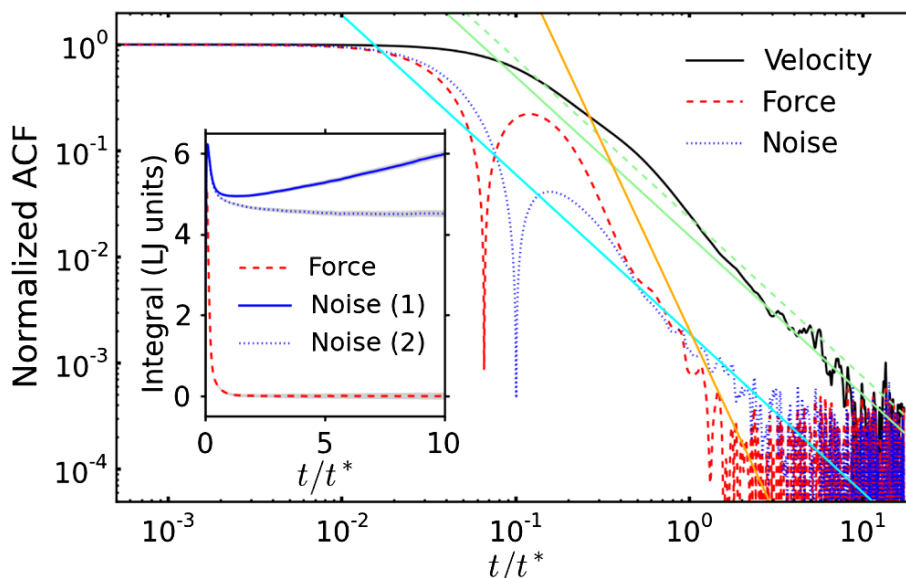




Un algorithme calculant la mémoire de la dynamique d'un fluide !

Qu'il s'agisse de petites ou de grosses molécules, de nanoparticules ou de colloïdes, tous les objets en suspension dans un fluide évoluent de façon couplée avec ce dernier. En général, on s'intéresse seulement à la dynamique de ces objets, et non à celle du fluide dans lequel il se trouve. On se concentre donc sur elle en ne décrivant l'effet du fluide que de façon implicite, à travers un terme de friction et une force aléatoire. Le modèle du mouvement Brownien, introduit par Einstein il y a plus d'un siècle, s'applique bien lorsque les objets en question se déplacent très lentement par rapport à leur environnement.

Cependant, l'effet du fluide n'est pas instantané: en se déplaçant, l'objet met le fluide en mouvement, et les écoulements ainsi induits influent en retour sur le mouvement de l'objet. Cet effet décalé dans le temps est habituellement décrit par un terme de « mémoire » dans l'équation du mouvement pour le soluté, et se traduit également par une décroissance lente (de façon algébrique) de certaines propriétés, telle que la fonction d'auto-corrélation des vitesses. La théorie hydrodynamique permet de décrire une partie de ces effets, à travers une force dite de Basset-Boussinesq, également vieille d'un siècle, qui fait intervenir un terme de « masse ajoutée », correspondant au fluide déplacé. Pendant des décennies, la théorie Brownienne, qui néglige toute mémoire, et celle hydrodynamique, qui ne s'applique que pour de gros objets par rapport aux molécules qui constituent le fluide, furent les seules étudiées, car il n'était pas possible de déterminer cette mémoire de façon systématique à partir de la dynamique microscopique du système.



C'est justement ce que permet un nouvel algorithme proposé par des chercheurs de l'Ecole Normale Supérieure (UMR 8640 PASTEUR – ENS/PSL/CNRS/UPMC) et de l'UPMC, afin de calculer explicitement cette mémoire à partir de simulations moléculaires. Grâce à ce nouvel outil, ils ont pu explorer le cas extrême d'un soluté identique aux molécules de solvant, pour lequel il est impossible de découpler la dynamique de l'un et de l'autre. Aux temps longs, la fonction mémoire décroît bien de façon algébrique (en $t^{-3/2}$), comme prévu par la théorie hydrodynamique. De plus, ils ont montré comment la loi de Basset-Boussinesq émerge naturellement à partir de la dynamique microscopique, généralisant au passage la notion de « masse ajoutée ». Cette dernière est négative dans le cas considéré, ce qui peut sembler paradoxal mais s'explique bien en examinant les diverses contributions aux temps courts et aux temps longs, et comment elles évoluent en fonction de la taille du soluté. En faisant le lien avec la dynamique microscopique, ces travaux fondamentaux permettent d'envisager des modèles plus pertinents pour la dynamique des petites molécules, des nanoparticules ou des biomolécules.

Source :

Molecular Hydrodynamics from Memory Kernels

Dominika Lesnicki and Rodolphe Vuilleumier

École Normale Supérieure, PSL Research University, Département de Chimie, Sorbonne Universités—UPMC Université Paris 06, CNRS UMR 8640 PASTEUR, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

Antoine Carof and Benjamin Rotenberg

Sorbonne Universités, UPMC Université Paris 06, CNRS, Laboratoire PHENIX, Case 51, 4 Place Jussieu, F-75005 Paris, France

PRL 116, 147804 (2016)

doi: 10.1103/PhysRevLett.116.147804

Contact Chercheur :

Rodolphe VUILLEUMIER, PR UPMC

UMR 8640 PASTEUR (ENS/PSL/CNRS/UPMC)

rodolphe.vuilleumier@ens.fr

Contact Communication Chimie :

Nicolas LEVY, Responsable Communication Chimie,

Département Chimie ENS (www.chimie.ens.fr)

nicolas.levy@ens.fr