

## **Effets de haute pression au sein de phases nanoconfinées**

**Benoit Coasne**

Institut Charles Gerhardt, CNRS UMR 5253, University Montpellier, ENSCMontpellier.

8 rue de l'École Normale, Montpellier, 34296 Cedex 05, France.

E-mail: [benoit.coasne@enscm.fr](mailto:benoit.coasne@enscm.fr)

Des travaux récents ont montré que certains phénomènes, qui ne se produisent qu'à haute pression pour des phases non confinées, peuvent être observés dans des matériaux nanoporeux dans des conditions de température et pression ambiantes. De tels phénomènes induits par des effets de surface ou de confinement incluent l'observation de phases haute pression ou réactions à haute pression. Ainsi, les glaces VII, VIII et IX, qui n'apparaissent qu'à des pressions supérieures à 1 GPa pour un système volumique, ont été observées dans des charbons poreux à température ambiante et sous une pression externe atmosphérique. Dans cet exposé, je présenterai dans un premier temps des travaux de simulation dans lesquels ces effets de haute pression ont pu être mis en évidence. Ainsi, nous verrons comment la forte dépendance en pression externe de la température de solidification d'un fluide confiné peut-être expliqué par des variations importantes de la pression mécanique au sein du pore. Nous verrons également comment des effets dits « poromécaniques » peuvent expliquer les dommages causés à une pâte de ciment en condition de cycle gel/dégel. Enfin, dans un deuxième temps, après m'être intéressé au calcul par simulation moléculaire du tenseur de pression au sein de la phase confinée, je présenterai un travail où nous avons trouvé, en accord avec l'expérience, que l'adsorption de gaz dans un solide microporeux (CO<sub>2</sub> dans une zéolithe silicalite) accroît ses propriétés mécaniques en augmentant son module élastique.