

Potentiel de Morse

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

```
Code source : <sxh python; title : 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 * a2. """ import
matplotlib.pyplot as plt # directive d'importation standard de Matplotlib import numpy as
np # directive d'importation standard de numpy def V@: # potentiel de Morse return D_e *
(1.- np.exp(-a*(r-r_e)))2.
```

```
def Vh@: # 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,u_h=V@,Vh@ plt.plot(r,u, color="blue", linewidth=1.5, linestyle="-") plt.plot(r,u_h, 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*a2.)),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.plot1)
```

```
1)
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() </sxh> 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>

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?rev=1431071480

Last update: 2015/05/08 09:51

