

```
# DS2-Densité radiale.py
```

```
01| #DS 2 -Fonction Densité radiale de probabilité de
prérence
02|
03|
04| import numpy as np
05| import matplotlib.pyplot as plt
06| from scipy.optimize import bisect
07|
08| #Données
09| a=52.9                                #rayon de Bohr en pm
10| N=35**0.5 / 26880                    #Facteur numérique de la
partie radiale
11|
12|
13| # Définir la fonction D
14| def D(x):
15|     return ((N**2/a**9)*x**8*np.exp(-x/2/a))
16|
17| # intervalle des valeurs en abscisse
18| X=np.linspace(1e-6, 35,100)
19|
20|
21| # Compléter les lignes de code ci dessous afin de
tracer le graphe souhaité , de préciser que l'abscisse
est r/a
22| Y= []
23| X2= a*X
24| Y=D(X2)
25| plt.figure(0)
26| plt.plot(X,Y,'+b',label="Densite radiale de
probabilité de présence")
27| plt.grid()
28| plt.legend()
29| plt.xlabel("r/a")
30| plt.ylabel("D")
31| plt.show()
32|
33|
34| max = max(Y)
35| print('valeur maximale de D:', max)
36|
37| # recherche du rayon de l'orbitale
38| def derivee (x,D) :
39|     d = (D(x+1e-4)-D(x-1e-4))/(2*1e-4)
```

```
40|     return d
41|
42| Der=derivee (X2,D)
43| plt.figure(1)
44| plt.plot(X,Der,"o",label="dérivée 1ère")
45| plt.xlabel("x")
46| plt.ylabel("dD/dr")
47| plt.grid() #tracé de la grille
48| plt.legend()
49| plt.show ()
50|
51| rayon=bisect(derivee,1e-6*a,35*a,args=(D))
52| print ( "le rayon est : ",rayon/a,"a")
```