

# Tâches confiées

Heiarii Lou Chao

14 mars 2023

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Prise en main</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Construction de structures cristallines</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Dynamique Moléculaire</b>	<b>2</b>
<b>4</b>	<b>Traitement de données</b>	<b>2</b>
<b>5</b>	<b>Systèmes complexes</b>	<b>2</b>

## 1 Prise en main

Pour la prise en main il a fallu :

- Installer LAMMPS et lire la documentation concernant les fichiers d'entrée (01/02/23)
- Effectuer des simulations de systèmes simples avec LAMMPS (01/02/23) :
  - Systèmes de tailles différentes :  $N = 100$ ,  $N = 1000$  par exemple
  - Ensembles thermodynamiques différents : NVE, NVT
  - Visualisation de grandeurs intéressantes :  $E$ ,  $E_k$ ,  $E_p$ ,  $T$  et  $P$
  - Visualisation de trajectoires
- Effectuer la simulation de la fusion d'un solide cristallin dans les ensembles NVE et NVT (03/02/23) :
  - Faire varier la température : une température basse, une montée de température et une température haute
  - Visualiser la fonction de corrélation de paires
- Préparation d'un système de molécules d'eau

## 2 Construction de structures cristallines

Pour construire les structures, il a fallu :

- Récupérer les mailles primitives des structures cristallines type graphène/graphite : fichiers CIF dans des bases de données comme AMCS et COD
- Dupliquer le réseau de graphite en une super-cellule (VESTA)
- Récupérer la structure de la molécule d'eau
- Étudier les fonctions de corrélation de paires de la molécule d'eau
- Optimiser la disposition des plaques de graphite et des molécules d'eau dans la boîte (PACKMOL)

## 3 Dynamique Moléculaire

Pour rattraper les lacunes en dynamique moléculaire :

- Lire et fichier *Computer Simulation of Liquids* de M. P. ALLEN et D. J. TILDESLEY

## 4 Traitement de données

Pour s'initier au traitement de données, il a fallu :

- Extraire du log de LAMMPS les données et les écrire dans un fichier à part (06/02/23)
- Convertir un fichier de configuration XYZ au format de LAMMPS (27/02/23)
- Lire le fichier des trajectoires pour calculer la RDF et la MSD (08/03/23)

## 5 Systèmes complexes

Pour effectuer des simulations de systèmes plus complexes, il a fallu :

- Lire des articles sur les champs de force réactifs (09/03/23, )
- Compiler LAMMPS sur le cluster MUSE
- Lancer des simulations pour deux modèles de la molécule d'eau (SPCE et ReaxFF) (14/03/23)
-