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 :

$V_{LJ} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right] = \varepsilon \left[\left(\frac{r_{m}}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_{m}}{r}\right)^{6} \right]$

où σ est la distance à laquelle le potentiel entre les particules s'annule et ε est l'énergie du puits de potentiel d'interaction. La distance r_m à laquelle le potentiel a cette valeur minimale est reliée à σ par la relation suivante : $r_{m} = 2^{1/6} \sigma$

<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®: 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>

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=1425400649

Last update: **2015/03/03 17:37**