
Table des matières

1. La quantification de grandeurs physiques	1
1.1 Quanta de lumière	1
1.2 L'effet photoélectrique	1
1.3 L'effet Compton	3
1.4 Le principe de combinaison de Ritz	4
1.5 L'expérience de Franck–Hertz	5
1.6 L'expérience de Stern et Gerlach	5
1.7 Notes biographiques	6
2. Les lois du rayonnement	11
2.1 Aperçu du rayonnement des corps	11
2.2 Quel est le rayonnement dans une cavité?	12
2.3 La loi de rayonnement de Rayleigh–Jeans :	
Les modes propres électromagnétiques d'une cavité	16
2.4 Loi de Planck	18
2.5 Notes biographiques	29
3. Aspects ondulatoires de la matière	31
3.1 Ondes de de Broglie	31
3.2 Diffraction des ondes de matière	36
3.3 L'interprétation statistique des ondes de matière	40
3.4 Valeurs moyennes en mécanique quantique	46
3.5 Trois opérateurs de la mécanique quantique	49
3.6 Le principe de superposition en mécanique quantique	51
3.7 Le principe d'incertitude de Heisenberg	54
3.8 Notes biographiques	68
4. Bases mathématiques de la mécanique quantique	71
4.1 Propriétés des opérateurs	71
4.2 Combinaison de deux opérateurs	72
4.3 Notations de Dirac : Bra et Ket	73
4.4 Valeurs propres et fonctions propres	74
4.5 Mesure simultanée d'observables différentes	81
4.6 Opérateurs position et quantité de mouvement	83
4.7 Relations d'incertitude de Heisenberg pour des observables quelconques	84

4.8	Opérateur moment cinétique	86
4.9	Énergie cinétique	90
4.10	Énergie totale	90
4.11	Notes biographiques	108
5.	Complément mathématique	111
5.1	Différentielles propres et la normalisation des fonctions propres pour des spectres continus	111
5.2	Développement en fonctions propres	114
6.	L'équation de Schrödinger	123
6.1	Conservation du nombre de particules en mécanique quantique	150
6.2	États stationnaires	152
6.3	Propriétés des états stationnaires	153
6.4	Notes biographiques	160
7.	L'oscillateur harmonique	163
7.1	La solution de l'équation de l'oscillateur	169
7.2	La description de l'oscillateur harmonique par les opérateurs de création et d'annihilation	179
7.3	Propriétés des opérateurs \hat{a} et \hat{a}^+	180
7.4	Représentation du hamiltonien de l'oscillateur en termes de \hat{a} et \hat{a}^+	181
7.5	Interprétation de \hat{a} et \hat{a}^+	182
7.6	Notes biographiques	188
8.	Transition de la mécanique classique à la mécanique quantique . .	191
8.1	Déplacement des valeurs moyennes	191
8.2	Théorème d'Ehrenfest	192
8.3	Constantes du mouvement, lois de conservation	193
8.4	Quantification en coordonnées curvilignes	196
8.5	Notes biographiques	209
9.	Particules chargées dans des champs magnétiques	211
9.1	Couplage au champ électromagnétique	211
9.2	L'atome d'hydrogène	223
9.3	Densités électroniques à trois dimensions	229
9.4	Le spectre des atomes d'hydrogène	232
9.5	Courants dans l'atome d'hydrogène	234
9.6	Le moment magnétique	235
9.7	Atomes hydrogénoïdes	236
9.8	Notes biographiques	250
10.	Les fondements mathématiques de la mécanique quantique II . . .	253
10.1	Représentations position, impulsion et énergie	253
10.2	Représentation d'opérateurs	257
10.3	Le problème des valeurs propres	266

10.4	Transformations unitaires	268
10.5	La matrice S	270
10.6	L'équation de Schrödinger sous forme matricielle	272
10.7	Le point de vue de Schrödinger	275
10.8	Le point de vue de Heisenberg	275
10.9	Image d'interaction	276
10.10	Notes biographiques	277
11.	Théorie des perturbations	279
11.1	Théorie des perturbations stationnaires	279
11.2	Dégénérescence	283
11.3	Méthode variationnelle de Ritz	298
11.4	Théorie des perturbations dépendante du temps	301
11.5	Perturbation constante sur un intervalle de temps	306
11.6	Transitions entre états du continuum	308
11.7	Notes biographiques	333
12.	Spin	335
12.1	Dédoublement de raies spectrales	336
12.2	L'expérience d'Einstein–de Haas	338
12.3	Description mathématique du spin	339
12.4	Fonctions d'onde avec spin	342
12.5	L'équation de Pauli	345
12.6	Notes biographiques	358
13.	Une équation d'onde non-relativiste avec spin	361
13.1	La linéarisation de l'équation de Schrödinger	361
13.2	Particules dans un champ externe et le moment magnétique	369
13.3	Notes biographiques	372
14.	Aspects élémentaires du problème à plusieurs corps	373
14.1	Conservation de l'impulsion totale d'un système de particules	377
14.2	Mouvement du centre de masse d'un système de particules en mécanique quantique	379
14.3	Conservation du moment angulaire total dans un système à plusieurs corps	383
14.4	Petites oscillations dans un système à plusieurs particules	396
14.5	Notes biographiques	407
15.	Particules identiques	409
15.1	Le principe de Pauli	411
15.2	Dégénérescence d'échange	411
15.3	Le déterminant de Slater	413
15.4	Notes biographiques	427

16. Le cadre formel de la mécanique quantique	429
16.1 Les bases mathématiques	
de la mécanique quantique – espace de Hilbert	429
16.2 Opérateurs dans l'espace de Hilbert	432
16.3 Valeurs propres et vecteurs propres	433
16.4 Opérateurs avec des spectres continus	
ou discrets-continus (mixtes)	437
16.5 Fonctions d'opérateur	439
16.6 Transformations unitaires	442
16.7 L'espace de produit direct	443
16.8 Les axiomes de la mécanique quantique	444
16.9 Particules libres	447
16.10 Résumé de la théorie des perturbations	461
17. Problèmes conceptuels et philosophiques	
de la mécanique quantique	465
17.1 Déterminisme	465
17.2 Localité	466
17.3 Théories des variables cachées	468
17.4 Théorème de Bell	471
17.5 Théorie de la mesure	474
17.6 Le chat de Schrödinger	478
17.7 Théories subjectives	478
17.8 Mesures classiques	479
17.9 L'interprétation de Copenhague	480
17.10 Enregistrement indélébile	480
17.11 L'Univers dédoublé	483
17.12 Le problème de la réalité	484
Index	487



<http://www.springer.com/978-3-540-64377-7>

Computational Materials Design

Saito, T. (Ed.)

1999, VIII, 300 p., Hardcover

ISBN: 978-3-540-64377-7