Physique atomique TD Doc 3 05/2020

- Ecriture de l'opérateur L_z en coordonnées sphériques
- Dégénérescence totale d'une orbitale atomique

On s'intéresse à écrire l'opérateur L_z en coordonnées sphériques. L_z étant la composante suivant (OZ) du moment cinétique de l'atome d'H_2. Pour cela, on doit répondre aux questions des étapes suivantes :

1°) Exprimer les coordonnées cartésiennes x, y, z en fonctions des coordonnées sphériques r, θ, φ et vice-versa.

2°) Sachant que le moment cinétique de l'e- de l'atome d'H_2 s'écrit : $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$. A ce moment correspond l'opérateur moment cinétique $\vec{\tilde{L}}$ de composantes $\tilde{L}_x$, $\tilde{L}_y$ et $\tilde{L}_z$. On peut écrire ces quatre opérateur sans le tilde $(\sim)$.
Ecrire l'opérateur L_z en coordonnées cartésiennes.

3°) On veut exprimer les dérivées partielles $\frac{\partial}{\partial x}$ et $\frac{\partial}{\partial y}$ en coordonnées sphériques. Pour cela, on se réfère aux définitions suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z} + \frac{\partial}{\partial \theta}\left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)_{y,z} + \frac{\partial}{\partial \varphi}\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_{y,z}$$

de même pour $\frac{\partial}{\partial y}$

On retrouve alors les équations suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta \cdot \cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cdot \cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Montrer alors que l'opérateur L_z s'écrit : $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$?

4°) En faisant agir cet opérateur sur la fonction d'onde $\Psi(r,\theta,\varphi)$, on fait apparaître le nombre quantique m par la relation $L_z \Psi(r,\theta,\varphi) = m\hbar \Psi(r,\theta,\varphi)$ où Ψ s'écrit $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$; il y va de soit que $L_z Y_{l,m}(\theta,\varphi) = m\hbar\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

a) Ecrire l'équation aux valeurs propres

b) Ecrire l'intervalle limite de m et en déduire le nombre de valeurs possibles de m pour une valeur donnée du nombre quantique orbital l.

5°) En tenant compte du spin de l'e- de l'atome d'H_2, montrer que la dégénérescence totale d'un niveau énergétique donné, caractérisé par le nombre quantique principal n, est $2n^2$.

6°) Calculer la dégénérescence totale d'une orbitale permise en tenant compte du spin.