

Représentation du potentiel de Lennard-Jones

L'utilisation de fonctions en python permet de nombreuses applications par la création de graphiques. En utilisant la "bibliothèque matplotlib/pylab", vous pourrez donc aisément créer des graphes de fonction.

Exemple du [potentiel de Lennard-Jones](#) de l'argon :

```
<sxh python; title : Lennard-Jones-01.py> #!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*- """
Représentation du potentiel de Lennard-Jones Argon :  $\sigma = 3.405 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon/kB = 118.2 \text{ K}$   $kB = 1.3806488(13) \times 10^{-23} \text{ J}$  ->  $\epsilon = 1.632 \cdot 10^{-21} \text{ J}$  """
from pylab import *
def f@: sigma=3.405
#angstrom ! epsilon=1.632 # 10-21 J
```

```
s = (sigma/r)**6
s2= 4.*epsilon* (s**2. - s)
return s2
```

```
r=[] u=[] x=3. while x < 10:
```

```
    r.append(x)
    u.append(f(x))
    x=x+0.1
```

```
plot(r, u) show() </sxh>
```

From:
<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:
<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:lennard-jones?rev=1390995347>

Last update: **2014/01/29 12:35**

