

# OBSAH

<b>Část třetí: Kvantová mechanika atomových soustav</b> .....	9
<b>8. Přibližné řešení stacionární Schrödingerovy rovnice</b> .....	11
8.1 Úvod .....	11
8.2.1 Variační metoda .....	12
8.2.2 Poruchová metoda – základní rozvaha .....	15
8.2.3 Rozdělovací metoda .....	17
8.2.4 Vztah rozdělovací metody a Ritzovy metody .....	19
8.2.5 Vztah rozdělovací metody a poruchového počtu .....	21
8.3.1 Nedegenerovaná hladina .....	24
8.3.2 Hellmannův-Feynmanův teorém .....	29
8.3.3 Degenerovaná a kvazidegenerovaná hladina. Starkův jev. Jemná struktura hladin atomu vodíku .....	32
8.4 Konvergence poruchové řady. Poruchový počet pro rezolventu .....	39
8.5 Neohrazené poruchy a asymptotický charakter konvergence .....	45
<b>9. Technika studia nestacionárních systémů</b> .....	53
9.1 Dvuhladinový systém v časově proměnném elektrickém poli .....	54
9.2 Diracův obraz .....	59
9.3 Časový poruchový počet .....	62
9.4 Přechody pod vlivem konstantní poruchy. Fermiho Zlaté pravidlo .....	65
9.5 Harmonická porucha v I. řádu. Tvar linie .....	68
9.6 Zapnutí konstantní poruchy. Vztah časového a nečasového poruchového počtu .....	71
9.7 Pravděpodobnost přechodu podle Wignera a Weisskopfa .....	76
9.7.1 Úvod .....	76
9.7.2 Řešení Wignerova-Weisskopfova modelu .....	78
9.7.3 Fyzikální význam řešení Wignera a Weisskopfa .....	82
9.7.4 Greenova funkce, resolventa, partitioning .....	84
9.8 Relace neurčitosti energie-čas .....	89
9.8.1 Úvod .....	89
9.8.2 Relace energie-čas .....	90
<b>10. Mnohačasticový problém I: Atomy a molekuly</b> .....	93
10.1 Úvod .....	93
10.2 Elektronová struktura atomů I .....	95
10.2.1 Základní formulace .....	95
10.2.2 Atom helia .....	99
10.2.3 Atom helia – základní stav .....	104
10.2.4 Atom helia – excitované stavy .....	111
10.3 Hartreeho-Fockova teorie .....	122

10.3.1	Jednoelektronová aproximace	122
10.3.2	Hartreeho-Fockovy rovnice	124
10.3.3	Koopmansův teorém	129
10.4	Elektronová struktura atomů II.	132
10.4.1	Slupkový model atomů, LS vazba	132
10.4.2	LS-vazba, JJ-vazba, intermediální vazba	138
10.5	Atom v magnetickém poli	142
10.6	Molekuly: Bornova-Oppenheimerova aproximace	146
10.7	Dvouatomové molekuly	154
10.7.1	Molekula iontu $H_2^+$	156
10.7.2	Molekula vodíku – základní stav	160
10.7.3	Molekula vodíku – symetrie a excitované stavy	165
10.7.4	Molekuly včera a dnes	169
10.7.5	Rotace a kmity dvouatomové molekuly	176
<b>11</b>	<b>Mnohočásticový problém II: rozlehlé systémy</b>	<b>182</b>
11.1	Redukce výrazu pro celkovou energii	183
11.2	Jellium (homogenní elektronový plyn)	189
11.2.1	Definice	189
11.2.2	Hartreeho-Fockovo přiblížení pro jellium	191
11.2.3	Jellium za HFA	198
11.3	Funkcionál hustoty	202
11.3.1	Teoretické základy metody funkcionálu hustoty	203
11.3.2	Užití metody funkcionálu hustoty: aproximace $E_{xc}[n]$	212
11.3.3	Vykročení za hranice DFT-LDA	219
11.3.4	Adiabatické propojení. KS výměnně korelační díra	222
11.4	Systematické rozvoje v teorii mnoha částic	224
11.4.1	Redukované matice hustoty. Rozvoj BBGKY	225
11.4.2	Metoda Greenových funkcí	233
<b>12</b>	<b>Teorie rozptylu</b>	<b>258</b>
12.1	Úvod	258
12.2	Diferenciální účinný průřez	260
12.3	Amplituda rozptylu	262
12.4	Bornova řada	267
12.5	Rozptyl na sféricky symetrickém potenciálu	272
11.5.1	Amplituda rozptylu	272
11.5.2	Fázový posuv	277
11.5.3	$Elm$ – reprezentace	284
11.5.4	Analytické vlastnosti S-matice	285
12.6	Srážky dvou částic	290

<b>13. Interakce s elektromagnetickým polem</b> .....	295
13.1 Úvod .....	295
13.2 Interakce atomu se zářením .....	297
13.2.1 Kalibrační invariance .....	297
13.2.2 Absorpce a emise .....	300
13.2.3 Dipólové a kvadrupolové přechody. Výběrová pravidla .....	306
13.2.4 Spektra dvouatomových molekul .....	314
13.3 Optické materiálové konstanty .....	318
13.3.1 Lorenzova teorie .....	319
13.3.2 Zobecněná susceptibilita. Kubova formule .....	321
13.4 Kvantování elektromagnetického pole .....	328
13.4.1 Jeansova věta .....	328
13.4.2 Fotony .....	330
13.4.3 Chaotické a koherentní stavy .....	332
13.4.4 Jednofotonové procesy .....	335
13.4.5 Dvoufotonové procesy .....	340
13.5 Dvouhladinový atom .....	348
13.5.1 Model .....	348
13.5.2 Spontánní emise .....	350
13.5.3 Absorpce záření .....	355
13.5.4 Rezonanční rozptyl .....	358
<b>Dodatek E: Rezolventa</b> .....	362
<b>Dodatek F: Funkcionální derivace</b> .....	365
<b>Literatura</b> .....	368
<b>Rejstřík</b> .....	369