

Modélisation des verres : de la structure aux propriétés

TP n° 2 : Comparaison de différents potentiels d'interaction

1. Formes analytiques des potentiels d'interaction

Au cours de ce TP nous utiliserons trois potentiels d'interaction pour simuler $\text{Na}_2\text{O}-2 \text{SiO}_2$ liquide à une température de 3500 K. Ces simulations seront effectuées avec le code DLPOLY.

- Le premier potentiel d'interaction est le même que pour le TP n° 1, c'est-à-dire celui de Pedone et al. [*J. Phys. Chem. B* 110 (2006) 11780]. On rappelle sa forme analytique :

$$U(\mathbf{r}^N) = \sum_{j>i} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + D_{ij} \left[\left(1 - e^{-a_{ij}(r_{ij} - r_{ij}^0)} \right)^2 - 1 \right] + \frac{C_{ij}}{r_{ij}^{12}} \quad (1)$$

Il ne contient que des termes de paire. Le premier terme est un terme électrostatique. Les charges sont respectivement de $q = -1.2, 2.4$ et 0.6 pour les atomes d'O, Si et Na. Le second terme est un potentiel de Morse, généralement utilisé pour des liaisons covalentes et le dernier terme est purement répulsif. On remarquera l'absence de termes explicites de dispersion et d'induction (polarisation).

- Le second potentiel d'interaction est celui de Du et Cormack [*J. Non-Cryst. Solids* 349 (2004) 66]. Sa forme analytique est la suivante,

$$U(\mathbf{r}^N) = \sum_{j>i} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + A_{ij} e^{-a_{ij} r_{ij}} - \frac{C_{ij}^6}{r_{ij}^6} \quad (2)$$

avec là aussi des termes de paire uniquement. Pour le terme électrostatique, les charges partielles employées sont les mêmes que précédemment. Le second terme est répulsif et le troisième terme est attractif : il correspond aux effets de dispersion.

- Le dernier potentiel utilisé est celui de Tilocca et al. [*Phys. Rev. B* 73 (2006) 104209]. Celui-ci contient un premier terme de paire

$$U_1(\mathbf{r}^N) = \sum_{j>i} \frac{z_i z_j}{r_{ij}} + A_{ij} e^{-a_{ij} r_{ij}} - \frac{C_{ij}^6}{r_{ij}^6} \quad (3)$$

qui diffère du précédent de par l'emploi de charges entières : $z = -2$ pour O, $+4$ pour Si et $+1$ pour Na. Il contient un terme supplémentaire,

$$U_2(\mathbf{r}^N) = \sum_{i,j,k} \frac{1}{2} k (\theta_{ijk} - \theta^0)^2 \quad (4)$$

où la somme porte sur tous les angles O-Si-O. Ce terme est donc dit à trois corps. De plus Tilocca et al. utilisent le shell-model, ce qui consiste à attribuer une partie de la charge et de la masse de l'O à un atome fictif (O_s dans le fichier CONFIG), qui lui est relié par un potentiel harmonique. Cela revient à créer un dipôle induit sur l'atome d'oxygène. Les effets de polarisation sont donc pris en compte dans ce potentiel. L'atome fictif suit la même dynamique que les atomes réels.

Tous les détails des paramètres sont donnés dans les publications correspondantes, qui sont fournies dans le répertoire /root/BIBLIOGRAPHIE.

2. Simulations à effectuer

Pour les deux premiers potentiels, une simulation de 50 ps sera effectuée dans l'ensemble *NVT*, à une température de 3500 K. Les fichiers nécessaires sont fournis dans les répertoires `/root/TD_POTENTIELS/POT1` et `/root/TD_POTENTIELS/POT2`. On remarquera que pour le potentiel de Pedone et al., une partie des interactions est donnée sous une forme tabulée (fichier `TABLE`) car la forme analytique n'est pas gérée par `DLPOLY`; pour le second potentiel ce problème n'apparaît pas (toutes les interactions sont alors définies dans le fichier `FIELD` uniquement).

Pour le potentiel de Tilocca et al., l'emploi du shell-model nous oblige à utiliser un pas de temps plus petit (0,2 fs contre 1 fs précédemment, pour des raisons similaires à celles évoquées dans le cours sur la DM Car-Parrinello). Modifier le fichier `CONTROL` dans le répertoire `/root/TD_POTENTIELS/POT3` en conséquence.

Comparer les fonctions de distributions radiales et les déplacements quadratiques moyens obtenus pour ces trois potentiels à l'aide des programmes déjà utilisés lors du TP n° 1.