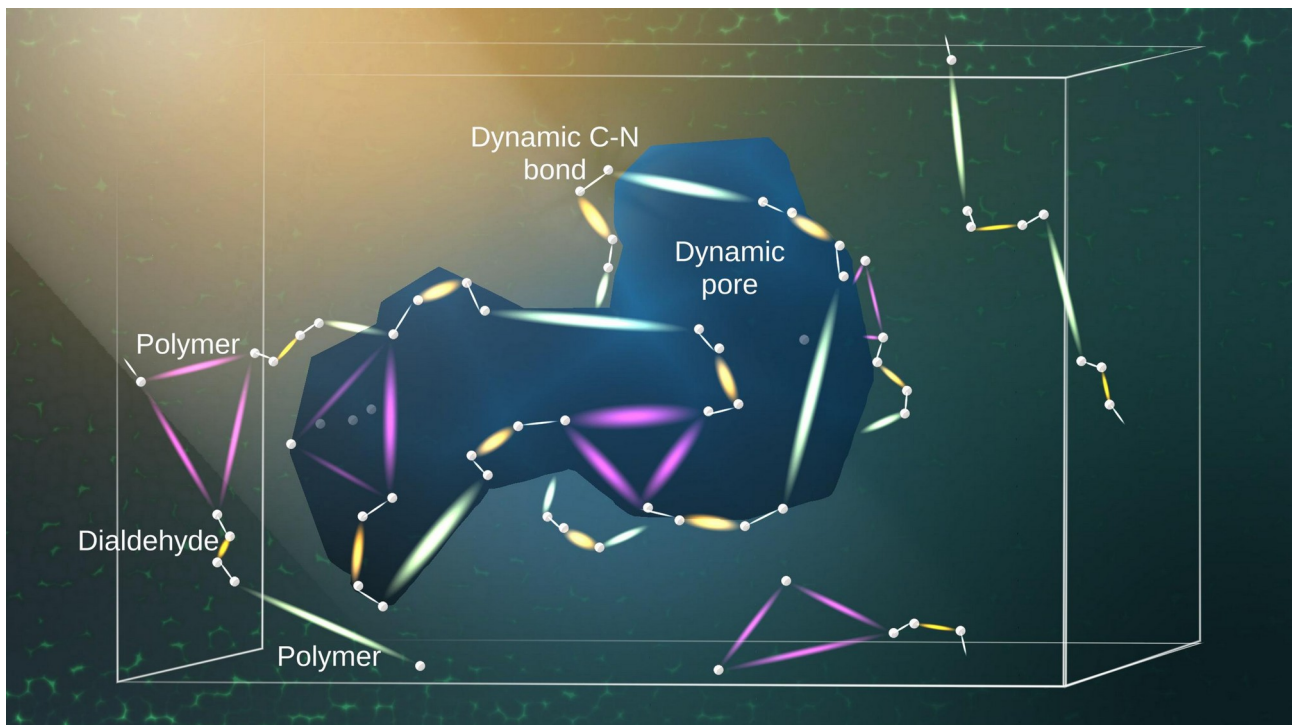


## Simulation de systèmes poreux et de solutions à l'échelle atomique

Romain Dupuis  
IEM/ICGM/Université de Montpellier

Ces dernières années, les méthodes permettant la simulation de systèmes à l'échelle atomique ont été fortement développées pour permettre la simulation de systèmes plus proches de ceux étudiés expérimentalement. Il est désormais possible de reproduire l'évolution de systèmes d'une centaine de nanomètres évoluant sur des temps supérieurs à la seconde, bien au-delà de ce que l'on peut faire en dynamique moléculaire classique. Ces modèles sont souvent intégrés dans une approche multi-échelle car ils permettent également de faire le lien avec des simulations mésoscopiques (dynamique brownienne, modèles à gros grains) et ils peuvent être utilisés pour tous types de matériaux.



**Figure - Représentation d'une structure de dynamères composée de polymères de différentes tailles et formes (batons / triangles) pouvant se connecter pour former un système poreux dynamique.**

Au cours de ce séminaire, je présenterai les méthodes que j'ai développées dans le cadre d'études portant sur la formation de gels dans la solution poreuse aqueuse de ciments, sur la formation de systèmes organiques utilisés pour la production de membranes séparatrices de gaz (dynamères) et sur la structuration de canaux d'eau. L'intérêt principal de ces méthodes est de pouvoir décorrélérer les effets (pH, degré d'humidité, température, arrangement moléculaire, etc.). Sur ces différentes problématiques, nous avons pu déterminer, en comparaison avec des données SWAXS et RMN, la structure atomique d'un gel amorphe qui se forme dans les matrices cimentaires afin de montrer que la calcification de ces gels nuit à la durabilité des ciments ; nous avons pu observer l'arrangement des chaînes dans les dynamères et découvrir qu'elles forment un système poreux complexe et non-permanent (voir figure) qui pourrait gonfler durant l'adsorption de gaz ; nous avons enfin commencé à étudier la stabilité des canaux d'eau multi-composants afin de mieux comprendre comment ils s'organisent en solution, avec pour objectif de prédéterminer des compositions à tester expérimentalement en étudiant quels sont les mécanismes et structures qui augmentent la perméabilité à l'eau.