

**MÉCANIQUE QUANTIQUE**  
**TRAVAUX DIRIGÉS Nos. 13** (Durée : 1 h )

## Opérateurs dipolaires et quadrupolaires électriques

On considère un système (par exemple un atome ou une molécule à plusieurs électrons), constitué de  $N$  charges ponctuelles  $q_n$  situées aux positions  $\vec{r}_n$ . Ce système est plongé dans un champ électrique dérivant d'un potentiel  $U(\vec{r})$ . Les sources significatives de  $U$  sont supposées extérieures à la zone d'intérêt. On se place en représentation  $|\vec{r}\rangle$ .

1. *Préliminaires*

- (a) Exprimer l'énergie d'interaction  $V$  du système et de  $U$
- (b) Exprimer l'équation simple à laquelle obéit  $U$  dans la zone d'intérêt

2. *Partie radiale* On se restreint pour l'instant à  $N = 1$ , la particule étant centrée en  $O$ . On développe  $U$  sous la forme

$$U(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} f_{l,m}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

- (a) Donner l'équation à laquelle obéit  $f_{l,m}(r)$
- (b) Montrer que  $f_{l,m}(r) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} c_{l,m} r^l$  est une solution convenable

3. *Cas de  $N$  particules* On pose alors

$$Q_{l,m}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} c_{l,m} r^l Y_l^m(\theta, \phi)$$

- (a) Réexprimer l'énergie  $V$  en fonction des  $Q_{l,m}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$  et des  $r_n, \theta_n, \phi_n$ , coordonnées polaires des  $\vec{r}_n$ .
- (b) Pour  $l = m = 0$ , commenter le résultat.
- (c) Même question pour  $l = 1$ . En négligeant les termes de  $l > 1$ , exprimer  $V$  en fonction de  $\vec{D} = \sum_{n=1}^N q_n \vec{r}_n$  et de  $\vec{\nabla} U_{r=0}$ . (indication : combiner linéairement les  $Y_1^m$  pour regrouper les termes imaginaires).
- (d) Dans le cas  $l = 2$ , donner les expressions des  $Q_{l,m}$  puis de  $V$  en négligeant tous les termes de  $l \neq 2$ .
- (e) Discuter le cas d'une distribution continue de charge  $\rho(\vec{r})$ , puis d'une distribution de courants  $\vec{j}(\vec{r})$ .