

Simulations multi-échelles de matériaux et de structures

Travaux pratiques sur la Dynamique Moléculaire : Résistance d'une nano-espèce entaillée

Programme de master DMS

17 février 2025

1 Introduction

Dans ce travail pratique, nous calculerons la ténacité d'un nano-échantillon entaillé au moyen de simulations de dynamique moléculaire (MD). Les simulations seront réalisées dans l'un des logiciels MD open source les plus populaires [LAMMPS](#) des laboratoires nationaux de Sandia. La ténacité d'un matériau caractérise la quantité d'énergie par volume nécessaire pour le rompre et peut être calculée en intégrant le travail effectué sur l'échantillon pour le rompre. Pour le cas le plus simple de rupture fragile en traction d'une barre de section A et de longueur L (c'est-à-dire de volume $V = AL$), on considère le travail d'une force F jusqu'à sa rupture à $F_r = EA\sigma_r/L$, où E est le module de Young du matériau. Le travail est fait par la force

$$W_r = \int_0^{\sigma_r} F(u) du = \frac{EAu^2}{2L} = \frac{F_r^2 L}{2EA} = \frac{\sigma_r^2 AL}{2E},$$

où σ_r est la contrainte critique. En divisant cette énergie par le volume, on obtient la ténacité du matériau

$$G = \frac{W_r}{LA} = \frac{F_r^2}{2EA^2} = \frac{\sigma_r^2}{2E}$$

Ainsi, dans les matériaux cassants, la ténacité est déterminée exclusivement par la contrainte critique σ_r et le module de Young E . Dans les matériaux ductiles ou quasi cassants, la rupture s'accompagne d'une dissipation d'énergie soit par glissement plastique (glissement de dislocations), soit par accumulation de dommages (micro-fissures, micro-pores, vides, etc.). Par conséquent, pour de tels matériaux, leur ténacité peut être plus élevée que si le matériau se comportait de manière purement cassante. Les processus dissipatifs sont généralement localisés devant la pointe de la fissure et forment une zone dite de processus. En termes simples, plus l'énergie dissipée lors d'une fracture est importante, c'est-à-dire plus la ténacité est élevée, plus le matériau est « difficile » à briser.

Pour étudier la ténacité du matériau, nous utiliserons des simulations de dynamique moléculaire 2D d'un échantillon entaillé ou lisse en traction uniaxiale (Fig. 1). L'objectif est de comprendre le lien entre la ténacité du matériau et la porosité initiale ainsi qu'avec les paramètres du potentiel de paire de Lennard-Jones, le taux de chargement et, si le temps le permet, avec l'orientation du réseau.

2 Installation

L'installation est représentée sur la Fig. 1 et se compose d'un échantillon de type os de chien avec une zone large pour les « poignées » et une zone plus fine où une répartition uniforme des contraintes est assurée. Le fichier d'entrée est rendu paramétrable, ce qui permet de contrôler la largeur W et la hauteur H de l'échantillon ainsi que le rayon de courbure R de la zone de transition. De plus, l'échantillon contient une certaine porosité et peut présenter une encoche ou une double encoche (deux encoches symétriques situées de chaque côté). Le mouvement des atomes dans les zones supérieure et inférieure (ombrées en jaune sur la figure) est restreint. Une distribution initiale linéaire des vitesses verticales est appliquée à travers l'échantillon de sorte que le côté inférieur reste fixe et que le côté supérieur se déplace verticalement à la vitesse V avec une distribution linéaire entre les deux. Sur les côtés supérieur et inférieur, la force verticale est mesurée ainsi que le déplacement de la partie supérieure et est enregistré dans le fichier journal.

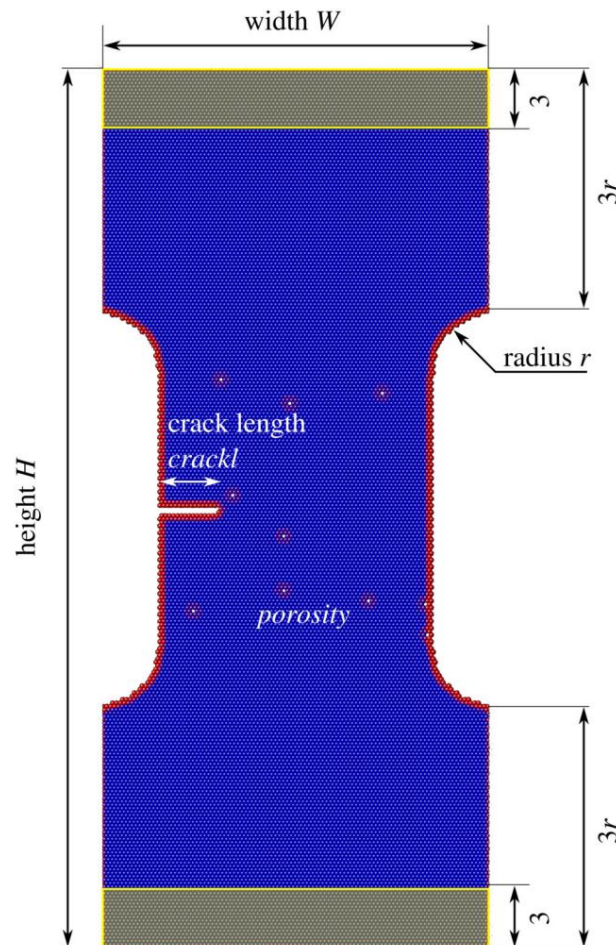


Figure 1 : Géométrie de l'échantillon et configuration du problème.

3 fichiers fournis

Pour télécharger tous les fichiers nécessaires, rendez-vous sur www.yastrebov.fr/TPMD2023.zip.

1. [in.tension](#) : fichier d'entrée pour les simulations LAMMPS MD avec commentaires.
2. [compute area.py](#) : un script python pour calculer le travail de la force et tracer la force-déplacement courbe.
3. [README](#) : un fichier texte avec des commandes utiles.
4. [TP MD CRACK 2023.pdf](#) ce document.

4 Comment commencer ?

Pour exécuter la simulation, tapez dans le terminal :

`$ Imp -var t 1000 -in in.tension` Cela produira un

fichier journal `log.lammps` et quelques images. Vous pouvez les ouvrir en tapant `$ eog neighbors image.0.jpg`

Maintenant, créons une nouvelle géométrie. Pour ce faire, ouvrez un fichier d'entrée
`$ gedit dans.tension`

et spécifiez la [variable](#) de largeur W , la [variable de hauteur](#) H et la [variable](#) de rayon de courbure r nécessaires. Exécutez à nouveau la simulation : `$ Imp -var t 100 -in in.tension` et vérifiez votre géométrie [eog neighbors image.0.jpg](#)

Tous les autres paramètres qui pourraient être spécifiés par l'utilisateur sont marqués avec [#USER DEFINED](#), à savoir :

- V : taux de chargement
- T : température
- W : largeur de l'échantillon
- H : hauteur de l'échantillon
- [epsilon](#) : énergie de liaison dans le potentiel Lennard-Jones 6-12 ϵ
- r : rayon de courbure d'un échantillon d'os de chien
- [porosité](#) : porosité du matériau
- [seed](#) : graine pour le générateur de nombres aléatoires pour répartir les pores dans le matériau
- [craquement](#) : longueur de l'entaille
- [twocracks](#) : (booléen : vrai/faux) détermine si deux encoches sont insérées

Dans le fichier d'entrée [in.tension](#) toutes les explications sont fournies. La documentation LAMMPS est disponible ici lammps.sandia.gov/doc/Manual.html.

5 Étude de la ténacité

Pour estimer la ténacité, nous mesurons le déplacement et la force sur la « poignée » supérieure. Ces paramètres sont stockés dans le fichier journal, qui peut être lu ultérieurement par un script Python [compute area.py](#). Prescrire un taux de chargement de V et exécuter la simulation (sans entailles) sur une période de temps plus longue, par exemple : `$ Imp -var t 30000`

`-in in.tension` Assurez-vous que l'échantillon était

complètement cassé à la fin de la simulation (vérifiez les images). Maintenant, pour construire une courbe force-déplacement et estimer son intégrale, c'est-à-dire le travail effectué pour rompre l'échantillon, on peut exécuter un script spécifiquement préparé : `$.compute area.py log.lammps` ce script lit les données stockées, les stocke séparément dans le fichier [force déplacement](#)

[log.data](#) et fait un tracé [Force déplacement.png](#) avec le travail indiqué (sa valeur est également indiquée à l'écran). Déterminer la ténacité dont il n'y a rien d'autre que ce travail divisé par la surface de l'échantillon.

Votre objectif est maintenant d'étudier comment les paramètres suivants influencent la ténacité :

- Réaliser une série de simulations sans entailles avec différentes [porosités](#) (ne pas dépasser 10%) ; réaliser plusieurs simulations pour chaque valeur de porosité en changeant [de graine](#) pour obtenir des données statistiquement significatives.
- Pour une porosité sélectionnée, étudier l'influence du paramètre [epsilon](#) (qui représente l'énergie de liaison entre les atomes) sur la ténacité et sur le type de courbe force-déplacement. N'utilisez pas d'encoches. Pour comparer les valeurs obtenues, normalisez la ténacité par [le paramètre epsilon](#) . Pour chaque [epsilon](#), effectuez quelques simulations pour obtenir des données statistiquement significatives.
- Réaliser une série de simulations de propagation de fissures pour différentes valeurs [d'epsilon](#). Exemple de simulation
Les résultats sont présentés dans la Fig. 2.

Dans le même temps, l'effet du taux de charge V et de la température T pourrait être étudié. Si le temps le permet, on peut étudier l'effet de différentes orientations cristallines, qui peuvent être définies dans [le réseau ...orient](#).

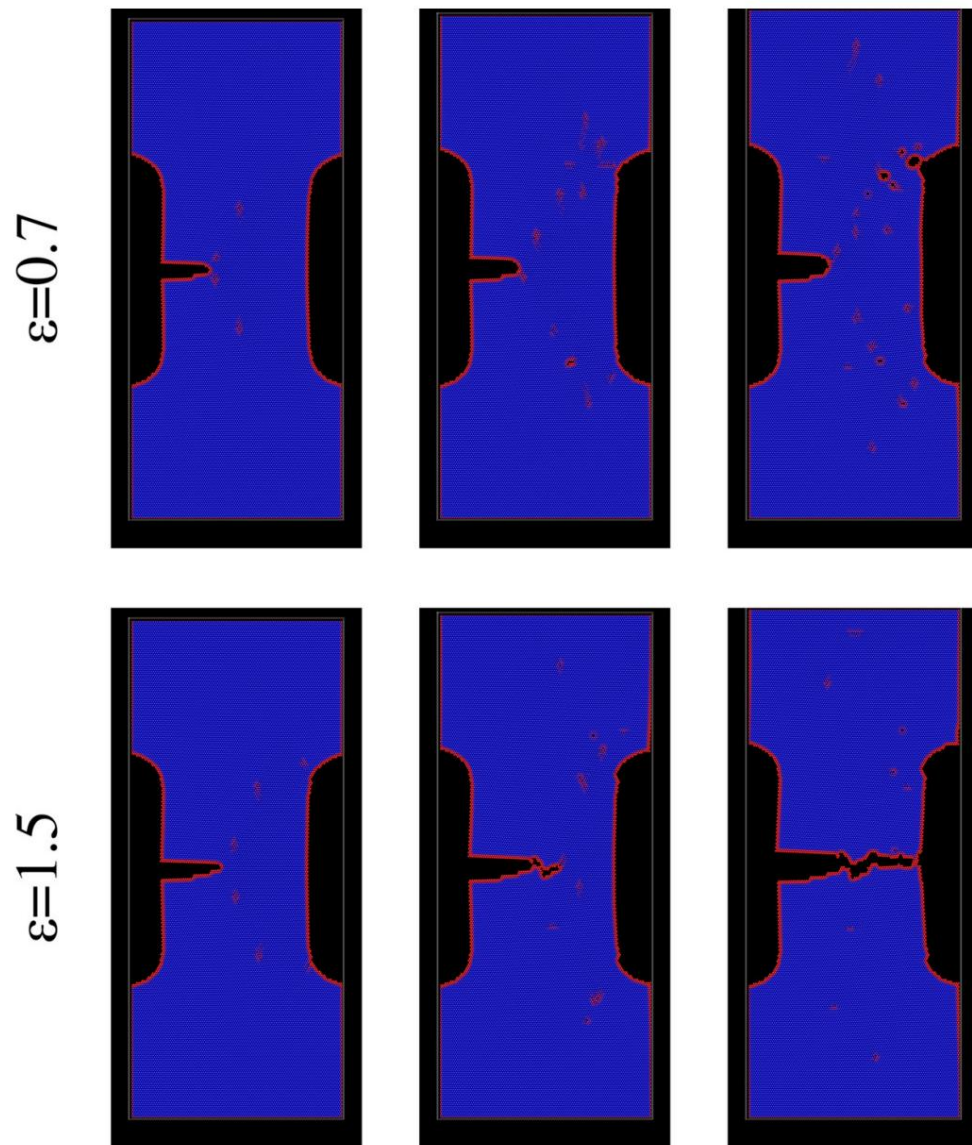


Figure 2 : Instantanés de la simulation de fracture pour différentes énergies de liaison ϵ pour un cristal parfait (pas de porosité initiale) affichés pour les mêmes moments temporels. Les défauts rouges dans le réseau correspondent soit à des pores, soit à des dislocations.

6 Données numériques

Exemples de valeurs des paramètres LJ-6-12 pour certains métaux

• Nickel (Ni) : $\sigma = 1,5808 \text{ \AA}$ et $\epsilon = 0,1729 \text{ eV}$ • Chrome

(Cr) : $\sigma = 2,7812 \text{ \AA}$ et $\epsilon = 0,24322 \text{ eV}$

7 questions pour l'évaluation

Veuillez préparer un court rapport dans le format de votre choix. Une réponse correcte et complète pour chaque question vous ajoute un point, donc votre note est N [0,4].

0. Votre nom¹ :

1. Décrivez vos résultats de simulation avec et sans encoche.

2. Comment la porosité initiale influence-t-elle la courbe contrainte/déformation ? Quelle est la variabilité de cette courbe pour différentes réalisations (différentes [graines](#) utilisées) ?

3. Comment la porosité initiale influence-t-elle la ténacité du matériau ? La dureté de l'intrigue change avec le regard du changement de porosité.

4. Décrire la propagation des fissures dans la structure pour différentes valeurs d' [epsilon](#). Expliquez vos observations.

¹Désolé, vous n'obtenez aucun point pour cette question.