

## Computational Materials Design

Bearbeitet von  
Tetsuya Saito

1. Auflage 1999. Buch. viii, 300 S. Hardcover

ISBN 978 3 540 64377 7

Format (B x L): 15,6 x 23,4 cm

Gewicht: 1360 g

[Weitere Fachgebiete > Physik, Astronomie > Physik Allgemein > Theoretische Physik,  
Mathematische Physik](#)

schnell und portofrei erhältlich bei

  
DIE FACHBUCHHANDLUNG

Die Online-Fachbuchhandlung [beck-shop.de](http://beck-shop.de) ist spezialisiert auf Fachbücher, insbesondere Recht, Steuern und Wirtschaft. Im Sortiment finden Sie alle Medien (Bücher, Zeitschriften, CDs, eBooks, etc.) aller Verlage. Ergänzt wird das Programm durch Services wie Neuerscheinungsdienst oder Zusammenstellungen von Büchern zu Sonderpreisen. Der Shop führt mehr als 8 Millionen Produkte.

---

# Table des matières

<b>1. La quantification de grandeurs physiques</b>	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
<b>2. Les lois du rayonnement</b>	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
<b>3. Aspects ondulatoires de la matière</b>	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
<b>4. Bases mathématiques de la mécanique quantique</b>	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
<b>5.</b>	<b>Complément mathématique . . . . .</b>	<b>111</b>
5.1	Différentielles propres et la normalisation des fonctions propres pour des spectres continus . . . . .	111
5.2	Développement en fonctions propres . . . . .	114
<b>6.</b>	<b>L'équation de Schrödinger . . . . .</b>	<b>123</b>
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
<b>7.</b>	<b>L'oscillateur harmonique . . . . .</b>	<b>163</b>
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
<b>8.</b>	<b>Transition de la mécanique classique à la mécanique quantique . .</b>	<b>191</b>
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
<b>9.</b>	<b>Particules chargées dans des champs magnétiques . . . . .</b>	<b>211</b>
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
<b>10.</b>	<b>Les fondements mathématiques de la mécanique quantique II . . .</b>	<b>253</b>
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
<b>11.</b>	<b>Théorie des perturbations . . . . .</b>	<b>279</b>
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
<b>12.</b>	<b>Spin . . . . .</b>	<b>335</b>
12.1	Dédoublément 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
<b>13.</b>	<b>Une équation d'onde non-relativiste avec spin . . . . .</b>	<b>361</b>
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
<b>14.</b>	<b>Aspects élémentaires du problème à plusieurs corps . . . . .</b>	<b>373</b>
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
<b>15.</b>	<b>Particules identiques . . . . .</b>	<b>409</b>
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

<b>16. Le cadre formel de la mécanique quantique</b> .....	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
<b>17. Problèmes conceptuels et philosophiques</b>	
<b>de la mécanique quantique</b> .....	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
<b>Index</b> .....	487