

Simulation des colloïdes

1. Organismes (avec affiliation, usuellement 2 ou 3 personnes) :

Arnaud VIDECOQ, IRCER, Université de Limoges
Yannick HALLEZ, LGC, Université Toulouse 3

2. Parrainage ou lien avec des sociétés savantes, des GDR ou autres structures :

GDR SLAMM (Solliciter la matière molle)

3. Résumé de la thématique du mini-colloque :

Les colloïdes ou suspensions colloïdales sont utilisés dans de nombreux domaines (santé, alimentation, peintures, procédés de mise en forme des matériaux, etc.). Les colloïdes sont immergés dans un solvant, constituant ainsi un mélange diphasique. Les simulations dans le domaine des colloïdes sont complexes du fait de l'écart important dans les échelles de longueur et de temps entre la dynamique des colloïdes eux-mêmes et celle des ions et molécules de solvant. Il n'est donc pas possible de considérer toutes ces entités de façon explicite dans une simulation. Les ions et molécules de solvant jouent pourtant un rôle important sur les interactions électrostatiques et hydrodynamiques.

Ce mini-colloque vise à échanger sur les techniques de simulation utilisées dans ce domaine dans le but de prédire notamment des propriétés de type structural (stabilité, arrangements de particules à l'échelle colloïdale, seuil de percolation, etc.) et/ou des propriétés de transport (de masse, de charge, de quantité de mouvement).

Les problématiques spécifiques portent sur :

- Les interactions entre particules : les études de la dynamique d'un ensemble de colloïdes sont souvent menées à l'aide de stratégies de coarse-graining impliquant de travailler avec des potentiels effectifs. Bien qu'essentiels à une bonne modélisation des systèmes, ces potentiels restent mal connus. Dans ce contexte, ce mini-colloque propose d'aborder les points suivants :
 - Modèles implicite ou explicite pour le traitement des ions (i.e. de l'électrostatique)
 - Modèles implicite ou explicite pour le traitement du solvant (i.e. de l'hydrodynamique) avec de nombreuses techniques : stokesian dynamics, lattice Boltzmann, dissipative particle dynamics, multi-particle collision dynamics, etc.
 - Cas de particules anisotropes : anisotropie de propriétés de surface (particules Janus ou à patch) et anisotropie de forme (plaquettes, etc.)
 - Détermination de potentiels d'interaction par machine-learning
- Le traitement de contraintes/stimuli appliqués : comme les autres systèmes relevant de la matière molle, les dispersions colloïdales sont très sensibles aux sollicitations externes. Simuler leur réponse à différentes sollicitations est essentiel par exemple pour comprendre des problématiques d'assemblage ou de stabilité dans des domaines comme la santé ou l'agronomie, ou encore pour des applications nécessitant un contrôle fin de la structure à méso-échelle (photonique, céramiques pour l'énergie, etc.). Dans ce cadre, nous proposons de discuter des techniques de simulation qui permettent de décrire l'effet des stimuli suivants :
 - Gravité
 - Champs électriques ou magnétiques externes
 - Pression
 - Cisaillement

18^{èmes} Journées de la Matière Condensée
22-26 août 2022, Lyon



- Compression par évaporation/séchage, congélation ou filtration
- Milieux confinés / interaction avec des parois

La thématique des dispersions colloïdales est à l'interface entre physique, mécanique, chimie, biologie et est donc abordée par différentes communautés qui ont tendance à se spécialiser autour de certaines techniques numériques. Nous pensons qu'un mini-colloque dans le cadre des JMC serait une belle opportunité d'échanger autour des derniers développements dans chaque domaine.