

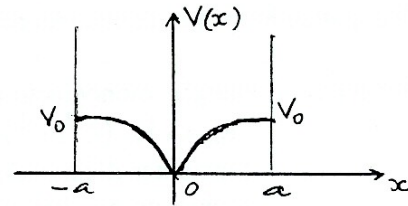
Contrôle de Janvier 2001 (durée : 1h)

I/ Boîte de potentiel perturbée

On considère une particule de masse m astreinte à se déplacer sur le segment $[-a, a]$ de l'axe des x , dans le potentiel $V(x)$ suivant:

$$V(x) = -V_0 \cdot \sin [\pi x / (2a)] \quad \text{pour } -a \leq x \leq 0$$

$$V(x) = V_0 \cdot \sin [\pi x / (2a)] \quad \text{pour } 0 \leq x \leq a$$



V_0 est suffisamment petit pour que le potentiel appliqué puisse être considéré comme une perturbation de la boîte de potentiel rectiligne (pour laquelle $V(x) = 0$ pour $-a \leq x \leq a$).

- 1) Ecrire l'opérateur Hamiltonien du système en mettant en évidence opérateur du système non perturbé et opérateur de perturbation.
- 2) Déterminer l'énergie de l'état fondamental, en appliquant la méthode des perturbations au 1^o ordre (**indication pour le calcul de l'intégrale**: changement de variable $u = \cos \alpha x$).
- 3) On souhaite appliquer la méthode des variations à l'étude d'un tel système perturbé. Proposer une fonction de variation (**ne faire aucun calcul**).

données :

-Energie et fonction d'onde de l'état fondamental de la boîte de potentiel rectiligne:

$$E^0_1 = h^2 / (32ma^2) \leftrightarrow \Psi^0_1(x) = (1/a)^{1/2} \cos(\pi x / 2a)$$

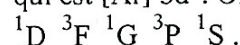
II/ Atomes polyélectroniques

On considère l'atome de scandium ionisé, $_{21}\text{Sc}^+$.

1) a- Expliquer pourquoi la configuration électronique de l'ion Sc^+ à l'état fondamental est $[\text{Ar}] 3d^1 4s^1$ ($[\text{Ar}]$ est la configuration électronique de l'argon, $_{18}\text{Ar}$).

b- Calculer l'énergie d'ionisation **de Sc^+** au moyen de la méthode empirique de Slater (**indication**: il est inutile de calculer les charges nucléaires effectives relatives aux électrons internes) et comparer à la valeur expérimentale égale à 12,8 eV.

2) On s'intéresse à la configuration électronique fondamentale et à celle du 1^{er} état excité qui est $[\text{Ar}] 3d^2$. On donne les multiplets issus de cette configuration excitée, soit:



- a- quel est le **multiplet fondamental** relatif à la configuration excitée $[Ar] 3d^2$? Déterminer les états spectroscopiques qui en sont issus.
- b- déterminer les termes atomiques (multiplets) et les états spectroscopiques issus de la configuration électronique fondamentale $[Ar] 3d^1 4s^1$ de Sc^+
- 3) a- représenter sur un diagramme énergétique les multiplets et états spectroscopiques déterminés en **2a-** et **2b-** .
- b- indiquer quelles sont les transitions optiques permises des états spectroscopiques excités vers l'état fondamental.
- c- quel sera l'effet d'un champ magnétique extérieur de faible intensité, B_{ext} sur la raie de plus grande longueur d'onde identifiée en **3b-** .

données : - énergie monoélectronique en méthode de Slater :

$$E_n = - \frac{1}{2} (Z'_{eff}/n'^2) \text{ en unités atomiques (u.a)} \quad ; 1 \text{ u.a} = 27,21 \text{ eV.}$$

- constantes d'écran de Slater : 0,30 ; 0,35 ; 0,85 ; 1

- valeurs du nombre quantique principal effectif n' en fonction de n :

n	1	2	3	4	5
n'	1	2	3	3,7	4

- règles de sélection en spectroscopie atomique :

les seules transitions permises sont celles se produisant entre deux états (L_1, S_1, J_1, M_{J1}) et (L_2, S_2, J_2, M_{J2}) tels que : $\Delta S = S_2 - S_1 = 0$; $\Delta L = L_2 - L_1 = 0, \pm 1$ (sauf si le système est mono-électronique, alors $\Delta l = \pm 1$) ; $\Delta J = J_2 - J_1 = 0, \pm 1$ (sauf de $J_1 = 0$ à $J_2 = 0$ qui est interdite) et $\Delta M_J = M_{J2} - M_{J1} = 0, \pm 1$.