

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 :

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

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(r): 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

Application : forces de cohésion dans les cristaux de gaz rares

À basse température, les gaz rares peuvent donner des cristaux de structure cubique à face centrée ou hexagonale compacte. Chaque atome possède alors d'autres atomes dans son voisinage immédiat et aussi au delà. Pour caractériser l'énergie de cohésion et relier le paramètre du réseau cristallin à σ , il faut considérer la somme de toutes ces interactions, ou du moins de celles correspondant à un

Last update:

2015/03/03 teaching:progappchim:lennard-jones <https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:lennard-jones?rev=1425413664>
21:14

voisinage suffisant pour converger.

From:

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

Permanent link:

<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:lennard-jones?rev=1425413664>

Last update: **2015/03/03 21:14**

