

Simulations en dynamique moléculaire de la propagation de fissure et plasticité dans un verre de silice

Cindy L. Rountree
DSM/DRECAM/SPCSI

**NSF-MPS Distinguished International Postdoctoral
Research Fellowships (MPS-DRF)**

Groupe *Fracture* CEA-SACLAY

SPCSI

Daniel Bonamy

Elisabeth Bouchaud

Claudia Guerra

Gael Pallares

Julien Scheibert

Saint-Gobain

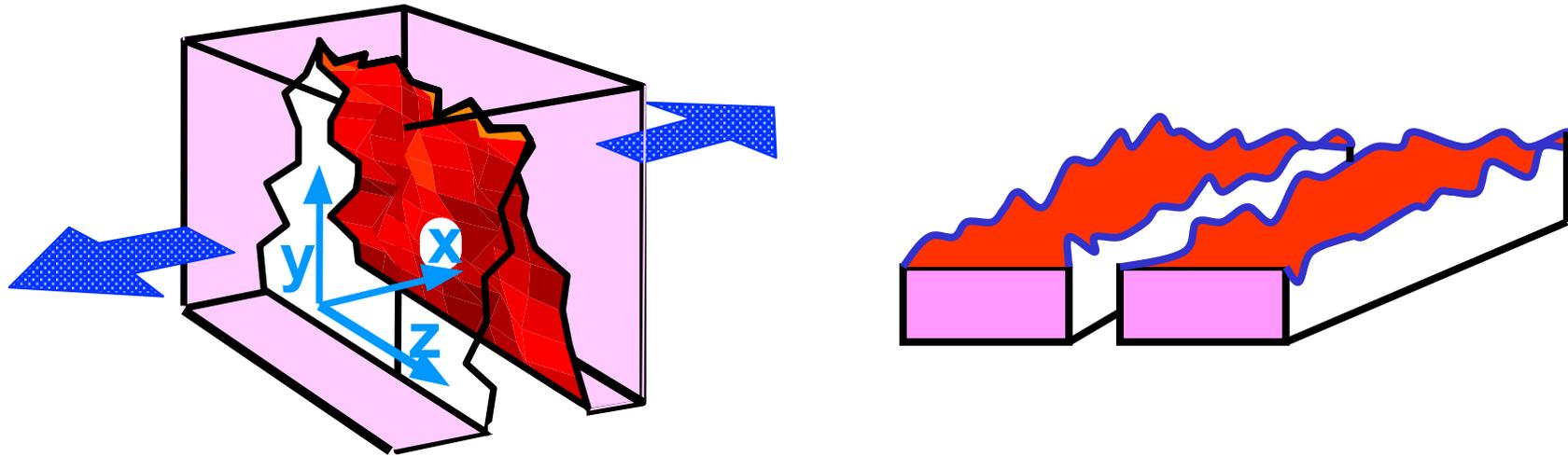
Stephane Roux

Damien Vandembroucq

Mehdi Talamali

CACS, USC

Rajiv K. Kalia



- Aspects Atomistiques de la Propagation d'une Fissure
- Mécanismes de dissipation de l'énergie: endommagement et plasticité

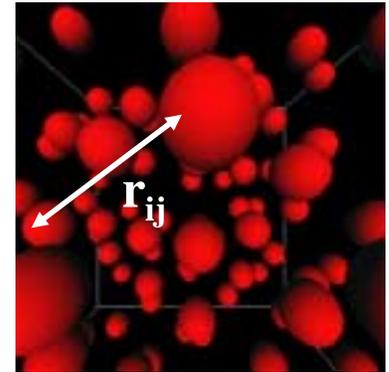
**Ces questions sont examinées avec
des simulations de DM**

- **Potentiel Interatomique pour le verre**
- **Validation du potentiel pour le verre**
- **Résultats sur la fracture et comparaison avec les expériences**
- **Déformation irréversible sous densification et cisaillement**
- **Simulations Numériques: physique des matériaux granulaires**
- **Conclusions**
- **Etudes en cours**

Méthode de dynamique moléculaire

Résolution des équations du mouvement pour tous les atomes:

$$\{\mathbf{r}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t)\} \quad m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}$$

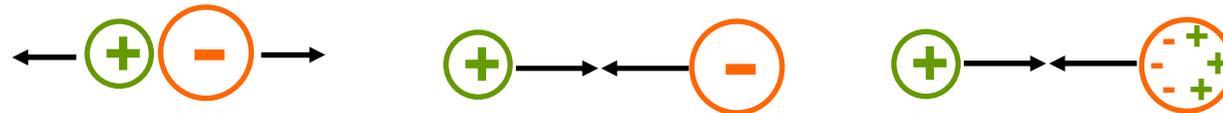


Potentiel Interatomique pour le verre:

$$V = \sum_{i < j} v_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij}) + \sum_{i, j < k} v_{ijk}^{(3)}(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{ik})$$

• Terme de paire:

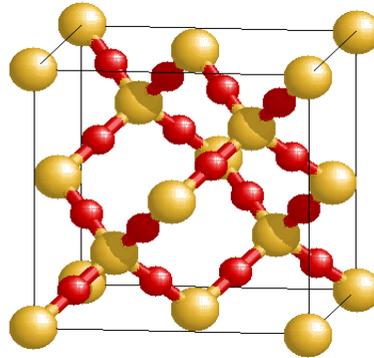
(1) répulsion stérique; (2) Coulomb; (3) charge dipolaire



• Terme à trois corps: torsion et étirement des liaisons covalentes



β _Cristobalite



● Silicium
● Oxygène

Procédure de trempe et de thermalisation

Idéal β -cristobalite

Densité=2.2 g/cc

fusion

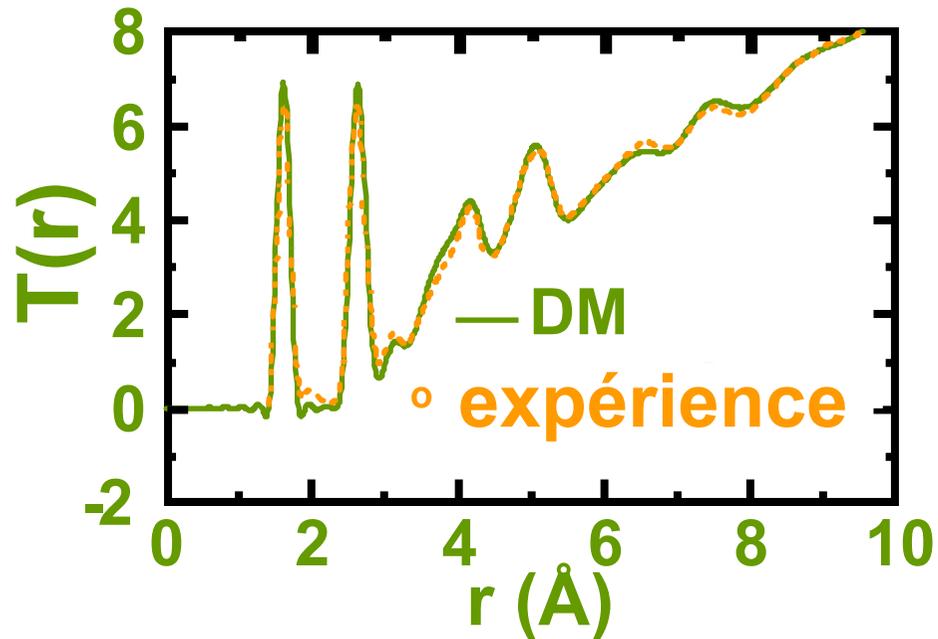
Liquide T=3200K

Verre à 2.2 g/cc

trempe

Liquide T=3200K

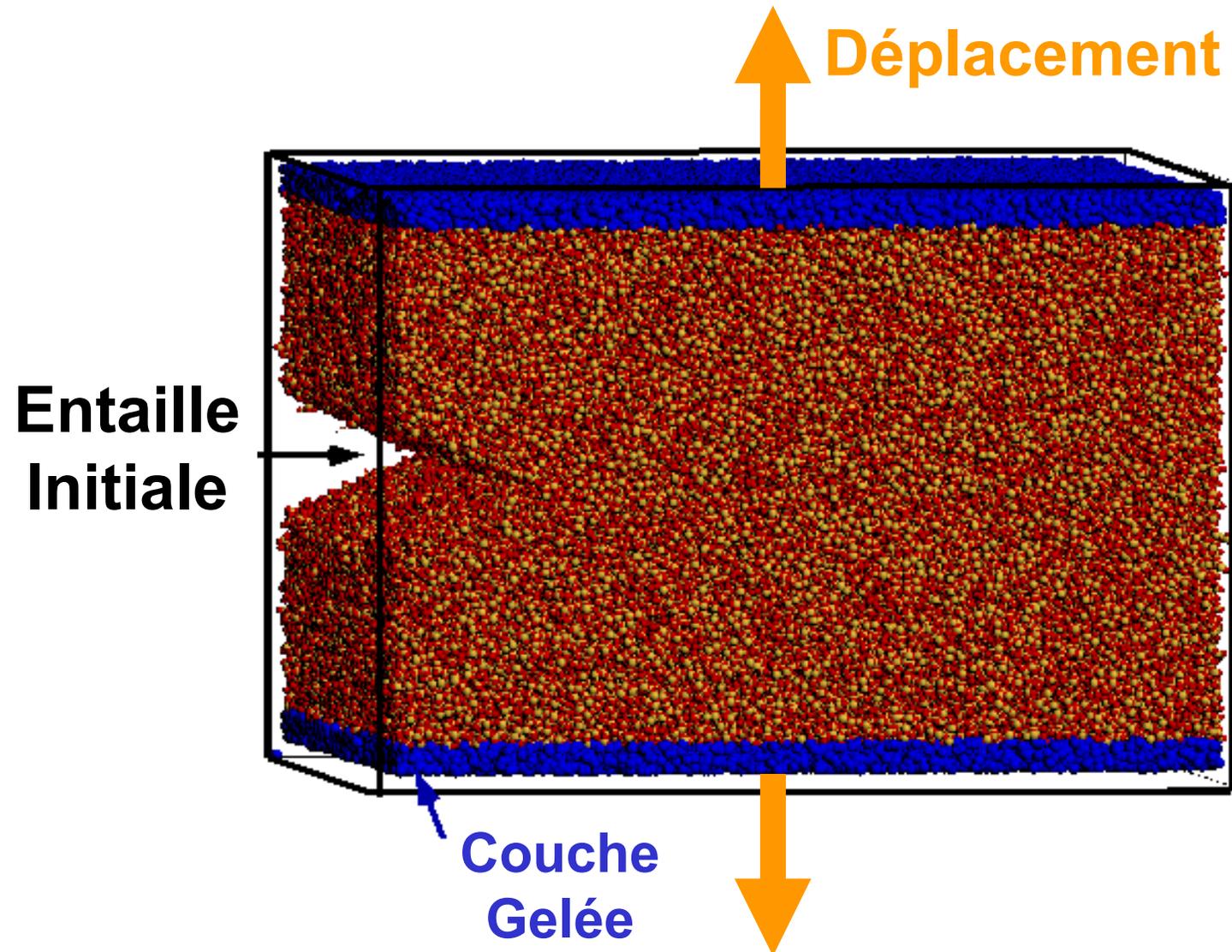
Fonction de corrélation de paire obtenue par diffraction de neutron



Propriétés mécaniques

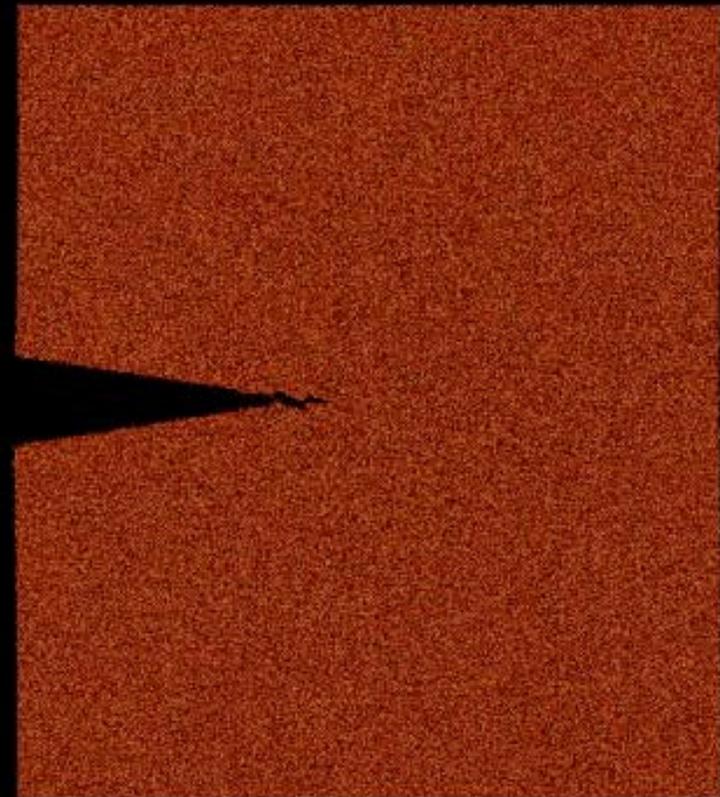
Modules	Simulation (GPa)	Expérience (GPa)
Young	71.4	73
Cisaillement	24	26.3
Compression	41.2	43.4

- Expérience de diffraction de neutron: **Susman et al. ('91)**
- Simulations DM: **Nakano et al. ('90)**



simulation de 15 millions d'atomes

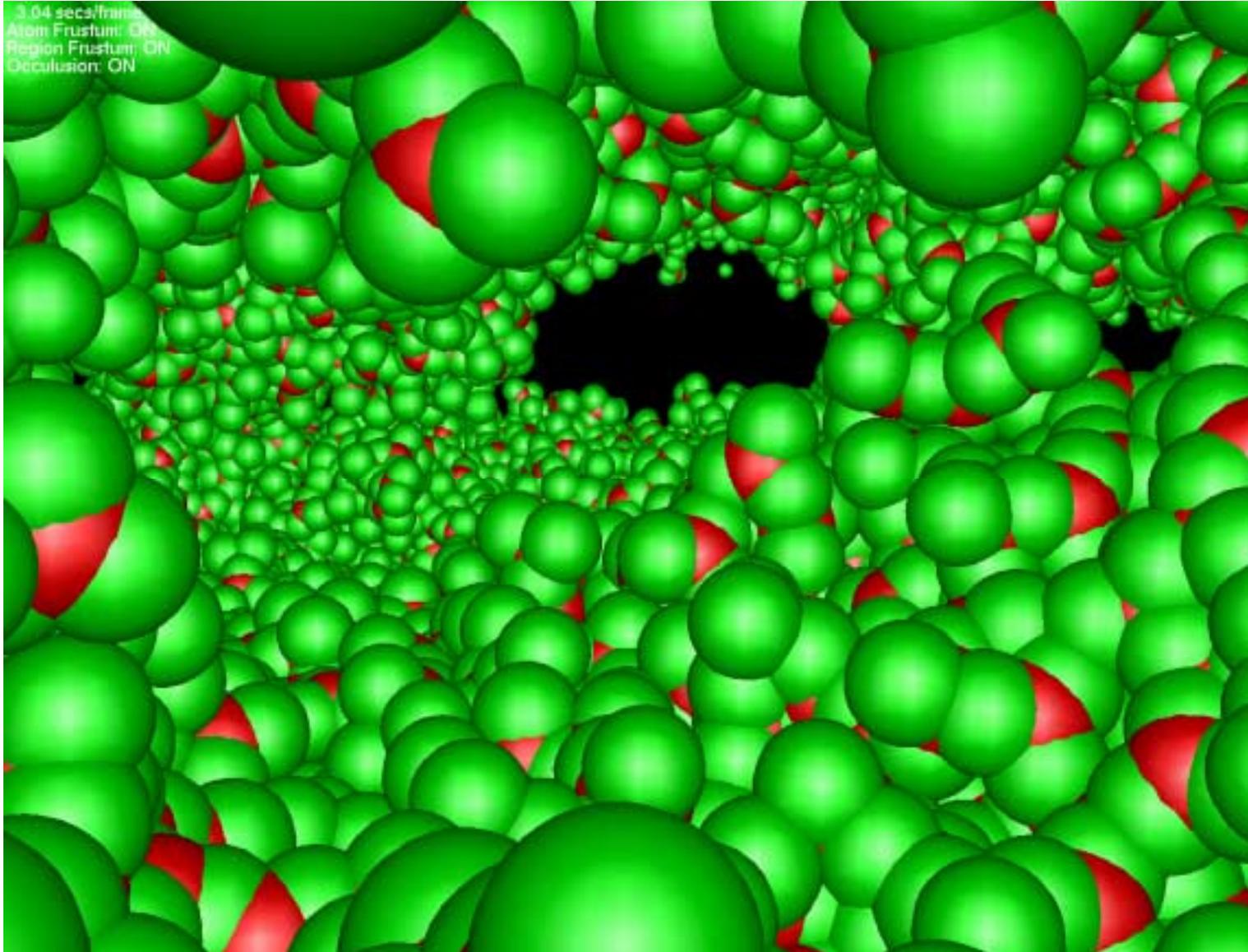
Taille du système
120nm×120nm×15nm



Pores en avant du front de fissure



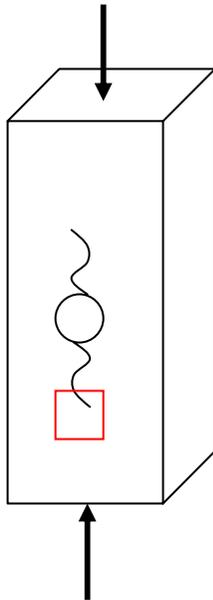
Voyage au centre de la fissure



Endommagement en corrosion sous contrainte

*Observations In situ
par AFM*
Silice pure

$V=3 \cdot 10^{-11} \text{ m/s}$

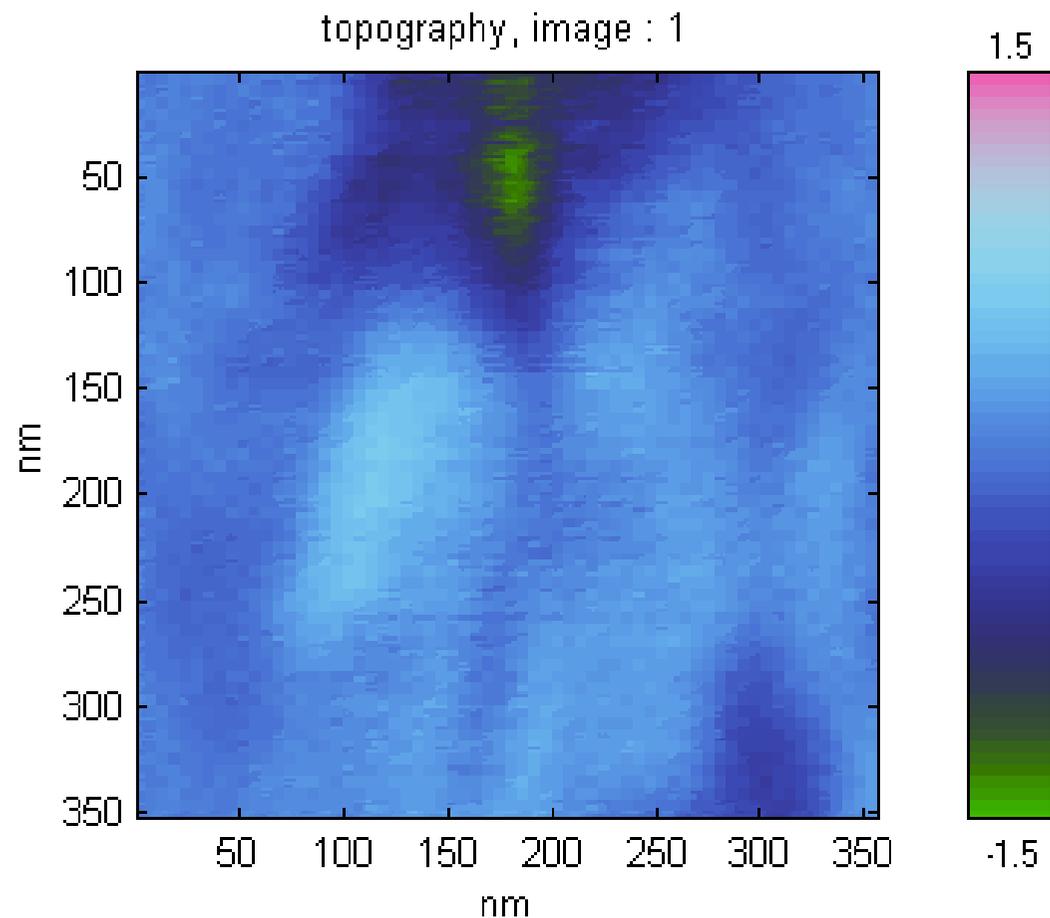


*S. Prades, D. Bonamy,
D. Dalmas, C. Guillot,
E. Bouchaud*

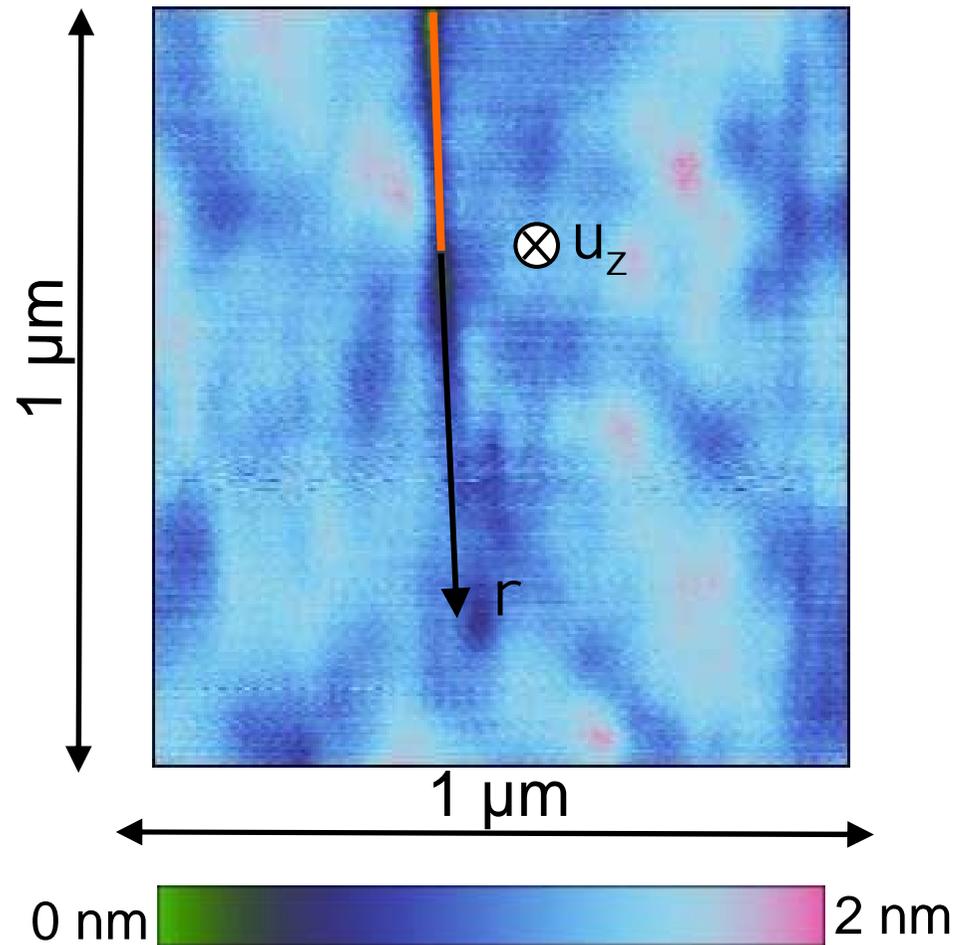
File: 1.sm2

Created on: 23/7 14:17:11

Flatten order: 1

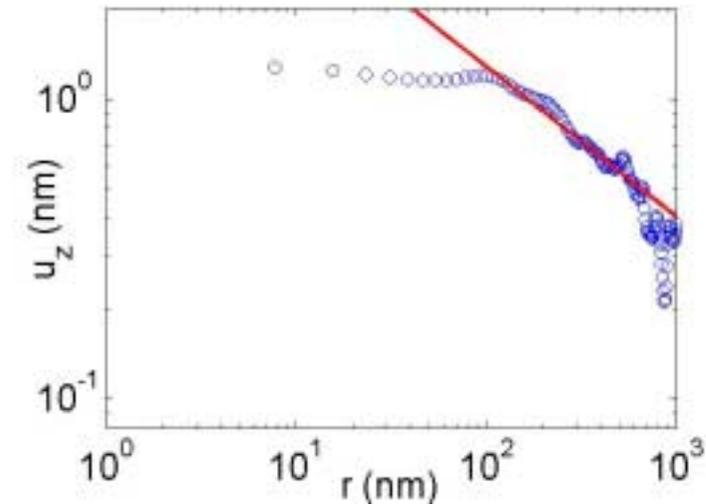


Déformation de la surface (expériences)



Elasticité linéaire :

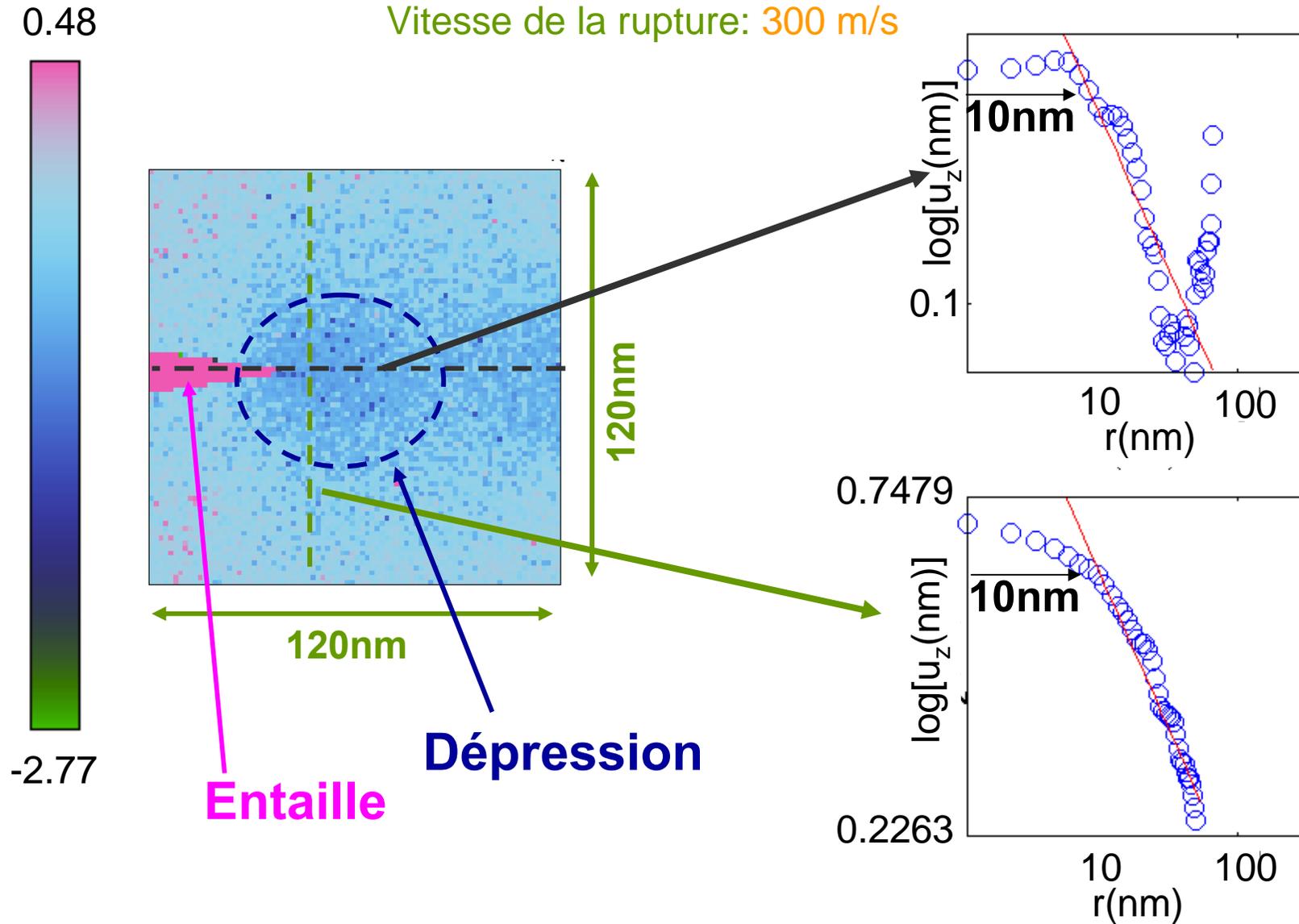
$$\delta z \propto r^{-0.5}$$



**Ecart à l'élasticité linéaire
dans la zone de process**

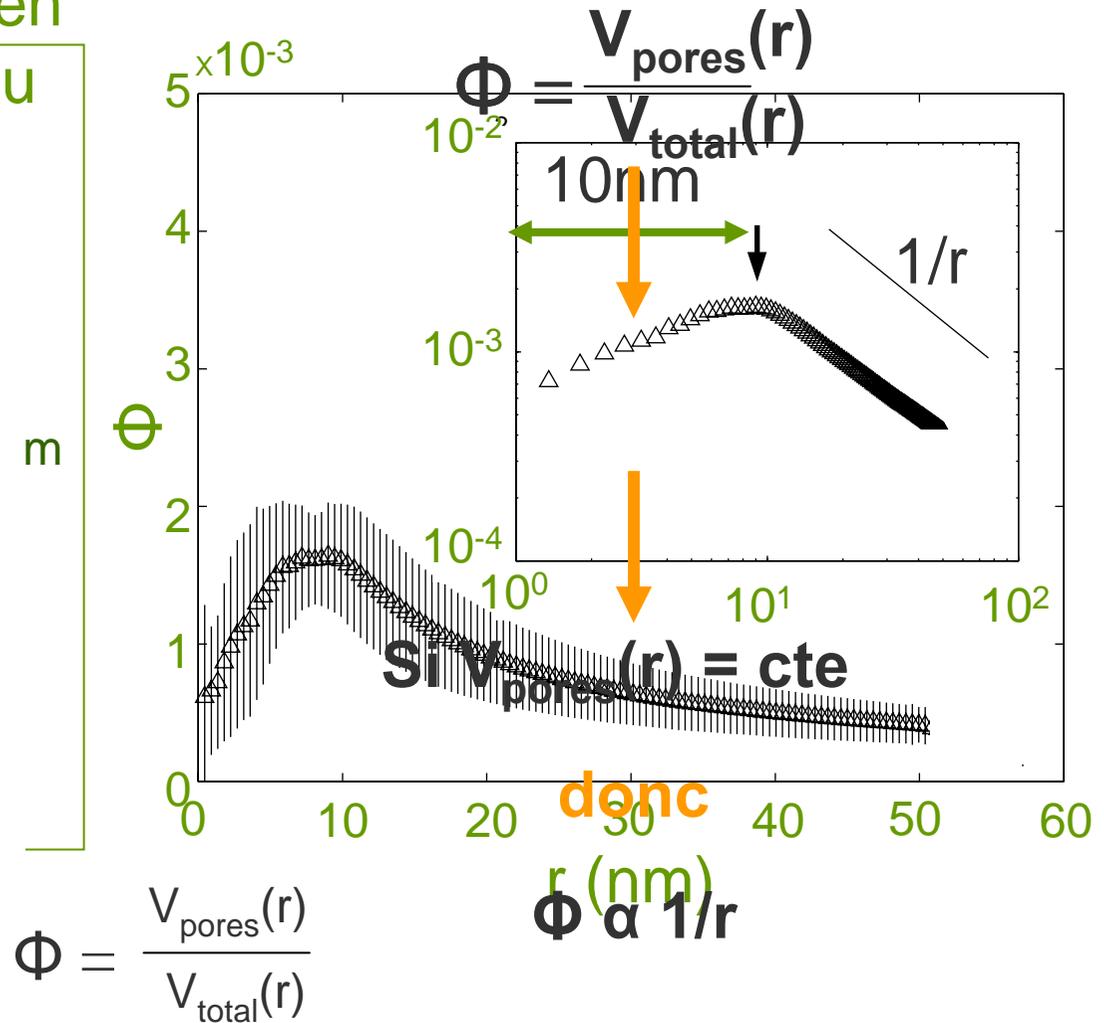
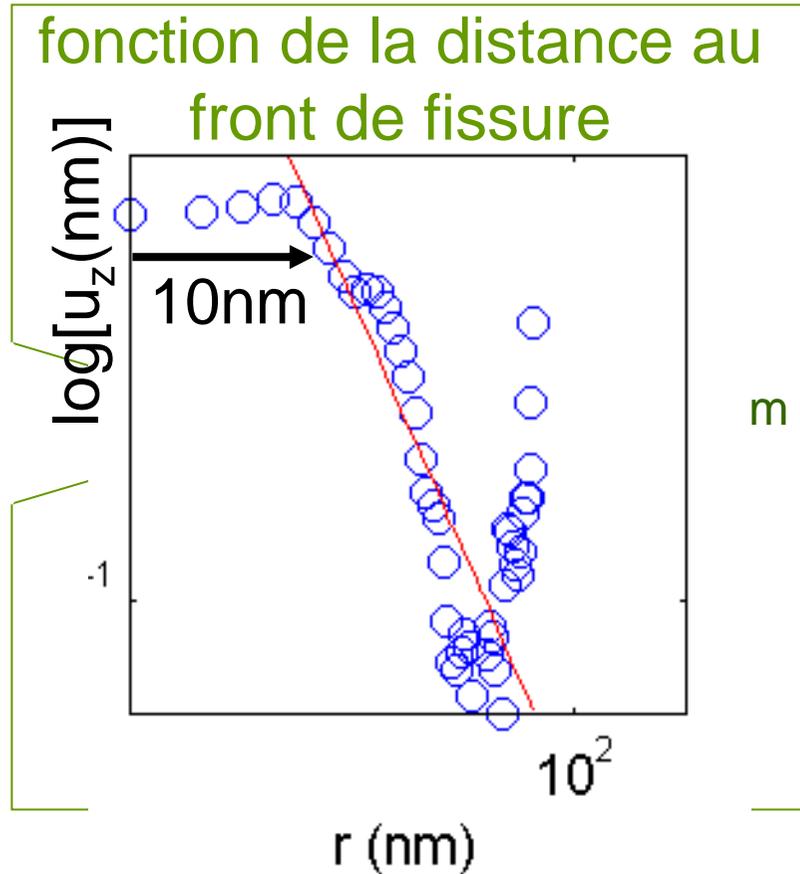
$$V = 3 \times 10^{-11} \text{ m/s}$$

Déformation de la surface (simulations)



Porosité en avant de la pointe de fissure

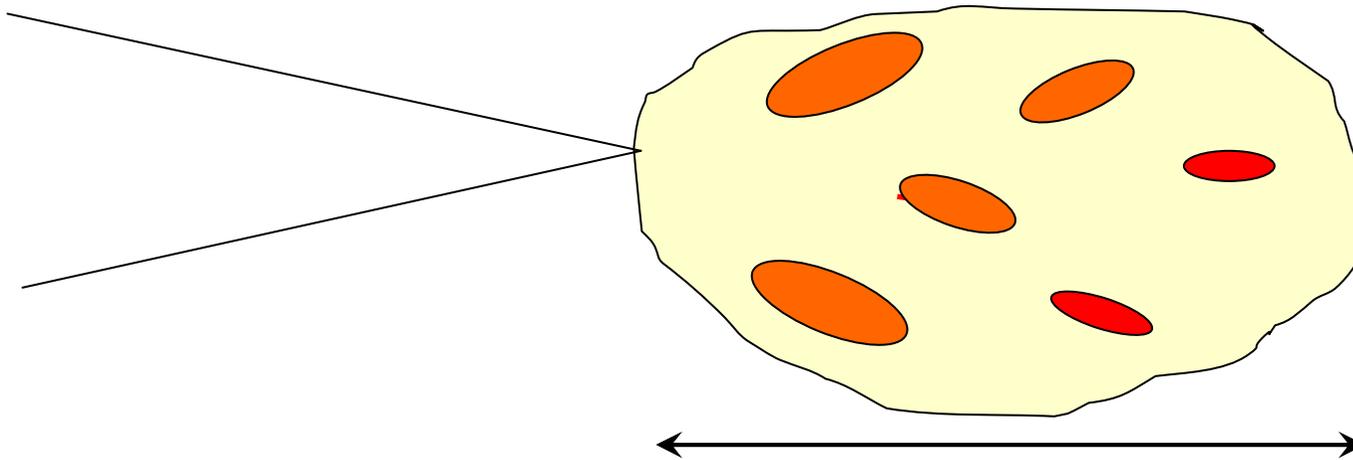
La hauteur de la surface en fonction de la distance au front de fissure



Zone de process = Zone poreuse

Matériaux observés à l'échelle des hétérogénéités

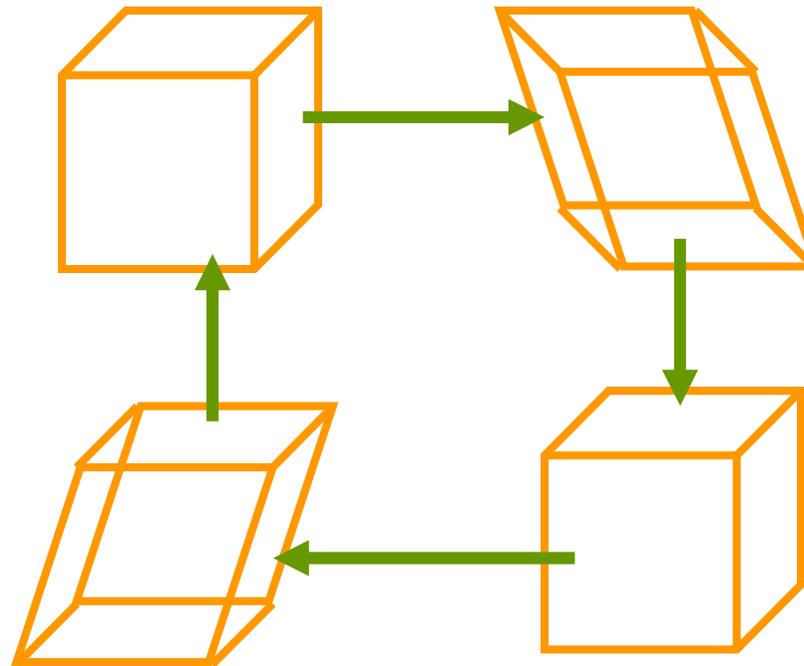
Désordre \Rightarrow la première liaison qui se rompt n'est probablement pas en front de fissure!

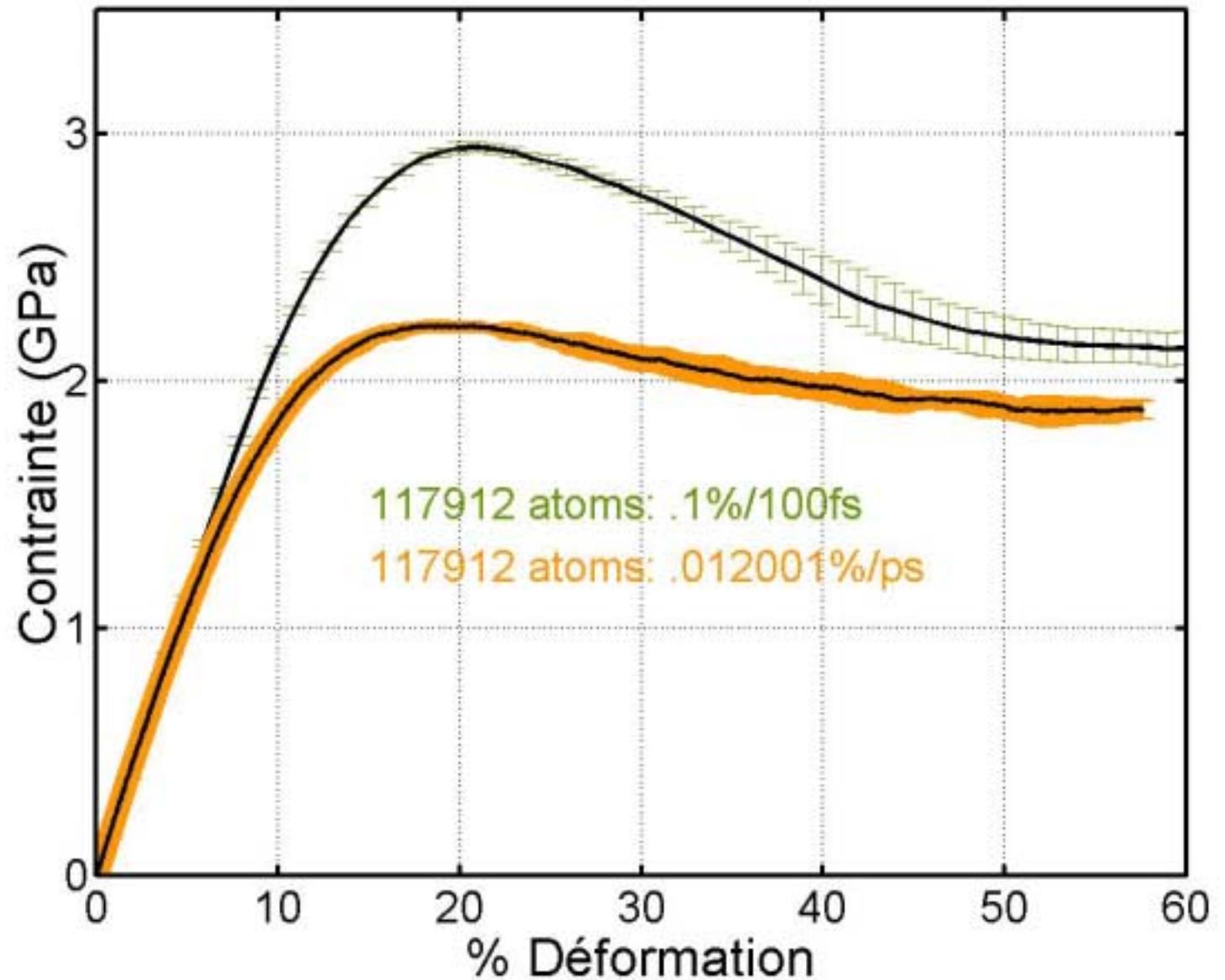
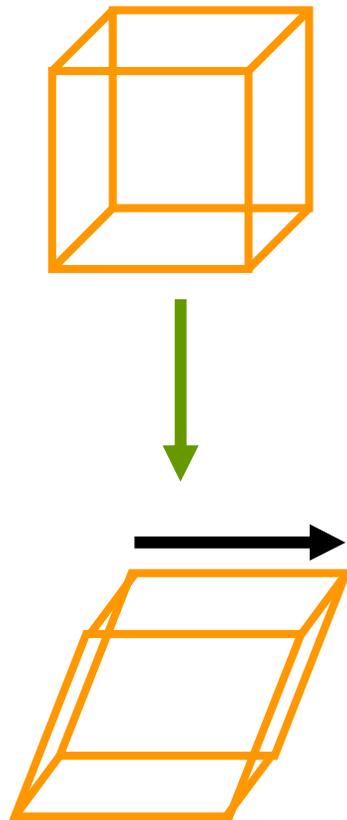


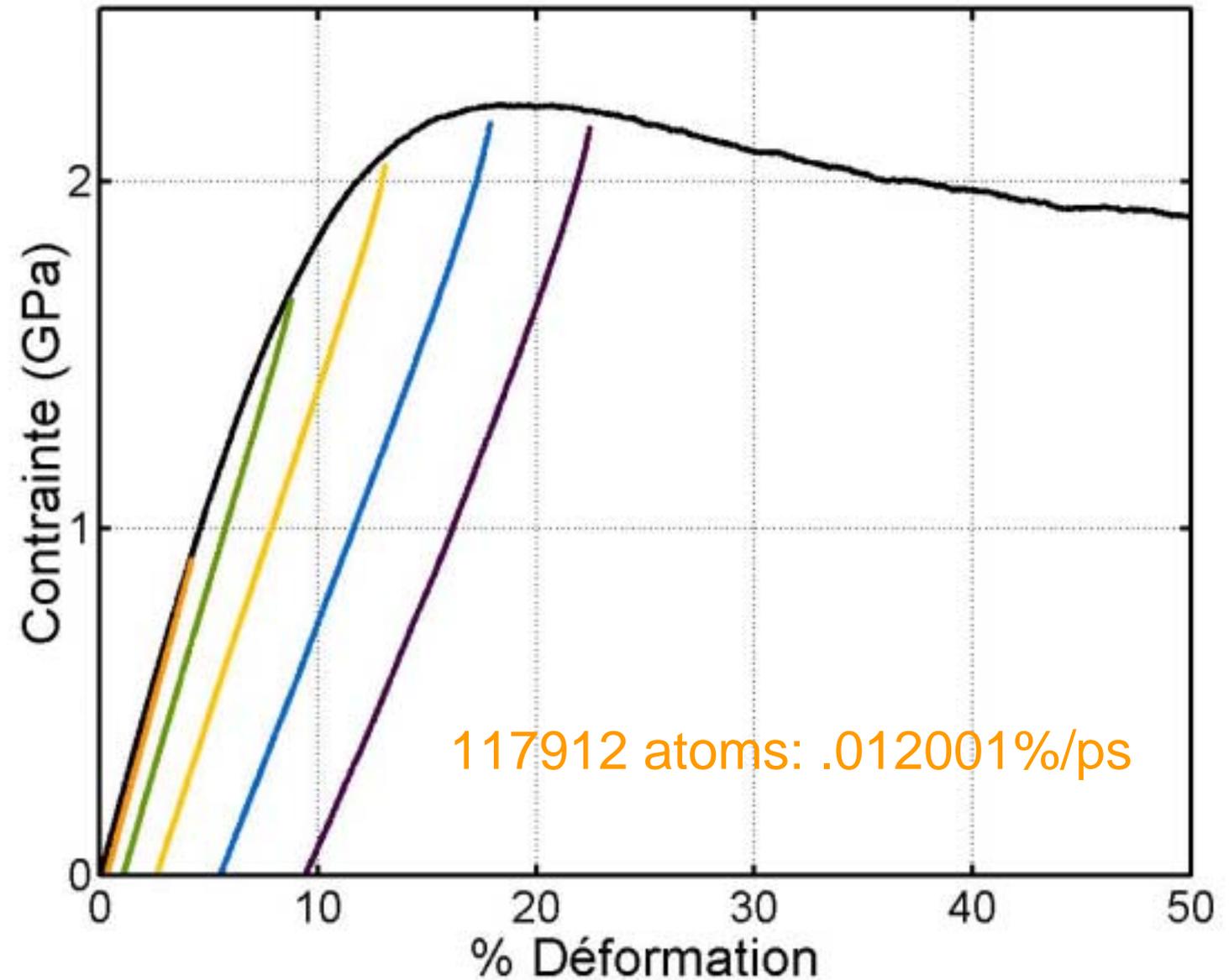
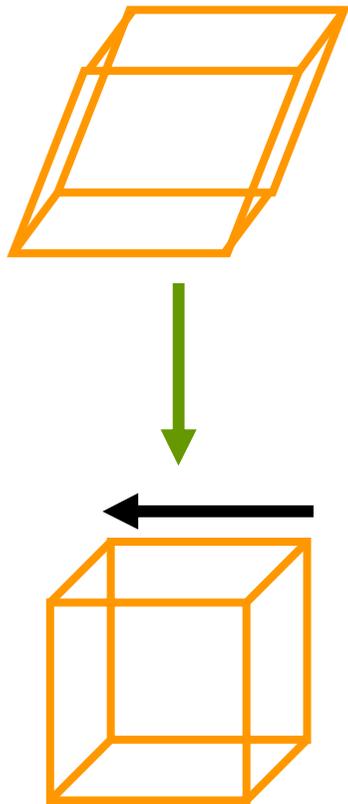
L'extension de la zone de process dépend du matériau & des conditions de chargement

« Plasticité » \Rightarrow échelles de longueur nanométrique

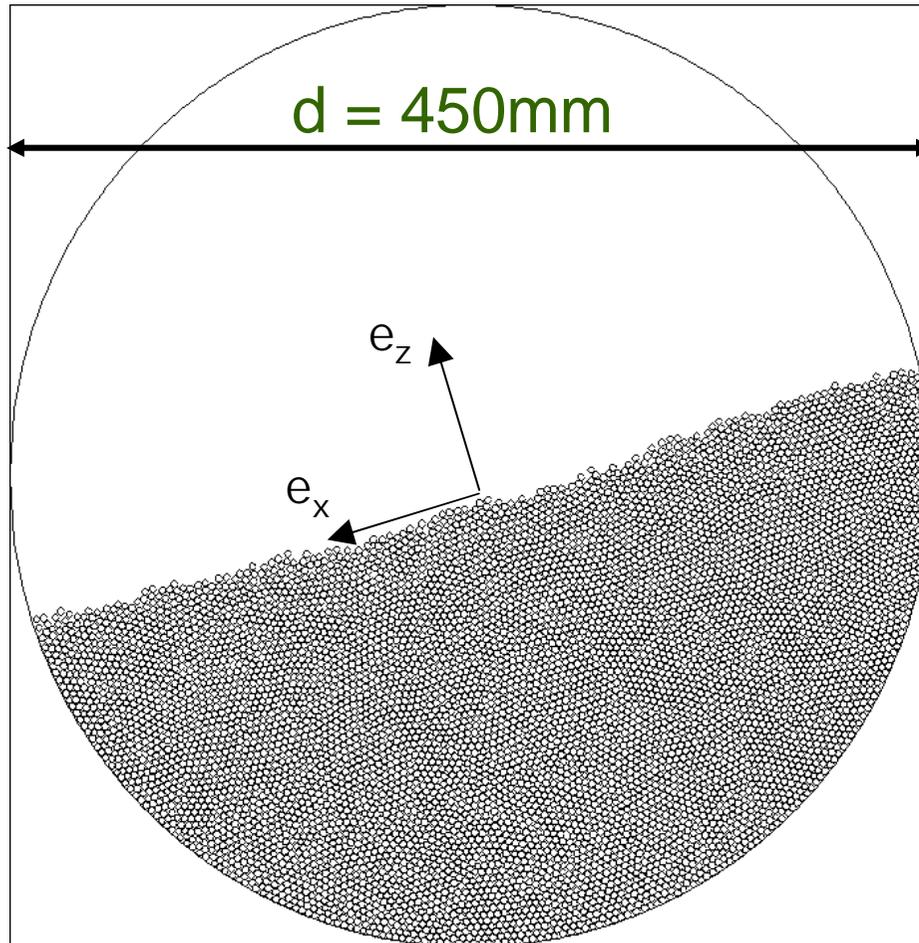
Cycle de Cisaillement



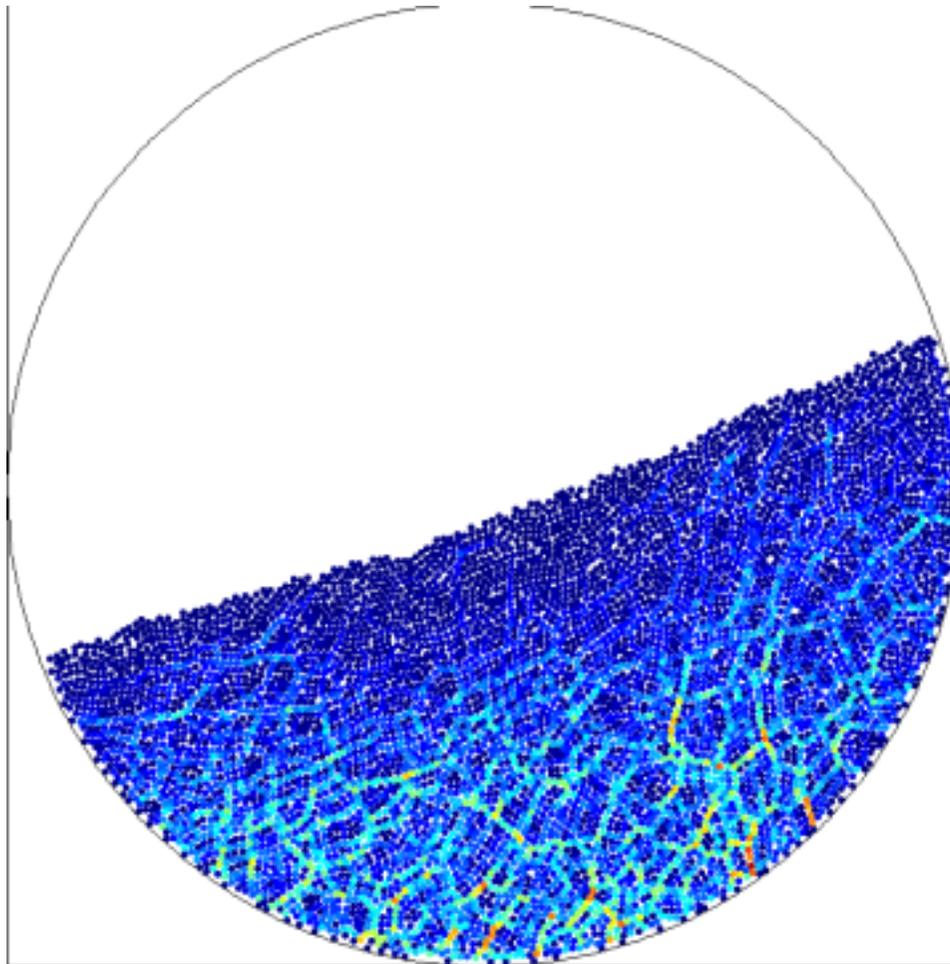




l'état régulier pour les écoulements granuleux



- tambour 2D diamètre 450mm
- rempli de 7183 disques «d'alu»
 - densité $\rho_0 = 2.7 \text{ g.cm}^{-3}$
 - Diamètre $d = 3 \pm 0.3 \text{ mm}$
 - Coeff. restitution 0.46
 - Coeff. Friction 0.4
- tournant à $\Omega = 2 \rightarrow 6 \text{ tr/min}$
- Méthode numérique: Dynamique de contacts
- Code utilisé: LMG90



0kPa

10kPa

- Réseau de voutes dans l'empilement
- Voutes 'fragiles' – de faible durée de vie dans la phase en mouvement
- Voutes 'solides' dans la phase statique

- **La rupture dans les verres implique la croissance et la coalescence de cavités nanométriques de $v = 1$ pm/s (AFM) à $v = 1300$ m/s (DM).**
- **Simulations et expériences définissent une zone de process dans les verres pour laquelle il y a un écart à l'élasticité linéaire.**
- **En simulation, la zone de process correspond à la zone 'poreuse'**
- **La silice subit des déformations réversibles jusqu'à ~ 10% de déformation en cisaillement, au-delà les déformations deviennent irréversibles.**