Université Larbi Ben M’hidi, Oum El-Bouaghi

Master (chimie & physique)

Matière : Méthodes numériques & Simulation

Prof. Nouiri

**TD/TP N° 01**

**(Rappel sur langage de programmation: Fortran)**

**Exercice 1 :**

1. Elaborer un programme Fortran permettant de calculer la valeur de la quantité:

$$z=e^{\frac{q}{2k}}$$

La quantité q est donnée par la formule suivante :
*𝑞*$=\frac{2ψm\_{e}}{ℏ^{2}}-\left(\frac{m\_{e}v}{2ℏ}\right)^{2}$ Avec : $ψ=\frac{λ}{8}$ et $λ=\frac{\left(αm\_{e}C\right)^{2}}{m\_{mol}}$

L’expression de $v$ est donnée par : $v=α\sqrt{\frac{m\_{e}}{m\_{mol}}}C$ et $ℏ=\frac{h}{2π}$ et $α=\frac{1}{β}$

Données du problème :

$h=6,6262 . 10^{-34}$ , $C=3. 10^{8}$ , $m\_{e}=9,1093891.10^{-31}$ , $m\_{mol}=1,52.10^{-22}$ , $β=137$ , $k=2.10^{3}$

Le nombre $π$ peut etre calculer par la formule $π=4arctg(1)$

**Exercice 2 :**

Calculer les valeurs de $Z$ (exercice 1) pour $β\in \left[137, 150\right]$ avec un pas de calcul $Δβ=1$