



Proposition d'un sujet de stage de Master de Recherche en Physique*

Titre du Stage : Etude des propriétés d'un fluide à l'état thermodynamique par Modélisation numérique de sa dynamique moléculaire

Encadrant(s) : Med-Ajmi HAJ HAMMOUDA **Email :** ajmi.hammouda@fsm.rnu.tn

Etablissement : ISIMM

Structure de Recherche : Laboratoire de Physique Quantique et Statistique (LR 18 ES 18)

Le Stage sera suivi par une thèse : oui

Résumé du travail :

But : Ce stage de Mastère est consacré à l'étude d'un fluide dans le but de déterminer les propriétés de son état thermodynamique en utilisant des simulations par la méthode de dynamiques moléculaires (DM).

Contexte : La connaissance de l'état thermodynamique d'un fluide passe par la détermination de son énergie interne. Si on admet que l'énergie potentielle d'un tel système est définie par une somme d'interaction de paires d'atomes ou de molécules, l'énergie interne serait une moyenne sur toutes les configurations prises par les constituants au cours du temps. L'une des approches utilisées pour calculer cette énergie, repose sur une simulation des mouvements moléculaires (dynamique moléculaire DM). Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à prédire l'état d'équilibre d'un fluide en adoptant cette approche.

Il s'agit d'appliquer un code de simulation de DM à un système de particules soumises à des interactions (coulombiennes, potentiel du type Lennard-Jones) et cela dans différents ensembles statistiques (NVE, NVT, et NVT). Ensuite on déterminera les propriétés thermodynamiques (pression, température, l'énergie interne, etc.), structurales (fonction de distribution radiale et de structure) et de transport (constante de diffusion, auto-corrélation des vitesses) du système étudié.

Mots clés: Dynamique Moléculaire, interactions atomiques et moléculaires, thermodynamique des fluides, Méthodes d'intégrations numériques.

*NB :

- L'étudiant doit contacter l'encadrant pour plus d'information.
- L'étudiant ne peut commencer son stage qu'après accord de la commission du Master (signature de la fiche du stage par les différentes parties).