



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).
 - 📄 ReaxFF, LCBOP2 (systèmes organiques).
 - 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.

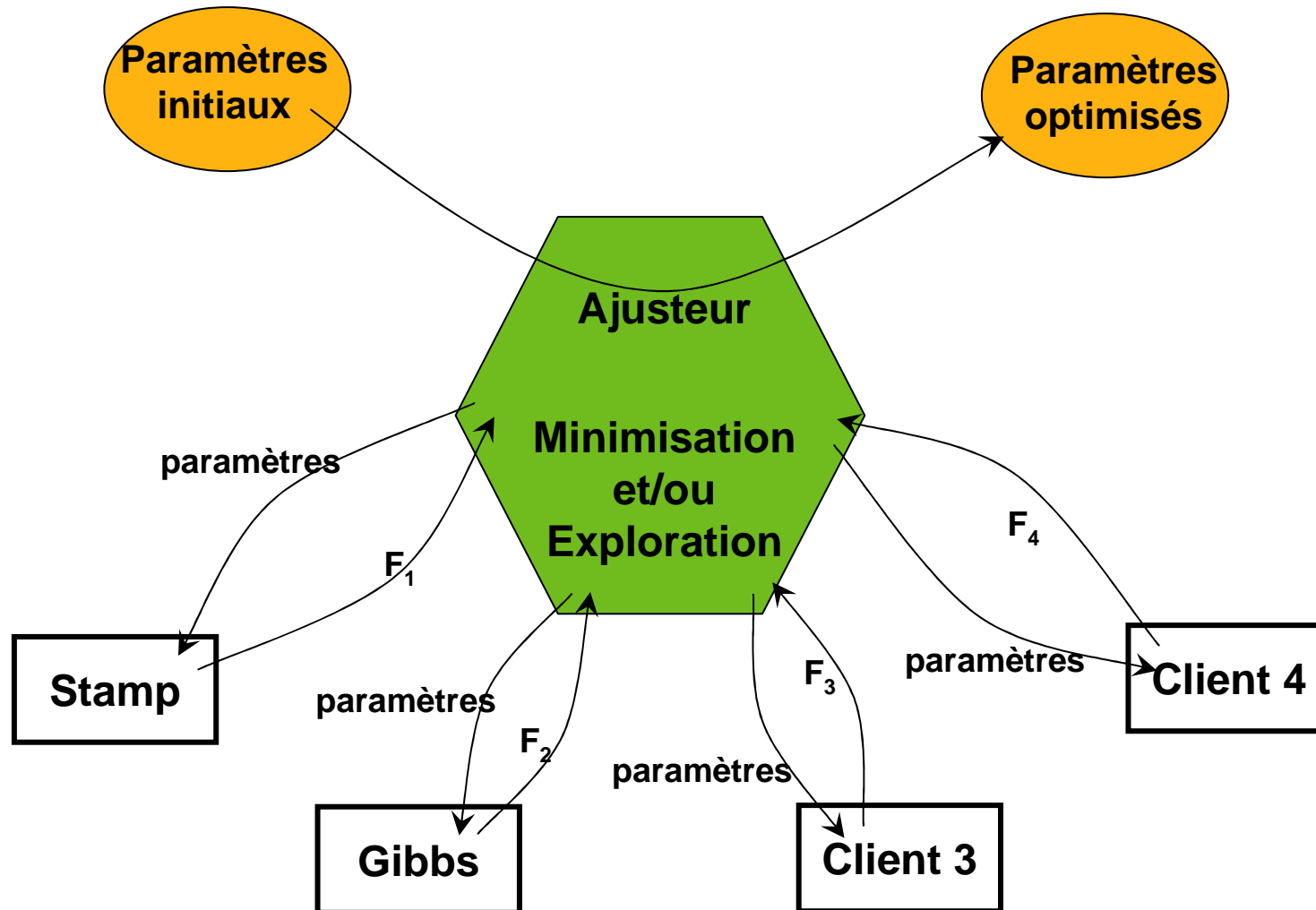
Fonctions d'énergie potentielle



- **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	Lennard-Jones, EAM, MEAM
Composante intra-moléculaire + Van der Waals + coulombien	Potentiel de type Bond Order + charges variables.	

Ajustement des fonctions potentielles



Ajustement des fonctions potentielles



Données disponibles

Ab Initio :

- Charges
- Potentiel électrostatique
- Grandeurs thermodynamiques
- ...

Expérimentales :

- Isothermes
- Hugoniots
- Compositions
- Vitesses de chocs
- Vitesses du son
- ...

Ajusteur

Paramètres recherchés

Intramoléculaires :

- Constantes de vibration
- Distances d'équilibre
- ...

Electrostatiques :

- Charges
- Paramètres de charges variables
- Polarisabilités
- ...

Dispersion-Répulsion :

- Lennard-Jones
- Exponentiel-6
- ...

Quelques exemples d'applications.

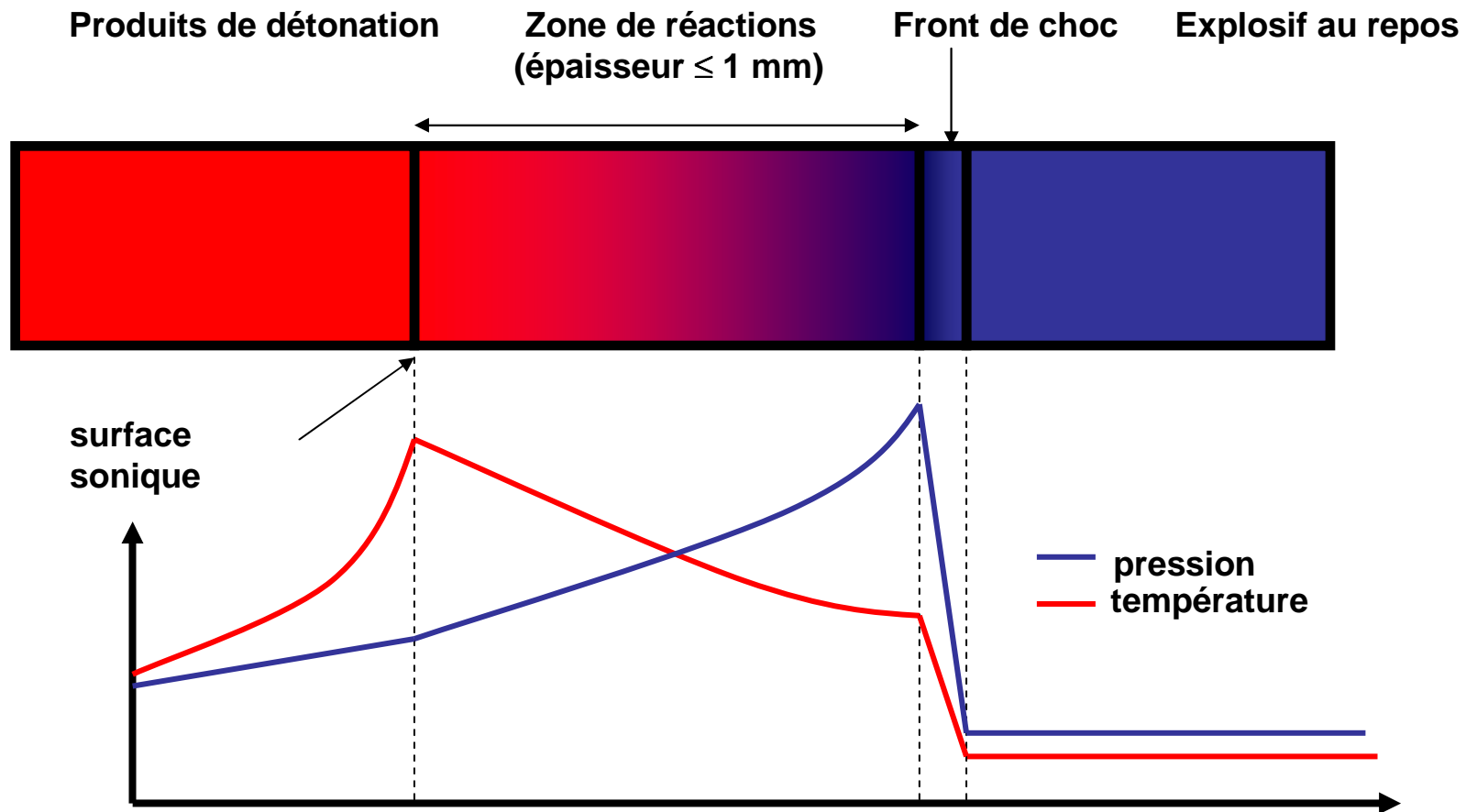


- **Propagation d'une onde de détonation.**
- **Réflexion oblique de deux ondes de détonation.**
- **Décomposition chimique d'un explosif**
- **Équation d'état des gaz issus de la détonation**
- **Physiques des agrégats de carbone.**
- **Ecaillage d'un monocristal de tantale.**
- **Ejection de matière.**

Propagation d'une onde de détonation.



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

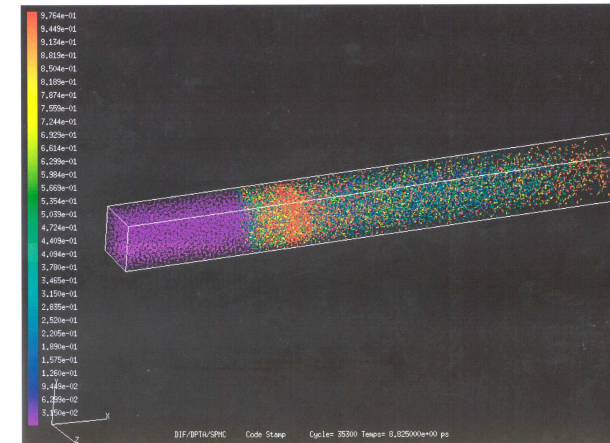


Propagation d'une onde de détonation.

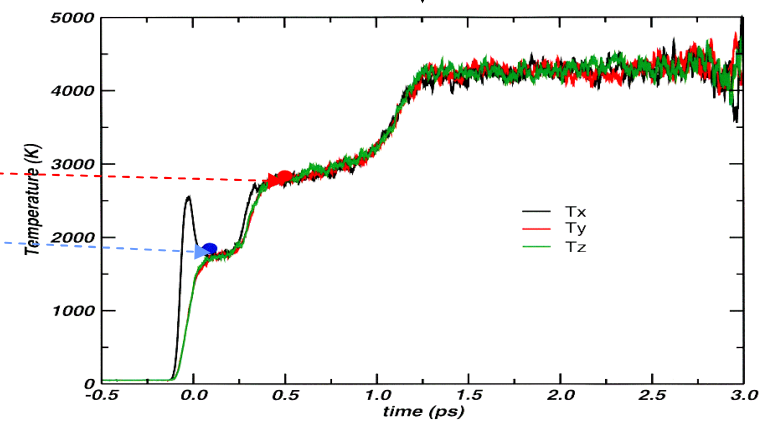
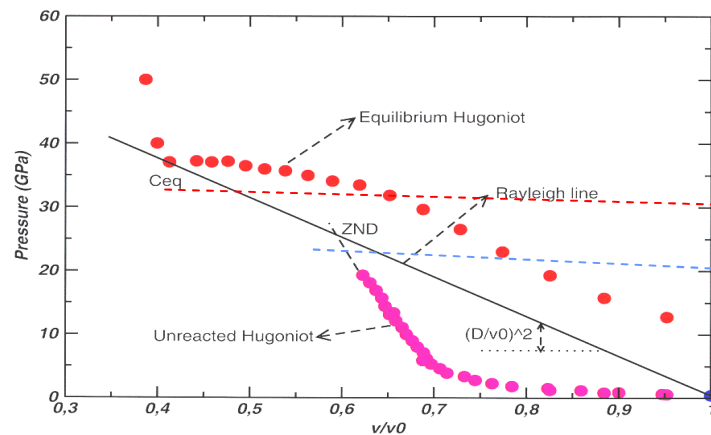


- La dynamique moléculaire est utilisée pour asseoir le cadre théorique du travail de modélisation.
 - Comparaison entre simulation DM et modèle hydrodynamique.

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

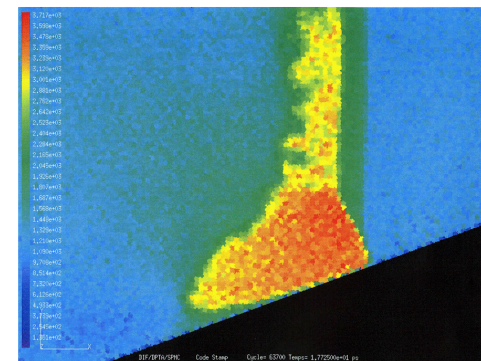
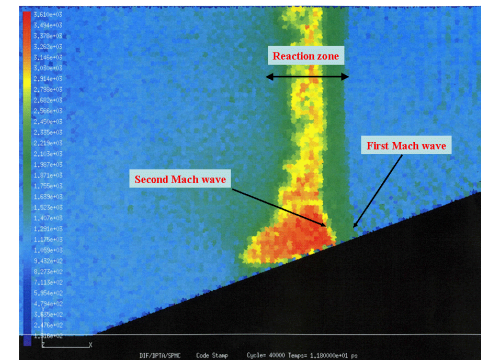
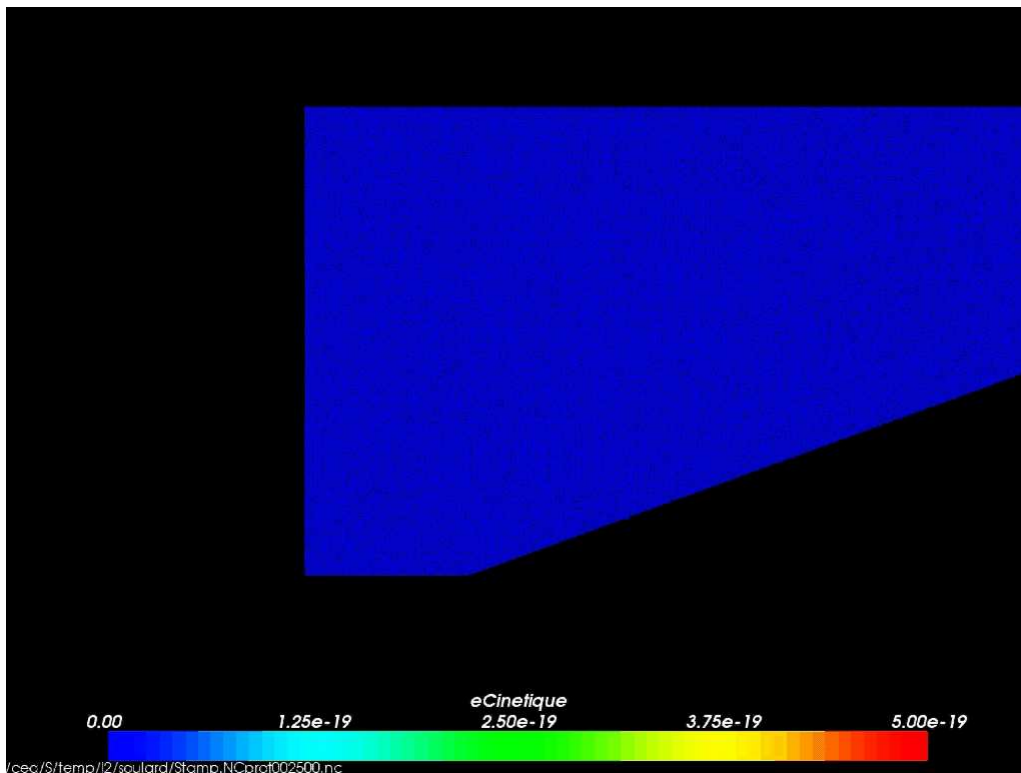


Modèle hydrodynamique
(ZND + hypothèses thermodynamiques)



Réflexion oblique de deux ondes de détonation.

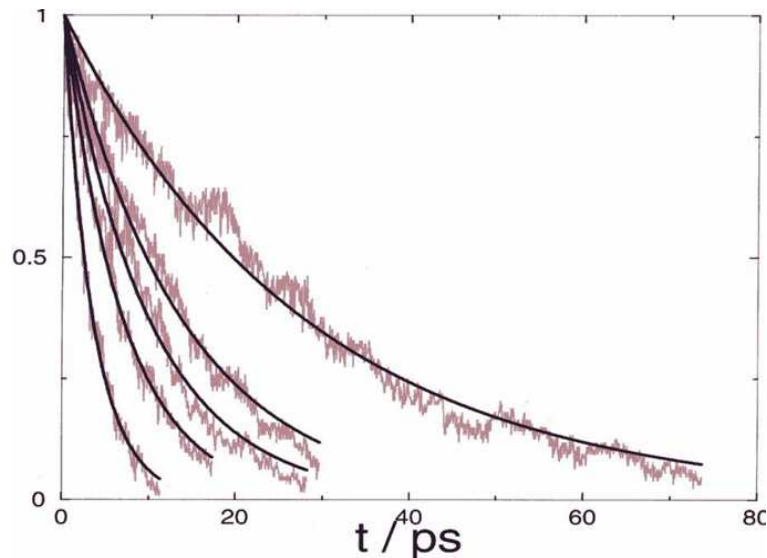
- Le caractère *a priori* instationnaire du processus nécessite un calcul sur des temps plus longs, impliquant un système de grande taille.
- Dimension retenue : 7 millions de molécules, environ 300 000 pas de temps (75 ps).



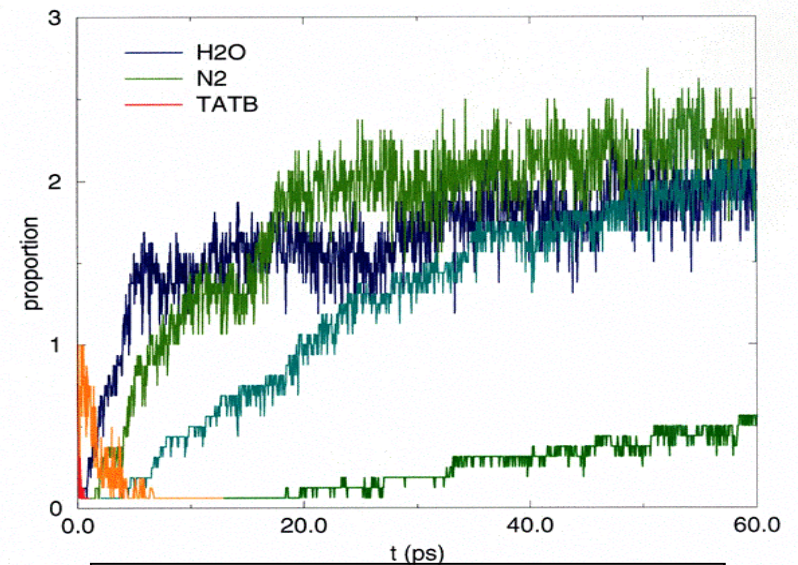
Décomposition chimique d'un explosif.



- 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 CH_3NO_2



TATB $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_6\text{N}_6$

Équation d'état des gaz issus de la détonation

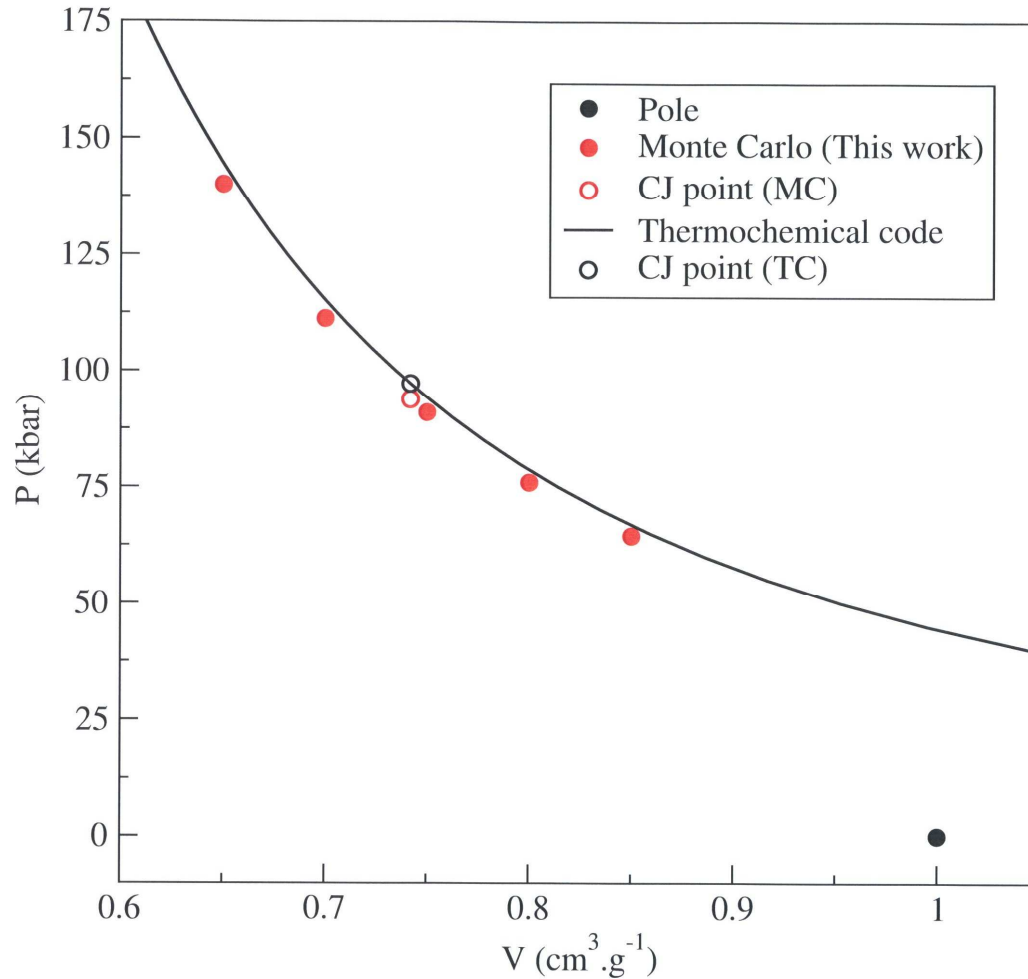
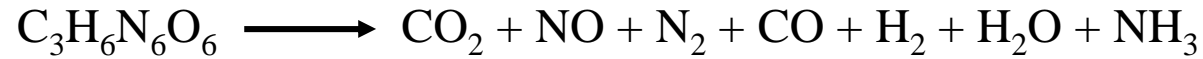


- La détonation produit des gaz sous haute pression (10-50GPa) et haute température (3000-5000K) dont il faut connaître avec précision l'équation d'état.
 - Mélange de molécules « simples » en équilibre chimique.
- Nécessité de l'implantation d'une technique Monte Carlo spécifique (le Monte Carlo Réactif)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

Exemple : calcul de l'Hugoniot



RDX



Célérité de détonation

Expérience : **6050 m.s⁻¹**

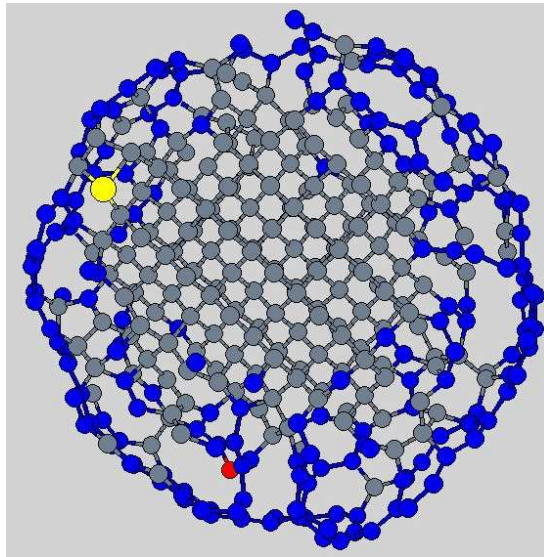
Monte Carlo : **6028 m.s⁻¹**

Thermochimie : **6137 m.s⁻¹**

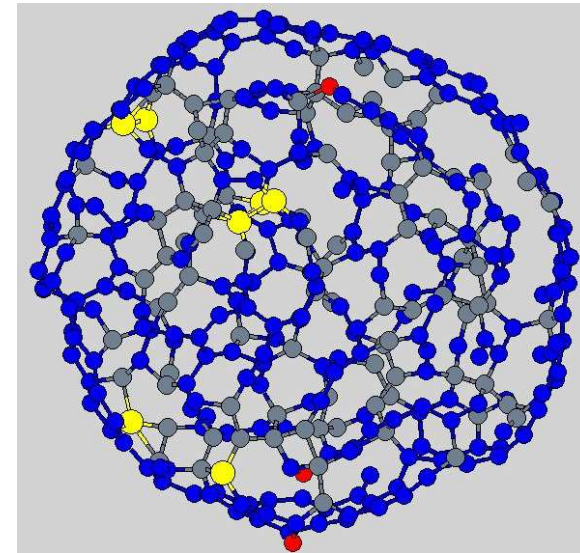
Physique des agrégats de carbone.



- Les gaz issus de la détonation peuvent contenir des agrégats de carbone solide (graphite, diamant) dont il faut connaître 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

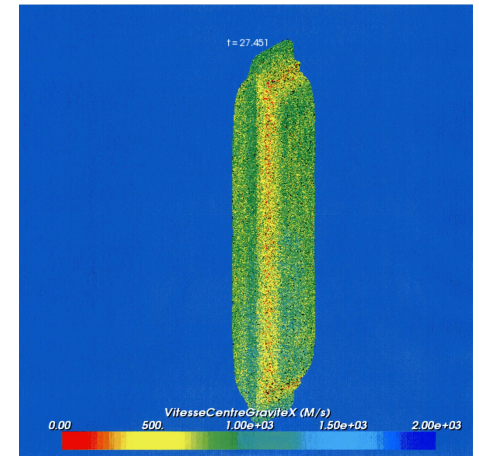
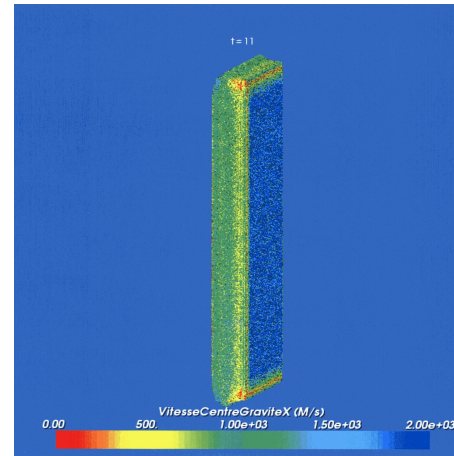
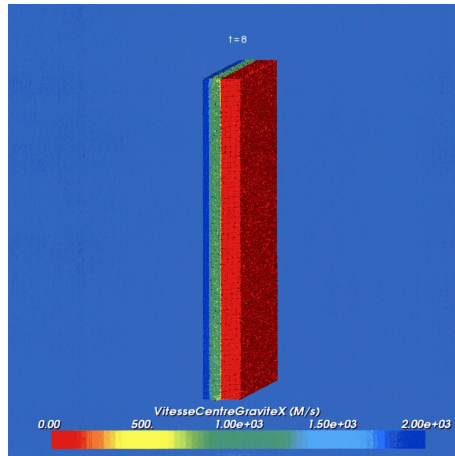
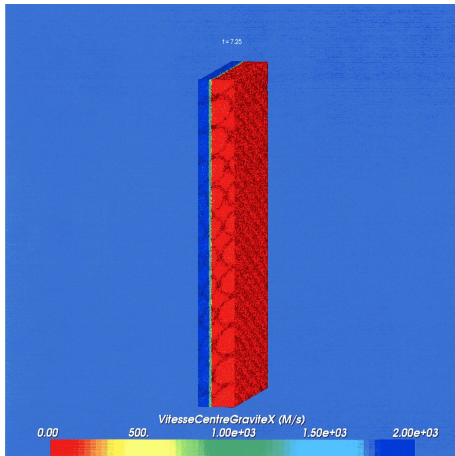


5000 K and 35 GPa

Endommagement sous choc : l'écaillage



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

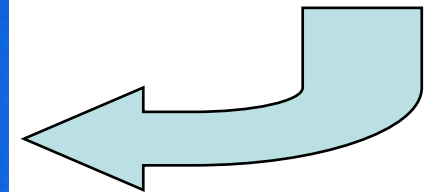
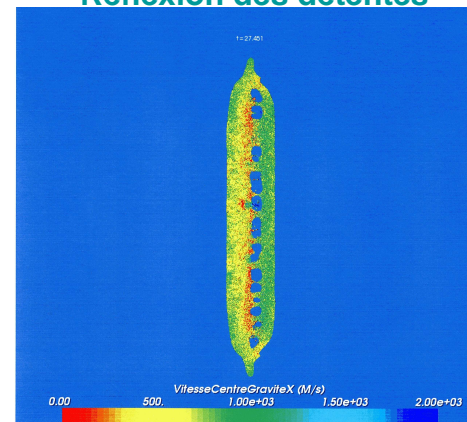
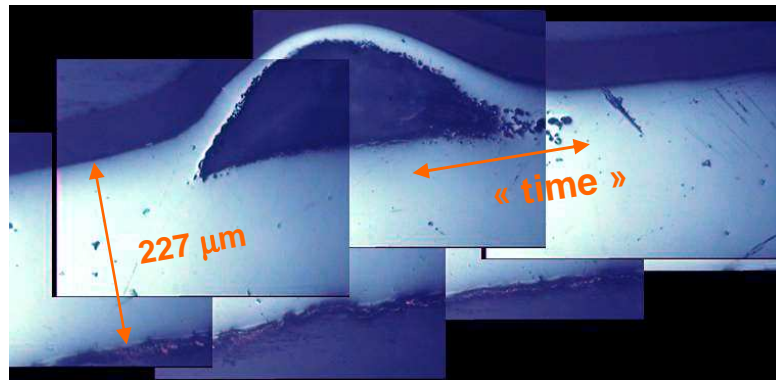


Impact

Propagation des chocs

Réflexion des détonantes

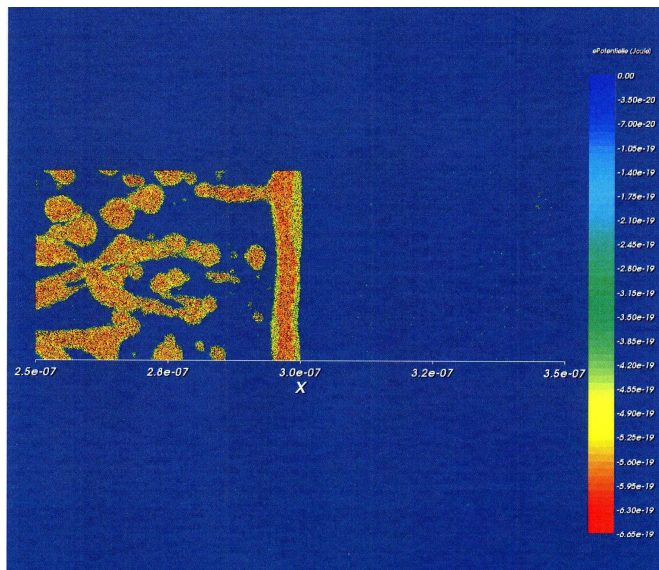
Etat final



Endommagement sous choc : éjection de matière

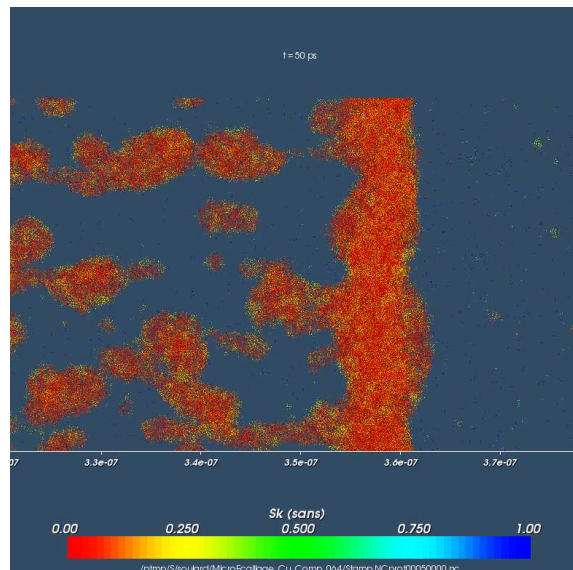


- La réflexion d'un choc sur un bord libre peut provoquer l'éjection d'une quantité plus ou moins importante de matière.
- Monocristal de cuivre, potentiel EAM.



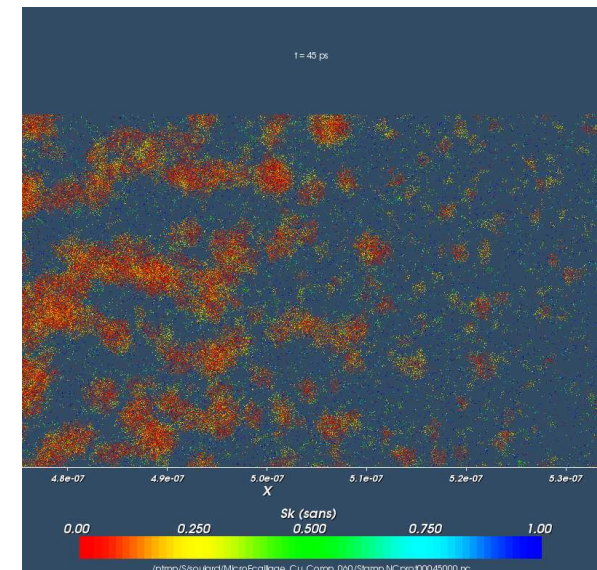
$$\rho_0 / \rho = 0.67$$

$P <$ Point de fusion sous choc



$$\rho_0 / \rho = 0.64$$

$P \approx$ Point de fusion sous choc



$$\rho_0 / \rho = 0.60$$

$P \gg$ Point de fusion sous choc