

# Calcul des tensions de surface des liquides métalliques

■ E. BOURASSEAU / CEA – DAM Île-de-France

Lorsqu'une onde de choc débouche sur la surface libre d'un métal, la présence de défauts peut provoquer une éjection de matière sous forme de nappes liquides. On peut montrer expérimentalement que ces nappes s'étirent puis se fragmentent pour former des gouttes nanométriques. Des études menées au CEA – DAM Île-de-France ont établi que la restitution de ce phénomène par un code hydrodynamique passait par la compréhension de la physique liée à l'interface entre le métal et le milieu extérieur. Ainsi, une des données primordiales à prendre en compte dans les codes hydrodynamiques est la tension de surface de cette interface. Or, cette propriété est difficile à mesurer expérimentalement. Nous avons donc utilisé la simulation microscopique (à l'échelle des atomes) pour déterminer la tension de surface de systèmes métalliques.

La tension de surface se manifeste lorsqu'on étire l'interface entre deux phases. Une force de rappel apparaît, qui est proportionnelle à la largeur d'étirement; la tension de surface est donc une force par unité de longueur, exprimée en  $\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$ . La tension de surface s'interprète aussi comme une énergie qui stocke le travail fourni pour déformer l'interface; elle est donc également homogène à une énergie par unité de surface. La simulation microscopique d'un ensemble d'atomes présentant deux phases à l'équilibre permet de décrire l'interface entre ces deux phases à l'échelle des atomes (figure 1). À partir de cette simulation, il est possible de calculer la tension de surface. Il existe pour cela deux approches différentes.

La première est l'approche thermodynamique. Celle-ci définit la tension de surface comme la variation d'énergie libre associée à une variation de l'aire de l'interface à volume constant. La méthode reposant sur cette approche consiste à déformer l'interface au cours de la simulation, tout en calculant la variation d'énergie libre associée en utilisant

la théorie des perturbations. La deuxième approche est mécanique. La théorie mécanique des fluides inhomogènes permet d'exprimer rigoureusement la tension de surface en fonction du tenseur de pression à l'interface. La méthode basée sur cette approche permet donc de calculer le tenseur de pression d'un système inhomogène en fonction des interactions entre atomes. La tension de surface est ensuite calculée en intégrant la différence entre la composante normale et les composantes tangentielles du tenseur à travers l'interface.

Dans un récent travail, ces deux méthodes ont été appliquées pour calculer la tension de surface dans le cas d'interfaces planes de liquides métalliques: le cuivre et l'étain. Dans le cas du cuivre, des résultats très proches des quelques résultats expérimentaux existants ont été obtenus, en meilleur accord que les autres résultats de calcul déjà publiés [1]. Concernant l'étain, il s'agit du seul exemple publié de calcul de la tension de surface et les résultats sont en bon accord avec les quelques résultats expérimentaux disponibles [2].

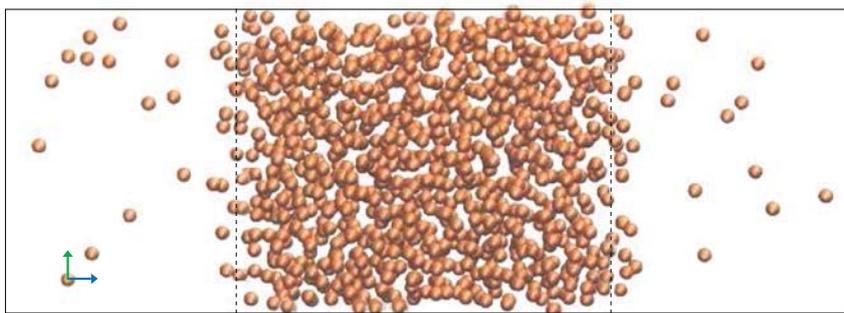
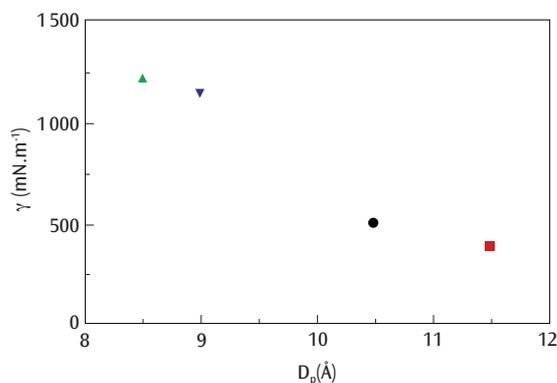
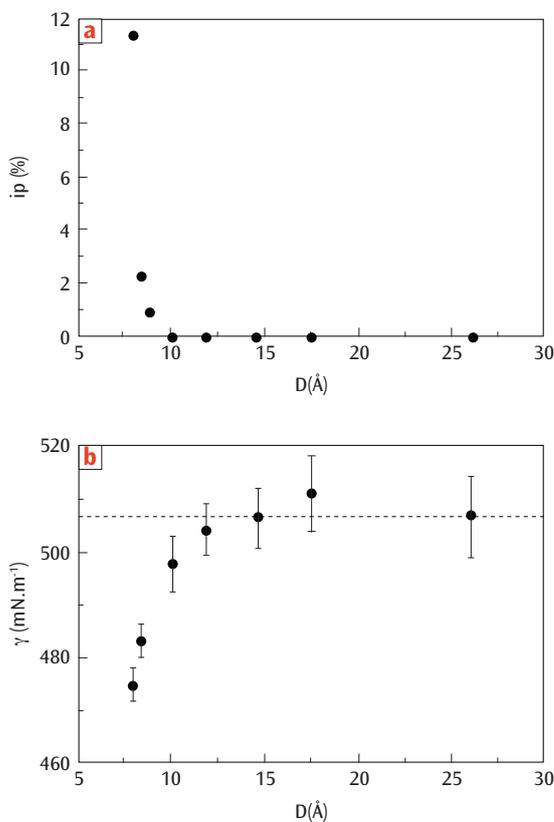


Figure 1. Simulation à l'échelle atomique d'un système présentant une phase liquide encadrée par une phase gazeuse. Les traits pointillés permettent de localiser les deux interfaces.

L'évolution de la tension de surface en fonction de l'épaisseur d'une nappe de métal liquide a ensuite été étudiée [3]. Le but était de déterminer un critère de rupture, c'est-à-dire l'épaisseur à partir de laquelle la nappe se fragmente. On a montré que la tension de surface évolue en fonction de l'épaisseur (figure 2). Elle est d'abord constante tant que la nappe reste intacte, puis diminue au fur et à mesure que des trous apparaissent. Enfin, lorsque la nappe devient instable, il n'est plus possible de calculer la tension de surface. Ces résultats se sont révélés similaires quel que soit le matériau concerné et quelle que soit la température. On a montré qu'un critère de rupture peut être déterminé à partir de l'étude d'une seule interface et que l'épaisseur de rupture d'un matériau était inversement proportionnelle à



**Figure 3.** Épaisseur de rupture ( $D_p$ ) d'une nappe de métal liquide en fonction de la tension de surface. Cuivre à 1700 K (vert) et 2000 K (bleu) - Étain à 1000 K (noir) et 1500 K (rouge).



**Figure 2.** Résultats de simulations de nappes liquides d'étain à 1000 K. (a) Évolution de l'indice de perforation ( $ip$ ) en fonction de l'épaisseur ( $D$ ), correspondant au nombre de trous observés pendant la simulation. (b) Évolution de la tension de surface ( $\gamma$ ) en fonction de l'épaisseur ( $D$ ).

sa tension de surface (figure 3). Ceci s'explique par le fait qu'un matériau dont la tension de surface est faible se déforme plus facilement et supporte mieux les tensions dues à la déformation. Il se fragmente donc pour une épaisseur plus faible.

Finalement, cette étude constitue la première brique d'un modèle de fragmentation des nappes liquides de métaux qui pourra ensuite être intégré dans les codes hydrodynamiques. Le phénomène d'éjection de matière sera ainsi mieux restitué par ces simulations à l'échelle macroscopique. Par ailleurs, une étude du même type est en cours pour déterminer l'évolution de la tension de surface des métaux liquides pour des interfaces cylindriques et sphériques en fonction de leurs rayons.

## Références

- [1] E. BOURASSEAU, A. A. HOMMAN, O. DURAND, A. GHOUI, P. MALFREY, "Calculation of the surface tension of liquid copper from atomistic Monte Carlo simulations", *Eur. Phys. J. B*, **86**, 251 (2013).
- [2] E. BOURASSEAU, G. FILIPPINI, A. GHOUI, P. MALFREY, "First calculations of the surface tension of liquid tin from atomistic simulations", *Mol. Phys.*, **112**, 2654-2657 (2014).
- [3] G. FILIPPINI, E. BOURASSEAU, A. GHOUI, F. GOUJON, P. MALFREY, "Slab thickness dependence of the surface tension: toward a criterion of liquid sheets stability", *J. of Chem. Phys.: Communication*, **141**, 081103 (2014).