

Compte rendu de TP : Dynamique Moléculaire

Vous rendrez votre travail sur la mise en place d'une simulation de type Dynamique Moléculaire, avec les propriétés suivantes :

- simulant un nombre N (modifiable) de particules
- interagissant par un potentiel de type Lennard-Jones

$$u(r) = 4 \left[\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6} \right] \quad \text{où} \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} .$$

- en 2 dimensions spatiales
- dans une boîte de simulation de taille $L \times L$, donc tronqué à $R_C = 2.5\sigma$
- avec des interactions selon la convention de l'image périodique la plus proche
- selon intégration d'après l'Algorithme de Velocity-Verlet
- réalisé dans un langage compilé (C ou Fortran)

Votre rapport n'a pas (!!!) besoin de reprendre tous les éléments théoriques vues en cours. Il est inutile de passer du temps à cela. En revanche, il comportera :

1. Un argumentaire justifiant le bon fonctionnement de votre code.
Un graphique confrontant le graphe de la variation de l'énergie, aux temps courts, en fonction de la taille du pas d'intégration, semble incontournable; libre à vous d'ajouter d'autres éléments utiles : vérifications, illustration d'une situation simple, etc; tout ce qui peut contribuer à s'assurer du bon fonctionnement de votre code est bienvenu.
2. Un exemple qualitatif d'une simulation : évolution d'une configuration initiale régulière, par exemple un cristal cubique simple, que vous ferez évoluer dans des conditions permettant de le faire fondre; indiquer la température en équilibre à laquelle correspond votre simulation
3. Une démarche quantitative, permettant de mesurer l'énergie potentielle, avec la correction nécessaire par rapport à l'implémentation de votre potentiel
4. Votre code (en forme de fichier), raisonnablement commenté.

Conseil : ne vous contentez pas de produire un graphique ou de calculer une valeur - c'est l'interprétation de vos résultats qui est intéressante !