

Michèle Desouter
Yves Justum
Xavier Chapuisat

Introduction à la théorie quantique

Concepts, pratiques et applications



La côte de l'ouvrage : 2-530-272

TABLE DES MATIÈRES

CHAPITRE 1 LE CHANGEMENT DE PARADIGME

1.1. Les deux concepts de la description classique	1
1.2. Dualité onde-particule, les égalités qui changent le paradigme	6
1.3. Fonction d'onde de de Broglie	10
1.4. But et domaine de la mécanique quantique	13

CHAPITRE 2 MODÈLE DES PUIITS

2.1. Système et état dynamique	15
2.2. La fonction d'onde	17
2.3. Équations de Schrödinger	20
2.4. Puits infini à une et plusieurs dimensions	25
2.5. Modèle du puits fini à une dimension	42
2.6. Modèle du double puits fini à une dimension	56
Exercices	60
Correction des exercices	65

CHAPITRE 3 POSTULATS ET OUTILS

3.1. Objectif des postulats	71
3.2. Postulat I : la description du système	72
3.3. Postulat II : la description des grandeurs physiques	75
3.4. Postulat III : les résultats de mesure d'une grandeur	77
3.5. Outils en rapport avec les postulats II et III : propriétés des opérateurs linéaires	79
3.6. Postulat IV : les probabilités des résultats de mesure	95
3.7. Postulat V : l'état d'un système après la mesure	104
3.8. Postulat VI : l'évolution du système	106
3.9. Application des postulats sur la mesure : la cryptographie quantique	109
Exercices	112
Correction des exercices	116

CHAPITRE 4 OSCILLATEUR HARMONIQUE

4.1. Définition et contexte	125
4.2. Oscillateur harmonique classique	128
4.3. Équation de Schrödinger de l'oscillateur harmonique linéaire	129
4.4. Résolution par les opérateurs d'échelle	134
4.5. Action des opérateurs \hat{X} et \hat{P}	141
4.6. Vibration d'une molécule diatomique	142

4.7. Application des postulats : la transition de Franck-Condon	148
4.8. Oscillateur harmonique à deux dimensions	152
4.9. Modes normaux de vibration	155
Exercices	164
Correction des exercices	172

CHAPITRE 5 MÉTHODES DE RÉOLUTION APPROCHÉES DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER STATIONNAIRE

5.1. Principe de la méthode des perturbations stationnaires	183
5.2. Série de perturbations d'un niveau non-dégénéré	186
5.3. Perturbation d'un niveau dégénéré	192
5.4. Méthode des variations	196
5.5. Exemples d'application des variations	207
Exercices	213
Correction des exercices	219

CHAPITRE 6 MOMENT CINÉTIQUE ET ROTATION

6.1. Moment cinétique orbital d'une particule	229
6.2. Intérêt de l'opérateur \hat{L}^2 dans les problèmes à deux centres avec un potentiel central	233
6.3. Valeurs et fonctions propres des opérateurs \hat{L}^2 et \hat{L}_z : les harmoniques sphériques	234
6.4. Applications	242
6.5. Démonstration des propriétés de l'observable moment cinétique	247
6.6. Les sous-espaces standard d'un opérateur moment cinétique	251
6.7. Moment cinétique de spin	255
Exercices	262
Correction des exercices	270

CHAPITRE 7 ATOME HYDROGÉNOÏDE

7.1. Hamiltonien coulombien	281
7.2. L'équation de Schrödinger des fonctions radiales	282
7.3. La quantification des niveaux d'énergie	285
7.4. Énergie des états liés	288
7.5. Expression générale des fonctions radiales	289
7.6. Les fonctions angulaires : les harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta, \varphi)$	292
7.7. Diverses représentations des orbitales	294
7.8. Applications	298
Exercices	300
Correction des exercices	302

CHAPITRE 8 COMPOSITION DES MOMENTS CINÉTIQUES

8.1. Position du problème	307
8.2. Rappel des propriétés d'un moment cinétique	309
8.3. Propriétés d'une somme de moments cinétiques	310
8.4. Valeurs et vecteurs propres des opérateurs \hat{J}^2 et \hat{J}_z	313
8.5. États singulet et triplet de spin	322
8.6. Applications	325
8.7. Symboles $3j$ de Wigner	342
Exercices	344
Correction des exercices	349

CHAPITRE 9 LES PARTICULES INDISCERNABLES

9.1. Particules identiques	363
9.2. Symétrie sous permutation de deux particules ou transposition \hat{P}_{12}	363
9.3. Dégénérescence d'échange	364
9.4. Postulat de symétrisation	365
9.5. Trou de Fermi	369
9.6. Application : deux particules dans deux spinorbitales	371
9.7. Construction des orbitales par la méthode du champ autocohérent de Hartree-Fock	373
Exercices	383
Correction des exercices	385

CHAPITRE 10 ÉVOLUTION DES PAQUETS D'ONDES

10.1. Arrière-plan expérimental	389
10.2. Rappel de l'approximation de Born-Oppenheimer	391
10.3. Propagation des paquets d'ondes, concepts de base	395
10.4. Propriétés des états superposés	399
10.5. Évolution de paquets d'ondes gaussiens	407
10.6. Superposition d'ondes planes	417
10.7. Spectre et fonction d'autocorrélation	430
Exercices	433
Correction des exercices	439

CHAPITRE 11 MANIPULATION DES ÉTATS QUANTIQUES

11.1. Perturbation constante dans un système à deux niveaux : période de Rabi ..	445
11.2. Perte de cohérence par couplage avec un environnement	455
11.3. Effet d'une radiation sinusoïdale sur deux états	461
11.4. Introduction au contrôle de la dynamique par impulsion laser	470
Exercices	491

Correction des exercices	498
--------------------------------	-----

CHAPITRE 12 MÉTHODES APPROCHÉES DÉPENDANT DU TEMPS

12.1. Méthode de perturbation dépendant du temps	507
12.2. Paquet d'ondes promu de la transition de Franck-Condon	509
12.3. Perturbation périodique, spectre d'absorption	513
12.4. Approximation adiabatique.....	517
12.5. Approximation soudaine.....	520
12.6. Application : la computation adiabatique (recuit quantique).....	522
Exercice	526
Correction de l'exercice	529

CHAPITRE 13 INTERACTIONS NON ADIABATIQUES

13.1. Équation électronique de Born-Oppenheimer :	
états électroniques adiabatiques	533
13.2. Couplage non adiabatique dû à la dynamique des noyaux	535
13.3. Localisation des régions de non adiabaticité :	
théorème de Hellmann Feynman	542
13.4. États électroniques diabatiques, cas à deux états	542
13.5. Critère d'adiabaticité de la dynamique dans les états	
électroniques	550
13.6. Femtochimie d'une dissociation non adiabatique	551
13.7. Formule de Landau-Zener-Stückelberg	553
13.8. Équations couplées en base adiabatique ou diabatique	557
13.9. Définition orthodoxe de la base électronique diabatique	558
13.10. L'intersection conique.....	567
Exercices	585
Correction des exercices	590