



Institut de physique
Résultat scientifique

Un fluide virtuel pour simuler des liquides chargés confinés

Des chercheurs ont mis au point un modèle numérique qui permet de simuler et expliquer le comportement d'un liquide chargé électriquement, comme les électrolytes de batteries, lorsqu'il est confiné entre deux plaques métalliques.

Employés dans le stockage de l'énergie, l'électrochimie et la catalyse, les liquides comportant des ions ou des molécules polaires présentent des comportements inattendus au voisinage d'une surface solide, notamment lorsqu'ils sont confinés. Il existe par exemple un lien inexplicé entre la température de solidification du liquide chargé et la nature métallique ou isolante de la surface. La complexité des interactions électrostatiques mises en jeu en géométrie confinée constitue un sujet de recherche plus actif que jamais mais malgré cela, la modélisation des liquides ioniques aux interfaces reste partielle et certains des comportements observés échappent encore à la compréhension théorique. Alors que la majorité des approches supposent des surfaces parfaitement isolantes ou métalliques, la difficulté consiste à simuler la réaction d'une surface dans le cas de matériaux réels, dont la réponse électrostatique est la plupart du temps intermédiaire entre isolant et métal.

Pour y parvenir, les chercheurs du Laboratoire interdisciplinaire de physique (LiPhy, CNRS/UGA), du Laboratoire de physique de l'École Normale Supérieure (LPENS, CNRS/ENS Paris/Sorbonne Univ./Univ. de Paris), en collaboration avec des chercheurs de l'Université de Stuttgart, ont introduit une nouvelle méthode de simulation à l'échelle atomique qui décrit le confinement ou l'adsorption d'un fluide chargé à proximité d'une surface en prenant en compte les effets de relaxation électronique, autrement dit le mouvement des électrons vers des charges électriques s'approchant du matériau. L'approche consiste à mimer les effets du regroupement des électrons face aux charges du liquide - l'écrantage électrostatique - pour n'importe quelle situation entre un matériau isolant et un métal parfait. Pour cela, les interactions coulombiennes sont décrites via un fluide de Thomas–Fermi « virtuel » fait de particules chargées légères et rapides qui impose un écrantage électrostatique en se réorganisant en présence du liquide confiné (figure). En utilisant cette stratégie sur un liquide ionique nanoconfiné, les chercheurs ont mis en évidence une transition de mouillage selon que le matériau confinant soit isolant ou métallique.

Cette approche originale, transposable à des matériaux de formes et de natures très variées, fournit un cadre théorique afin de prédire le comportement inhabituel des liquides chargés, en particulier au contact de structures métalliques nanoporeuses, avec des applications directes dans le domaine de l'énergie, de l'environnement ou de la chimie.



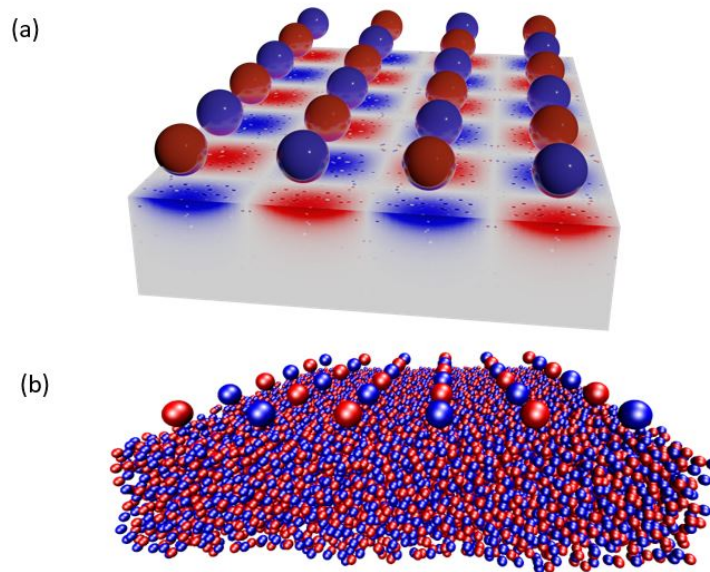


Figure : (a) Illustration des interactions électrostatiques dans un cristal ionique (boules rouges et bleues) à la surface d'un métal imparfait (en gris). Dans cette approche classique, les électrons se massent devant les charges de manière à minimiser l'interaction électrostatique à l'interface entre le cristal ionique et le métal. (b) Dans la nouvelle approche par simulation moléculaire, un fluide virtuel chargé est utilisé pour mimer l'écrantage induit par le métal. Crédit : Alexander Schlaich (LiPhy, CNRS/UGA)

Référence

Electronic screening using a virtual Thomas–Fermi fluid for predicting wetting and phase transitions of ionic liquids at metal surfaces. Alexander Schlaich, Dongliang Jin, Lydéric Bocquet, Benoit Coasne. *Nature Materials*, paru le 11 novembre 2021.
DOI: [10.1038/s41563-021-01121-0](https://doi.org/10.1038/s41563-021-01121-0)
Disponible sur la base d'archives ouvertes [HAL](https://hal.archives-ouvertes.fr/).

Contacts

Benoit Coasne | Directeur de recherche CNRS | LiPhy | benoit.coasne@univ-grenoble-alpes.fr
Communication INP-CNRS | inp.com@cnrs.fr