

Předmluva . . . . .	9
<b>Část I. Lineární algebra v kvantové chemii . . . . .</b>	<b>11</b>
1. Matice . . . . .	11
1.1. Definice matice a základní operace s maticemi . . . . .	11
1.2. Inverzní matice . . . . .	12
1.3. Matice se speciálními symetrickými vlastnostmi . . . . .	13
1.4. Matice rozdělené na pole. Direktní součin matic . . . . .	16
2. Unitární prostory . . . . .	18
2.1. Lineární a unitární prostor . . . . .	18
2.2. Lineární nezávislost vektorů. Báze prostoru . . . . .	19
2.3. Transformace souřadnic při změně báze . . . . .	20
2.4. Ortonormální báze . . . . .	21
2.5. Izomorfismus lineárních prostorů. Podprostory . . . . .	22
2.6. Direktní součin prostorů . . . . .	23
3. Lineární operátory v konečněrozměrném unitárním prostoru . . . . .	24
3.1. Základní pojmy a definice . . . . .	24
3.2. Maticové reprezentace operátorů . . . . .	26
3.3. Charakteristický problém . . . . .	27
3.4. Adjungované, unitární a normální operátory . . . . .	31
3.5. Vlastnosti komutujících operátorů. Hermitovské operátory . . . . .	34
3.6. Nilpotentní operátory . . . . .	36
3.7. Operátorové nerovnosti a identity . . . . .	39
3.8. Projekční operátory . . . . .	40
3.9. Projekční a posuvné operátory jako fundamentální jednotky v operátorovém prostoru . . . . .	41
3.10. Spektrální rozvoj operátoru. Vlastní projektor . . . . .	44
3.11. Součinnový tvar vlastních projektorů. Komponentní analýza . . . . .	45
3.12. Rezolventa . . . . .	47
3.13. Direktní součin operátorů . . . . .	49
3.14. Hilbertův prostor . . . . .	49
3.15. Lineární operátory v Hilbertově prostoru . . . . .	51
3.16. Lineární funkcionály . . . . .	52
3.17. Diracova symbolika . . . . .	53
Literatura . . . . .	57

<b>Část II. Teorie grup</b> . . . . .	58
4. Elementární teorie konečných grup . . . . .	59
4.1. Definice grupy. Příklady konečných grup . . . . .	59
4.2. Izomorfismus a homomorfismus grup . . . . .	62
4.3. Podgrupy. Třídy podle podgrupy . . . . .	63
4.4. Třídy konjugovaných prvků . . . . .	64
4.5. Invariantní podgrupa a faktor-grupa. Direktní součin grup . . . . .	66
5. Reprezentace konečných grup . . . . .	68
5.1. Definice reprezentace grupy . . . . .	68
5.2. Unitární reprezentace. Charakter reprezentace . . . . .	69
5.3. Regulární reprezentace . . . . .	70
5.4. Reducibilní a ireducibilní reprezentace . . . . .	71
5.5. Relace ortogonality . . . . .	74
5.6. Rozklad reducibilní reprezentace . . . . .	79
5.7. Počet ireducibilních reprezentací grupy . . . . .	80
5.8. Výpočet charakterů ireducibilních reprezentací . . . . .	81
5.9. Direktní součin reprezentací. Reprezentace direktního součinu grup . . . . .	83
5.10. Konstrukce báze ireducibilní reprezentace . . . . .	85
5.11. Symetrické vlastnosti maticových elementů . . . . .	87
5.12. Reprezentace symetrického a antisymetrického direktního součinu . . . . .	89
6. Symetrická grupa . . . . .	90
6.1. Cyklická struktura permutací . . . . .	90
6.2. Třídy symetrické grupy . . . . .	92
6.3. Youngovy diagramy. Ireducibilní reprezentace grupy $S_N$ . . . . .	93
6.4. Symetrizační a antisymetrizační operátory . . . . .	95
7. Bodové grupy . . . . .	96
7.1. Prvky a operace symetrie . . . . .	97
7.2. Maticová reprezentace operací symetrie bodových grup . . . . .	98
7.3. Stručný přehled důležitějších bodových grup . . . . .	100
7.4. Ireducibilní reprezentace bodových grup . . . . .	101
Literatura . . . . .	101
<b>Část III. Vybrané kapitoly kvantové mechaniky</b> . . . . .	103
8. Formalismus kvantové mechaniky . . . . .	103
8.1. Axiomatika kvantové mechaniky . . . . .	103
8.2. Systémy stejných částic. Symetrizační postulát . . . . .	109
8.3. Stav systému a Diracova symbolika . . . . .	112
8.4. Heisenbergovy relace neurčitosti . . . . .	113
8.5. Lineární harmonický oscilátor. Kreační a anihilační operátory . . . . .	115
9. Impulsmoment . . . . .	117
9.1. Centrální síly a orbitální impulsmoment . . . . .	117
9.2. Spektrum operátorů impulsmomentu . . . . .	119
9.3. Vlastní funkce orbitálního impulsmomentu . . . . .	122
9.4. Invariantní podprostory operátorů $J_x, J_y, J_z$ . . . . .	125
9.5. Skládání dvou impulsmomentů . . . . .	126
9.6. Impulsmoment a kreační a anihilační operátory . . . . .	128

10. Spin elektronu . . . . .	130
10.1. Spinový postulát . . . . .	130
10.2. Spinové funkce a operátory . . . . .	131
10.3. Spin víceelektronového systému. Diracova identita . . . . .	133
10.4. Konstrukce $N$ -elektronových spinových vlastních funkcí . . . . .	135
10.4.1. Genealogická metoda konstrukce spinových funkcí . . . . .	135
10.4.2. Analytická (projekční) metoda . . . . .	137
10.4.3. Grupové teoretická metoda . . . . .	141
10.4.4. Serberovy spinové funkce. Diagonalizační metoda . . . . .	143
11. Kvantová dynamika a symetrie . . . . .	146
11.1. Heisenbergova pohybová rovnice . . . . .	146
11.2. Ehrenfestovy rovnice . . . . .	147
11.3. Konstanty pohybu . . . . .	149
11.4. Transformace souřadnic a stavových vektorů . . . . .	151
11.5. Invariance hamiltoniánu vůči transformacím souřadnic . . . . .	154
11.6. Symetrie a zákony zachování . . . . .	155
11.7. Grupa symetrie hamiltoniánu . . . . .	157
11.8. Inverze času . . . . .	159
11.9. Symetrické vlastnosti vlastních funkcí hamiltoniánu . . . . .	163
12. Přibližné metody řešení Schrödingerovy rovnice . . . . .	166
12.1. Variační metoda . . . . .	167
12.2. Separační teorém. Rozdělovací technika . . . . .	171
12.3. Poruchová metoda . . . . .	174
12.4. Rayleighova-Schrödingerova poruchová teorie . . . . .	176
12.5. Adiabatická a Bornova-Oppenheimerova aproximace . . . . .	180
12.6. Viriální teorém . . . . .	184
12.7. Hellmannova-Feynmanova věta . . . . .	187
13. Mnohaelektronové vlnové funkce a matice hustoty . . . . .	191
13.1. Obecný tvar $N$ -elektronové vlnové funkce . . . . .	192
13.2. Konfigurační interakce. Slaterova-Condonova pravidla . . . . .	194
13.3. Redukované matice hustoty . . . . .	197
13.4. Orbitální reprezentace redukovaných matic hustoty . . . . .	200
13.5. Bezspinové matice hustoty . . . . .	202
14. Model nezávislých částic . . . . .	203
14.1. Vlnová funkce v modelu nezávislých částic . . . . .	204
14.2. Hartreeho-Fockovy rovnice. SCF metoda . . . . .	206
14.3. Brillouinova věta . . . . .	210
14.4. Konfigurace uzavřených slupek . . . . .	212
14.5. Rozvojové metody . . . . .	215
14.6. Konstanty pohybu v Hartreeho-Fockově metodě . . . . .	217
14.7. Korelační problém . . . . .	220
14.8. Pseudopotenciály . . . . .	222
15. Druhé kvantování . . . . .	225
15.1. Elektronové kreační a anihilační operátory . . . . .	225
15.2. Antikomutační relace . . . . .	227
15.3. Bezčasová Wickova věta . . . . .	228
15.4. Vyjádření operátorů ve druhém kvantování . . . . .	232

15.5. Děročásticový formalismus . . . . .	233
15.6. Operátory ve tvaru normálního součinu . . . . .	236
<b>Dodatek 1. Diracova delta funkce . . . . .</b>	<b>238</b>
Literatura . . . . .	239
Rejstřík . . . . .	242