

## Proposition de Travail de Fin d'Études

### Comportement mécanique de matériaux nanoporeux filamenteux: Modélisation de grandes déformations par éléments finis

Contacts : [Cedric.Gommes@ulg.ac.be](mailto:Cedric.Gommes@ulg.ac.be) (Département de Chimie Appliquée)  
[JP.Ponthot@ulg.ac.be](mailto:JP.Ponthot@ulg.ac.be) (LTAS-Mécanique Numérique Non Linéaire)

Un nombre incalculable de technologies reposent sur l'utilisation de matériaux nanoporeux : les procédés à membranes, la séparation par adsorption, la catalyse hétérogène, les électrodes de pile à combustible, ne sont que quelques exemples parmi de nombreux autres.

La micrographie électronique ci-contre a été obtenue sur un gel de silice nanoporeux. Cette structure est typique de nombreux matériaux obtenus par procédé sol-gel : elle consiste en un enchevêtrement tridimensionnel complexe de filaments dont le diamètre est de quelques dizaines de nm, et la longueur peut atteindre le micron.

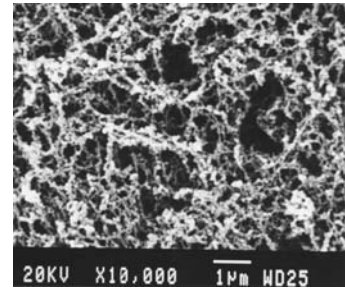


Fig. 1 Micrographie électronique d'un gel de silice.

Lorsque des matériaux de ce type sont comprimés, ils commencent généralement par subir une déformation élastique, lors de laquelle leur compressibilité reste constante, suivie d'une déformation plastique lors de laquelle leur compressibilité diminue au fur et à mesure où les filaments entrent en contact et se collent les uns aux autres. Certains matériaux ont toutefois un comportement plus surprenant : quand on les comprime, ils commencent par devenir de plus en plus mous !

Le but de ce TFE est de mener à bien une modélisation par éléments finis, pour comprendre qualitativement quelles sont les caractéristiques du matériau nanoporeux qui sont responsables de tel ou tel type de comportement mécanique. En pratique, il s'agira principalement : (i) de programmer un code permettant d'analyser par éléments finis les grandes déformations d'un treillis de poutres bidimensionnelles, et (ii) d'utiliser ce code pour analyser les déformations de modèles de treillis représentatifs de la morphologie des matériaux.

Des pavages de Poisson-Voronoi plans constituent des modèles morphologiques réalistes de matériaux de type sol-gel. En ajustant les paramètres de ces modèles, on peut simuler des distributions plus ou moins homogènes de la taille des pores. Il s'agira alors d'analyser les relations entre la morphologie et le comportement mécanique. Cet outil de pavage est déjà existant et ne doit donc plus être développé.

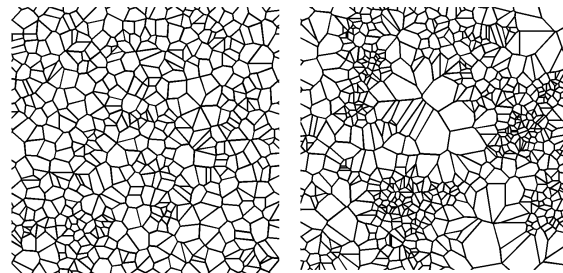


Fig. 2: Exemples de pavages de Voronoi qui constituent des modèles bidimensionnels de la morphologie de matériaux sol-gel.

Une spécificité des matériaux nanostructurés, qui les distingue des matériaux macroscopiques, est le rôle joué par les forces de Van der Waals (celles qui permettent aux geckos de coller aux murs). Ces forces conduisent à une attraction des filaments les uns par les autres, et elles pourraient donner lieu à des comportements mécaniques inédits.