Contrôle continu : Devoir Surveillé N°2

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

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

11 Décembre 2019

Exercise 1 : Calculer les niveaux d'énergie dans un atome (6 points)

Le $n^{ième}$ niveau d'énergie d'un électron dans un atome d'hydrogène est donné par :

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \tag{1}$$

où $m_e = 9.1094 \cdot 10^{-31}\ kg$ est la masse de l'électron, $e = 1.602210^{-19}\ C$ est la charge élémentaire, $\epsilon_0 = 8.8542 \cdot 10^{-12} C^2 s^2\ kg^{-1} m^{-3}$ est la permittivité électrique du vide, et $h = 6.6261 \cdot 10^{-34}\ Js$

a) Définir la fonction `E(n)` qui retourne la valeur du niveau d'énergie en électron-volt (eV).

Indication.

— On vous donne $1\ eV = 1.6022\dot{1}0^{-19}\ J$.

Solution. On défini d'abord les constantes dans l'équation, ensuite la fonction `E(n)` qui retourne la valeur du niveau d'énergie en électron-volt (eV) :

```python
# Constantes
me = 9.1094e-31
e = 1.6022e-19
eps0 = 8.8542e-12
h = 6.6261e-34
def E(n):
    Ejoule = - (me * e**4)/(8*eps0**2 * h**2)* (1/n**2)
    return Ejoule/e
```

b)

— Calculer la valeur du niveau d'énergie le plus bas, `E(n=1)`. A quoi correspond ce niveau d'énergie ?

— Tester la valeur du niveau d'énergie pour $n \to \infty$. A quoi correspond le niveau d'énergie $E = 0$ eV ?

Solution. Le niveau d'énergie pour n = 1 :

```
print("E(n = 1) = ", E(n = 1), " eV")
# ==> E(n = 1) =  -13.606152702370753  eV
```

Le niveau d'énergie le plus bas $E_1 = -13,6\ eV$ obtenu pour n = 1, correspond au niveau fondamental de l'atome d'hydrogène. C'est l'état le plus stable.

Le niveau d'énergie pour n = 100 :

```
print("E(n = 100) = ", E(n = 100), " eV")
# ==> E(n = 100) =  -0.0013606152702370755  eV
```

Le niveau d'énergie est nul $E = 0\ eV$ lorsque n tend vers l'infini (l'électron est alors séparé du noyau).

c) Écrire une boucle qui calcule et affiche le niveau d'énergie E_n pour $n = 1, \ldots, 20$.

Indication. Le résultat doit être comme suivant :

```
E1 = -13.606152702370753 eV
E2 = -3.4015381755926883 eV
............................
............................
E19 = -0.03769017369077771 eV
E20 = -0.03401538175592689 eV
```

Solution. On peut calculer et afficher les valeurs E_n pour $n = 1, \ldots, 20$ en utilisant une boucle for :

```
for n in range(1, 21):
    print("E{} = {} eV".format(n, E(n)))
```

d) L'énergie libérée lorsqu'un électron se déplace du niveau ni au niveau nf est donnée par :

$$\Delta E = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \cdot \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right) \tag{2}$$

Construire et afficher les valeurs de la matrice $\Delta E^{i,f}$ dont la cellule de la colonne `i` et de la ligne `f` contient l'énergie libérée lorsqu'un électron passe du niveau d'énergie `i` au niveau `f`, pour $i, f = 1, \ldots, 5$.

$$\Delta E^{i,f} = \begin{pmatrix} \Delta E_{1,1} & \Delta E_{1,2} & \Delta E_{1,3} & \Delta E_{1,4} & \Delta E_{1,5} \\ \Delta E_{2,1} & \Delta E_{2,2} & \Delta E_{2,3} & \Delta E_{2,4} & \Delta E_{2,5} \\ \Delta E_{3,1} & \Delta E_{3,2} & \Delta E_{3,3} & \Delta E_{3,4} & \Delta E_{3,5} \\ \Delta E_{4,1} & \Delta E_{4,2} & \Delta E_{4,3} & \Delta E_{4,4} & \Delta E_{4,5} \\ \Delta E_{5,1} & \Delta E_{5,2} & \Delta E_{5,3} & \Delta E_{5,4} & \Delta E_{5,5} \end{pmatrix} \tag{3}$$

Solution. On peut créer la matrice $\Delta E^{i,f}$ et afficher ces valeurs avec la méthode suivante :

```
from numpy import array
DEn = [[E(ni) - E(nf) for ni in range(1, 6)] for nf in range(1,6)]
print(array(DEn))
#==> DEn =
#[[  0.          10.20461453  12.09435796  12.75576816  13.06190659]
# [-10.20461453   0.           1.88974343   2.55115363   2.85729207]
# [-12.09435796  -1.88974343   0.           0.6614102    0.967754864]
# [-12.75576816  -2.55115363  -0.6614102    0.           0.30613844]
# [-13.06190659  -2.85729207  -0.96754864  -0.30613844   0.         ]]
```

Exercise 2 : Générer des coordonnées équidistantes (4 points)

Nous voulons générer $n+1$ coordonnées x équidistantes dans $[a, b]$. Stocker, pour `a = -2` ; `b = 3` et `n= 20` les coordonnées x dans une liste `xList`.

a) Définir toutes les variables puis utiliser une boucle **for** et ajouter chaque coordonnée à la liste `xList` (*initialement vide*).

Indication. Avec n intervalles, correspondant à $n+1$ points, dans $[a, b]$, chaque intervalle a une longueur $h = (b-a)/n$. Les coordonnées peuvent alors être générées par la formule `xi = a + i * h` ; $i = 0, \ldots, n$.

Solution. La liste `xList` sera remplis par les valeurs de `xi` comme suivant :

```
n =20
a, b = -2, 3
h = (b - a) / n
xList = []
for i in range(n+1):
    xi  = a + i * h
    xList.append(xi)
```

b) Utiliser une liste de compréhension comme une implémentation alternative.

Solution. Nous pouvons également remplir `xList` par une liste de compréhension :

```
xList = [a + i * h for i in range(n+1)]
```

c) Vectoriser la liste résultante `xList` en un tableau `numpy` xVect. N'oubliez pas **d'importer** d'abord la fonction qui transforme les listes en tableaux à partir de `numpy`.

Solution. La fonction `numpy.array()` transforme les listes en tableaux `numpy` :

```
from numpy import array
xVect = array(xList)
```

Exercise 3 : Tracer une fonction gaussienne (7 points)

a) Définir une fonction `f(x)` qui met en œuvre la gaussienne suivante

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2} \tag{4}$$

Solution. La fonction `f(x)` s'écrit :

```
import numpy as np
def f(x):
    return 1/np.sqrt(2*np.pi) * np.exp(-0.5 *x*x)
```

b) Remplir les listes `xList` et `fList` avec x et $f(x)$ valeurs pour 41 coordonnées x uniformément espacées dans $[-4, 4]$.

Indication. Adapter l'exemple de l'exercice 2.

```
n = 40
a, b = -4, 4
h = (b - a) / n
xList, fList=[], []

for i in range(n+1):
    xi  = a + i * h
    fi = f(xi)
    xList.append(xi)
    fList.append(fi)

print(fList)
```

Solution.

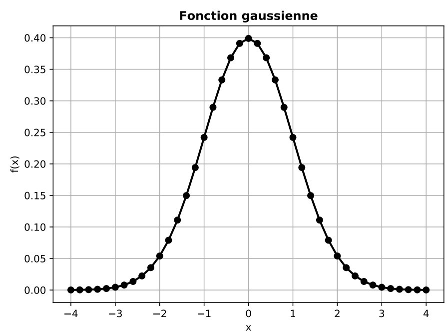
c) Vectoriser le code en **b)** en créant les valeurs `x` à l'aide de la fonction `linspace()` à partir de la bibliothèque `numpy` et en évaluant `f(x)` pour un argument du tableau.

Solution. Soit un tableau `x` généré par la fonction `numpy.linspace()` :

```
x = np.linspace(-4, 4, 41)
print(f(x))
```

d) Faites un tracé de cette fonction `f(x)` en utilisant la bibliothèque `matplotlib`.

Indication. La sortie du programme devrait ressembler à la figure ci-dessous.



Solution. Le graphique sera généré en implémentant le code suivant :

```
import matplotlib.pyplot as plt

plt.plot(x, f(x), 'ko-',lw=2)
plt.title("Fonction gaussienne", fontweight='bold')
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("f(x)")
plt.grid()
plt.tight_layout()
plt.savefig("gauss.png"); plt.savefig("gauss.pdf")
```

Exercise 4 : Tracer la viscosité de l'eau (5 points)

La viscosité de l'eau, μ, varie avec la température T (en Kelvin) selon la formule :

$$\mu(T) = A \cdot 10^{B/(T-C)} \tag{5}$$

où $A = 2.414 \cdot 10^{-5}$ Pa s, $B = 247.8\ K$ et $C = 140\ K$.

a) Définir la fonction `mu(T, A, B, C)` qui renvoie la valeur de la viscosité μ pour chaque valeur donnée de la température T.

Solution. La fonction `mu(T, A, B, C)` est définie comme suivant :

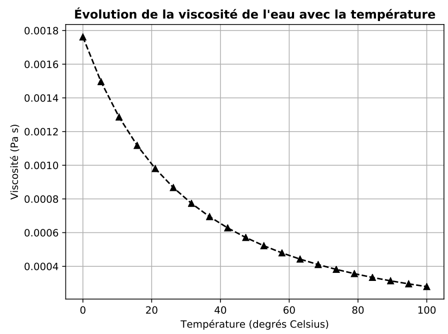
```
def mu(T, A, B, C):
    return A*10**(B/(T-C))
```

b) Tracer $\mu(T)$ pour 20 valeurs de T entre 0 et 100 degrés Celsius. Marquer l'axe des x avec "Température (degrés Celsius)", l'axe des y avec "viscosité (Pa s)" et le titre "Évolution de la viscosité de l'eau avec la température". **Notez que T dans la formule de μ doit être en Kelvin**.

Indication.

— On vous donne : 0 deg C = 273 deg K

— La sortie du programme devrait ressembler à la figure ci-dessous.



Solution. Le code qui trace la viscosité de l'eau en fonction de la température est comme suivant :

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
# 0 deg C = 273 deg K
T = np.linspace(0, 100, 20)

plt.plot(T, mu(T+273, A = 2.414e-5, B = 247.8, C = 140), 'k^--')
plt.title("Évolution de la viscosité de l'eau avec la température",
          fontweight='bold')
plt.xlabel("Température (degrés Celsius)")
plt.ylabel("Viscosité (Pa s)")
plt.grid()
plt.savefig("viscosity.png"); plt.savefig("viscosity.pdf")
```