

Analyse des propriétés de matériaux sous choc par simulations moléculaires (Monte Carlo et dynamique moléculaire)

**Laurent Soulard
CEA-DAM Ile-de-France**

laurent.soulard@cea.fr

Problématique



- **La DAM est amenée à étudier des matériaux inertes (métaux) ou réactifs (explosifs) soumis à de très fortes sollicitations.**
 - Vitesses de déformation (métaux) $\sim 10^6 \text{ s}^{-1}$.
 - Décompositions chimiques (explosifs) en $\sim 10^{-8} \text{ s}$.
- **Le programme “Simulation” exige une description précise des processus associés.**
 - Expériences spécifiques.
 - Moyens de calculs performants.
 - Méthodes nouvelles de simulation.
- **La dynamique moléculaire classique et le Monte Carlo sont des outils numériques mis en place dans le cadre de ce programme.**

Codes.

- **Code Stamp, développé à la DAM compte tenu de la spécificité très particulière de nos applications.**
 - Code parallèle, bon fonctionnement sur quelques milliers de processeurs (machine TERA-10, CCRT).
 - Bibliothèque de fonctions d'énergie potentielle.
 - ✉ Modèles phénoménologiques : Lennard-Jones, exp-6, REBO, etc.
 - ✉ Modèles applicatifs :
 - [EAM, MEAM (métaux).
 - [EAM, MEAM (métaux).
 - Ensembles thermodynamiques.
 - ✉ NVE, NVT, NPT, NVHug, ...
- **Code Gibbs, co-développé par le CNRS, l'Université Paris XI, l'IFP et le CEA-DAM.**
 - Code parallèle, bon fonctionnement sur quelques dizaines de processeurs.

Fonctions d'énergie potentielle

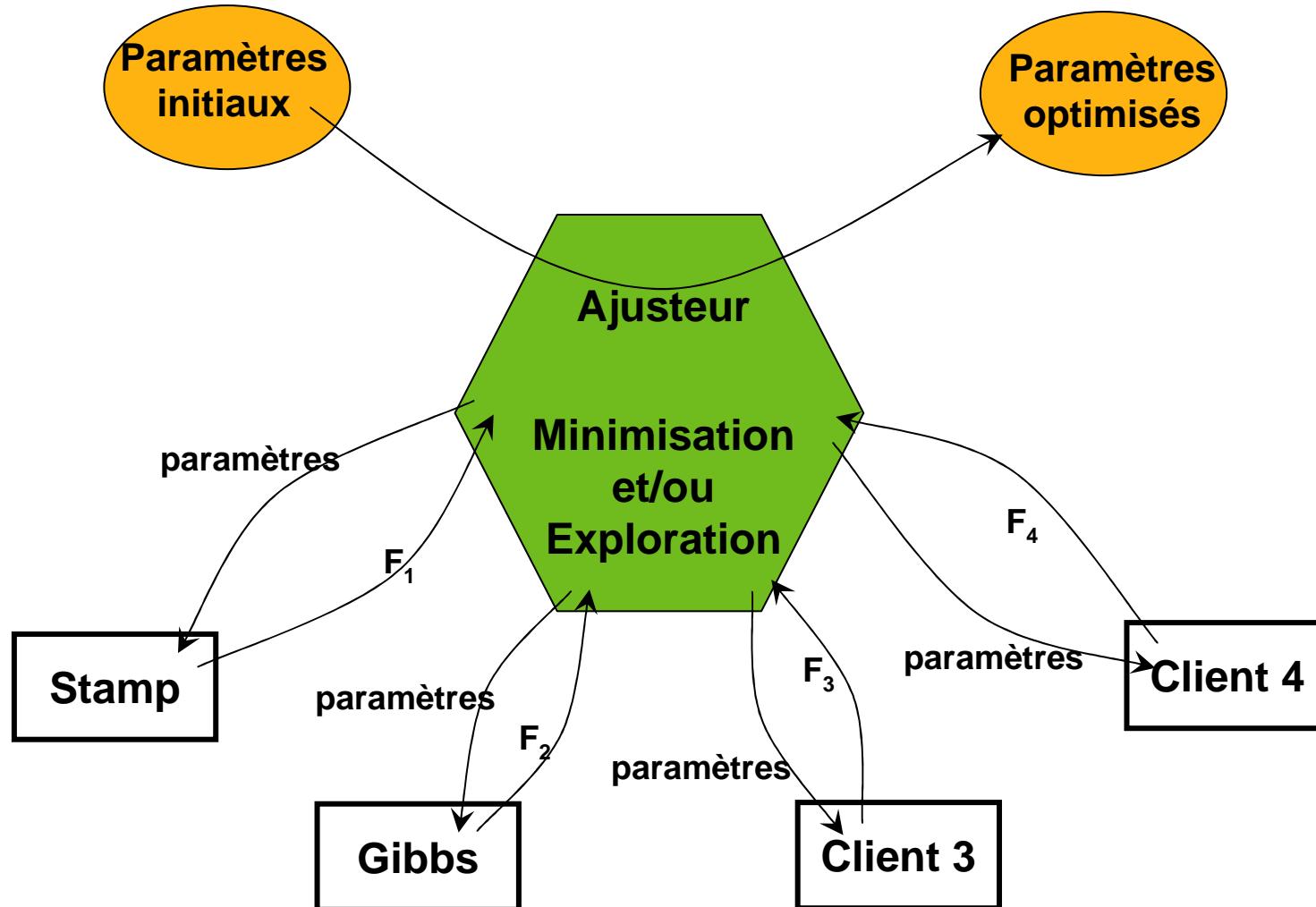


- Ingrédient de base des simulations moléculaires, elles décrivent les interactions entre les atomes ou entre les molécules du système.
- Leur formalisme étant généralement empirique, elles sont spécifiques d'un problème ou d'un matériau donné.
- Elles peuvent être simples (Lennard-Jones : 2 paramètres) ou très complexes (ReaxFF : plusieurs centaines de paramètres).

Systèmes organiques		Métaux
Inertes	Réactifs	
Composante intra-moléculaire + Van der Waals + coulombien	Potentiel de type Bond Order + charges variables.	Lennard-Jones, EAM, MEAM

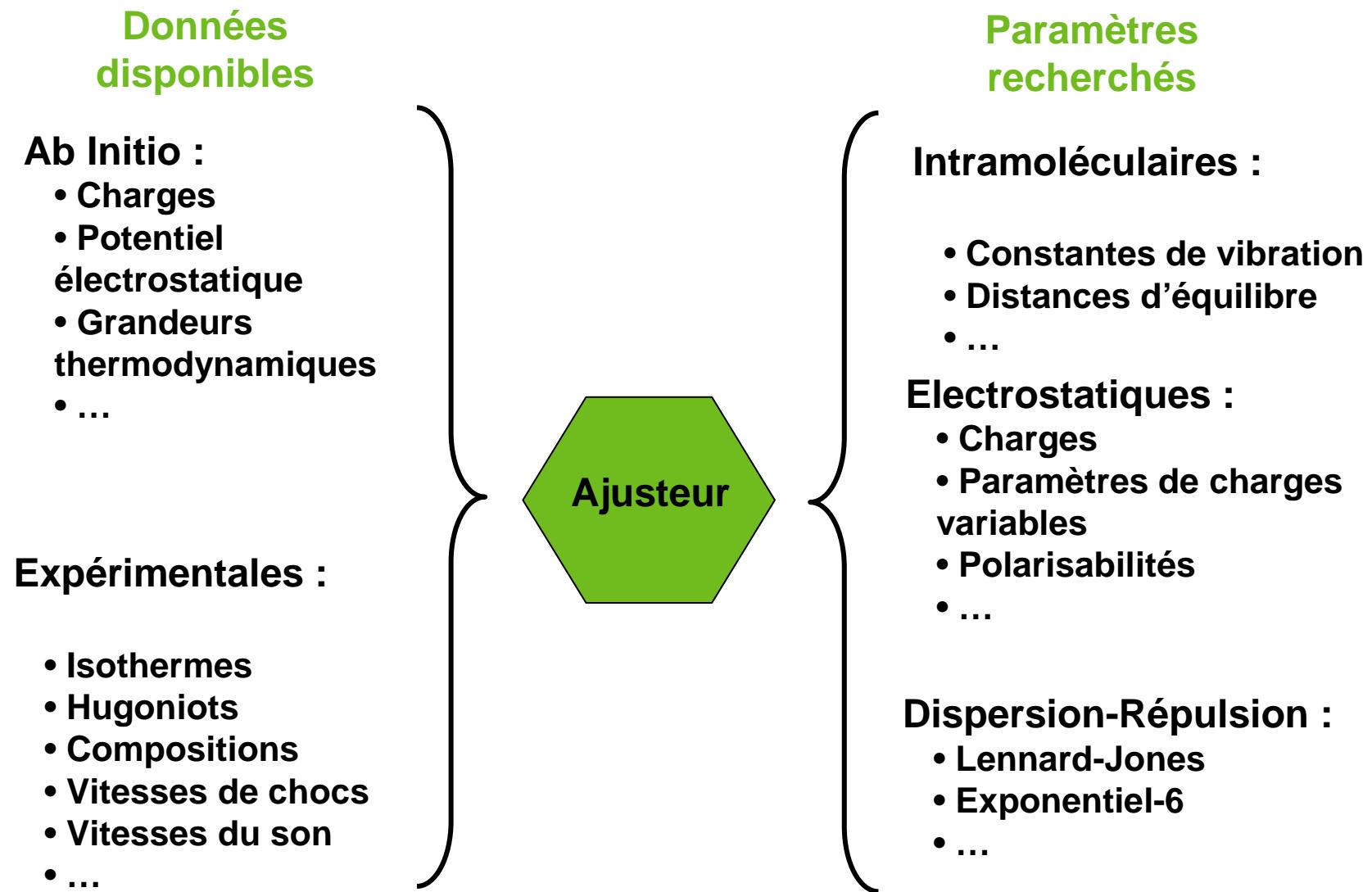
Ajustement des fonctions potentielles

cea



Ajustement des fonctions potentielles

cea



Quelques exemples d'applications.

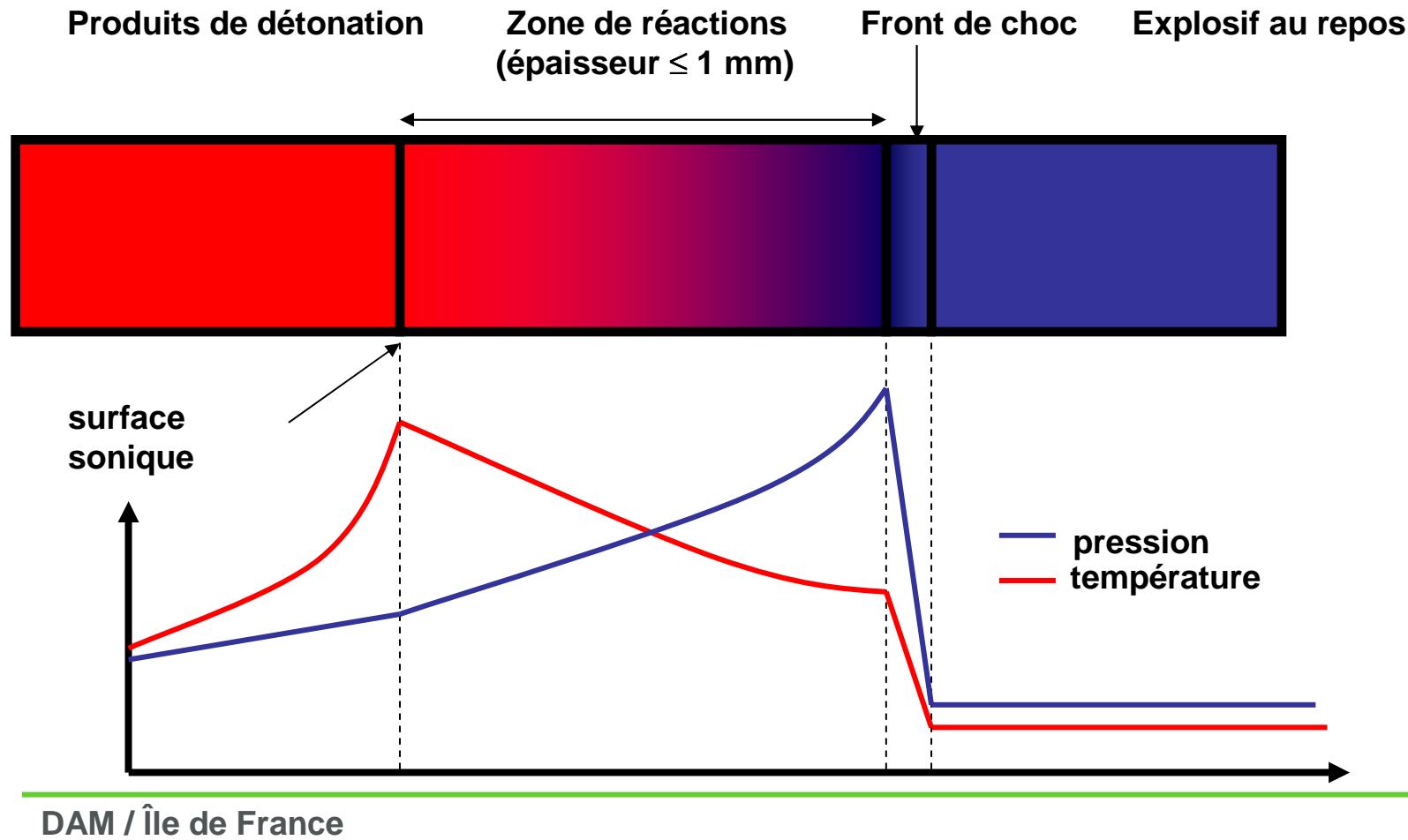


- Propagation d'une onde de détonation.
- Réflexion oblique de deux ondes de détonation.
- Décomposition chimique d'un explosif
- Équation d'état des gaz issus de la détonation
- Physiques des agrégats de carbone.
- Ecaillage d'un monocristal de tantale.
- Ejection de matière.

Propagation d'une onde de détonation.

cea

- Onde de détonation : onde de choc réactive supersonique.
 - Célérité : 5 à 10 km/s.
 - Pression : de 15 à 35 GPa, compression : environ 2.



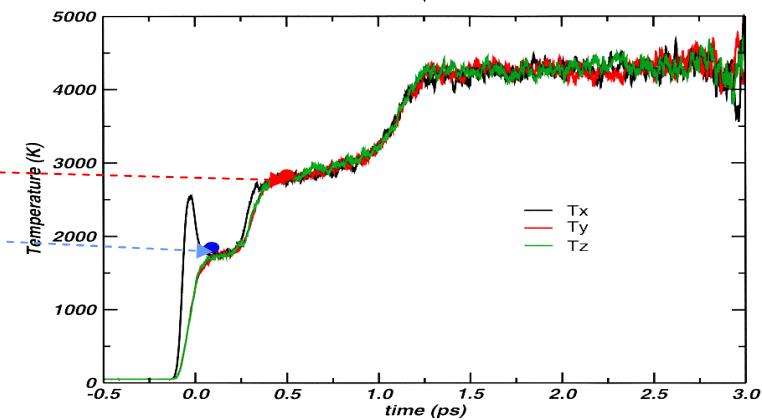
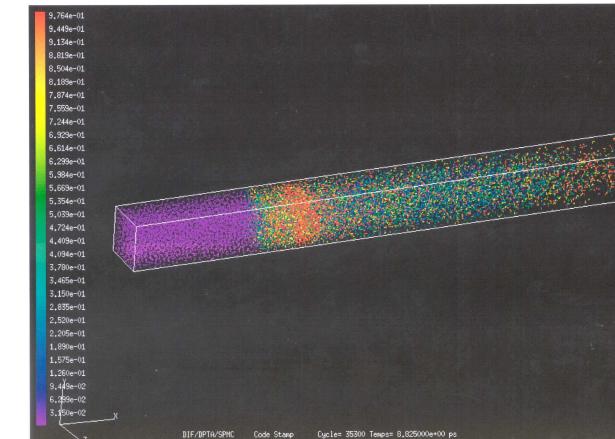
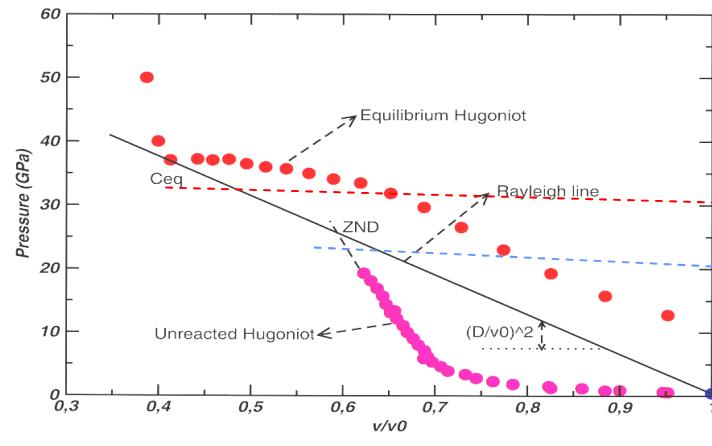
Propagation d'une onde de détonation.

cea

- La dynamique moléculaire est utilisée pour assurer le cadre théorique du travail de modélisation.
 - Comparaison entre simulation DM et modèle hydrodynamique.

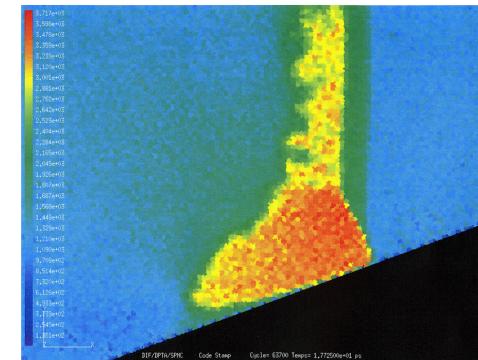
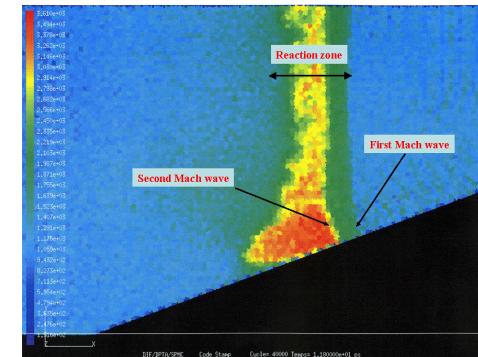
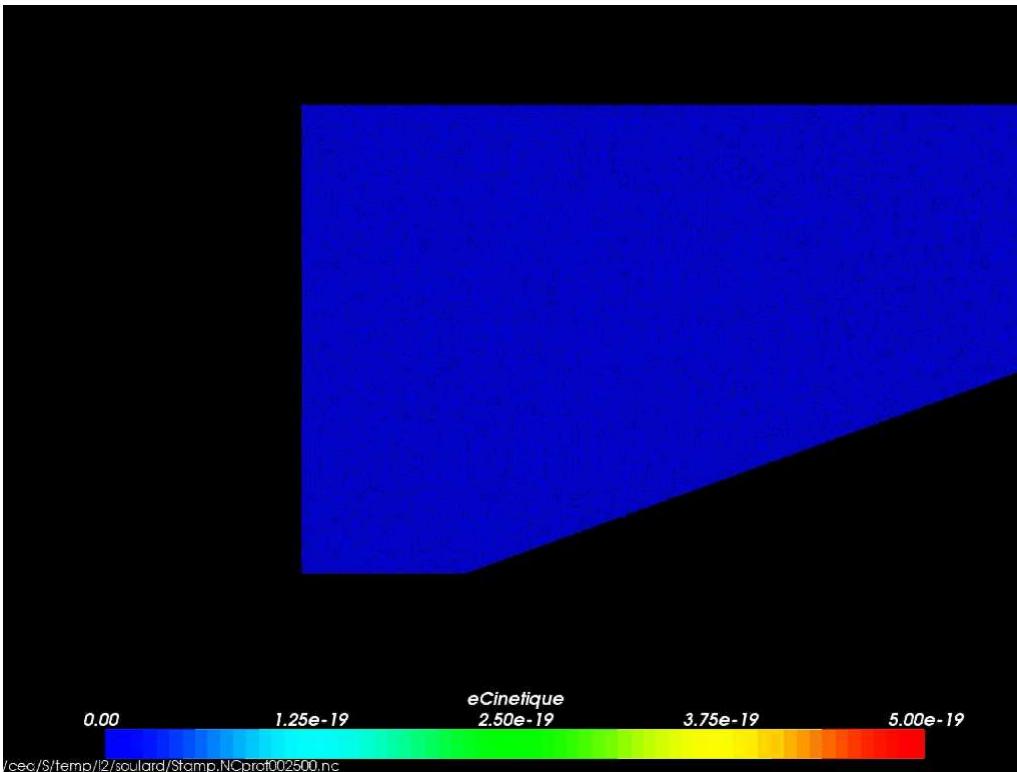
Calcul de DM : potentiel REBO, environ 50 000 atomes.

Modèle hydrodynamique
(ZND + hypothèses thermodynamiques)



Réflexion oblique de deux ondes de détonation.

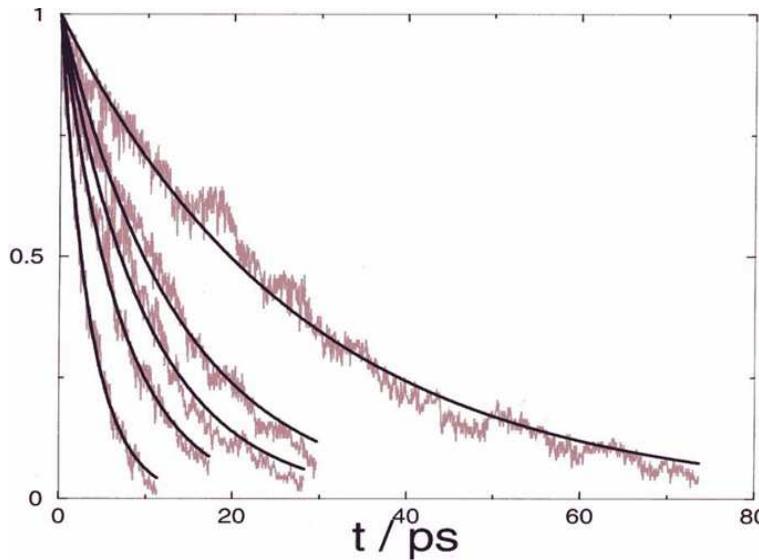
- Le caractère *a priori* instationnaire du processus nécessite un calcul sur des temps plus longs, impliquant un système de grande taille.
- Dimension retenue : 7 millions de molécules, environ 300 000 pas de temps (75 ps).



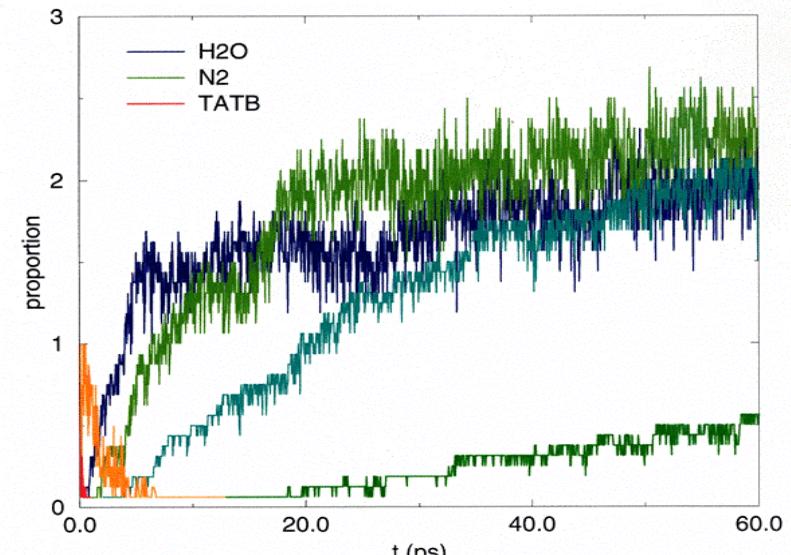
Décomposition chimique d'un explosif.

cea

- Recherche d'informations quantitatives sur les processus chimiques survenant dans la zone de réaction.
- Epaisseur < 1mm, vitesse entre 5 et 10 km/s, compression ~ 2.
- Simulation par dynamique moléculaire.
 - Potentiel ReaxFF, proposé par le CalTech (USA) et implanté dans le code Stamp.
 - ReaxFF est un potentiel à ordre de liaison et à charges variables.



Nitrométhane CH₃NO₂:



TATB C₆H₆O₆N₆

Équation d'état des gaz issus de la détonation

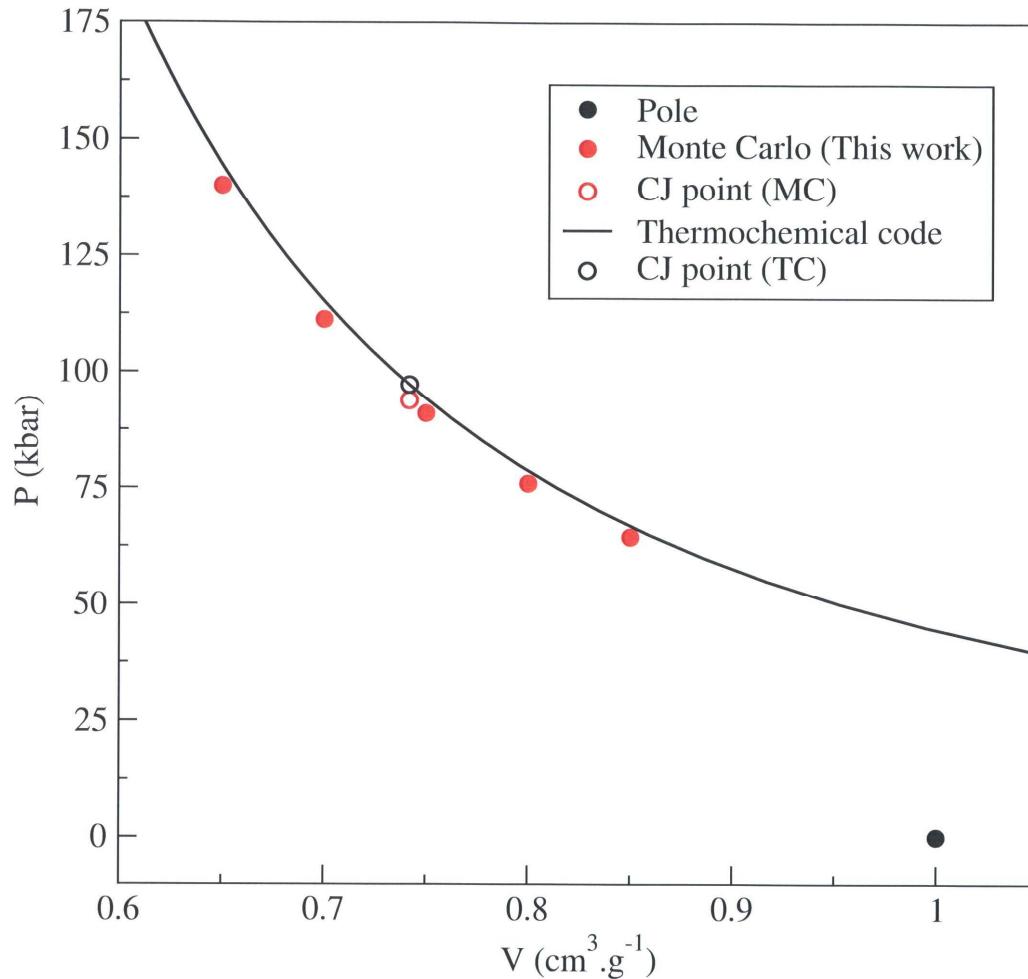
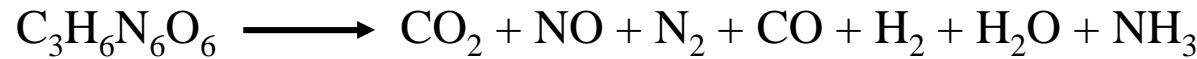
cea

- La détonation produit des gaz sous haute pression (10-50GPa) et haute température (3000-5000K) dont il faut connaître avec précision l'équation d'état.
 - Mélange de molécules « simples » en équilibre chimique.
- Nécessité de l'implantation d'une technique Monte Carlo spécifique (le Monte Carlo Réactif) associée à une méthode de calcul de l'Hugoniot.

Exemple : calcul de l'Hugoniot

cea

RDX



Célérité de détonation

Expérience : **6050 m.s⁻¹**

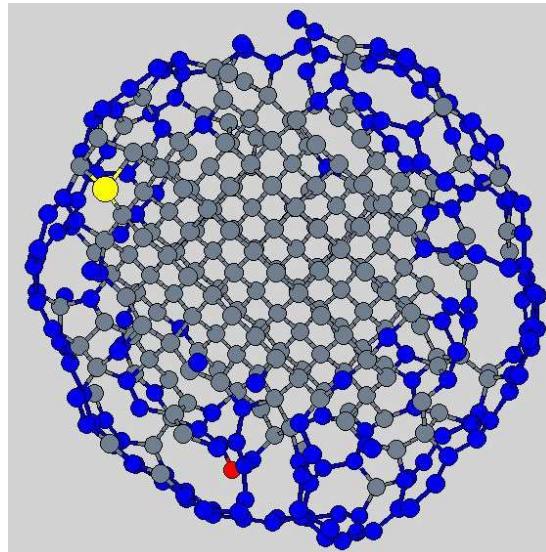
Monte Carlo : **6028 m.s⁻¹**

Thermochimie : **6137 m.s⁻¹**

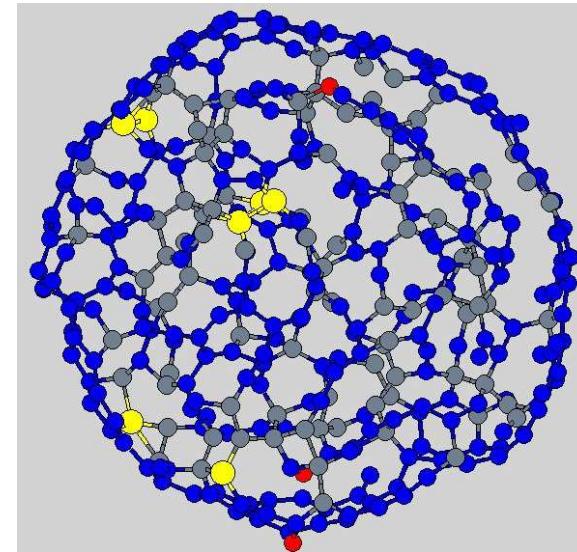
Physique des agrégats de carbone.

cea

- Les gaz issus de la détonation peuvent contenir des agrégats de carbone solide (graphite, diamant) dont il faut connaitre les propriétés dynamiques (croissance, coalescence) et thermodynamiques (effets de taille) dans un environnement thermodynamique sévère (une dizaine de GPa, quelques milliers de K).
- Potentiel LCBOP2 (potentiel à ordre de liaison spécialisé pour le traitement du carbone), utilisable en DM et MC.



4000 K and 30 GPa

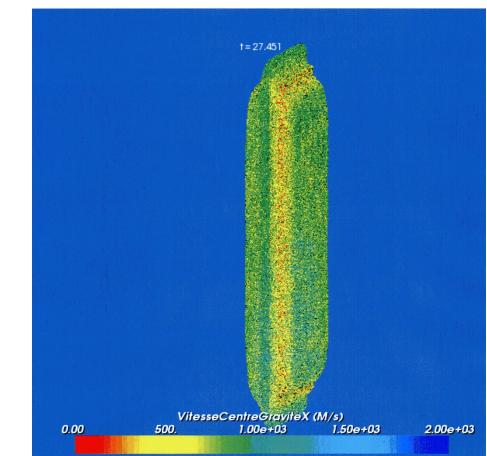
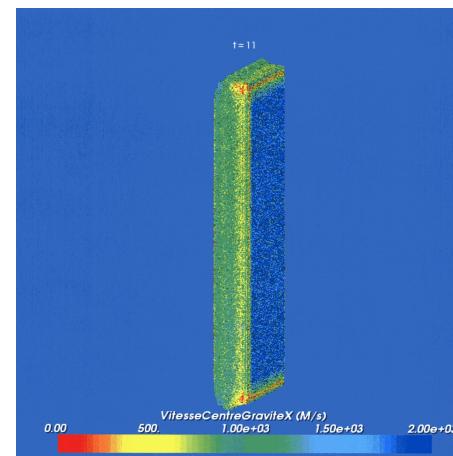
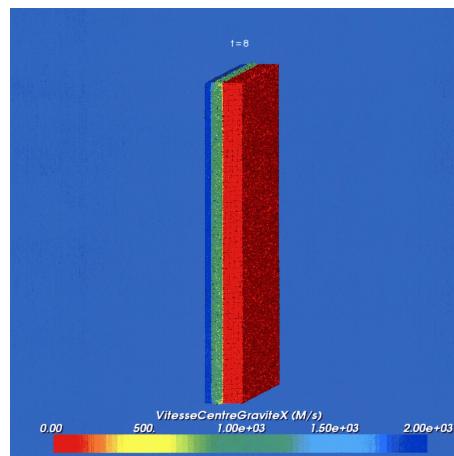
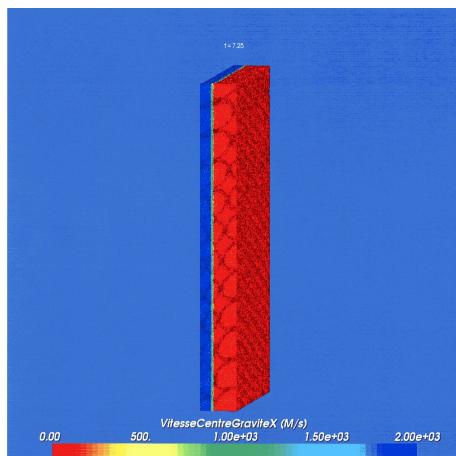


5000 K and 35 GPa

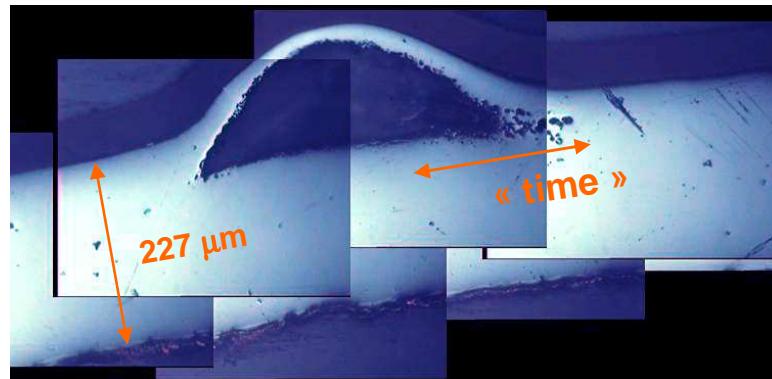
Endommagement sous choc : l'écaillage

cea

- Processus résultant du croisement de deux faisceaux de détentes.
- Tantale, potentiel MEAM, bords libres, 54×10^6 atomes.
- Comparaison quasi-directe avec l'expérience.

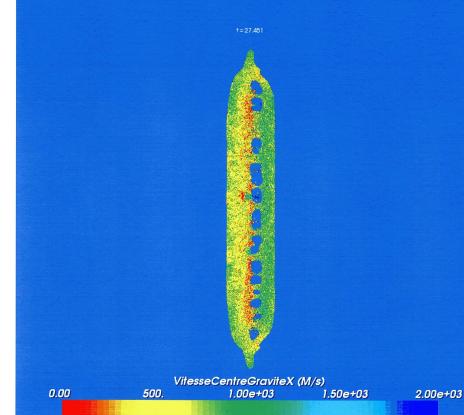


Impact

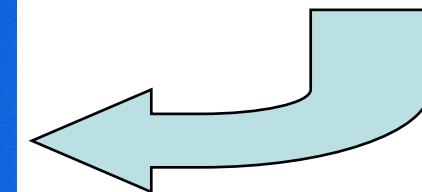


Propagation des chocs

Réflexion des détentes



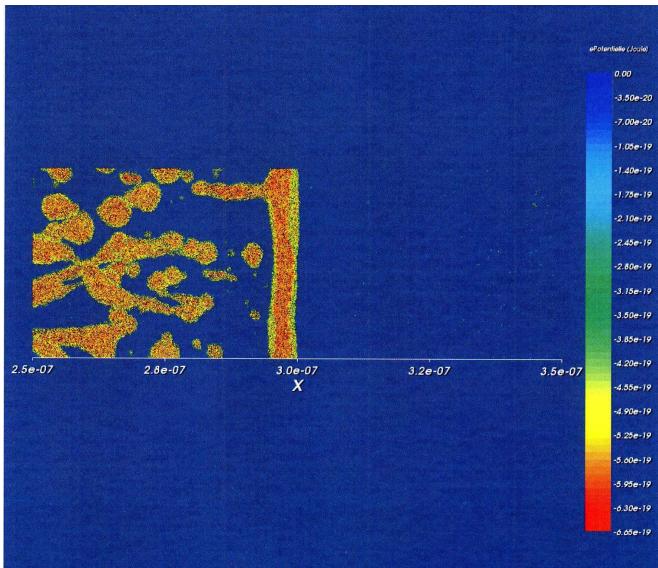
Etat final



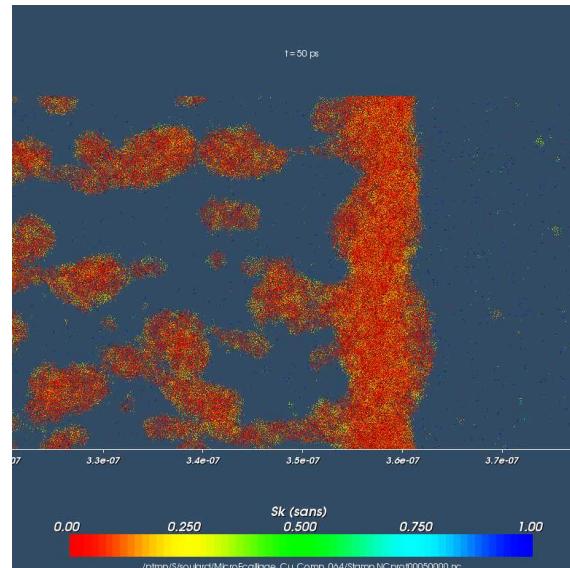
Endommagement sous choc : éjection de matière

cea

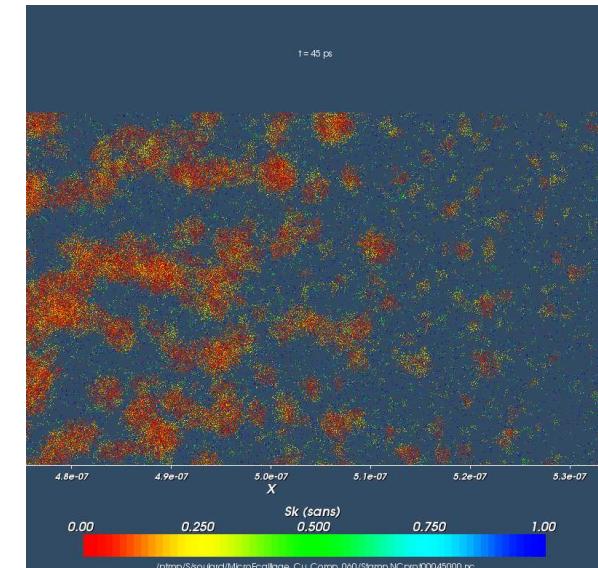
- La réflexion d'un choc sur un bord libre peut provoquer l'éjection d'une quantité plus ou moins importante de matière.
- Monocristal de cuivre, potentiel EAM.



$\rho_0 / \rho = 0.67$
P< Point de fusion sous choc



$\rho_0 / \rho = 0.64$
P≈ Point de fusion sous choc



$\rho_0 / \rho = 0.60$
P>> Point de fusion sous choc