



Université Blaise Pascal

UNIVERSITÉ BLAISE PASCAL
U.F.R de Recherche Scientifique et Technique



CYCLE DE CONFÉRENCES DE CHIMIE

Avec le concours de : **Manufacture Française des Pneumatiques MICHELIN**
Centre de Développement Préclinique, Schering-Plough
Fédération de Chimie (FR 2404)
Section Auvergne de la Société Française de Chimie
U.F.R.S.T. / Master de Chimie / Département de Chimie

Mercredi 8 Septembre 2010 à 16 h
Amphi de Chimie Paul REMI - (Site des Cézeaux)

Dr Emeric Bourasseau
CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

Couplage microscopique-macroscopique pour la simulation de systèmes hétérogènes agrégats / fluide

La connaissance des propriétés d'équilibre des mélanges de produits de détonation est une des étapes nécessaires à la compréhension du phénomène de détonation. Dans le cas des explosifs riches en carbone, ces mélanges présentent la particularité d'être constitués d'une phase fluide dense dans laquelle sont immergés des agrégats de carbone de taille nanométrique. L'étude de ces systèmes inhomogènes présentant à la fois un équilibre de phase et un équilibre chimique représente un challenge important en détonique, que seules les méthodes de simulations moléculaires sont actuellement susceptibles de relever.

Au cours de cette présentation, nous vous décrirons les différentes méthodes et modèles que nous avons développés pour étudier ces systèmes particuliers. Des simulations de dynamique moléculaire ont été réalisées en utilisant un potentiel complexe de type Bond Order pour étudier les agrégats de carbone solide à l'échelle moléculaire, et dresser le diagramme de phase de ces objets nanométriques. Nous avons également développé un modèle permettant de substituer les agrégats réels par des particules mésoscopiques qui en reproduisent les propriétés. Enfin, la méthode de Reaction Ensemble Monte Carlo, qui permet de déterminer l'équilibre chimique d'un système moléculaire, a été adaptée dans le but de calculer les propriétés des systèmes fluide / mésoparticule à l'équilibre chimique. L'application de ces méthodes à des cas réels de mélanges de produits de détonation d'explosifs usuels nous a permis de mettre en lumière l'importance de la prise en compte du caractère hétérogène de ce type de systèmes.