## La particule colloïdale, modèle moléculaire pour étudier les états de la matière

P. BOTHOREL, Professeur

Une des grandes périodes qu'a connues la Chimie Physique fut la marche vers l'infiniment petit. Les notions d'atome, de molécule se sont vulgarisées mais elles s'affinent régulièrement grâce à l'invention de nouveaux instruments ou de nouvelles théories quantiques. Depuis quarante ans des chimistes physiciens font le chemin inverse. Ils tentent de comprendre comment ces briques élémentaires s'organisent pour donner naissance aux différents états de la matière, tels que nous les observons à notre échelle. Des théoriciens avaient proposé plus tôt des lois régissant les interactions énergétiques entre ions ou molécules dotées d'un moment dipolaire permanent. Mais il a fallu que London, s'appuyant sur la jeune mécanique quantique, introduise vers 1940 les forces de dispersion pour que soit complétée la panoplie de toutes les forces d'interaction qui peuvent exister entre atomes ou molécules et qui sont rassemblées sous le nom de forces de Van der Waals.

Mais il ne suffit pas de définir une loi d'interaction entre deux molécules pour en déduire l'organisation d'un échantillon de matière dans lequel elles se trouvent. Une telle étude théorique exige de calculer l'énergie d'interaction et l'entropie d'une population énorme de molécules, de l'ordre du nombre d'Avogadro. Les spécialistes de mécanique statistique ont tout d'abord utilisé des méthodes de calcul analytique mais qui ne conduisent à des équations d'état qu'en faisant des approximations importantes. L'arrivée d'ordinateurs puissants a permis une seconde approche qui consiste à simuler le système de particules en interaction et à calculer les grandeurs physiques à l'équilibre à l'aide des méthodes de Monte Carlo ou de la dynamique moléculaire. Les nombres de molécules traitées ainsi ne sont pas encore de l'ordre du nombre d'Avogadro mais les moyennes statistiques calculées sont si satisfaisantes que certains ne parlent plus de calcul théorique mais d'expérience sur ordinateur.

Cette déviation du langage s'explique aussi par le petit nombre d'expériences réelles permettant le contrôle des équations d'état théoriques. Celles-ci sont pratiquement toutes obtenues à l'aide d'un modèle de particules sphériques. Les gaz rares sont le seul exemple d'atomes ou de molécules répondant à ce critère. C'est pourquoi les diagrammes d'état des gaz rares ont été abondamment utilisés pour mettre au point ces

théories statistiques. Mais depuis une dizaine d'années d'autres systèmes chimiques se sont révélés parfaitement adaptés à ces études. Ce sont les milieux colloïdaux.

Par définition un colloïde est constitué de deux phases non miscibles dont l'une est dispersée dans l'autre sous formes de fines particules ; leur taille est comprise entre le micromètre et le nanomètre. Elles peuvent être parfaitement sphériques, comme par exemple dans les émulsions ou les particules de polymère en suspension, les latex. Il suffit aux théoriciens d'intégrer toutes les interactions énergétiques qui existent entre toutes les molécules qui se trouvent dans deux particules colloïdales voisines pour passer d'une population de molécules à une population de particules en interaction. Des équations d'état peuvent être calculées et le comportement thermodynamique de certains ont été prévus et retrouvés expérimentalement, prouvant ainsi la validité du modèle théorique. Il existe aussi des cristaux colloïdaux; quand on les éclaire à l'aide d'un faisceau laser, ils présentent un spectre de diffraction semblable à celui d'un cristal ionique traversé par un faisceau de rayons X. Ces colloïdes existent aussi dans les états de la matière plus exotiques, comme les cristaux liquides. De nouveaux types de forces d'interaction moléculaire à longue distance y ont été mises en évidence récemment.

Ces études sur l'organisation microscopique et le comportement thermodynamique des colloïdes ont aussi un grand intérêt pratique car leurs applications sont nombreuses et variées; on les rencontre aussi bien dans l'agro-alimentaire que des les formulations pharmaceutiques. Les chimistes physiciens en ont d'ailleurs fait un de leurs thèmes majeurs dans une étude prospective de leurs recherches dans le futur.