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
γ [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 $a_0 = 0.529\ A°$, 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.

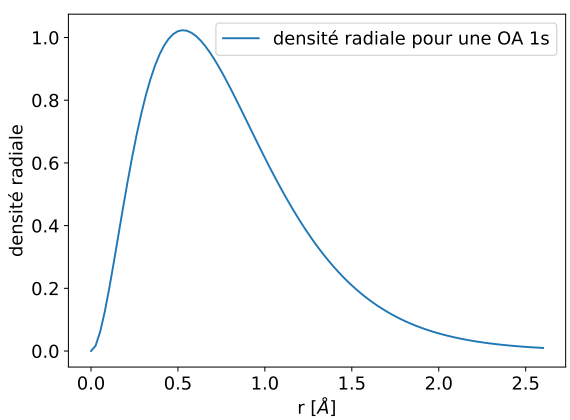

Figure 1: Densité radiale pour une orbitale atomique 1s.

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