

TD N°4 : Intégration numérique

Ahmed Ammar (ahmed.ammar@fst.utm.tn)

Institut Préparatoire aux Études Scientifiques et Techniques, Université de Carthage.

Apr 14, 2021

Contents

Exercice 1: Vitesse d'une fusée

On lance une fusée verticalement du sol et l'on mesure pendant les premières 80 secondes l'accélération γ :

$t[s]$	0	10	20	30	40	50	60	70	80
$\gamma [m s^{-2}]$	30	31.63	33.44	35.47	37.75	40.33	43.29	46.70	50.67



Calculer la vitesse V de la fusée à l'instant $t = 80 s$, par la méthode des trapèzes.

Solution. On sait que l'accélération γ est la dérivée de la vitesse V , donc,

$$V(t) = \int_0^t \gamma(s) ds$$

$$I = V(80) = \int_0^{80} \gamma(s) ds$$

Calculons I par la méthode des trapèzes. Ici, d'après le tableau des valeurs, $h = 10$.

$$I \approx h \left[\frac{1}{2} f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2} f(x_n) \right]$$

$$I \approx 10 \left[\frac{1}{2} \times 30 + \frac{1}{2} \times 50.67 + 31.63 + 33.44 + \dots + 46.70 \right]$$

$$\approx 3089.45 \quad ms^{-1}$$

```
h = 10
I = 0.5 * (30 + 50.67) # 1/2 * [f(x0) + f(xn)]
fx = [31.63, 33.44, 35.47, 37.75, 40.33, 43.29, 46.70] # f(x1) ---> f(xn-1)
for i in range(len(fx)):
    I += fx[i]
I *= h
print(I, "ms-1")
```

Exercice 2: Orbitales atomiques

Pour décrire la trajectoire d'un électron autour d'un noyau, une description probabiliste est adoptée : l'électron n'est plus caractérisé par ses coordonnées spatiales mais par sa *probabilité de présence* en un point de l'espace.

Pour simplifier le problème, on considérera que cette probabilité de présence ne dépend que de la variable r , distance entre l'électron et le centre du noyau. Pour une orbitale $1s$, la probabilité de trouver l'électron entre les rayons r_1 et r_2 s'écrit :

$$P_{s1} = \int_{r_1}^{r_2} \underbrace{4 \times \frac{r^2}{a_0^3} \times e^{-2 \times \frac{r}{a_0}}}_{\text{densité radiale}} dr$$

avec $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$, appelé le rayon de Bohr.

La densité radiale, représentée dans la figure 1, est maximale pour $r = a_0$. Ce rayon qui maximise la densité radiale est appelé le *rayon orbitalaire*.



À noter

Dans ce problème, les distances seront conservées en Angström.

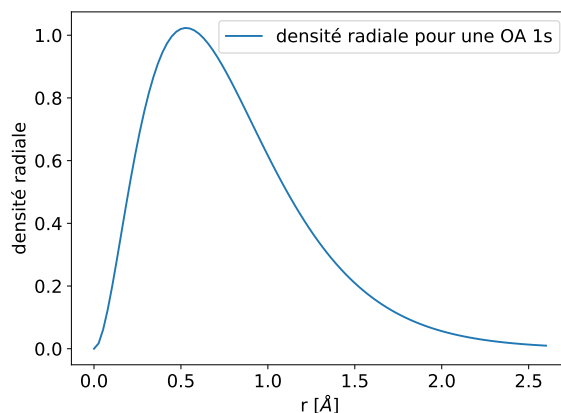


Figure 1: Densité radiale pour une orbitale atomique 1s.

- a) Définir une fonction `densite_radiale()`, définie entre 0 et ∞ qui prend comme paramètre variable un rayon r et comme paramètre par défaut $a_0 = 0.529$ Å et renvoie la valeur $4 \times \frac{r^2}{a_0^3} \times e^{-2 \times \frac{r}{a_0}}$.
- b) Tracer la densité radiale pour $r \in [0, 2.6]$ Å, afin d'obtenir le même graphique sur la figure 1.
- c) On souhaite déterminer la probabilité de présence de l'électron entre 0 et a_0 . Évaluer cette probabilité à l'aide de 100 rectangles. On pourra vérifier que la réponse obtenue est proche de 0.32.
- d) Déterminer le nombre entier n , tel que l'électron ait une probabilité supérieure ou égale à 90% de se trouver entre 0 et $n * a_0$.
- e) On souhaite désormais évaluer la probabilité de trouver l'électron proche du rayon de Bohr, c'est-à-dire entre $0.9 * a_0$ et $1.1 * a_0$. Évaluer cette probabilité à l'aide de 100 rectangles.
- f) D'après la valeur obtenue à la question précédente, que penser de la description des trajectoires des électrons par orbite autour du noyau ?



À noter

On répondra en commentaire dans le programme.

Solution. La solution de l'exercice est dans le programme python suivant:

```
## NOM DU PROGRAMME: OrbitalesAtomiques.py
## IMPORTATION
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from midpoint_integral import midpoint
# a)
def densite_radiale(r, a0 = 0.529):
    return 4 * (r**2/a0**3) * np.exp(-2*(r/a0))
# b)
r = np.linspace(0,2.6, 100)

plt.figure(figsize=(7,5))
plt.plot(r, densite_radiale(r), label = "densité radiale pour une OA 1s")
plt.xlabel("r "+r+"\AA")
plt.ylabel("densité radiale")
plt.legend()
plt.show()

# c) probabilité de présence de l'électron entre 0 et a0
a0 = 0.529
Pa0 = midpoint(densite_radiale, 0, a0, 100)
print("La probabilité de présence de l'électron entre 0 et a0 est: ", Pa0)

# d) rayon moyen de l'OA 1s
for n in range(21):
    Prn = midpoint(densite_radiale, 0, n*a0, 100)
    if Prn >= 0.90:
        print("n = %d, Pr%d = %.4f"%(n,n,Prn))

'''
r90 = 3*a0. On dit donc que la rayon moyen de l'OA 1s de l'atome d'hydrogène
est une sphère de rayon 3*a0, soit à peu près 1.6 Å.
'''

# e)
Pr = midpoint(densite_radiale, 0.9*a0, 1.1*a0, 100)
print("La probabilité de présence de l'électron entre 0.9*a0 et 1.1*a0 est: ", Pr)

# La probabilité de présence de l'électron entre 0.9*a0 et 1.1*a0 est: 0.10790737203009312

# f) Conclusion

'''
* La densité radiale de probabilité de présence est maximale
pour r = a0 (rayon de Bohr) On dit que c'est le rayon le plus probable.

* Ce résultat est trompeur, car entre 0.9*a0 et 1.1*a0, la probabilité de présence
de l'électron n'est que de 11%.

* l'atome d'hydrogène est une sphère de rayon 3*a0, soit à peu près 1.6 Å.

* La probabilité de présence de l'électron 1s est plus élevée à l'extérieur
de l'orbite de Bohr.
'''
```