

Interactions et structures de suspensions polydisperses de colloïdes sphériques chargés

G. Bareigts et C. Labbez

Surfaces et Interfaces d'Oxydes Métalliques (SIOM), Dept. INTERFACES, Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, UMR 6303 CNRS-Université de Bourgogne Franche-Comté, 9 Av. Alain Savary, BP 47870, 21078 DIJON Cedex, FRANCE

Les suspensions colloïdales se trouvent un peu partout autour de nous, dans les matériaux de constructions, en cosmétique, dans l'alimentation, en biologie. Elles sont composées de particules nanométriques ou micrométriques dispersés dans un gaz, un liquide ou un solide. Cette thèse porte sur les suspensions colloïdales dans des solutions ioniques, où les colloïdes portent une charge électrique, par exemple des particules de silice dans une solution aqueuse de chlorure de sodium, à un pH basique. Les colloïdes, ici approximés par des sphères, peuvent varier significativement en taille, ce qui peut avoir un effet important sur le comportement de ces systèmes. Cette étude vise à améliorer la compréhension de ces suspensions colloïdales chargées par des modèles théoriques résolus par des simulations numériques. Un des défis de ces simulations est le grand nombre de degrés de libertés. Pour chaque (micro-)ion il y a des centaines de molécules de solvant, et pour chaque colloïde des centaines voire des milliers d'ions. Pour s'en sortir, nous avons calculé les interactions effectives à l'échelle colloïdale. Nous avons repris et développé plusieurs approches, présentant chacune un compromis en terme de temps de calcul et précision. La variation en taille des colloïdes peut introduire des effets intéressants, observés expérimentalement, notamment le fractionnement des suspensions en plusieurs phases cristallines quand on augmente la concentration en colloïdes. Des techniques de simulations Monte-Carlo simples associées aux interactions inter-colloïdes calculées précédemment ont permis d'obtenir des résultats en bon accord avec l'expérience.

Colloidal suspensions are found a bit everywhere around us, in construction materials, in cosmetics, in food, in biology. They are composed of nanometric or micrometric particles dispersed in a gas, a liquid or sometimes a solid. This thesis is about colloidal suspensions in ionic solutions, where colloids bear an electric charge, for example silica particles in an aqueous solution of sodium chloride, at a basic pH. The colloids, here approximated by spheres, can vary significantly in size, which can have an important effect on the behavior of these systems. This study aims at improving the understanding of these charged colloidal suspensions by theoretical models solved by numerical simulations. One of the challenge of these simulations is the huge number of degrees of freedom. For each (micro-)ion there is hundreds of solvent molecules, and for each colloid there is hundreds if not thousands of ions. To get away with it, we calculated the effective interactions at the colloidal scale. We took and developed several approaches, each showing a trade-off in terms of computational time and accuracy. The size variation of colloids may introduce interesting effects, experimentally observed, notably the fractionation of suspensions in several crystalline phases when the colloidal concentration is increased. Some simple Monte-Carlo simulation techniques in combination with the inter-colloid interactions computed previously allowed us to obtain results in good agreement with experiments.