

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 : σ = 3.405 Å, ε/kB = 118.2 K kB =
1.3806488(13)×10⁻²³ -> ε = 1.632 10⁻²¹ J """
from pylab import *
def f(r):
    sigma=3.405
    epsilon=1.632
    s = (sigma/r)**6
    s2= 4.*epsilon*(s**2 - 1)
    return s2
```

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

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

```
plot(r, u)
show()
```

Suggestion : récrire ce programme en utilisant des directives d'importation standard des librairies Matplotlib/NumPy

From:

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

Permanent link:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:lennard-jones?rev=1391050152>

Last update: 2014/01/30 03:49

