



Institut de physique
Actualité scientifique

La grandeur du ciment dans la petitesse de ses pores

Le ciment est le matériau le plus produit au monde et un acteur majeur des émissions de gaz à effet de serre. Le mystère de l'origine de son extraordinaire pouvoir de cohésion est éclairci grâce à de nouvelles approches théoriques et numériques, dégageant des pistes pour concevoir un matériau plus durable.

Une fois hydraté, le ciment est largement utilisé pour lier des matériaux de construction, notamment le béton, leur conférant des propriétés cohésives et mécaniques extraordinaires. Alors que comprendre l'origine de la cohésion du ciment est un enjeu majeur pour améliorer sa technologie et espérer réduire son impact climatique, jusqu'ici, la physique en jeu au sein du ciment était largement incomprise, les modélisations théoriques échouant à rendre compte de la force de cohésion d'un facteur 100 par rapport aux simulations numériques. Dans ce travail, en associant des simulations numériques 3D décrivant l'organisation des composants du ciment à l'échelle moléculaire et de nouveaux calculs analytiques, les chercheurs et les chercheuses ont montré que la force de cohésion est due aux interactions électrostatiques entre les ions, lesquelles sont très significativement augmentées par rapport aux prédictions en raison de leur confinement extrême avec l'eau dans des nanopores. Cette étude a été réalisée par des membres du Laboratoire de physique théorique et modèles statistiques (LPTMS, CNRS/Univ. Paris-Saclay), du Laboratoire de mécanique et génie civil (LMGC, CNRS/ Univ. Montpellier), de Georgetown University et du Massachusetts Institute of Technology. Elle est publiée dans la revue *Science Advances*.

A base de calcaire et d'argile, la pâte de ciment se forme par précipitation avec l'eau. Elle est principalement composée de silicate de calcium hydraté (C-S-H), présentant des pores nanométriques en forme de feuillets dont les surfaces sont chargées et dans lesquels des ions calcium solvatés sont confinés. Au cours de l'hydratation, les pores rétrécissent et le confinement augmente jusqu'au moment où la place manque pour accommoder toutes les molécules d'eau entourant habituellement les ions. Les ions s'associent alors avec l'eau dans des structures spécifiquement optimisées par le confinement. L'écrantage diélectrique dû à la solvation disparaît, induisant des corrélations ioniques significativement plus fortes qu'on ne le pensait auparavant et la formation d'une sorte de cristal d'ions enchevêtré de molécules d'eau (figure). Un nouveau modèle analytique prenant en compte la disparition de l'écrantage des interactions a été développé, qui prédit l'intensité de la cohésion de la pâte de ciment, cette fois en très bon accord avec les simulations numériques. De façon assez contre-intuitive, les feuillets de C-S-H s'attirent fortement, bien que portant des charges de même signe. Cette attraction, d'origine purement Coulombienne, est due à la présence d'ions de charge opposée dans l'espace inter-feuillets.

La compréhension de la physique fondamentale en jeu dans la cohésion du ciment procure des outils pour l'identification de paramètres clés tels que le type d'ions, leur charge ou le type de molécules du solvant, en vue de concevoir une pâte de ciment plus durable et des nouveaux matériaux de construction pour des infrastructures plus résilientes. Ces résultats intéressent aussi des applications dans d'autres domaines comme les colloïdes ou les membranes biologiques, quand sont réunies interactions électrostatiques et confinement.



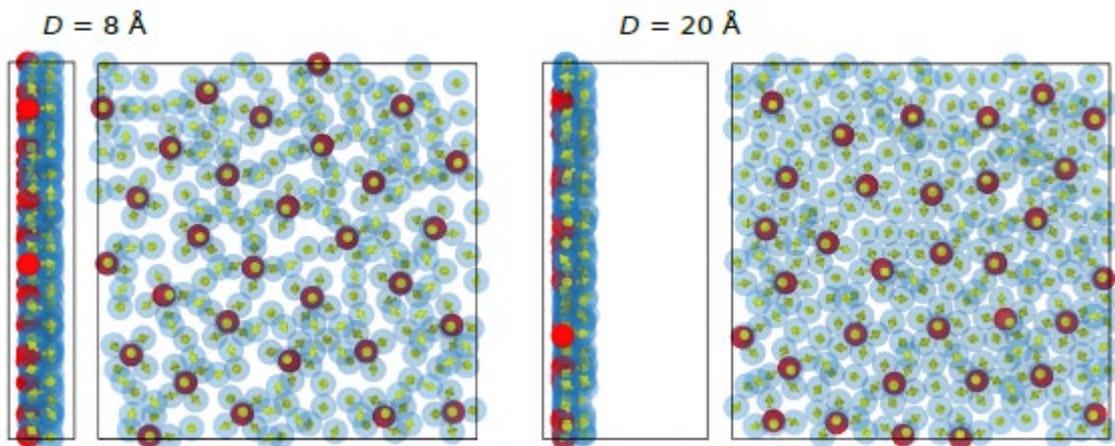


Figure : Représentation des ions et des molécules d'eau procurée par les simulations 3D dans le cas de pores étroits (8 Å) et de pores larges (20 Å). Les ions sont en rouge et les molécules d'eau en bleu, avec une flèche jaune indiquant la direction de leur moment dipolaire. Dans le premier cas, les ions sont très confinés, entourés typiquement de 5 molécules d'eau, et ils se concentrent sur une seule couche en formant un cristal carré. Dans le second cas, la dimension du pore est plus grande, il y a plus de molécules d'eau par ion et, en raison de l'écrantage des interactions coulombiennes, les ions ne sont plus ordonnés.

Référence

The physics of cement cohesion. A. Goyal, I. Palaia, K. Ioannidou, F.-J. Ulm, H. van Damme, R. J.-M. Pellenq, E. Trizac, E. Del Gado. *Science Advances*, paru le 04 août 2021.
DOI : [10.1126/sciadv.abg5882](https://doi.org/10.1126/sciadv.abg5882)

Contacts

Emmanuel Trizac | professeur à l'Université Paris-Saclay | LPTMS | emmanuel.trizac@universite-paris-saclay.fr
Communication CNRS-INP | inp.com@cnrs.fr