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 * 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®: # 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,uh=V®,Vh® 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_annoth=(r_e+np.sqrt(ymax*0.85/(D_e*a**2.)),ymax*0.85) plt.annotate(r'Potentiel harmonique', xy=xy_annoth, 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[1)]

[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**