

Niveaux d'énergies de l'hydrogène et des hydrogénoïdes

Auteur : Thomas Langlinay

Niveaux scolaires :
Seconde, Première S, Terminale S

Mots clés :
Algorithme/Programmation
Physique-Chimie

ENONCE

Ecrire, en langage Python, un programme permettant de calculer les énergies des niveaux des orbites :

- d'un atome d'hydrogène,
- d'hydrogénoïdes.

1. L'atome d'hydrogène

Commençons ce programme par préciser, en commentaire, ici en vert, l'unité des niveaux d'énergies utilisés par la suite dans le programme.

La mise en commentaire s'effectue à l'aide du symbole #, disponible dans le catalogue (**SHIFT** **4**).

Définissons la fonction "energie". Elle aura pour argument n (nombre quantique principal).

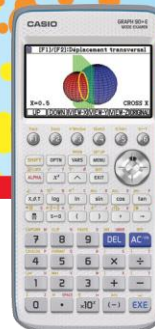
```
energieH.py 001/001
# En (en eV)
```

FILE RUN SYMBOL CHAR A↔a ▶

```
energieH.py 003/003
# En (en eV)
def energie(n):
```

FILE RUN SYMBOL CHAR A↔a ▶

Graph 90+E



Ensuite, initialisons la variable i , variable qui stocke les niveaux des orbites.

Introduisons une boucle "tant que" (while) qui jusqu'à i inférieur ou égal à n , calcul les termes successifs des énergies des différents niveaux, énergies définies par:

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2}$$

Il ne reste plus qu'à incrémenter le compteur des niveaux des orbites.

Enfin, à l'aide de "print", il est possible d'afficher les niveaux des orbites et leurs énergies.

Pour tester le programme, il ne reste plus qu'à aller dans l'onglet {RUN}. Ne pas oublier d'enregistrer le programme.

Appeler ensuite la fonction "energie" en précisant la valeur de n .

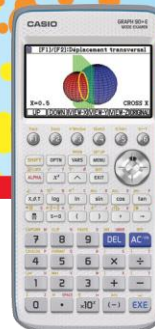
Prenons, par exemple, $n = 4$.

```
energieH.py 001/007
# En (en eV)
def energie(n):
    i=0
    while i<=n:
        i=i+1
        En=-13.6/(i**2)
        print("n =",i,"E
```

```
>>>energie(4)
n = 1 E = -13.6 eV
n = 2 E = -3.4 eV
n = 3 E = -1.511111111
n = 4 E = -0.85 eV
n = 5 E = -0.544 eV
>>>
```

Le programme dans son entièreté :

```
energieH.py 001/007
# En (en eV)
def energie(n):
    i=0
    while i<=n:
        i=i+1
        En=-13.6/(i**2)
        print("n =",i,"E =",En,"eV")
```



2. Les hydrogéoïdes

Reprenons le programme précédent et modifions le afin d'obtenir les énergies des niveaux des hydrogéoïdes.

Il faut :

- ajouter un argument à la fonction "energie". Elle aura ainsi pour argument n (nombre quantique principal) et Z (numéro atomique).
- Modifier la formule de l'énergie :

$$E_n = -\frac{13.6Z^2}{n^2}$$

```
energie1.py 001/007 ▶
# En (en eV)
def energie(Z,n):
    i=0
    while i<=n:
        i=i+1
        En=-13.6*Z**2/(i*
        print("n =",i,"E
```

Le programme dans son entièreté :

```
energie1.py 001/007 ▶
# En (en eV)
def energie(Z,n):
    i=0
    while i<=n:
        i=i+1
        En=-13.6*Z**2/(i**2)
        print("n =",i,"E =",En,"eV")
FILE RUN SYMBOL CHAR A↔a ▶
```

Remarque : à la place d'une boucle "tant que" (while), il est possible d'utiliser une boucle for.

```
energie1.py 001/006 ▶
# En (en eV)
def energie(Z,n):
    for i in range(1,n):
        En=-13.6*Z**2/(i**2)
        print("n =",i,"E =",En,"eV")
FILE RUN SYMBOL CHAR A↔a ▶
```