

Potentiel de Morse

Potentiel de Morse et approximation harmonique, avec représentation des niveaux d'énergie des modèles quantiques correspondants.

Code source :

[potentiel_Morse-04.py](#)

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Représentation du potentiel de Morse pour H2
http://en.wikipedia.org/wiki/Morse_potential
http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_harmonic_oscillator approximation
harmonique
D_e = 7.6E-19 J
a = 19.3E-15 m
r_e = 74.1E-12 m
dérivée de seconde d2V/dr2 = 2 * D_e * a**2.
"""
import matplotlib.pyplot as plt # directive d'importation standard de
Matplotlib
import numpy as np # directive d'importation standard de
numpy

def V(r): # potentiel de Morse
    return D_e * (1.- np.exp(-a*(r-r_e)))**2.

def Vh(r): # potentiel harmonique
    return D_e * (a*(r-r_e))**2.

a = 19.3E9 # en unité m-1 # paramètre de contrôle de la largeur du
potentiel
r_e = 74.1E-12 # en unité m # distance interatomique d'équilibre
(longueur de liaison)
#a = 19.3E-3 # en unité pm-1
#r_e = 74.1 # en unité pm
D_e = 7.6E-19 # J # énergie de dissociation
NA = 6.02214129E23 # nombre d'Avogadro
h = 1.054571726E-34 # constante de Planck
mH = 1.007825E-3/NA # masse de l'hydrogène
nu0 = (a/2.*np.pi)*np.sqrt(2.*D_e/mH)
hnu0 = h * nu0 # quantum d'énergie

plt.figure(figsize=(12, 9), dpi=80)
plt.title(u"Potentiel de Morse et approximation harmonique\npour le
dihydrogène $H_2$. Représentation des niveaux de vibration.")
r = np.linspace(10.,400.,176) * 1E-12
```

```
u,uh = V(r),Vh(r)
plt.plot(r,u, color="blue", linewidth=1.5, linestyle="--")
plt.plot(r,uh, color="green", linewidth=2.5, linestyle="--")
xmax = 400.E-12
plt.xlim(0., xmax)
ymax = 1.E-18
plt.ylim(-0.5e-19, ymax)
plt.xlabel(u"Distance interatomique (m)")
plt.ylabel(u"Énergie (J)")
# annotations des courbes
xy_annot = (r_e+np.sqrt(ymax*0.85/(D_e*a**2.)),ymax*0.85)
plt.annotate(r'Potentiel harmonique',
             xy=xy_annot, xycoords='data',
             xytext=(+40, +40), textcoords='offset points', fontsize=16,
             color="green",
             arrowprops=dict(arrowstyle="simple",
                             connectionstyle="arc3,rad=.2",color="green"))
xy_annotm = (xmax*0.95,V(xmax*0.95))
plt.annotate(r'Potentiel de Morse',
             xy=xy_annotm, xycoords='data',
             xytext=(-200, -60), textcoords='offset points',
             fontsize=16, color="blue",
             arrowprops=dict(arrowstyle="simple",
                             connectionstyle="arc3,rad=.2",color="blue"))
# description du puit de potentiel
plt.plot((r_e,xmax),(0,0), color="blue", linewidth=1.5, linestyle="--")
plt.plot((0.,xmax),(D_e,D_e), color="blue", linewidth=1.5, linestyle="--")
plt.annotate("", xy=(xmax*0.4,0.), xytext=(xmax*0.4,D_e),
             arrowprops=dict(arrowstyle="<->",color='k',shrinkA=0,shrinkB=0))
plt.text(xmax*0.41, D_e*0.3, u"Puit de potentiel", fontsize=14)

# niveaux de vibrations de l'approximation harmonique :
for v in range(10):
    E = hnu0*(v+0.5)
    dr = np.sqrt(E/(D_e*a**2.))
    plt.plot([r_e-dr,r_e+dr],[E,E], color="green", linewidth=2.5,
             linestyle="--")

# niveaux de vibrations du potentiel de Morse :
#vmax = int((2.*D_e-hnu0)/hnu0) # valeur maximale de v suivant la
# théorie
vmax = 8 # compromis pour la représentation
for v in range(vmax):
    E = hnu0*(v+0.5) - (hnu0*(v+0.5))**2/(4.*D_e)
    r1,r2 = r_e-np.log(1.+np.sqrt(E/D_e))/a,r_e-np.log(1.-
    np.sqrt(E/D_e))/a
    plt.plot([r1,r2],[E,E], color="blue", linewidth=1.5, linestyle="--")
    # description de l'énergie de dissociation (niveau de vibration 0)
```

```
if v == 0:
    plt.plot((r2,xmax),(E,E), color="blue", linewidth=1.5,
linestyle="--")
    plt.annotate("", xy=(xmax*0.6,E), xytext=(xmax*0.6,D_e),
arrowprops=dict(arrowstyle="<->",color='k',shrinkA=0,shrinkB=0))
    plt.text(xmax*0.61, D_e*0.6, u"Énergie de dissociation",
fontsize=14)
    # numérotation des niveaux de vibration
    plt.text(r2*1.05, E*1.02, "n = "+str(v), fontsize=14)
    #print(v,E)

plt.show()
```

Figure :



Prolongement

- ajouter des annotations comme la distance interatomique d'équilibre
- Représenter dynamiquement l'oscillation de la longueur de liaison en intégrant les équations du mouvement. La force doit être calculée à partir du potentiel.

Références

- http://en.wikipedia.org/wiki/Morse_potential
- <http://www.phy.duke.edu/~hsg/363/homeworks/assignment-04-02-05-2011.pdf>
- Article original : [Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels](#)
Philip M. Morse, Phys. Rev. 34, 57 – Published 1 July 1929. DOI :
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.34.57>

From:

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

Permanent link:

https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:matplotlib_gallery:potentiel_morse

Last update: **2020/02/25 10:04**

