

Simulation de mécanismes coopératifs dans la matière dense

(Victor Teboul)

Nos recherches sont centrées sur la simulation à l'échelle atomique de milieux denses (liquides surfondus, verres, polymères, etc). Nous nous intéressons principalement à leurs propriétés de transport.

Un liquide peut rester liquide, et donc désordonné, en dessous de sa température de fusion. Dans ce cas, il se trouve dans un état d'équilibre métastable qui peut être brisé à tout moment par l'apparition de germes suivie de la cristallisation. Si la température du liquide surfondu est encore diminuée, sa viscosité ainsi que l'ensemble des temps de relaxation le caractérisant s'accroissent de manière considérable, conduisant finalement à l'apparition d'un verre. L'un des caractères étonnants de ce phénomène est que ce ralentissement de la dynamique n'est lié à aucune modification structurale du milieu. Des comportements inexplicables et universels apparaissent ainsi dans les liquides surfondus, les polymères et les verres. Il a été montré récemment que certains de ces comportements se retrouvent dans la matière molle, suggérant une universalité plus large. L'une des explications avancées pour ces phénomènes est l'apparition spontanée de la coopérativité dans ces milieux. Des mouvements moléculaires coopératifs sont en effet observés expérimentalement et par simulation¹.

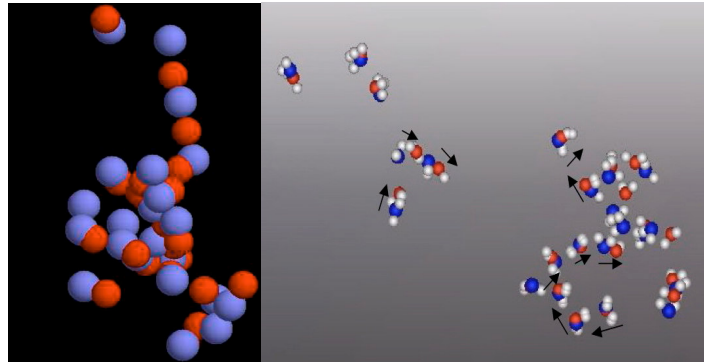


Fig. 1. Mouvements coopératifs similaires dans la silice et l'eau.

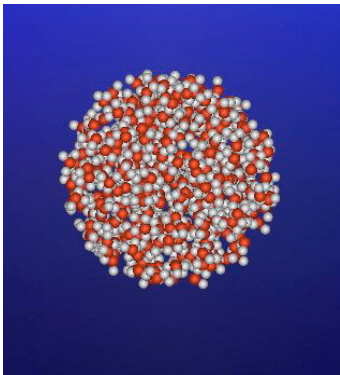
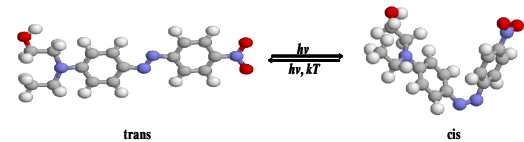


Fig. 2. Eau surfondue confinée à l'intérieur d'un nanoporeux (R=10 Å).

Si cette coopérativité est bien à l'origine de la dynamique dans les milieux désordonnés, il semble possible en modifiant ces mouvements coopératifs de contrôler la viscosité et l'ensemble des propriétés de transport du milieu. Nous cherchons donc l'effet d'une modification de la coopérativité sur les propriétés du matériau. Nous avons ainsi montré que le confinement à l'intérieur de milieux nanoporeux avait pour effet inattendu d'accroître la coopérativité^{2,3}.

Nous avons aussi réalisé récemment les premières simulations réalistes de l'isomérisation de chromophores à l'intérieur d'une matrice amorphe. Nos résultats ont montré que l'isomérisation des chromophores stimulait l'apparition des mouvements coopératifs dans le



milieu, et simultanément modifiait considérablement les temps de relaxation de la matrice⁴. Ces recherches trouvent des applications naturelles dans le secteur médical pour la préservation de milieux vivants ou de médicaments.

¹V. Teboul, *Pressure dependence of dynamical heterogeneity in water*, J. Phys. Condens. Mat. **20**, 244116 (2008).

²V. Teboul, C. Alba-Simionesco, *Dynamical heterogeneity in glassforming liquid Toluene: comparison of bulk and confined conditions by quasielastic neutron scattering and Molecular Dynamics simulations*, Chem. Phys. **317**, 245 (2005).

³V. Teboul, *Transient self-organization of supercooled water confined inside nano-porous materials*, Int. J. Nanotechnology **5**, 851 (2008).

⁴V. Teboul, M. Saiddine, J.M. Nunzi, *Isomerization-induced dynamical heterogeneity in a glass-former below and above T_g*, Phys. Rev. Lett. **103**, 265701 (2009).