

Rotateur biatomique

Cf. [cette page](#).

Code source : <sxh python; title : rotateur_biatomique-01.py> #!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*- """ Somme d'état (ensemble canonique) de rotation (rotateur biatomique) """

from math import exp # on a juste besoin de l'exponentielle import matplotlib.pyplot as plt # directive d'importation standard de Matplotlib

T = 100. # (température réduite = T / Theta) Zrot = 0. # somme d'état Jmax = 30 # valeur maximale de J print '-----' print '| J | dégénérescence | J*(J+1) | terme de Z |' print '-----' Js=[] terms=[] for J in range(Jmax+1):

```
g = 2*J+1 # dégénérescence
term= (2*J+1)*exp(-J*(J+1)/T)
print '| %3d | %4d | %4d | %.8e |' % (J, g, J*(J+1), term)
Zrot += term
Js.append(J)
terms.append(term)
```

print '-----'

print "Somme d'état à T=%3d jusqu'au niveau %2d : %.8e " % (T,Jmax,Zrot)

fig = plt.figure() plt.title(u"Rotateur biatomique et somme d'état à T = "+str(T)) plt.plot(Js, terms, 'bo', label=r'\$(2J+1)\exp\{-J(J+1)\theta_{rot}/T\}\$') plt.legend(loc='upper right') plt.vlines(Js, [0], terms) plt.xlabel(u"Niveaux J") plt.ylabel(u"Termes de la somme d'état") eq = r'\$Z_I^{\text{Rot}} = \sum_{J} (2J+1) \exp\{-J(J+1)\theta_{rot}/T\} = '+str(round(Zrot,3))+"\$" size = 14 x, y = 12,7 plt.text(x, y, eq, fontsize=size, clip_on=True)

plt.show() # vue interactive de la figure </sxh>

Figure :



Sortie des valeurs :

J	dégénérescence	J*(J+1)	terme de Z
0	1	0	1.00000000e+00
1	3	2	2.94059602e+00
2	5	6	4.70882267e+00
3	7	12	6.20844306e+00
4	9	20	7.36857678e+00
5	11	30	8.14900043e+00
6	13	42	8.54160866e+00
7	15	56	8.56813596e+00

8	17	72	8.27478835e+00
9	19	90	7.72482354e+00
10	21	110	6.99029276e+00
11	23	132	6.14411195e+00
12	25	156	5.25340178e+00
13	27	182	4.37469528e+00
14	29	210	3.55123642e+00
15	31	240	2.81225655e+00
16	33	272	2.17386690e+00
17	35	306	1.64106933e+00
18	37	342	1.21036009e+00
19	39	380	8.72460102e-01
20	41	420	6.14818650e-01
21	43	462	4.23670231e-01
22	45	506	2.85550178e-01
23	47	552	1.88274853e-01
24	49	600	1.21458857e-01
25	51	650	7.66753988e-02
26	53	702	4.73727511e-02
27	55	756	2.86481384e-02
28	57	812	1.69591336e-02
29	59	870	9.82856285e-03
30	61	930	5.57687812e-03

Somme d'état à T=100 jusqu'au niveau 30 : 1.00327380e+02

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

Permanent link: https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:matplotlib_gallery:rotateur_biatomique?rev=1430395869

Last update: 2015/04/30 14:11

