

MATEO : logiciel intégré pour déterminer les propriétés de matériaux énergétiques par une approche multiéchelles

MATEO est un ensemble de codes permettant de calculer les propriétés de matériaux organiques à partir d'un minimum de données d'entrée. Initialement développé pour les propergols et explosifs, il permet de calculer *a priori* leurs propriétés fondamentales (densité, enthalpies de formation, de sublimation...) ainsi que leurs caractéristiques d'usage (chaleur d'explosion, puissance explosive, impulsion spécifique, température de décomposition, sensibilité à l'impact...). Il se distingue des logiciels décrits dans la littérature par une grande simplicité d'emploi obtenue sans compromis sur la fiabilité, grâce à des modèles développés sur des bases physiques et combinés au sein d'une approche multiéchelles.

D. Mathieu CEA - Le Ripault

Dans tous les domaines, la recherche d'une productivité accrue conduit à recourir à des logiciels aux différentes étapes de conception d'un produit. Les études expérimentales sont de plus en plus associées à des techniques *in silico* (i.e. mettant en jeu des moyens informatiques) pour la mise au point de médicaments, par exemple. De même, des modèles numériques seraient particulièrement précieux pour les matériaux énergétiques, étant donné les risques et coûts associés à leur manipulation. Deux types de logiciels sont actuellement disponibles sur le marché pour modéliser des matériaux et relier leurs propriétés à leur composition :

- > les premiers transposent aux matériaux la technique exploitée dans le domaine pharmaceutique, qui consiste à rechercher une relation empirique entre la propriété à évaluer et des grandeurs faciles à calculer pour chaque molécule ;
- > le second type d'outil repose sur des codes permettant de simuler un matériau à l'échelle microscopique sur la base de potentiels interatomiques empiriques.

La première approche est adaptée à l'évaluation de propriétés très complexes inaccessibles à une approche théorique. Son application aux matériaux se heurte à un manque de données expérimentales et au fait que leurs propriétés ne dépendent pas seulement de leur composition chimique mais aussi de paramètres tels que leur morphologie, leur

mise en forme, la présence de défauts... De plus, elle n'exploite pas les connaissances théoriques disponibles.

La seconde est limitée, dans le cas de matériaux organiques, par une méconnaissance de leur structure à l'échelle des molécules, et par le fait que les potentiels classiques ne permettent pas de rendre compte des aspects réactifs malgré des progrès dans ce sens [1].

Pour une modélisation réaliste de ces matériaux, ces outils sont donc insuffisants, et il faut faire appel à différentes disciplines pour aborder les diverses échelles. Moyennant quoi, il est possible d'évaluer les performances théoriques de systèmes basés sur des molécules dont la synthèse n'a pas encore été réalisée. Toutefois, par manque d'outils fiables pour évaluer la faisabilité synthétique des composés envisagés, l'intérêt de ces études théoriques n'est pas nécessairement à la hauteur de l'investissement consenti.

L'expertise des chimistes organiciens étant seule à même de prendre en compte les critères de faisabilité synthétique, l'idéal serait de permettre à ces derniers d'évaluer eux-mêmes les propriétés des matériaux qu'ils se proposent de synthétiser. Des travaux dans cette direction ont été engagés très récemment avec le développement de nouveaux logiciels [2,3]. Cependant, leur facilité d'emploi est obtenue au prix d'une perte de fiabilité, car ils reposent sur des modèles empiriques simples dont les limites sont difficiles à appréhender. Le code

MATEO développé au CEA - Le Ripault [4] combine au contraire fiabilité et simplicité d'utilisation grâce à une approche basée sur les principes suivants :

- > les différentes échelles nécessaires pour décrire le matériau sont considérées de manière explicite (approche dite « multi-échelles ») comme illustré sur la **figure 1** ;
- > les modules de calcul correspondant sont accessibles via une interface unique représentée sur la **figure 2** ;
- > le logiciel : une fois configuré pour effectuer certains types de calcul, son utilisation se limite à spécifier les formules des composés entrant dans la composition du matériau ; les modèles les plus appropriés sont alors automatiquement sélectionnés ;
- > des modèles fiables pour les données de base sont, le cas échéant, remplacés par des modèles moins complexes si la haute précision fournie est perdue lors du calcul des caractéristiques d'usage ;
- > les modèles utilisés sont rappelés dans le fichier de résultats afin d'assurer la traçabilité des calculs.

L'obtention de résultats fiables pour divers types de systèmes (cristaux, polymères, sels...) a nécessité le développement de modèles moins empiriques que ceux habituellement employés [5].

Cet outil a été mis au point en un petit nombre d'années grâce à l'utilisation, chaque fois que cela a été possible, de composants logiciels pré-existants, par exemple pour les calculs d'équilibres chimiques entre produits de combustion ou la détection de l'aromaticité dans les molécules.

Figure 2. Interface de MATEO : les formules chimiques saisies dans CHEMTOOL sont converties en structures 3D par BALLOON et affichées par JMOL en même temps que les propriétés calculées. Ces logiciels sont librement disponibles sur internet.

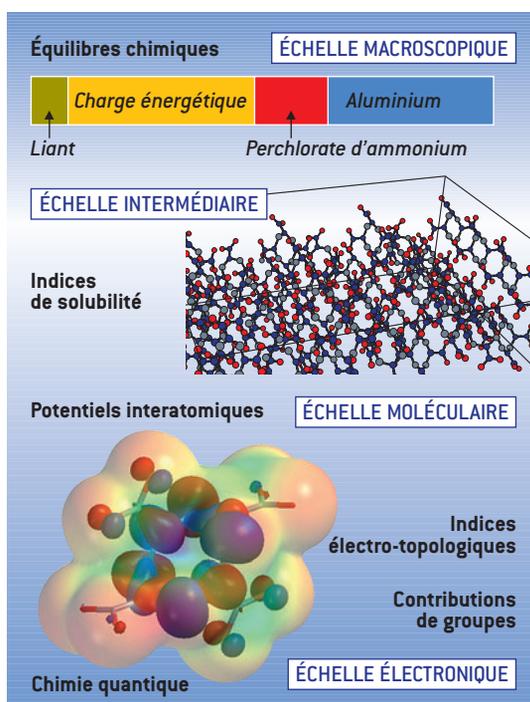
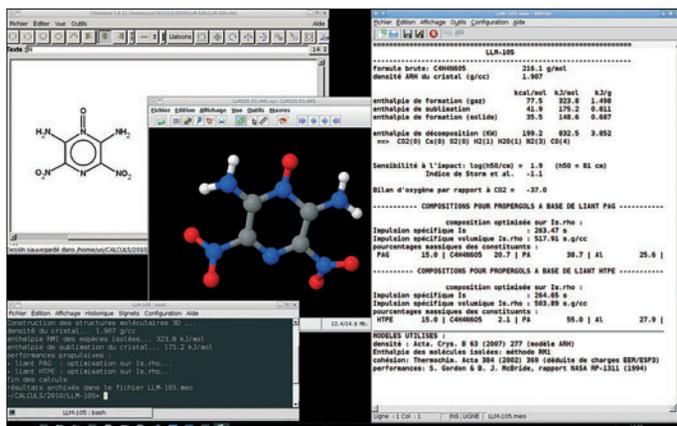


Figure 1. Imbrication de différents modèles à diverses échelles pour le calcul de propriétés.

Seuls les modèles propres au laboratoire ont ainsi dû être implémentés, ce qui se traduit par à peine 30 000 lignes de code.

L'usage de ce type d'outil est appelé à se développer, non seulement du fait de besoins dans le domaine des matériaux énergétiques, mais aussi par suite de la réglementation européenne, notamment la directive REACH qui implique en particulier l'évaluation du risque pyrotechnique pour un nombre croissant de composés (environ 143 000 actuellement) et encourage explicitement le développement de méthodes supplantant à l'expérimentation.

RÉFÉRENCES

[1] D. MATHIEU, "Split charge equilibration method with correct dissociation limits", *J. Chem. Phys.*, **127**, 224103 (2007).

[2] H. MUTHURAJAN *et al.*, "Computer code to predict the heat of explosion of high energy materials", *J. Haz. Mater.*, **161**, p. 714-717 (2009).

[3] M. H. KESHAVARZ *et al.*, "A new computer code to evaluate detonation performance of high explosives and their thermochemical properties. Part I", *J. Haz. Mater.*, **172**, p. 1218-1228 (2009).

[4] D. MATHIEU, "MATEO : A software package for the molecular design of energetic materials", *J. Hazard. Mater.*, **176**, p. 313-322 (2010).

[5] D. MATHIEU *et al.*, "Predicting and evaluating performance of energetic salts : models and theoretical tools", *Int. J. Mater. Chem. Propul.*, **8**, p. 19-30 (2009).