

Séminaire



LABORATOIRE de MÉCANIQUE et GÉNIE CIVIL

Romain Dupuis

LMGC

Jeudi 11 septembre 14h00

Amphi Jean-Jacques Moreau
860, rue de Saint Priest, Bat. 2
34090 Montpellier

« De la molécule au matériau : ce que vous n'auriez jamais imaginé aimer savoir sur la simulation atomistique »

Résumé

Que peuvent bien nous apprendre les atomes sur les bétons, les géopolymères ou encore les supercondensateurs ? Derrière ces matériaux du quotidien se cachent des phénomènes complexes, souvent difficiles à observer expérimentalement car ils ont lieu à l'échelle des interfaces moléculaires, mais que la simulation atomistique permet de décrypter.

Prenons l'exemple du béton : certains gels et minéraux que l'on peut caractériser expérimentalement se forment dans les pores du ciment après durcissement et peuvent fragiliser la structure. Quelles conditions favorisent la formation de ces phases ? Comment génèrent-elles des contraintes dans la matrice cimentaire ? Au-delà du béton, des problématiques comme le stockage d'énergie ou la dépollution de l'eau sont elles aussi liées à la structure et à la déformation des matériaux poreux. Un axe important de recherche est de développer des approches multi-échelles pour valider les modèles et relier les phénomènes microscopiques aux propriétés macroscopiques.

Au cours de ce séminaire, je présenterai différentes approches que je développe pour intégrer la réactivité chimique depuis l'échelle moléculaire jusqu'à l'échelle mésoscopique. Les réactions chimiques jouent un rôle clé dans le vieillissement des matériaux et donc dans la durabilité des matériaux. Enfin, je montrerai quelques applications concrètes sur lesquelles je travaille actuellement, illustrant le potentiel de ces méthodes pour la recherche fondamentale et appliquée. Nous verrons comment ces approches permettent de concevoir des solutions pour l'énergie (stockage, dessalement) et de mieux comprendre certains processus de dépollution de l'eau (PFAS, lithium).