

Modélisation stochastique de la condensation capillaire dans des xérogels de carbone

Cedric J. Gommès ^{1*}, Anthony P. Roberts ²

¹ Department of Chemical Engineering, Université de Liège, 3 allée du Six Août, 4000 Liège, Belgique

² School of Mathematics and Physics, The University of Queensland, Brisbane QLD 4072, Australie

(*email : cedric.gommès@uliege.be)

La première discussion de la condensation capillaire date des travaux de Lord Kelvin à la fin du XIX^{ème} siècle [1], et elle a été suivie par de nombreux développements théoriques et expérimentaux tout au long du XX^{ème} siècle. De manière peut être surprenante, il fallut attendre le tournant du XXI^{ème} siècle, et le développement de matériaux mésoporeux ordonnés, pour que les théories existantes soient confrontées pour la première fois à des expériences effectuées sur des matériaux ayant les mêmes structures idéales (des pores cylindriques) que les modèles existants. Ces travaux ont globalement validé le contenu physique des théories, mais ils ont également révélé l'importance du désordre géométrique [2]. Or, la plupart des matériaux mésoporeux d'intérêt pratique sont extrêmement désordonnés.

Nous présentons une analyse stochastique de la condensation capillaire dans des xérogels de carbones, qui vise à comprendre l'influence de la structure désordonnée de ces matériaux sur leurs propriétés d'adsorption. La structure poreuse des xérogels est modélisée sur base de données de diffusion des rayons X aux petits angles (SAXS), à l'aide d'un modèle classique de champ aléatoire Gaussien seuillé (Figure 1 et [3]). L'originalité de notre approche tient à une généralisation multiphasique de ce modèle, qui nous permet de décrire à la fois le matériau poreux et la structure du condensat dans les pores [4]. Les paramètres du modèle fournissent alors une approximation à faible dimensionnalité de l'espace de configuration du système. Les prédictions du modèle sont globalement en accord avec les expériences (Figure 2), mais elles remettent en question certaines conceptions sur l'origine de l'hystérèse d'adsorption/désorption dans ces matériaux.

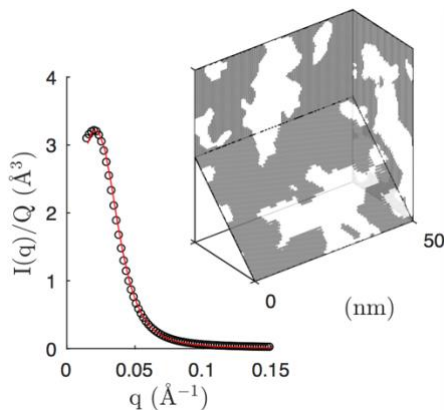


Figure 1 : Spectre SAXS du xérogel de carbone, et réalisation du modèle de structure poreuse par champ aléatoire seuillé.

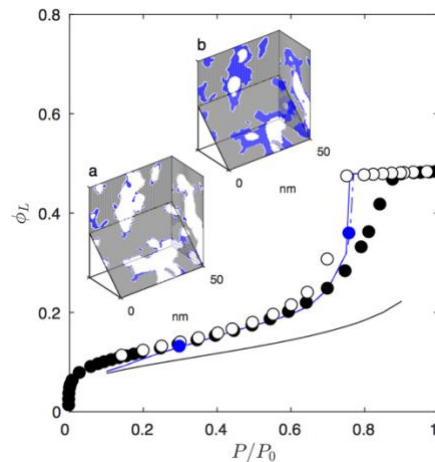


Figure 2 : Isotherme d'adsorption d'azote calculée sur base de la structure obtenue par SAXS (courbe bleue) ainsi que les valeurs expérimentales pour l'adsorption (●) et la désorption (○). Les cartouches illustrent la structure du condensat.

[1] W. Thomson, *Philos. Mag.* 42 (1871) 448 ;

[2] D. Wallacher et al., *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 195704 ;

[3] P. Levitz, *Adv. Coll. Interf. Sci.* 76 (1998) 71;

[4] C.J. Gommès et A.P. Roberts, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, soumis.