

# Thèse : Etude de la pression de cristallisation par simulation moléculaire et expériences micro-fluidiques

*L. Brochard, J.-M. Pereira, M. Vandamme (Laboratoire Navier, Ecole des Ponts/Univ. Gustave Eiffel/CNRS)*

Supervision: *L. Mercury, F. Osselin (Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans/BRGM/CNRS)*

*T. Honorio (Laboratoire de Mécanique Paris-Saclay, ENS Paris-Saclay/Univ. Paris Saclay/CNRS)*

## Contexte

La cristallisation de sels dans les milieux poreux est une cause majeure d'endommagement des matériaux impliquée dans la dégradation du patrimoine (Fig. 1), les désordres géotechniques<sup>1</sup>, les processus géomorphologiques<sup>2</sup>, ou encore la durabilité des matériaux cimentaires<sup>3,4,5</sup>. Pourtant, l'endommagement par cristallisation au sein d'un milieu poreux reste l'un des phénomènes les plus mal compris en mécanique des milieux poreux<sup>6</sup>. Les dégradations dépendent fortement de la nature du sel, du type de matériau poreux, des cycles de dissolution-précipitation, de la cinétique de diffusion des solutés, ou encore de l'échelle de porosité en jeu. Le fait qu'un cristal en contact avec une solution sursaturée puisse croître tout en étant comprimé a été mis en évidence dès le 19<sup>e</sup> siècle<sup>7</sup>. La loi de Correns<sup>8</sup> (1949) fournit une première prédiction théorique du phénomène basée sur l'égalité des potentiels chimiques entre la solution sursaturée et le cristal. Elle prédit une 'pression de cristallisation' qui peut excéder la centaine de MPa pour des solutions fortement sursaturées, largement suffisante pour endommager les matériaux de construction et les roches. La loi de Correns a été affinée depuis<sup>9</sup>, mais elle ne permet pas de comprendre pourquoi, d'un sel à l'autre, il existe de si grandes différences d'endommagement des matériaux, à conditions expérimentales identiques<sup>10</sup>. En particulier, les travaux récents ont démontré le rôle central de l'interface nanométrique cristal-film aqueux-solide où s'établit la pression de disjonction à l'origine du transfert de la contrainte<sup>11,12,13,14,15,16,17,18</sup>.

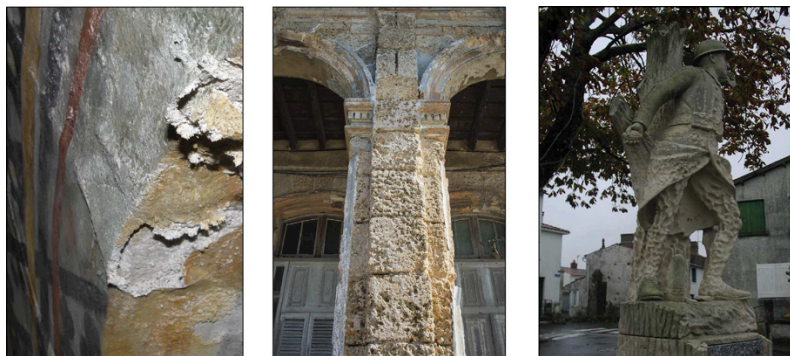


Fig. 1 : Exemples de dégradation au sel de patrimoine et monuments, de Flatt et al.<sup>6</sup>

## Objectif

Dans ce projet, nous nous proposons d'utiliser des approches de simulation moléculaire (Navier, LMPS) en complément d'expériences de micro-fluidique (ISTO) afin d'établir l'origine et de quantifier les phénomènes de pression de cristallisation dans des systèmes modèles. Les approches micro-fluidiques



consistent en l'utilisation de micromodèles permettant un contrôle précis et un suivi quantitatif de la cristallisation à l'échelle d'un pore modèle. La simulation moléculaire permettra de compléter l'expérience avec une description nanométrique de la coexistence soluté-sel à l'échelle de l'interface cristal-solide. Ce travail doit permettre une mesure et une estimation théorique quantitatives de la pression de cristallisation, afin d'évaluer le rôle des paramètres clés (super-saturation, pression de disjonction, épaisseur de film, nature du sel et de la surface) et converger vers une analyse thermodynamique cohérente. Ce travail pourra être transposé à des cas plus appliqués sur lesquels les partenaires mènent des recherches (cristallisation de thénardite/mirabilite, bétons, roches calcaires, monuments historiques).

### Détails pratiques et candidatures

Ce projet de thèse se déroulera alternativement entre la région parisienne (laboratoire Navier et LMPS) pour la partie simulation en 1<sup>ère</sup> année, et Orléans (ISTO) pour la partie expérimentale en 2<sup>ème</sup> année (3<sup>ème</sup> année à voir en fonction de l'avancement). Le doctorant sera inscrit à l'école doctorale Science, Ingénierie, Environnement de l'Ecole des Ponts ParisTech. Le projet est financé par le CNRS dans le cadre de la mission pour les initiatives transverses et interdisciplinaires (projet ESOPÉ). Le contrat doctoral est prévu pour une durée de trois ans à compter du 1<sup>er</sup> octobre 2022, avec une rémunération brute de 2135€/mois à temps complet.

Les candidats doivent être diplômés d'un Master 2 ou équivalent en physique et/ou (géo)-mécanique des matériaux (ou domaine proche), avec un goût à la fois pour le numérique et l'expérimental. Ils doivent pouvoir communiquer en français et/ou en anglais couramment, à l'écrit comme à l'oral. Les candidats intéressés sont invités à candidater sur le portail emploi du CNRS (<https://emploi.cnrs.fr/Offres/Doctorant/UMR8205-LAUBRO-001/Default.aspx>) ou par mail en envoyant un CV, une lettre de motivation et leurs relevés de notes à L. Brochard ([laurent.brochard@enpc.fr](mailto:laurent.brochard@enpc.fr)) d'ici le 6 mai 2022.

---

<sup>1</sup> Sass & Burbaum (2010) *Acta Carsologica*, 39.

<sup>2</sup> Osselin et al. (2022). *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 318, 165-189.

<sup>3</sup> Taylor et al. (2001) *Cement and Concrete Research*, 31, 683-693.

<sup>4</sup> Liu et al. (2014) *Construction and Building Materials*, 66, 692-701.

<sup>5</sup> Rajabipour et al. (2015) *Cement and Concrete Research*, 76, 130-146.

<sup>6</sup> Flatt et al. (2014) *Nature communications*, 5(1), 1-5.

<sup>7</sup> Lavalley (1853) *Compt. Rend. Acad. Sci (Paris)*, 36, 493-495.

<sup>8</sup> Correns (1949) *Discussions of the Faraday society*, 5, 267-271.

<sup>9</sup> Coussy (2006) *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54(8), 1517-1547.

<sup>10</sup> Shahidzadeh-Bonn et al. (2008) *Langmuir*, 24(16), 8599-8605.

<sup>11</sup> Scherer (1999) *Cement and Concrete Research*, 29, 1347-1358.

<sup>12</sup> Scherer (2004) *Cement and Concrete Research*, 34(9), 1613-1624.

<sup>13</sup> Flatt (2002) *J. Cryst. Growth*, 242, 435-454.

<sup>14</sup> Steiger (2005) *J. Cryst. Growth*, 282, 455-469.

<sup>15</sup> Steiger & Asmussen (2008) *Geochimica and Cosmochimica Acta*, 72, 4291-4306.



---

<sup>16</sup> Shahidzadeh-Bonn (2010) *Phys. Rev. E*, 81, 066110.

<sup>17</sup> Desarnaud (2016). *Scientific reports*, 6(1), 1-8.

<sup>18</sup> Mercury et al. (2021) *ACS Earth Space Chem*, 5(2), 170-185.