

# OBSAH

Předmluva .....	9
<b>Téma I – Obecný formalismus kvantové mechaniky. Braketová symbolika. Teorie reprezentací. Oscilátor v energetické reprezentaci. Čisté a smíšené stavy .....</b>	<b>11</b>
I.1: Algebra 1 .....	13
I.2: Algebra 2 .....	14
I.3: Algebra 3 .....	16
I.4: Vlastnosti komutátorů .....	18
I.5 – T: Glauberova identita .....	19
I.6: $x$ - a $p$ -reprezentace .....	21
I.7: Elektron v konstantním elektrickém poli .....	23
I.8: Vlastní vektory operátoru souřadnice v energetické reprezentaci lineárního harmonického oscilátoru .....	25
I.9: Kvadratické odchylky souřadnice a impulzu pro lineární harmonický oscilátor .....	28
I.10 – T: Operátor posunutí .....	30
I.11: Nabíý lineární harmonický oscilátor v elektrickém poli 1 .....	32
I.12: Nabíý lineární harmonický oscilátor v elektrickém poli 2 .....	34
I.13 – T: Nabíý lineární harmonický oscilátor v elektrickém poli 3 .....	35
I.14: Tepelné kmity atomů železa v $E$ -reprezentaci .....	37
I.15 – T: Tepelné kmity atomů železa v $x$ -reprezentaci .....	40
I.16: Operátory kanonicky sdružených proměnných v křivočarých souřadnicích 1 .....	44
I.17: Operátory kanonicky sdružených proměnných v křivočarých souřadnicích 2 .....	45
I.18: Elektronový obal po beta rozpadu tritia .....	47
I.19: Vlastnosti smíšených stavů .....	49
I.20 – T: Koherentní stav lineárního harmonického oscilátoru .....	52
I.21: Měření vlivu gravitačního pole interferencí neutronů .....	58
<b>Téma II – Teorie momentu hybnosti. Spin. Skládání momentů hybnosti .....</b>	<b>61</b>
II.1: Vlastnosti stavu $ lm\rangle$ s ostrými hodnotami $L^2$ a $L_z$ .....	63
II.2: Vlastnosti stavu, který je lineární kombinací vlastních stavů $L^2$ a $L_z$ .....	64
II.3: Rozlišení čistého a smíšeného spinového stavu Sternovým–Gerlachovým magnetem .....	67

II.4: Magnetický moment elektronu v atomu vodíku .....	69
II.5: Polární diagram kulové funkce $Y_{10}$ .....	71
II.6: S-symetrické vázané stavy trojrozměrné sféricky symetrické $\delta$ -jámy .....	72
II.7: Magnetická rezonance spinu na rozpadající se hladině .....	75
II.8: Vlastní stavy operátoru průmětu spinu do obecného směru .....	77
II.9: Larmorova precese neutronů v konstantním magnetickém poli .....	78
II.10: Odraz neutronů od feromagnetického materiálu .....	81
II.11: Celkový spin dvou fermionů se spinem $1/2$ .....	84
II.12: Úhel mezi spiny v singletním a tripletním stavu dvou spinů $s = 1/2$ .....	85
II.13: Vlastní stavy celkového momentu hybnosti .....	87
II.14 – T: Dvourozměrný lineární harmonický oscilátor .....	88
II.15 – T: Algebraické řešení spektra atomu vodíku .....	94
II.16: Einsteinův–Podolskeho–Rosenův paradox .....	103
II.17: Teorie skrytých parametrů a Bellova nerovnost .....	107
 <b>Téma III – Metody přibližného řešení stacionární Schrödingerovy rovnice.</b>	
Energetické hladiny atomů .....	111
III.1: Lineární harmonický oscilátor v elektrickém poli .....	113
III.2: Relativistické korekce pro atom vodíku .....	114
III.3: Energie základního stavu atomu helia .....	119
III.4: Působení poruchy na dvouhladinový systém .....	123
III.5: Vliv poruchy na první hladiny dvourozměrného lineárního harmonického oscilátoru .....	125
III.6: Atom vodíku v elektrickém poli .....	129
III.7: Vazebná energie dvou atomů vodíku, van der Waalsova vazba .....	131
III.8: Hartreeho a Hartreeho–Fockovy rovnice pro atom helia a lithia .....	136
III.9: Hustota elektronů v systému $N$ elektronů .....	138
III.10: Termy konfigurací ekvivalentních elektronů $(np)^3$ , $(nd)^2$ a $(np)^4$ .....	139
III.11 – T: Hyperjemné rozštěpení základního stavu atomu vodíku .....	144
 <b>Téma IV – Úvod do kvantové chemie, molekuly</b> .....	
IV.1: Rotační spektrum molekuly HCl .....	151
IV.2: Disociační energie izotopů molekuly vodíku: $H_2$ , HD a $D_2$ .....	153
IV.3: Délka vazby a úhel mezi vazbami v molekule $NH_3$ .....	155
IV.4: Hellmanův–Feynmanův teorém .....	159
IV.5: Viriálový teorém pro molekuly .....	160
IV.6: $sp^2$ -hybrid a jeho použití k popisu molekuly $H_2O$ .....	164
 <b>Téma V – Rozlehlé systémy</b> .....	
V.1: Hustota stavů .....	169
V.2: Atomární řetízek .....	171
V.3: Atomární řetízek s povrchem .....	176
V.4: Měrné teplo elektronů v kovech v Sommerfeldově modelu .....	182
V.5: Magnetický moment elektronů v Sommerfeldově modelu .....	185

V.6: Elektronové žele v Hartreeho aproximaci .....	187
V.7 – T: Hartreeho–Fockovy rovnice pro paramagnetický stav žele .....	190
V.8 – T: Lokální aproximace výměnného potenciálu .....	199
<b>Téma VI – Pohyb v elektrickém a magnetickém poli .....</b>	<b>201</b>
VI.1: Komutátory v magnetickém poli .....	202
VI.2: Ehrenfestovy relace v elektrickém a magnetickém poli .....	203
VI.3: Diamagnetická susceptibilita heliového plynu .....	204
VI.4: Landého g-faktor .....	206
VI.5: Magnetizace $N$ spinů v konstantním magnetickém poli .....	207
VI.6: Volný elektron v konstantním magnetickém poli 1 .....	209
VI.7: Volný elektron v konstantním magnetickém poli 2 .....	213
VI.8: Volný elektron v konstantním magnetickém poli 3 .....	216
VI.9: Curieův zákon .....	219
VI.10: Hallův jev 1 .....	222
VI.11: Hallův jev 2 .....	226
<b>Téma VII – Teorie rozptylu .....</b>	<b>229</b>
VII.1: Optický teorém .....	231
VII.2: Diferenciální účinný průřez pro rozptyl na coulombickém potenciálu v Bornově aproximaci .....	232
VII.3: Friedelovo sumační pravidlo .....	234
VII.4: S-rozptyl na sférické pravouhlé jámě a vázaný stav jámy jako pól S-matice .....	238
VII.5: Rozptyl na trojrozměrné sféricky symetrické $\delta$ -jámě .....	242
VII.6: Rozptyl protonu na atomu vodíku .....	246
<b>Téma VIII – Přibližné řešení nestacionárních úloh .....</b>	<b>250</b>
VIII.1: Kvantové rázy .....	252
VIII.2: Vodíkový atom v časově proměnném elektrickém poli .....	258
VIII.3: Lineární harmonický oscilátor v časově proměnném silovém poli .....	261
VIII.4: Čpavkový maser .....	263
VIII.5: Částice v potenciálové jámě s časově proměnnou délkou .....	269
VIII.6: Lineární harmonický oscilátor s časově závislou tuhostí .....	272
<b>Téma IX – Druhé kvantování. Elektromagnetické pole ve vakuu .....</b>	<b>275</b>
IX.1: Operátor hustoty částic .....	278
IX.2: Vlastní stav operátoru hustoty částic 1 .....	280
IX.3: Vlastní stav operátoru hustoty částic 2 .....	281
IX.4: Energie základního stavu v Hartreeho–Fockově aproximaci .....	282
IX.5: Koopmansův teorém .....	286
IX.6: Intenzita elektrického pole v případě jednomódového záření .....	289
IX.7: Koherentní stav elektromagnetického pole .....	291
IX.8: Mnohomódový koherentní stav elektromagnetického pole .....	294
IX.9: Koherentní stav v souřadnicové reprezentaci .....	297
IX.10 – T: Relace neurčitosti v koherentním stavu elektromagnetického pole .....	299

IX.11 – T: Komutátory operátorů polních veličin.....	301
IX.12 – T: Casimirova síla.....	306
<b>Téma X – Interakce elektromagnetického pole s atomem.....</b>	<b>313</b>
X.1 – T: Interakce dvouhladinového atomu s elektromagnetickým polem.....	315
X.2 – T: Rozpad excitovaného stavu dvouhladinového atomu.....	318
X.3: Pravděpodobnost spontánní emise fotonu.....	324
X.4: Doba života 2p elektronu v atomu vodíku a $\mu^-$ -atomu.....	326
X.5 – T: Doba života tripletního stavu vzniklého hyperjemným rozštěpením základního stavu atomu vodíku.....	329
<b>Dodatek – Atomové jednotky.....</b>	<b>333</b>
<b>Literatura.....</b>	<b>336</b>
<b>Rejstřík.....</b>	<b>337</b>