

Oscillateur non harmonique

```
[1]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import odeint
```

$$V(r) = A \left(\frac{3r_e^4}{5r^{10}} - \frac{1}{r^6} \right)$$

$$\frac{dV}{dr} = A \left(-\frac{30r_e^4}{5r^{11}} + \frac{6}{r^7} \right) \text{ et on vérifie bien que } \frac{dV}{dr}(r_e) = 0$$

```
[5]: lam=9.10e-6
c=3e8
f0=c/lam
print(f0*1e-12) # en THz
```

32.96703296703297

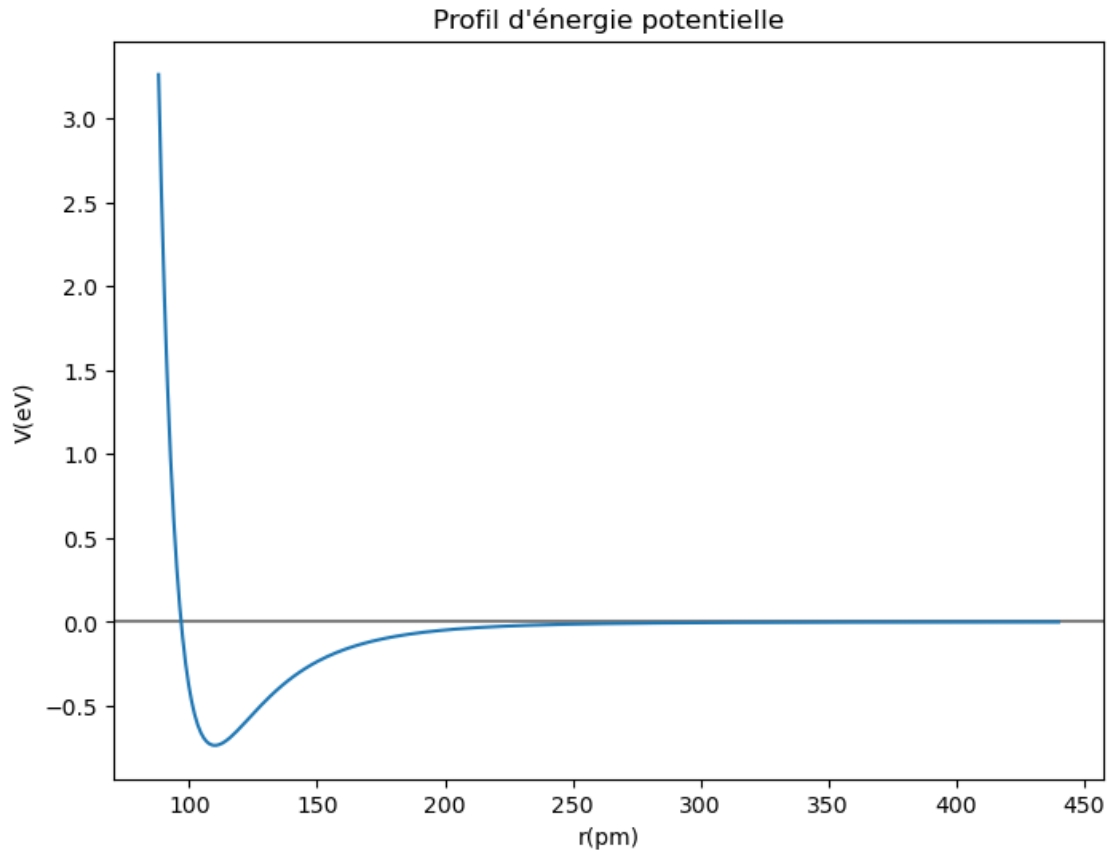
$$\frac{d^2V}{dr^2} = A \left(\frac{66r_e^4}{r^{12}} - \frac{42}{r^8} \right) \text{ donc } \frac{d^2V}{dr^2}(r_e) = \frac{24A}{r_e^8}.$$

$$\text{On en déduit que } f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{48A}{mr_e^8}} \text{ d'où } A = \frac{\pi^2 f_0^2 m r_e^8}{12}$$

```
[6]: m=16*1.7e-27
re=110e-12
A=np.pi**2*f0**2*m*re**8/12
print(A) # en J.m^6
```

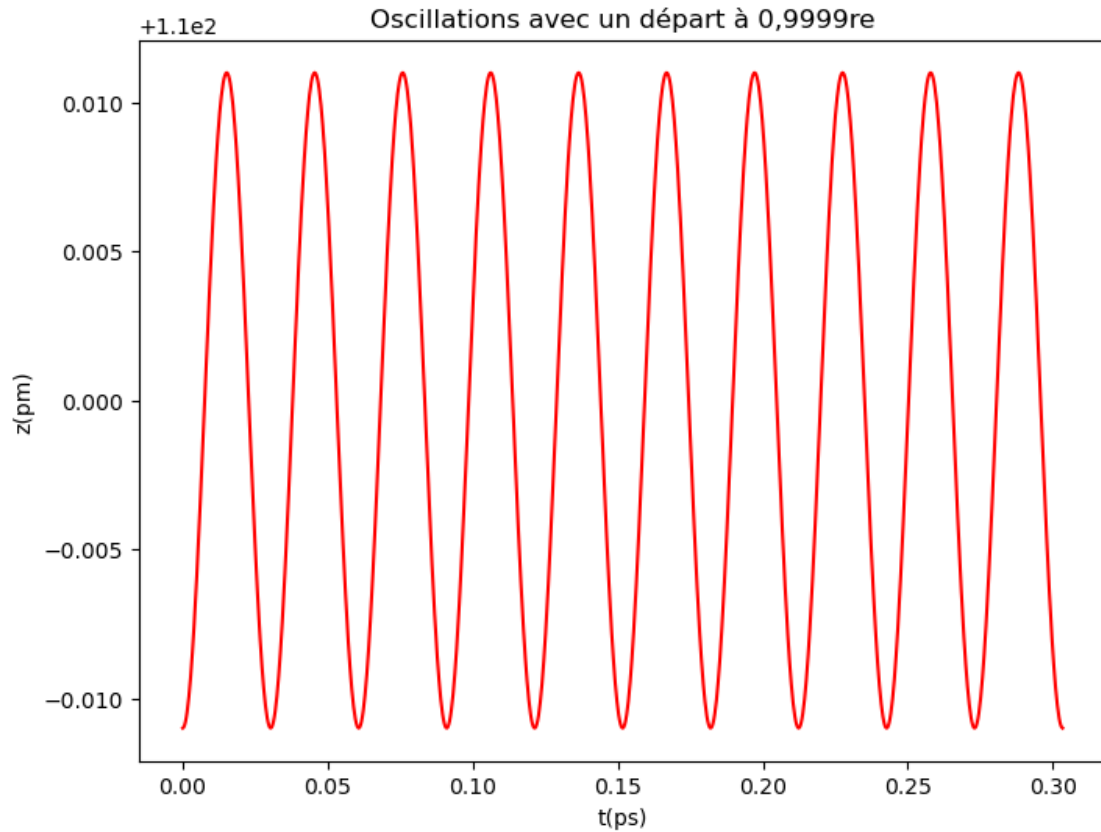
5.2118104152561124e-79

```
[7]: tab_r=np.linspace(0.8*re,4*re,300)
tab_V=A*(3*re**4/5/tab_r**10-1/tab_r**6)
plt.figure(figsize=(8,6))
plt.axhline(0,color="gray")
plt.plot(tab_r*1e12,tab_V/1.6e-19)
plt.xlabel("r(pm)")
plt.ylabel("V(eV)")
plt.title("Profil d'énergie potentielle")
plt.show()
```

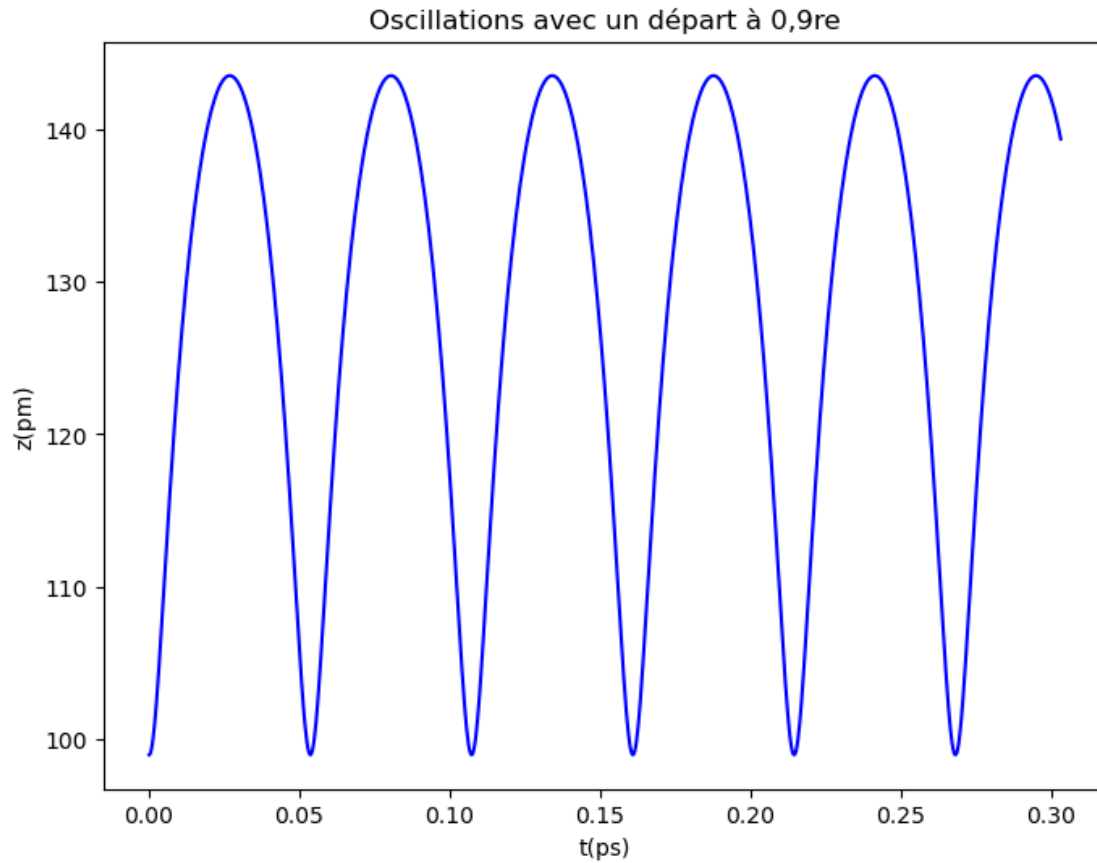


$E_m = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 + V(r) = cst$ donc en dérivant $\frac{m}{2} \ddot{r} + \frac{dV}{dr} \cdot \dot{r} = 0$ d'où on tire l'équation demandée après simplification par $\dot{r}$.

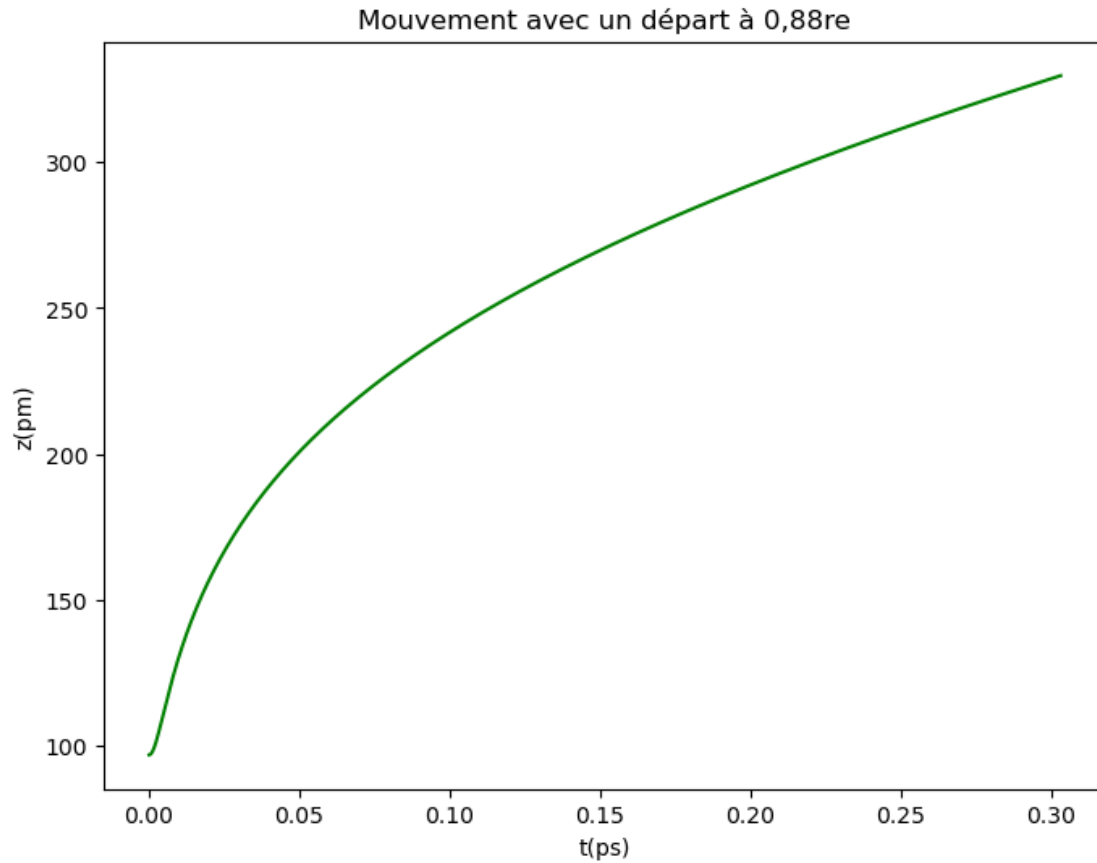
```
[8]: def derivee(inconnues,t): # [r,rpoint]
    r=inconnues[0]
    rpoint=inconnues[1]
    rpointpoint=12*A/m*(re**4/r**11-1/r**7)
    return [rpoint,rpointpoint]
ci=[0.9999*re,0]
T0=1/f0
tab_t=np.linspace(0,10*T0,1000)
solution=odeint(derivee,ci,tab_t)
tab_r=solution[:,0]
plt.figure(figsize=(8,6))
plt.plot(tab_t*1e12,tab_r*1e12,color="red")
plt.xlabel("t(ps)")
plt.ylabel("z(pm)")
plt.title("Oscillations avec un départ à 0,9999re")
plt.show()
```



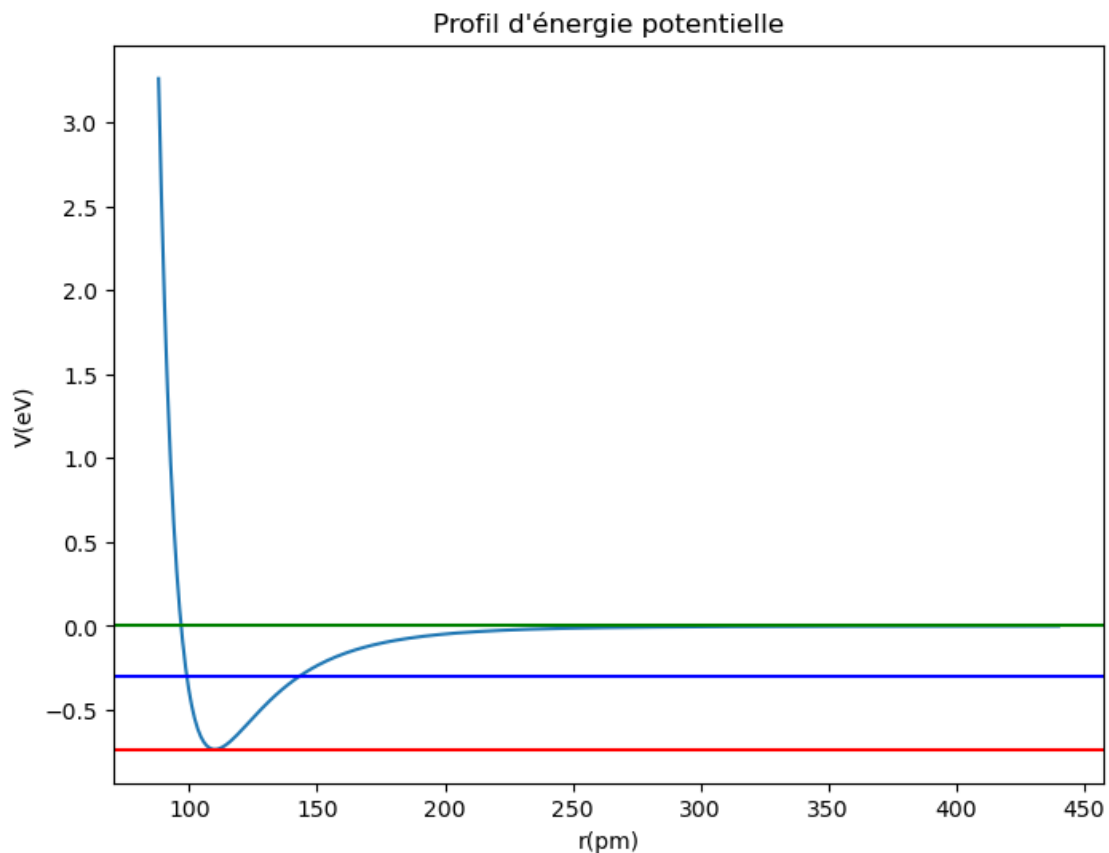
```
[9]: def derivee(inconnues,t): # [r,rpoint]
    r=inconnues[0]
    rpoint=inconnues[1]
    rpointpoint=12*A/m*(re**4/r**11-1/r**7)
    return [rpoint,rpointpoint]
ci=[0.9*re,0]
T0=1/f0
tab_t=np.linspace(0,10*T0,1000)
solution=odeint(derivee,ci,tab_t)
tab_r=solution[:,0]
plt.figure(figsize=(8,6))
plt.plot(tab_t*1e12,tab_r*1e12,color="blue")
plt.xlabel("t(ps)")
plt.ylabel("z(pm)")
plt.title("Oscillations avec un départ à 0,9re")
plt.show()
```



```
[14]: def derivee(inconnues,t): # [r,rpoint]
        r=inconnues[0]
        rpoint=inconnues[1]
        rpointpoint=12*A/m*(re**4/r**11-1/r**7)
        return [rpoint,rpointpoint]
ci=[0.88*re,0]
T0=1/f0
tab_t=np.linspace(0,10*T0,1000)
solution=odeint(derivee,ci,tab_t)
tab_r=solution[:,0]
plt.figure(figsize=(8,6))
plt.plot(tab_t*1e12,tab_r*1e12,color="green")
plt.xlabel("t(ps)")
plt.ylabel("z(pm)")
plt.title("Mouvement avec un départ à 0,88re")
plt.show()
```



```
[12]: Em1=A*(3/5*re**4/(0.9999*re)**10-1/(0.9999*re)**6)
      Em2=A*(3/5*re**4/(0.9*re)**10-1/(0.9*re)**6)
      Em3=A*(3/5*re**4/(0.88*re)**10-1/(0.88*re)**6)
      tab_r=np.linspace(0.8*re,4*re,300)
      tab_V=A*(3*re**4/5/tab_r**10-1/tab_r**6)
      plt.figure(figsize=(8,6))
      plt.plot(tab_r*1e12,tab_V/1.6e-19)
      plt.axhline(Em1/1.6e-19,color="red")
      plt.axhline(Em2/1.6e-19,color="blue")
      plt.axhline(Em3/1.6e-19,color="green")
      plt.xlabel("r(pm)")
      plt.ylabel("V(eV)")
      plt.title("Profil d'énergie potentielle")
      plt.show()
```



V_{min} représente l'énergie de la molécule au repos. Si on lui fournit $|V_{min}|$, elle se dissocie. On trouve donc par ce modèle une énergie de dissociation de $0,7\text{eV}$. Sur internet on trouve 494kJ/mol ce qui donne après calculs $5,1\text{eV}$, donc le modèle est peu exact.

[]:

[]: