Licence Chimie - L2 – Parcours Chimie
Université Paris 7
Année universitaire 2006-2007

Examen du module « Outils mathématiques pour les chimistes » OT3
Mercredi 10 janvier 2007 (durée 2 heures)

.
Exercice 1 (4pts):
Calculer la série de Fourier de la fonction f de période 2π donnée par $f(x) = x$ entre 0 et 2π. Montrer que $2(\sin x+2^{-1}\sin 2x+3^{-1}\sin 3x + \ldots) = \pi-x$, pour $0 < x <2\pi$. En déduire, en prenant pour x la valeur $x = \pi/2$, une série numérique convergente vers π.

Exercice 2 (4pts):
Dans $\mathfrak{R}^2$ soit S le cercle de centre O et rayon $r > 0$, de paramétrage $x = r.\cos t$, $y = r.\sin t$. Calculer l'intégrale curviligne de $-x^2ydx+xy^2dy$, d'abord directement, puis en utilisant la formule de Green.

Exercice 3 (4pts):
Donner la matrice R relativement à la base canonique de la rotation dans $\mathfrak{R}^3$ autour de l'axe Δ passant par $0 = (0, 0, 0)$ et par $H = (4, 2, 3)$, et d'angle $\pi/3$.

Exercice 4 (7pts):
Soit l'espace $\mathfrak{R}^3$ construit sur la base canonique orthonormée (**i**, **j**, **k**).

Soit la matrice $M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, et f l'application linéaire dont M est la matrice relativement à la base canonique.

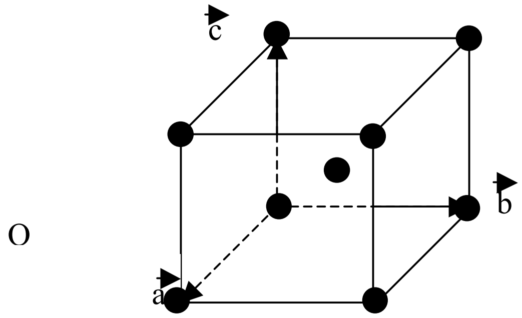
a) Déterminer le polynôme caractéristique de M donné par : $P(\lambda) = \det(M-\lambda.\mathbf{I}) = 0$.
(**I** est la matrice identité). Les solutions de l'équation $P(\lambda) = 0$ sont les valeurs propres de M. Les calculer. On les notera λ_i, pour i = 1, 2 et 3.

b) Déterminer pour chaque i un vecteur $\mathbf{e_i} = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix}$ dans la base canonique de $\mathfrak{R}^3$, qui soit propre relativement à la valeur propre λ_i c'est-à-dire un vecteur non-nul tel que l'on ait : $M\,\mathbf{e_i} = \lambda_i\,\mathbf{e_i}$.
Montrer que dans $\mathfrak{R}^3$ ces trois vecteurs propres de M sont linéairement indépendants. On montrera qu'une combinaison linéaire $C_1\,\mathbf{e_1} + C_2\,\mathbf{e_2} + C_3\,\mathbf{e_3} = 0$ équivaut à $C_1 = C_2 = C_3 = 0$. Les vecteurs $\mathbf{e_i}$ forment donc une base de $\mathfrak{R}^3$. Donner alors l'expression de la matrice D décrivant l'application linéaire f ci-dessus dans la base de ses vecteurs propres $\mathbf{e_i}$.

c) Montrer que la base de $\mathfrak{R}^3$ formée par les vecteurs $\mathbf{e_i}$ est orthogonale. Est-elle orthonormée ? Justifier.

Exercice 5 (7pts):
Le fer métallique cristallise dans une maille cubique centrée, c'est-à-dire portant un atome à chaque sommet du cube et un atome au milieu du cube.

Cette maille est construite sur la base ($\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$) formée de vecteurs de même norme et orthogonaux. L'origine O étant choisie comme défini dans la figure ci-dessous.
La position d'un atome d'un quelconque de ce métal est déterminée par ses coordonnées x, y et z.



On veut détermıner les coordonnées X, Y et Z du même atome dans la maille rhombohédrique construite sur les vecteurs $\vec{A}$, $\vec{B}$ et $\vec{C}$ et inscrite dans la maille cubique.
On choisit les vecteurs $\vec{A}$, $\vec{B}$ et $\vec{C}$ comme étant les vecteurs reliant le centre du cube et les extrémités des vecteurs $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ respectivement :
$\vec{A} = ½(\vec{a} - \vec{b} - \vec{c})$
$\vec{B} = ½(-\vec{a} + \vec{b} - \vec{c})$
$\vec{C} = ½(-\vec{a} + \vec{b} - \vec{c})$

a) Dessiner ces vecteurs sur la maille cubique.
b) Vérifier que les vecteurs $\vec{A}$, $\vec{B}$ et $\vec{C}$ définissent bien une maille rhomboédrique, c'est-à-dire que leurs normes sont égales et que les angles formés entre eux sont tous égaux et différents de 90°.
c) Déterminer la matrice de passage [S] de la maille cubique à la maille rhomboédrique.
d) Exprimer les coordonnées X, Y et Z en fonction des coordonnées x, y et z.
e) Soit le point de coordonnées x = 0,5, y = 0,5 et z = 0,5. Donner ses coordonnées dans la maille rhomboédrique à partir du calcul. Pouvait-on prévoir ce résultat sans calcul ?
f) En comparant les volumes de la maille cubique et de la maille rhomboédrique, déterminer la multiplicité de la maille cubique par rapport à la maille rhomboédrique.