

ISM3 – CODE DE SIMULATION MICROSCOPIQUE

Introduire les conditions périodiques signifie considéré maintenant le terme ULJ sous la forme :

$$U^{LJ} = \frac{4\varepsilon^*}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, i \neq j}^N \left[\left(\frac{r^*}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r^*}{r_{ij}} \right)^6 \right] \rightarrow \tilde{U}^{LJ} = \frac{4\varepsilon^*}{2} \sum_{\{\vec{\eta}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, i \neq j}^N \left[\left(\frac{r^*}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r^*}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

On prendra $r^* = 3.0$ et $\varepsilon^* = 0.2$. Les $\{\vec{\eta}\}$ sont les 27 premières images périodiques dans le cas d'une boîte répliquée cubique. Ses dimensions sont $L_x = L_y = L_z = L = 42.0$.

- 1 – Introduire dans votre code sous forme de vecteur/tableau les coordonnées des $N_{sym} = 27$ vecteurs de translation possibles. Les coordonnées correspondant au vecteur qui laisse la boîte répliquée inchangée est (0,0,0), les autres vecteurs sont de la forme (L,-L,0) ou encore (L,L,L) par exemple.
- 2 – Transformer la double boucle qui vous a permis de calculer U^{LJ} dans le cas non périodique au cas périodique. La nouvelle boucle qui englobe les deux précédentes correspondra aux vecteurs $\{\vec{\eta}\}$, i.e. :

```
for i_sym = 1, N_sym
  for i = 1, N
    for j = 1, N...
```

Si N_{sym} est fixé à 1, vérifier que l'on retrouve le résultat de U^{LJ} en conditions non périodiques.

ISM3 – CODE DE SIMULATION MICROSCOPIQUE

3 – Prenez en compte les vecteurs de symétrie dans les coordonnées des particules j de la 3^{ème} boucle, i.e. :

$$\begin{aligned}Xj_loc &= Xj + \text{coordonnée X du } i_sym^{i\text{ème}} \text{ vecteur } \{\vec{\eta}\} \\Yj_loc &= Yj + \text{coordonnée Y du } i_sym^{i\text{ème}} \text{ vecteur } \{\vec{\eta}\} \\Zj_loc &= Zj + \text{coordonnée Z du } i_sym^{i\text{ème}} \text{ vecteur } \{\vec{\eta}\}\end{aligned}$$

4 - Les conditions périodiques qui se réduisent aux 27 premières images n'ont de sens physique que si les interactions de Lennard-Jones sont tronquées, i.e. elles ne sont calculées que pour des distances entre particules telles que $r_{ij} < R_{cut} < L$. Ceci signifie que l'on doit calculer en fait :

$$\tilde{U}^{LJ}(R_{cut}) = \frac{4\varepsilon^*}{2} \sum_{\{\vec{\eta}\}} \sum_{i=1}^N \sum_{j, r_{ij} \leq R_{cut}} \left[\left(\frac{r^*}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r^*}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

On prendra ici $R_{cut} = 10.0$. Introduire la condition sur les distances au niveau de la troisième boucle :

```
for i_sym = 1, N_sym
  for i = 1, N
    for j = 1, N...
      if (r_ij < R_cut) then
```

5 – Dans le cas périodique avec troncature, comment adapter le calcul des forces agissant sur les particules ?
Vérifier à nouveau que la somme des forces est bien nulle.