

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.

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.

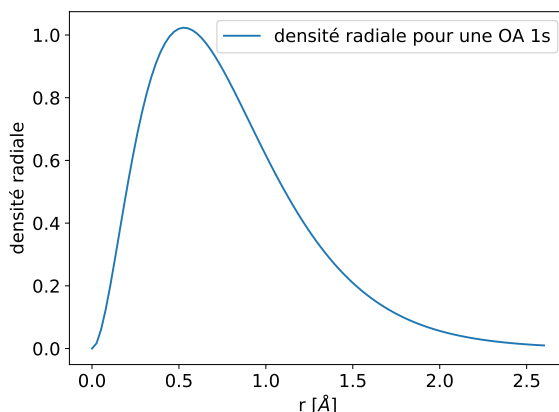


Figure 1: Densité radiale pour une orbitale atomique 1s.

a) Définir une fonction `densite_radiale()`, définie entre 0 et ∞ qui prend comme paramètre variable un rayon r et comme paramètre par défaut $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ 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 $r \in [0, 2.6] \text{ \AA}$, 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.