

---

# Comportement thermodynamique et mécanique des matériaux poreux flexibles : une vision unifiée

François-Xavier Coudert\*<sup>†1</sup>, Anne Boutin<sup>2</sup>, and Alain Fuchs<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut de Recherche de Chimie Paris, CNRS – Chimie ParisTech, Paris, France – CNRS : UMR8247, Chimie ParisTech – France

<sup>2</sup>Processus d'Activation Sélective par Transfert d'Énergie Uni-électronique ou Radiatif (PASTEUR) – CNRS : UMR8640, Université Pierre et Marie Curie (UPMC) - Paris VI, École normale supérieure [ENS] - Paris – 24 Rue Lhomond 75231 PARIS CEDEX 05, France

## Résumé

La découverte d'un grand nombre de matériaux nanoporeux flexibles de la famille des MOFs (Metal–Organic Frameworks), qui réagissent à des stimuli physico-chimiques comme l'adsorption par des modifications importantes de leur structure cristalline (Fig. 1) a nécessité le développement d'une nouvelle gamme d'outils théoriques. [1] Nous avons donc développé une large gamme d'outils théoriques pour explorer ce domaine, alliant les calculs de chimie quantique, la dynamique moléculaire *ab initio*, les simulations Monte Carlo classique, et des modèles mésoscopiques de déformation élastique. Cette méthodologie a permis quelque beaux succès récent : mise en évidence d'une "signature" dans le régime élastique des transitions structurales [1], prédiction de nouvelles phases inconnues expérimentalement (mais récemment confirmées) [2], présence de défauts structuraux corrélés formant des nanodomains [3], mécanisme d'amorphisation sous pression de matériaux de la famille ZIF [4]. Par ailleurs, nous avons développé des modèles théoriques (analytiques ou numériques) permettant d'analyser et de rationaliser les données expérimentales brutes comme les isothermes d'adsorption mesurées lors de caractérisations de routine. [5,6]

A. U. Ortiz, A. Boutin, A. H. Fuchs and F.-X. Coudert, *Phys. Rev. Lett.*, **2012**, 109, 195502

A. U. Ortiz, A. Boutin and F.-X. Coudert, *Chem. Commun.*, **2014**, DOI: 10.1039/C4CC00734D

M. J. Cliffe, W. Wan, X. Zou, P. A. Chater, A. K. Kleppe, M. G. Tucker, H. Wilhelm, N. P. Funnell, F.-X. Coudert, and A. L. Goodwin, *Nat. Commun.*, **2014** (accepted for publication)

A. U. Ortiz, A. Boutin, A. H. Fuchs and F.-X. Coudert, *J. Phys. Chem. Lett.*, **2013**, 4, 1861–1865.

F.-X. Coudert, M. Jeffroy, A. H. Fuchs, A. Boutin, C. Mellot-Draznieks, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 14294.

Review: F.-X. Coudert, A. Boutin, M. Jeffroy, C. Mellot-Draznieks, A. H. Fuchs, *ChemPhysChem* **2011**, 12, 247.

---

\*Intervenant

<sup>†</sup>Auteur correspondant: fx.coudert@chimie-paristech.fr

**Mots-Clés:** matériaux nanoporeux, metal, organic frameworks, thermodynamique statistique, adsorption, pression