (n, l) ; ve shodě s běžnou konvencí, budeme dále užívat kvantová čísla n, l . Energie je podle (44) určena číslem n , které se nazývá hlavní kvantové číslo; n také určuje tzv. elektronovou slupku.

Protože platilo, že $k=1, 2, \dots$, může l podle (43) nabývat pro dané n pouze konečného počtu hodnot

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (45)$$

Kvantové číslo l se nazývá vedlejší kvantové číslo a určuje, jak již víme, velikost momentu hybnosti elektronu. Ke každému l ještě přísluší $(2l + 1)$ různých hodnot tzv. magnetického kvantového čísla m ($\equiv m_l$), které určuje průmět momentu hybnosti do zvolené osy.

Souhrnně: stavům s vlnovými funkcemi

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

přísluší vlastní hodnota energie (44), která je pro dané n celkem n^2 -násobně degenerovaná, neboť

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2 \quad (46)$$

Vezmeme-li ještě v úvahu spin elektronu, jehož průmět do zvolené osy se charakterizuje kvantovým číslem $m_s = \pm 1/2$, budou stavy elektronu určeny vlnovými funkcemi (vrátíme se k $m_l = m$)

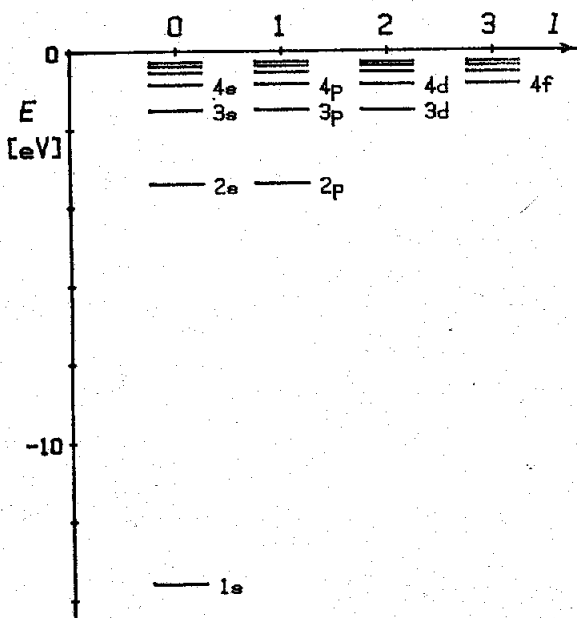
$$\psi_{nlm_l m_s}(r, \theta, \varphi, \sigma)$$

a vlastní hodnoty E_n budou $2n^2$ -násobně degenerované.

Připomeňme si ještě spektroskopické značení stavů s různým l (viz (VIII.20)), které se kombinuje s číselným vyjádřením hlavního kvantového čísla n .

Stav:	1s	2s	2p	3s	3p	3d	...
n	1	2	2	3	3	3	...
l	0	0	1	0	1	2	...

Energiové hladiny pro několik prvních stavů jsou znázorněny v obr.30.



Obr.30

Energiové hladiny pro elektron v atomu vodíku. Ke každému l ($l=0,1,\dots,n-1$) přísluší ještě $(2l+1)$ možných hodnot m_l ($m_l = -l, \dots, 0, \dots, l$). Znázorněny jsou jen hladiny pro $n \leq 7$ (popsány do $n=4$), neboť pro další n by se zobrazující úsečky silně zhušťovaly (pro $n \rightarrow \infty$ jde $E_n \rightarrow 0$).

Vlnové funkce

mají tvar (17) a s příslušnými kvantovými čísly jsou (spin zatím neuvažujeme)

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (47)$$

Sférické funkce $Y_l^m(\theta, \varphi)$ známe již z předchozí kapitoly, takže zbývá určit jen radiální vlnové funkce $R_{nl}(r)$. Postup jsme již ukázali při psaní (39) (tam to bylo pro kvantová čísla k, l); pro elektronové slupky $n=1,2,3$ jsou uvedeny v tab. 6. Grafy těchto funkcí jsou v obr.31.

Obecný výraz pro normalizované radiální vlnové funkce je

$$R_{nl}(r) = - \left\{ \left(\frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} \times e^{-r/na_0} \times \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l \times L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right) \quad (48a)$$

$$\text{kde} \quad L_{n-l-1}^{2l+1}(x) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+1} \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!} \cdot x^k \quad (48b)$$

jsou tzv. přidružené Laguerrovy polynomy [12,13].

Protože funkce $R_{nl}(r)$ jsou vlastními funkcemi hermitovského operátoru \mathcal{H} , jsou ortonormální, takže pro ně platí

$$\int_0^{\infty} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^2 dr = \delta_{nn'} \quad (49)$$

(Protože jsou reálné, je zbytečné vyznačovat komplexní sdružení R_{nl} ; vzpomeňte si, že automaticky ortogonální jsou pouze vlastní funkce příslušející různým vlastním hodnotám; proto je v (49) n a n' , ale nikoliv l a l' !)

Uvedené funkce $R_{nl}(r)$ však netvoří úplný systém (viz odst.IV.1.3), neboť jsou to vlastní funkce pouze pro část spektra operátoru \mathcal{H} (jen pro $E < 0$).

Tabulka 6 Radiální vlnové funkce $R_{nl}(r)$ pro atom vodíku (a_0 je Bohrov poloměr)		
n	l	$R_{nl}(r)$
1	0	$2 a_0^{-3/2} \exp(-r/a_0)$
2	0	$2(2a_0)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp(-r/2a_0)$
	1	$\frac{1}{\sqrt{3}} (2a_0)^{-3/2} \times \frac{r}{a_0} \exp(-r/2a_0)$
3	0	$2(3a_0)^{-3/2} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) \exp(-r/3a_0)$
	1	$\frac{8}{9\sqrt{2}} (3a_0)^{-3/2} \times \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) \exp(-r/3a_0)$
	2	$\frac{4}{27\sqrt{10}} (3a_0)^{-3/2} \times \frac{r^2}{a_0^2} \exp(-r/3a_0)$

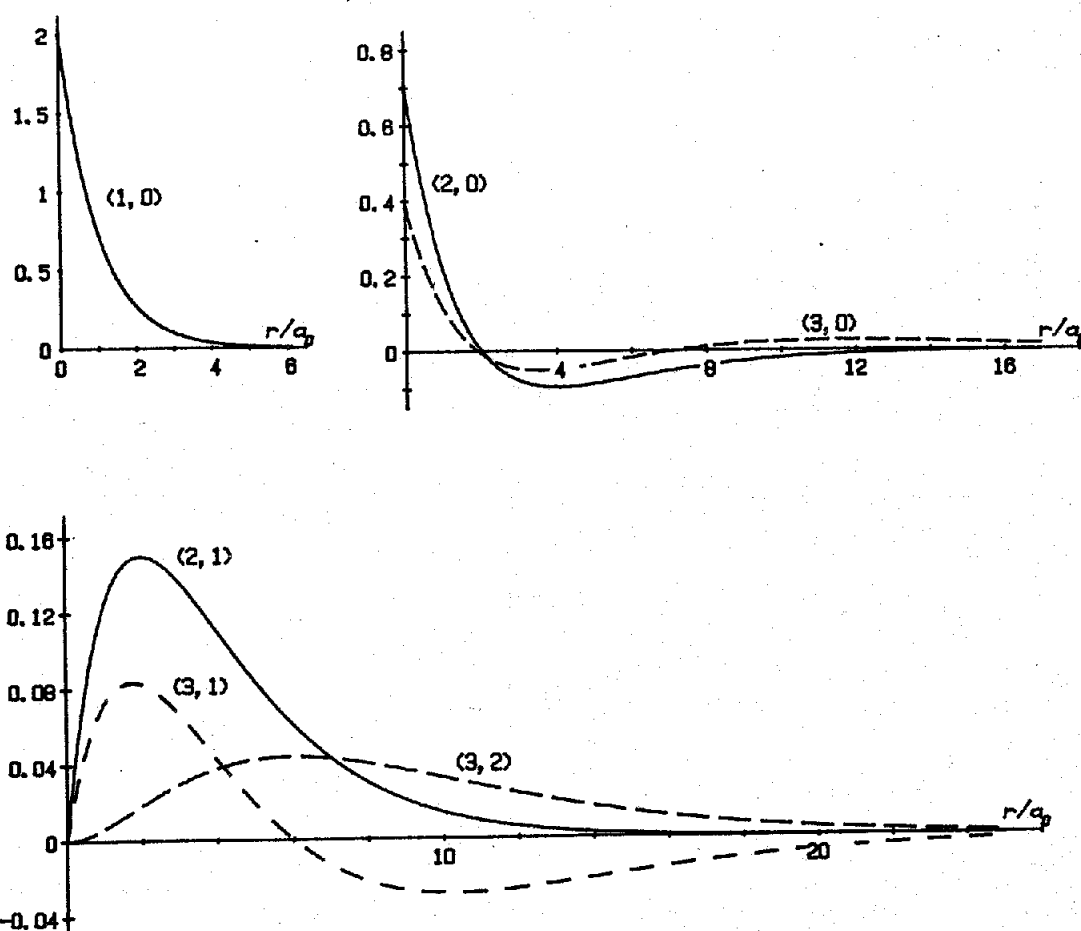
Radiální vlnové funkce $R_{nl}(r)$ se normalizují podle (22), což zde znamená požadavek

$$\int_0^{\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (50)$$

Dojdeme k němu takto: obecná normalizační podmínka žádá, aby

$$\iiint |\psi_{nlm}(x,y,z)|^2 dx dy dz = 1$$

Přejdeme-li ke sférickým souřadnicím, nesmíme zapomenout přetransformovat i element $dx dy dz$ (přejde v $d\tau$ podle (VIII.5)).



Obr.31

Radiální vlnové funkce $R_{nl}(r)$ pro $n=1,2,3$ (v závorkách u křivek jsou uvedeny dvojice (n,l)).

Na ordinátu jsou vynášeny hodnoty $a_0^{3/2} R_{nl}$ (všimněte si, že v grafech jsou na ordinátách různá měřítka).

Pro funkce (47) dostaneme normalizační podmínku

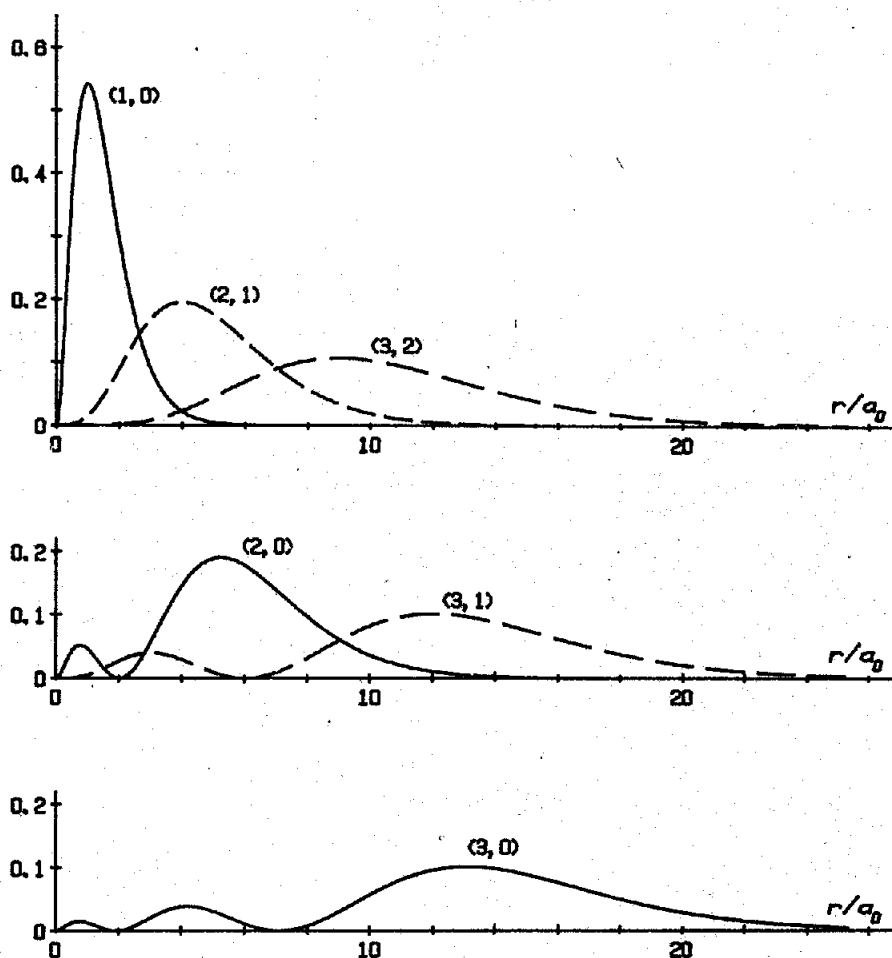
$$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \times \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi = 1 \quad (51)$$

podmínka(50) = 1 podle (VIII.33)

Pravděpodobnost, že elektron ve stavu ψ_{nlm} bude nalezen v infinitesimálním objemu $d\tau$ v okolí bodu se sférickými souřadnicemi r, θ, φ je

$$dP_{nlm}(r, \theta, \varphi) = |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega \quad (52)$$

kde $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$.



Obr.32

Radiální hustoty pravděpodobnosti výskytu $|R_{nl}(r)|^2 r^2$ pro funkce R_{nl} z obr.31. Na ordinátu jsou vynášeny hodnoty $a_0 R_{nl}^2 r^2$.

Provedeme-li integraci přes celý interval θ a φ (přes celý prostorový úhel), dostaneme pravděpodobnost, že elektron bude nalezen ve sférické vrstvě mezi r a $r+dr$; vzhledem k (51) to bude

$$dP_{nlm}(r) = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \quad (53)$$

Jestliže naopak provedeme integraci přes r od 0 do $+\infty$, získáme pravděpodobnost $dP_{nlm}(\theta, \varphi)$, že elektron bude nalezen v prostorovém úhlu $d\Omega$ ve směru určeném úhly θ, φ ; vzhledem k (50) je

$$dP_{nlm}(\theta, \varphi) = |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (54)$$

Tento výraz jsme však už diskutovali v odst.3.3 předchozí kapitoly, kde jsou také uvedeny grafy $|Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$ (připomeňme znovu, že tyto veličiny nezávisí na φ , takže funkce (54) jsou rotačně symetrické kolem osy z).

2.3) Soustavy podobné vodíku

V řešení provedeném pro atom vodíku je podstatný fakt, že jde o soustavu dvou částic (elektron+proton) jejichž vzájemná přitažlivá interakce je nepřímo úměrná čtverci vzdálenosti mezi nimi. Proto řešení provedené pro vodík bude bez problémů aplikovatelné i na jiné soustavy, které mají tuto vlastnost. Všimneme si zde několika z nich s tím, že se zaměříme především na změnu Bohrova poloměru a_0 a ionizační energie E_I . Připomeňme si, že

$$a_0 = \chi_c \frac{1}{\alpha} = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} ; E_I = \frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 = \frac{e^2}{8\pi \epsilon_0 a_0} \quad (55)$$

kde μ byla redukovaná hmotnost systému elektron+proton

$$\mu \equiv \mu(H) = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p} \right) \quad (56)$$

Pro vodík dostáváme

$$a_0(H) = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m} , \quad E_I(H) = 13,606 \text{ eV}$$

Budeme-li mít soustavu tvořenou dvěma částicemi s hmotnostmi m_1, m_2 a s přitažlivou interakční energií

$$V(r) = - \frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (57)$$

kde Z je bezrozměrný parametr, potom vše co je potřebné udělat, je nahradit redukovanou hmotnost výrazem $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ a e^2 nahradit Ze^2 .

a) Deuterium a tritium

V těchto izotopech je proton nahrazen jádrem v němž je kromě protonu ještě jeden, resp. dva, neutrony. Hmotnost deuteriového jádra je přibližně $2m_p$ a tritiového $3m_p$, takže

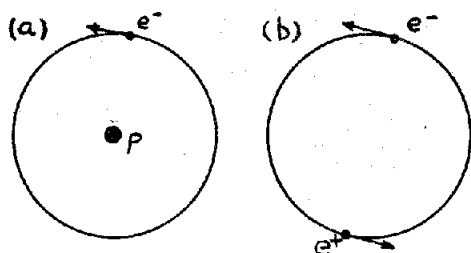
$$\mu(\text{deuterium}) \approx m_e (1 - m_e/2m_p) , \quad \mu(\text{tritium}) \approx m_e (1 - m_e/3m_p)$$

Protože $m_e/m_p \approx 1/1836 \ll 1$, je jasné, že redukované hmotnosti deuteria a tritia jsou velmi blízké $\mu(H)$. Přesto je možné spektroskopicky zjistit malé posuny spektrálních čar: vlnové délky vodíkových čar jsou nepatrně větší než deuteriových a ty pak větší než u odpovídajících čar tritiových.

b) Positronium

je soustava tvořená elektronem e^- a positronem e^+ . Zde se situace výrazně liší od atomu H v tom, že positron (který nahrazuje proton) má stejnou hmotnost jako elektron a nelze tedy předpokládat, že je v klidu (obr.33). Platí

$$\mu(\text{positronium}) = m_e/2 ; a_0(\text{positronium}) \approx 2a_0(H) ; E_I(\text{positronium}) \approx E_I(H)/2$$



Obr.33

Schematické znázornění (a) H a (b) positronia. Jelikož $m_p \gg m_e$, je proton prakticky lokalizován v těžišti a elektron "obíhá" kolem něho ve vzdálenosti $a_0(H)$. U positronia obě částice (e^- , e^+) "obíhají" kolem těžiště s tím, že $a_0(\text{positronia}) = 2a_0(H)$

Pro daný stav positronia je tedy střední vzdálenost elektronu od positronu rovna dvojnásobku střední vzdálenosti mezi protonem a elektronem v atomu H. Vzdálenosti energiových hladin jsou poloviční proti H, takže vlnové délky pro čáry v positroniovém spektru jsou dvojnásobkem vlnových délek odpovídajících čar ve spektru H. Positronium je ovšem útvar nestabilní. V základním stavu lze přijde elektron do kontaktu s positronem, takže dochází k anihilaci spojené s emisí fotonů.

c) Ionty podobné vodíku

jsou např.: He^+ , Li^{++} , Be^{+++} , ...

Je-li hmotnost jádra M a jeho náboj $+Ze$, potom

$$a_0(Z) \approx a_0(H)/Z \quad a \quad E_I(Z) \approx Z^2 E_I(H) \quad (58)$$

Protože $M \gg m_e$, můžeme zanedbat rozdíl mezi redukovanými hmotnostmi $\mu(H)$, $\mu(Z)$. Ionty podobné vodíku jsou vždy menší než atom H (což je pochopitelné, neboť elektron je silněji přitahován k jádru) a jejich ionizační energie rychle (kvadraticky) roste se Z. Vlnové funkce pro jediný elektron pohybující se v poli jádra s nábojem $+Ze$ dostaneme pouhou záměnou a_0 v (48) za a_0/Z ($a_0 \equiv a_0(H)$).

d) Mezonové atomy

Jsou tvořeny atomovým jádrem v jehož poli se místo elektronu nachází μ^- nebo π^- mezon. Doba života takových systémů je omezena dobou života mezonů, nicméně je možné je na urychlovačích vytvořit a studovat jejich vlastnosti.

Uvažujme např. nejjednodušší mezoatom tvořený μ^- mezonem a protonem (jádre H). Náboj mezonu je $-e$, jeho hmotnost $m_\mu \approx 207m_e$, takže

$$a_0(\mu^-, p^+) \approx \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_\mu e^2} \approx \frac{a_0(H)}{200} \quad (59a)$$

a ionizační energie

$$E_I(\mu^-, p^+) \approx \frac{m_\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \approx 200 E_I(H) \quad (59b)$$

V takovém mezoatomu se μ^- mezon nachází mnohem blíže jádru než elektron. Existence jaderné interakce mezi mezonem a jádrem vede ke změně energiových hladin (44), které byly získány pro čistě coulombovské elektrostatické pole. Experimentální studium těchto změn dovoluje dělat určité závěry právě o charakteru jaderných sil, působících mezi jádrem a mezonem. Ještě výraznější bude tento jev u mezoatomů s jádrem s velkým Z .

3. Atomy s více elektrony

Řešení atomu vodíku se výrazně zjednodušilo díky dvěma skutečnostem: i) v atomu H je pouze jeden elektron, takže nebylo třeba brát do úvahy Pauliho princip; ii) přechodem k souřadné soustavě spojené s těžištěm se úloha redukuje na problém jedné částice. U atomů s více elektrony tato zjednodušení mizí. Problém mnohaelektronových atomů je možné řešit pouze aproximativně, a to i v případě nejjednoduššího z nich - atomu helia. V tomto odstavci si, spíše jen kvalitativně, všimneme hlavních problémů a cest k jejich řešení. Navážeme přitom na poznatky, které jsme o souborech stejných částic získali v kap. VI.

3.1) Jednoelektronová aproximace a přiblížení centrálního pole

Uvažujme atom se Z elektrony. Protože hmotnost jádra je mnohem větší než elektronu, splývá těžiště atomu prakticky s jádrem, které proto budeme pokládat za nepohyblivé v počátku souřadnic. Označíme-li polohové vektory elektronů $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z$ a zanedbáme-li relativistické korekce (speciálně pak členy závislé na spinu), je hamiltonián souboru elektronů v poli jádra

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^Z \frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (60)$$

První člen reprezentuje celkovou kinetickou energii souboru Z elektronů. Druhá suma vyjadřuje elektrostatickou interakční energii elektronů s jádrem, které má náboj $+Ze$. Poslední člen je coulombovská elektro-elektronová interakční energie.

Přesné (analytické) řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\mathcal{H} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Z) = E \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Z) \quad (61)$$

nelze najít ani pro atom He, tj. pro $Z=2$. Důvodem je právě třetí, elektron-elektronový, člen v (60). Kdyby v hamiltoniánu nebyl, šlo by o soubor Z nezávislých elektronů a řešení by bylo snadné: energie souboru by byla prostě součtem energií jednotlivých elektronů v poli vytvořeném nábojem $+Ze$ a výsledná vlnová funkce $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Z)$ by se zapsala jako Slaterův determinant z vlnových funkcí elektronů (viz odst. VI.2).