

Géométrie et Matériaux

Toulouse, 13-14 juin 2019
Amphi 102, Bât. 20, campus de l'INSA

| | Jeudi 13 | Vendredi 14 |
|-------|--------------|----------------|
| 09h00 | café | café |
| 09h30 | S. TRICARD | E. PALLEAU |
| 11h00 | TH. FERNIQUE | F. SMALLENBURG |
| 12h30 | déjeuner | déjeuner |
| 14h00 | Y. HALLEZ | |
| 15h30 | M. SABLİK | |
| 19h00 | Dîner | |

Déjeuners au CROUS de l'INSA. Dîner au restaurant "La Cuisine de Jean" (18 avenue Albert Bedouce).
Départs groupés de l'amphi avec les locaux motorisés.

Résumé des interventions

Simon Tricard (LPCNO, Toulouse) : Nanoparticules et auto-assemblage. Les nanoparticules sont des objets chimiques dont les trois dimensions sont inférieures à 100 nm. L'exposé présentera dans un premier temps les intérêts que suscitent les nanoparticules en tant que telles et les stratégies pour limiter/contrôler leur croissance à l'échelle nanométrique. La deuxième partie abordera le fait de les assembler, la chimie "supraparticulaire" ou leur auto-assemblage dans l'espace et sur surface.

Thomas Fernique (LIPN, Villetaneuse) : Empilements de sphères. En mathématiques et informatique, une question importante à propos des empilements de sphères est de déterminer (rigoureusement) les plus denses. Ainsi, si la façon la plus dense d'empiler des oranges semblent être connue depuis toujours, la formalisation de ce problème est attribuée à Kepler (1611) et sa preuve formelle n'a été obtenue qu'en 1998 (Hales). Cet exposé propose un survol des résultats aujourd'hui connus, selon la dimension de l'espace et le nombre de sphères différentes. L'intérêt dans le contexte de l'auto-assemblage de nanoparticules est que certains assemblages binaires ou ternaires obtenus expérimentalement ressemblent très fortement à certains des empilements trouvés théoriquement. Ce qui conduit à la question qui sous-tend ce workshop : à quel point ce parallèle peut-il être exploité pour obtenir des assemblages originaux ?

Yannick Hallez (LGC, Toulouse) : Simulation des interactions entre objets de géométrie complexe. L'organisation de nanoparticules dans l'espace est déterminée par les interactions colloïdales qu'elles subissent. S'il existe un certain catalogue de modèles d'interactions pour les objets sphériques, presque tout reste à faire pour les objets anisotropes. Les interactions entre objets complexes sont donc souvent calculées en approchant leur géométrie par un assemblage de sphères et en sommant les interactions associées à chaque paire de sphères. Cet exposé présentera un outil de simulation destiné au calcul des interactions électrostatiques entre objets de géométrie complexe et qui ne fait pas appel à cette décomposition. Quelques résultats seront proposés afin d'illustrer les limites de l'approche de sommation par paire ainsi qu'une piste d'amélioration.

Mathieu Sablik (IMT, Toulouse) : Introduction aux pavages : du local au global. Un pavage est un recouvrement de l'espace par des tuiles de telle sorte que deux tuiles ne se superposent pas. Un modèle très répandu mathématiquement est celui des tuiles de Wang : on se donne un ensemble fini de tuiles carrées dont les bords sont coloriés et on cherche à paver le plan par des copies de ces tuiles collées bord-à-bord de façon à ce que les couleurs en contact coïncident. Dans cet exposé on propose de voir comment ces règles locales peuvent imposer une structure globale, par exemple une structure qui n'est pas périodique. On verra dans un deuxième temps quelle complexité peuvent avoir ces structures et comment construire les règles locales qui les réalisent.

Etienne Palleau (LPCNO, Toulouse) : Assemblage et co-assemblage dirigée de nano-objets colloïdaux : Quid de la géométrie ? Dans cet exposé, j'introduirai la notion d'assemblage dirigé de nanoparticules colloïdales sur surfaces en la confrontant avec la notion d'auto-assemblage. De manière très générale, je démontrerai l'intérêt de l'assemblage localisé de nanoparticules sur substrats, que j'étendrai au (co)assemblage simultané ou séquentiel de plusieurs types de nanoparticules. Enfin je décrirai quelques applications et systèmes où la géométrie et la configuration du co-assemblage joue un rôle primordial.

Frank Smallenburg (LPS, Orsay) : Predicting self-assembly in simple models with multiple length scales. In many cases, the stability of complex structures in colloidal systems is enhanced by a competition between different length scales. One example of this is the self-assembly of nanoparticles coated with soft polymers, where the two length scales are given by the size of the nanoparticle core and the size of the polymer corona. As a starting point for the uncovering the effects of such "soft" short-ranged repulsive interactions, we explore a simple three-dimensional hard-core square shoulder (HCSS) model. We use Monte Carlo-based crystal structure finding techniques to map out the zero-temperature phase diagram for this model, finding a variety of crystalline structures. Additionally, using mean-field free energy calculations, we draw several finite-temperature different values. Our results show the stability of a rich variety of crystal phases, such as body-centered orthogonal (BCO) lattices not previously considered for the square shoulder model. Future efforts will focus on mixtures of particles with different sizes, and self-assembly on a substrate.

Participants

- Bernand-Mantel Anne, Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-objets (LPCNO)
- Chaudret Bruno, LPCNO
- Chinaud-Chaix Clémence, LPCNO
- Delpech Fabien, LPCNO
- Esnay Julien, Institut de Mathématiques de Toulouse
- Fernique Thomas, Laboratoire d'Informatique de Paris Nord
- Hallez Yannick, Laboratoire de Génie Chimique, Toulouse
- Herrera Alonso, Institut de Mathématiques de Toulouse
- Lacroix Lise-Marie, LPCNO
- Macé Nicolas, Laboratoire de Physique Théorique, Toulouse
- Meireles Martine, Laboratoire de Génie Chimique, Toulouse
- Moretti Chiara, Laboratoire de Chimie de l'ENS de Lyon
- Muratov Cyrill, New Jersey Institute of Technology
- Nayral Celine, LPCNO
- Palleau Etienne, LPCNO
- Pham Adeline, LPCNO
- Sablik Mathieu, Institut de Mathématiques de Toulouse
- Smallenburg Frank, Laboratoire de Physique des Solides, Orsay
- Soulantika Katerina, LPCNO
- Tricard Simon, LPCNO
- Viau Guillaume, LPCNO