

TP Particules : Exemples sur des clusters de carbone

Logiciels :

- Éditeur moléculaire (ex. Avogadro)
- LAMMPS (avec reaxff et la documentation/exemple reax)
- Visualisation moléculaire (ex. AtomEye ou VMD)

Programme :

- Potentiel réactifs : utilisation et précautions
- Importer des structures atomiques
- Minimiser l'énergie d'une structure atomique
- Construire un état initial aléatoire
- Exemple de cinétique chimique

1. Introduction

- Carbone
- Potentiels réactifs : AIREBO/ReaxFF [1]

2. Propriétés structurales d'un cluster de carbone (exemple du C4)

Objectif : recherche d'un minimum local (minimisation) + comparaison avec des résultats de chimie quantique.

Exemple de travail à effectuer :

- Construire qualitativement une des structures de C4 proposées dans [2] via un éditeur moléculaire
- A partir de l'exemple « CHO » donné dans la documentation « reax » de Lammmps, formater le fichier et l'importer dans Lammmps
- Minimiser la structure (commande minimize)
- Comparer les angles et la longueur des liaisons avec les données de chimie quantique fournies dans [2] avec l'outil de visulaton.

Solution : ./1-CHO-modif/

3. Recherche des structures les plus stables (exemple du C14)

Objectif : comment trouver la structure la plus stable pour une molécule ?

1. « A la main »
2. Algorithme de type basin-hopping
3. Simulation de recuit : apport d'énergie par augmentation de la température [3]

Exemple de travail à effectuer sur le C14 :

- Construire/importer une molécule C14 linéaire
- Réaliser une simulation de recuit (nvt ; 100 ps ; berendsen de 0 à 1500 K) puis un retour à la température 0K.
- Visualiser la structure obtenue ; comparer à la forme stable donnée dans [4].

Solution : ./2-CHO-modif-thermal/

4. Vers la cinétique chimique

Objectif : Illustrer les capacités de la DM pour décrire la cinétique chimique. Méthodologie présentée dans [5] : choix du pas de temps, procédure pour les conditions initiales, choix de la configuration du potentiel reaxff.

Exemple de travail à effectuer :

- Placer aléatoirement dans une boîte de 100 \AA^3 400 atomes de carbone (8 mg/cm^3)
- Réaliser une simulation avec un potentiel répulsif (afin d'éviter les conditions initiales sans chevauchement d'atome et d'énergie trop importante) (nve/limit, berendsen à 300 K)

Solution : ./3-cinetique-CI/

- Lancer à partir de la création initiale réalisée une simulation avec le potentiel reaxff

Solution : ./3-cinetique-ex/

Bibliographie :

- [1] van Duin et al. ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons. *J. Phys. Chem. A* **105**, 9396-9409 (2001).
[2] Massó et al. Electronic structure calculations on the C 4 cluster. *J. Chem. Phys.* **124**, 234304 (2006).
[3] Ojwang' et al. Predictions of melting, crystallization, and local atomic arrangements of aluminum clusters using a reactive force field. *Chem. Phys.* **129**, 244506 (2008).
[4] Bernholc et al. Kinetics of aggregation of carbon clusters. *Phys. Rev. B* **33**, 7395 (1986).
[5] Jensen et al. Parametric Study of ReaxFF Simulation Parameters for Molecular Dynamics Modeling of Reactive Carbon Gases. *J. Chem. Theory Comp.* **8**, 3003 (2012).