

Conférencière invitée
Marie Jardat | [PHENIX](#)

MODELING THE ORGANIZATION AND TRANSPORT OF SPECIES IN LIQUIDS

MODÉLISATION DE L'ORGANISATION ET DU TRANSPORT D'ESPÈCES DANS LES LIQUIDES

marie.jardat@sorbonne-universite.fr



14 novembre 2023

à 11h00

UFR de Chimie

**Tour 24.34
Salle 307**

**Collation à partir
de 10h30 4'**



[Plan campus](#)

Résumé : Quels sont les principaux facteurs qui influencent l'organisation et le transport d'espèces en suspension dans des liquides ? Cette question est importante dans plusieurs contextes, de la théorie du transport dans les électrolytes jusqu'à la compréhension des mécanismes qui permettent la propulsion de particules actives ou la formation de condensats biologiques. Afin de comprendre, interpréter ou prédire le comportement de ces systèmes, nous combinons au laboratoire PHENIX différents types de modélisations et de simulations numériques. Je présenterai au cours de cette conférence les grands principes des méthodes de simulation numérique que j'utilise. Ces méthodes, souvent dites à gros grains, ne décrivent pas explicitement tous les détails atomiques d'un système physicochimique, mais présentent plusieurs avantages. D'abord, elles permettent de simuler le comportement des systèmes sur des durées plus longues que ne le feraient des simulations quantiques ou de dynamique moléculaire classique décrivant tous les atomes. Aussi, la simulation de modèles simplifiés permet de mieux comprendre l'origine microscopique des propriétés d'un système complexe, en séparant certains effets génériques (rôle de l'encombrement, des interactions électrostatiques, de l'hydrodynamique) d'effets moléculaires spécifiques. Pour illustrer l'intérêt de ces modélisations, je présenterai quelques résultats obtenus ces dernières années :

(i) Nous avons montré, pour des systèmes très différents (des milieux nanoporeux chargés, une protéine au voisinage d'un brin d'ADN), que la compétition entre les interactions électrostatiques et les effets d'encombrement stérique peuvent conduire à des résultats non intuitifs. Dans ces exemples, la modélisation et la simulation numérique permettent de proposer des interprétations simples d'observations expérimentales. (ii) Nous avons simulé la dynamique de petits ions au voisinage de plans chargés et montré que les résultats obtenus s'écartent nettement de la situation idéale couramment supposée dans les théories du transport électrocinétique de type Poisson-Nernst-Planck. Ici, les simulations numériques permettent de montrer les limites d'une théorie existante, et de proposer des résultats facilement réutilisables. (iii) Nous avons proposé un modèle de particule isotrope active, c'est-à-dire une particule qui présente une autopropulsion conduisant aux temps longs à une diffusion augmentée. L'activité provient ici de l'apparition d'une transition de phase du milieu environnant, transition maintenue dans le voisinage de la particule par une réaction chimique hors équilibre. Dans cet exemple, la simulation numérique est l'outil qui permet d'étudier le comportement d'un modèle simple dans une large gamme de paramètres, afin d'identifier les ingrédients du modèle qui pilotent la propriété observée.

Biographie : [Marie Jardat](#) est professeur de chimie à Sorbonne Université, membre du Laboratoire PHENIX, PhysicoChimie des Electrolytes et Nanosystèmes Interfaciaux, dont elle est actuellement directrice adjointe. Elle effectue ses recherches dans le domaine de la modélisation en physicochimie et de la simulation numérique du comportement des solutions et des suspensions. Après avoir enseigné à tous les niveaux de la licence et du master, elle se consacre désormais aux enseignements de chimie générale en L1 et de thermodynamique appliquée à la chimie en L2.

Les mardis de la chimie Conception | Fernande.sarrazin@sorbonne-universite.fr