

Simulation de l'éjection de matière sous choc par dynamique moléculaire

O. DURAND - L. SOULARD / CEA-DAM Île-de-France

Lorsqu'un matériau métallique est traversé par une onde de choc très intense, sa surface libre peut passer en fusion à la réflexion de l'onde et éjecter un nuage de particules micrométriques (éjecta). Les hétérogénéités métallurgiques et géométriques de la surface sont la principale cause de ce phénomène. Sa restitution par un code de calcul macroscopique est à l'heure actuelle très difficile car les mécanismes et propriétés physiques mis en jeu dans ces conditions extrêmes sont encore loin d'être parfaitement modélisés. Nous développons depuis peu une approche inédite au CEA/DAM qui consiste à simuler l'éjection à l'échelle atomistique par dynamique moléculaire. Cette approche apporte beaucoup à la compréhension du phénomène car elle permet de mesurer des distributions de tailles de particules et d'identifier ainsi des mécanismes élémentaires de fragmentation, transposables, dans une certaine mesure, au monde macroscopique.

L'approche atomistique pour simuler l'éjection offre plusieurs avantages : elle permet de s'affranchir de tout effet de maillage et d'approximation de modèle physique inhérents à une approche macroscopique, puisque le comportement de la matière est simulé directement à partir du mouvement des atomes. En revanche, elle ne permet de traiter que des systèmes de taille nanométrique ; elle se veut donc complémentaire de l'approche macroscopique. Afin d'étudier l'éjection par cette approche et de bénéficier d'une statistique suffisante pour les éjecta, nous avons développé une nouvelle méthode (méthode hybride) permettant de traiter des systèmes de plusieurs centaines de millions d'atomes sur des temps de calcul raisonnables [1]. Nous avons également développé des outils d'analyse spécifiques pour mesurer la forme et la taille des agrégats [1].

Le principe de la méthode hybride consiste à séparer le système en une zone volumique et une zone surfacique (figure 1), et à les traiter différemment durant la phase d'initialisation. Les atomes de la zone volumique sont portés dans un état de choc correspondant à une densité donnée par un calcul de quasi-équilibre. Par ce biais, le temps physique de simulation est indépendant du nombre d'atomes et convient donc à des systèmes de grande taille. La zone surfacique est équilibrée simultanément à pression quasi nulle et à 300 K. L'équilibre atteint dans les deux zones, les particules de la zone volumique sont mises en mouvement avec la vitesse matérielle u_p correspondant à l'état de choc, et le calcul se poursuit pour les deux zones dans l'ensemble microcanonique afin de rendre compte du

caractère hors équilibre de l'éjection. Les simulations sont réalisées à l'aide du code Stamp du CEA/DAM, en parallèle, sur typiquement 4 000 cœurs du calculateur Tera 100. Elles profitent pleinement des moyens de calcul actuels de la DAM.

Dans l'exemple décrit sur la figure 1, un cristal de cuivre, de dimensions 176 nm × 88 nm × 88 nm et contenant environ 125 millions d'atomes, est mis au contact du vide. Il présente une rugosité de surface sinusoïdale de période 29,3 nm et de profondeur 10 nm ; il est soumis à un choc se propageant dans la direction O_x ($u_p = 3\,636$ m/s). La figure 2 montre l'évolution du système aux premiers instants de l'éjection (typiquement 60 ps après le début de l'éjection) et à des instants plus tardifs (200 et 800 ps). Aux premiers instants, l'in-

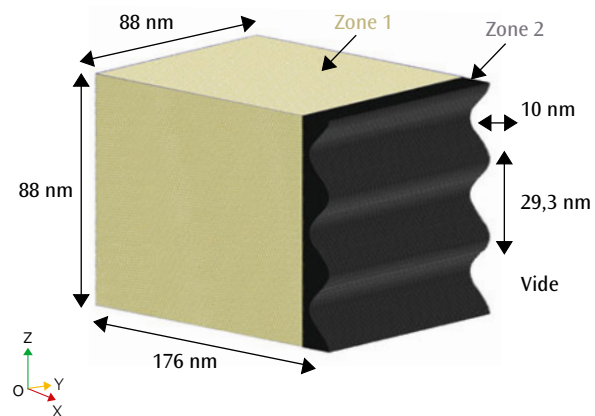


Figure 1. Principe de la méthode hybride. Le système est séparé en une zone volumique (zone 1) et une zone surfacique (zone 2) traitées différemment afin de diminuer sensiblement le temps de calcul.

teraction de l'onde de choc plane avec les vallées de la sinusoïde donne naissance à 3 nappes d'atomes qui commencent à se fragmenter différemment, de manière stochastique, en raison de la forte agitation thermique des atomes.

À des instants plus tardifs, typiquement au-delà de 200 ps, la fragmentation des nappes est bien développée et les filaments de métal liquide qui en résultent finissent par se détacher complètement du reste du cristal. Ce dernier peut alors être éliminé des calculs, rendant les simulations moins coûteuses, qui peuvent être poursuivies sur des temps longs (typiquement 1 ns). La fragmentation la plus tardive est celle de la tête de jet qui reste intègre et cylindrique jusqu'à environ 200 ps. Au-delà de 800 ps, toutes les particules sont devenues sphériques.

Les distributions sur une échelle log-log, à différents instants au-delà de 200 ps, du nombre N de particules éjectées en fonction de leur volume V sont reportées sur la **figure 3**. Elles sont identiques et montrent que le système a atteint un état stable. Elles suivent un comportement générique composé de 3 parties distinctes. La première partie concerne les plus petits agrégats : elle est

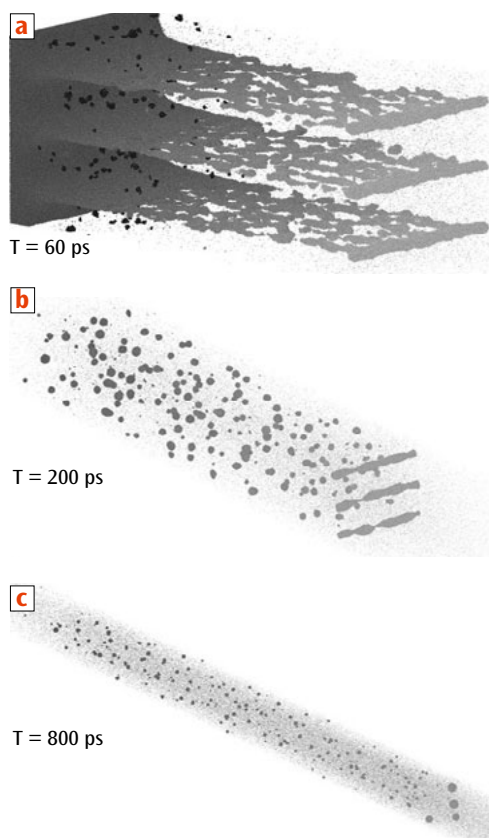


Figure 2. Évolution du système (vue oblique). (a) : aux premiers instants de l'éjection, typiquement 60 ps après le début de l'éjection, (b) : 200 ps et (c) : 800 ps après le début de l'éjection. Au-delà de 800 ps, toutes les particules sont devenues sphériques

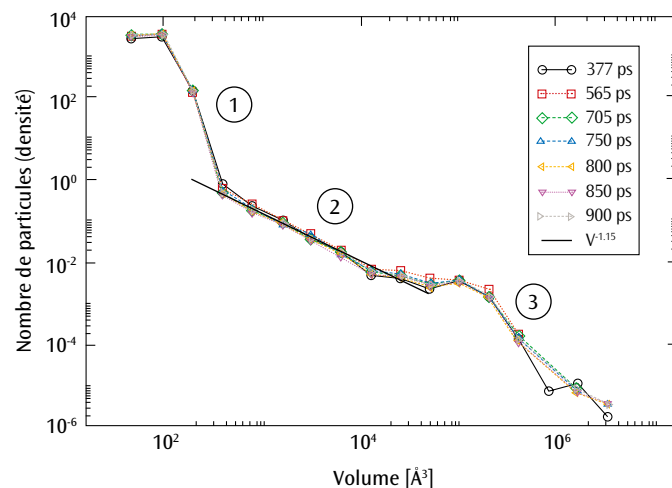


Figure 3. Distribution sur une échelle log-log du nombre de particules éjectées en fonction de leur volume, pour différents instants au-delà de 200 ps.

attribuée à l'évaporation (atomisation) du métal liquide visible sur la **figure 2** autour des nappes. La partie du milieu correspond à une variation en loi de puissance de type $N(V) \propto V^{-\alpha}$, avec $\alpha \sim 1,15$, et la dernière partie obéit à une forme exponentielle. Ces deux dernières lois se retrouvent très communément dans les études publiées sur la fragmentation, en ayant pour origine des mécanismes bien distincts [2]. Le mécanisme à l'origine de la loi de puissance fait encore l'objet de débats, mais l'existence d'une telle loi présente un intérêt car, à l'inverse d'une exponentielle, elle ne fait appel à aucune grandeur caractéristique : elle résulte en général d'un phénomène invariant d'échelle. Elle devrait donc également exister à des échelles supérieures aux nôtres, notamment micrométriques. Ce point très important reste à confirmer.

L'approche que nous développons pour simuler l'éjection de matière par dynamique moléculaire montre donc son intérêt et semble très prometteuse. Elle permet d'accéder à des distributions de tailles de particules et d'identifier des mécanismes distincts de fragmentation. Cette première étude porte sur le cuivre mais nous avons également entamé des simulations avec l'étain afin de rendre plus facile une comparaison simulation-expérience. Par ailleurs, l'origine des deux composantes de la distribution fait actuellement l'objet d'une étude approfondie.

Références

- [1] O. DURAND, L. SOULARD, "Large-scale molecular dynamics study of jet breakup and ejecta production from shock-loaded copper with a hybrid method", *J. Appl. Phys.*, **111**, 044901 (2012).
- [2] D. E. GRADY, "Length scales and size distributions in dynamic fragmentation", *Int. J. Fract.*, **163**, p. 85-99 (2010).