

## VII. Harmonický oscilátor

### 1. Úvod

- 1.1. Harmonický oscilátor v klasické mechanice
- 1.2. Kvantověmechanický hamiltonián

### 2. Schrödingerova rovnice pro harmonický oscilátor

- 2.1. Řešení v souřadnicové reprezentaci
- 2.2. Algebraické řešení

### 3. Soubor nezávislých harmonických oscilátorů

- 3.1. Hamiltonián, jeho vlastní vektory a vlastní hodnoty
- 3.2. Kvazičásticové pojetí

### 4. Harmonický oscilátor v termodynamické rovnováze

### 5. Kmity molekul

- 5.1. Kmity jader dvouatomové molekuly
  - 5.1.1. Obecná formulace. Adiabatická aproximace
  - 5.1.2. Problém dvou těles. Vibrační a rotační pohyb
  - 5.1.3. Morseho potenciál. Harmonická aproximace
- 5.2. Torzní kmity
- 5.3. Poznámka o kmitech víceatomových molekul

## VIII. Moment hybnosti

### 1. Základní vztahy

### 2. Vlastní funkce a vlastní hodnoty operátorů $L_z$ , $L^2$

- 2.1. Řešení
- 2.2. Sférické funkce
- 2.3. Prostorové kvantování

### 3. Tuhý rotátor

- 3.1. Řešení
- 3.2. Rotační spektra dvouatomových molekul
- 3.3. Hustota pravděpodobnosti

### 4. Skládání momentů hybnosti

- 4.1. Dva orbitální momenty hybnosti
- 4.2. Orbitální a spinový moment

## IX. Částice ve sféricky symetrickém poli

### 1. Obecné charakteristiky řešení

- 1.1. Zopakování poznatků z klasické mechaniky
- 1.2. Kvantověmechanická formulace

### 2. Atom vodíku

- 2.1. Řešení rovnice pro radiální část vlnové funkce
- 2.2. Energiové hladiny a vlnové funkce
- 2.3. Soustavy podobné vodíku

### 3. Atomy s více elektrony

- 3.1. Jednoelektronová aproximace a přiblížení centrálního pole
- 3.2. Energiové hladiny a elektronové konfigurace atomů

### 4. Hybridní orbitaly

- 4.1. Orbitaly vyjádřené reálnými vlnovými funkcemi
- 4.2.  $sp$  hybridizace
- 4.3.  $sp^2$  hybridizace
- 4.4.  $sp^3$  hybridizace

## X. Dvě základní přibližné metody řešení Schrödingerovy stacionární rovnice

### 1. Poruchový počet pro stacionární úlohy

- 1.1. Základní formule
- 1.2. Postup při výpočtu korekcí k degenerovaným hladinám
- 1.3. Poznámka o téměř degenerovaných hladinách
- 1.4. Příklady použití poruchového počtu
  - 1.4.1. Anharmonický lineární oscilátor
  - 1.4.2. Atom vodíku v homogenním elektrickém poli. Starkův jev

### 2. Variační metoda

- 2.1. Princip metody
- 2.2. Příklad: základní stav atomu He a iontů podobných He
- 2.3. Lineární kombinace funkcí jako zkusmá funkce
- 2.4. Molekulární iont  $H_2^+$ 
  - 2.4.1. Řešení
  - 2.4.2. Překryvový, coulombovský a rezonanční integrál
  - 2.4.3. Vazební a antivazební stavy

## XI. Poruchy závislé na čase. Přechody

1. Formulace úlohy
2. Přibližné řešení
3. Dva významné speciální případy: periodická a konstantní porucha
  - 3.1. Aplikace obecných formulí
  - 3.2. Přechody mezi dvěma diskrétními stavy
  - 3.3. Přechod do kontinua stavů
  - 3.4. Fermiho zlaté pravidlo

## XII. Interakce atomu s elektromagnetickým polem

1. Interakční hamiltonián
  - 1.1. Rovinná vlna: pole a potenciály
  - 1.2. Interakční hamiltonián pro slabá pole
  - 1.3. Dipólová aproximace
  - 1.4. Výběrová pravidla v dipólové aproximaci
  - 1.5. Členy vyšších řádů v interakčním hamiltoniánu
2. Nerezonanční excitace atomu
  - 2.1. Klasický model
  - 2.2. Kvantově mechanické řešení
  - 2.3. Síly oscilátorů. Diskuze
3. Rezonanční excitace

## Dodatky

- F. Fundamentální konstanty
- G. Tabulky Clebschových—Gordanových koeficientů pro skládání orbitálního momentu hybnosti a spinu elektronu
- H. Některé základní vztahy z teorie elektromagnetického pole
- I. Funkce operátorů

## Literatura