

N° d'ordre :

THÈSE
Présentée devant

**L'INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUÉES
DE TOULOUSE**

En vue de l'obtention du
DOCTORAT INSA
Spécialité Génie Civil

Par
Stéphane BROCAS

**VERS LE COMPORTEMENT DE SYNTHÈSE
DE MILIEUX HÉTÉROGÈNES
PAR MODÉLISATION MOLÉCULAIRE**

Concepts, outils et application au nano-comportement d'argile

Tome III (progiciels et publications)

Soutenue le 7 décembre 2000 devant la commission d'Examen

MM. B. CAMBOU	Rapporteur
J. JOFFRE	Examineur
<u>P. JOUANNA</u>	Directeur de thèse
D. MAINPRICE	Examineur
J.P. OLLIVIER	Examineur
E. RINGOT	Examineur
H. VAN DAMME	Rapporteur

Stéphane BROCAS

Vers le comportement de synthèse de milieux hétérogènes par modélisation moléculaire.
Concepts, outils et application au nano-comportement d'argile.

RÉSUMÉ

Les modélisations utiles à l'ingénieur, à l'échelle macroscopique, sont envisagées classiquement en assimilant le milieu hétérogène à un continuum où interagissent divers constituants. Cette approche phénoménologique est maintenant bien établie au plan conceptuel mais elle nécessite la connaissance du comportement dont l'obtention par des voies expérimentales classiques devient de plus en plus difficile dans des milieux complexes.

Pour sortir de cette impasse, le retour à la physique au niveau atomique est aujourd'hui envisageable. En effet l'obtention du comportement par voie de synthèse numérique, longtemps considérée comme utopique, devient une réalité grâce à la modélisation moléculaire.

En partie 1 du mémoire, un condensé des concepts est donné tant pour l'approche phénoménologique que pour l'approche discrète à l'échelle atomique. La physique statistique permet de franchir le premier pas pour combler le fossé entre ces deux échelles extrêmes. L'implémentation du nano-comportement ainsi obtenu dans des programmes tels que les éléments finis est amorcée pour assurer le raccordement avec des modélisations phénoménologiques.

La partie 2 passe en revue les outils de modélisation moléculaire disponibles (logiciels). Leur assemblage (progiciels) aboutit à la mise au point d'un banc d'expérimentation numérique, dit "triaxial nano-numérique" (T.N.N.), apte à étudier le nano-comportement par voie de synthèse.

Sur les bases de la partie 1 et 2, la partie 3 présente un ensemble d'expériences numériques sur cristaux d'argile de type montmorillonite, anhydres ou hydratés. Les premiers résultats portent sur la relation contrainte-déformation obtenue à l'équilibre macroscopique soit par voie énergétique soit par une extension aux solides de l'approche du viriel. De plus les coefficients de transport hors équilibre macroscopique, relatifs à la diffusion et à la viscosité des molécules d'eau dans les espaces interfoliaires, sont obtenus par des techniques asymptotiques à gradient nul.

En conclusion sont exposés les espoirs offerts par ces premiers résultats de nano-comportement par voie de synthèse numérique.

Mots clés

Modélisation moléculaire, nano-comportement, milieux hétérogènes, argile.

FORMATION DOCTORALE : GENIE CIVIL

INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUÉES - UNIVERSITÉ PAUL SABATIER, TOULOUSE, FRANCE.

LABORATOIRE MATÉRIAUX ET DURABILITÉ DES CONSTRUCTIONS (L.M.D.C.)
Institut National des Sciences Appliquées - Université Paul Sabatier
INSA Génie Civil, Complexe scientifique de Rangueil,
31 077 Toulouse Cedex 4, France.