

Modèle mésoscopique de cristallisation du gypse

G. Dumazer & A. Lemarchand

CNRS, Université Pierre et Marie Curie - Paris 6, Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée ,
UMR 7600, 4, place Jussieu, case courrier 121, 75252 Paris Cedex 05, France
dumazer@lptmc.jussieu.fr

La cristallisation du gypse à partir de grains de sulphate de calcium hémihydraté en solution aqueuse est étudiée à une échelle mésoscopique. Nous avons construit un modèle de formation du gypse limitée par un processus de nucléation hétérogène et de précipitation sous forme d'aiguilles. Cette précipitation a une cinétique de croissance d'abord autocatalytique contrôlée par la surface des aiguilles, puis contrôlée par la diffusion des réactifs dans la solution. Ce modèle introduit un nombre minimal de paramètres dont l'effet sur la dynamique de croissance et sur la morphologie du gypse est étudié en détail par des simulations numériques et par une approche stochastique sous forme d'une équation maîtresse. Nous avons trouvé que le nombre de germes par grain d'hémihydrate raccourcit le temps d'induction ainsi que la longueur des aiguilles, tout en augmentant leur enchevêtrement, c'est-à-dire en améliorant les propriétés mécaniques du matériau. Les résultats de simulation et les solutions de l'équation maîtresse reproduisent de façon satisfaisante les résultats des expériences menées à l'École Nationale Supérieure de Céramique Industrielle de Limoges par le Groupe d'Étude des Matériaux Hétérogènes. Le modèle pourra être utilisé pour prédire le comportement du système réactif dans des conditions qui ne sont pas compatibles avec les protocoles expérimentaux d'observation.

Références

G. Dumazer, V. Narayan, A. Smith et A. Lemarchand, *J. Phys. Chem. C*, à paraître (2009).