

Conclusions

Dans cette thèse, nous avons déterminé la structure et les propriétés thermodynamiques de systèmes colloïdaux chargés stables caractérisés par une symétrie sphérique. La méthode utilisée est basée sur le formalisme des théories des équations intégrales qui fait appel à l'équation d'Ornstein-Zernike. Ce formalisme nécessite une connaissance précédente du potentiel d'interaction pair. Les forces exercées entre colloïdes sont approximées par la somme de forces paires qui dérivent d'un gradient d'un potentiel Coulombien exponentiellement écranté écrit en termes de paramètres renormalisés (Z_{eff}, κ_{eff}) . Nous avons calculé ces paramètres effectifs en utilisant trois approximations de l'équation de Poisson Boltzmann (PB) et qui sont le modèle des cellules supplémenté par la recette proposé par Alexander, le modèle de Jellium renormalisé proposé par Trizac et Levin et sa version amélioré connue par le modèle de Jellium modifié.

A cause de la nature approximative des Théories des Equations Intégrales l'exactitude des résultats de ce formalisme dépend en générale d'une part de la nature (portée) du potentiel reliées aux paramètres effectifs et d'autre part du degré de la consistance thermodynamique d'une théorie d'équation intégrale. L'analyse de la charge renormalisé Z_{eff} , qui contrôle le paramètre d'écrantage renormalisé κ_{eff} et le potentiel pair effectif, issue des trois modèles a abouti aux conclusions suivantes :

1. Les modèles de cellules et de Jellium renormalisé sont respectivement consistants pour les hautes et faibles densités. Ces derniers restent inconsistants pour les densités moyennes.
2. Le modèle de Jellium modifié considère les corrélations spatiales entre macroions et donne par suite des paramètres effectifs consistants pour les densités moyennes.

3. Avec un bon choix de la zone trou de corrélation, le modèle de Jellium modifié est capable de reproduire les résultats des deux autres modèles.
4. Pour $\kappa_{res}a = 0$, la compressibilité dérivée de la pression du viriel du OCM, P_{OCM} n'est pas compatible à la structure du système OCM. Le système réduit OCM décrit par le potentiel Yukawa pair effectif reproduit correctement la structure du système original tenant compte la contribution de la pression des microions mais reste incapable de définir la pression totale de la suspension.
5. Pour le cas sans sel, la compressibilité osmotique est reliée à l'inverse de la charge effective, ceci nous offre un moyen pour estimer la compressibilité χ_{pB} de la suspension qui est essentiellement du aux contrions.
6. Pour $\kappa_{res}a \neq 0$, et pour les faibles fractions de remplissage ($\eta < \eta^*$), il existe une consistance entre la compressibilité du système OCM, χ_{OCM} et la structure du système original. Par contre χ_{pB} et la structure ne sont pas consistants. dans ce cas, la structure et les propriétés thermodynamiques, en particulier la pression, peuvent être calculées en appliquant le critère standard de la condition de la consistance thermodynamique au système OCM réduit.
7. Pour $\kappa_{res}a \neq 0$, et pour les fortes fractions de remplissage ($\eta > \eta^*$), nous sommes face à un régime d'écrantage dominé par les contrions, ce cas rejoint le cas sans sel pour lequel la condition de la consistance thermodynamique des TEI est fixée par χ_{pB} et non pas par la compressibilité de viriel du système réduit χ_{OCM} .

Dans une deuxième partie, nous avons injecté le potentiel pair effectif dans l'équation d'Ornstein-Zernike effective couplée à des relations de fermetures adéquates. Nous avons utilisé la relation HNC et la relation auto consistante SC2VM appliquée pour la première fois dans ce travail pour le traitement de systèmes colloïdaux stables chargés. L'implémentation numérique de la condition de la consistance thermodynamique est réalisée en fonction du régime d'écrantage dominant la système. Nous avons trouvé que :

1. Pour le cas sans sel, la relation auto consistante SC2VM reproduit la structure de la suspension colloïdale similaire à la structure du OCM en exigeant à la compressibilité provenant du formalisme des Théories des Equations Intégrales de vérifier $\chi_{pB} = 1/Z_{eff}$ qui provient de la contribution des microions puisque elle est compatible à la structure du OCM.

2. Pour le cas avec sel et comme la compressibilité χ_{OCM} est considéré être une bonne approximation à la compressibilité osmotique totale dans le cas où le potentiel et une fonction indépendante de la densité (c-à-d pour des fractions de remplissage suffisamment faible et/ou des concentrations du sel suffisamment élevées), la relation SC2VM reproduit la structure en appliquant la forme standard de la condition de la consistance thermodynamique en exigeant à l'amplitude de la compressibilité du théorème de fluctuation de vérifier la même valeur que la compressibilité du théorème de viriel du système conjuguais OCM.
3. Pour le cas avec sel et si $\eta > \eta^*$, l'écrantage est dominé par les contrions, par conséquence nous retrouvons les conclusions du cas sans sel.

La Comparaison des résultats de structure issues des relations SC2VM et HNC avec les données de Monte Carlo a montré la supériorité de la SC2VM sur la HNC. Cet accord confirme la capacité de cette théorie d'équations intégrales de reproduire la structure du potentiel effectif Yukawa. Il est important de noter que le traitement développé dans ce travail est limité pour des valeurs de paramètre de couplage faibles pour lesquelles les interactions colloïdales peuvent être approximées par la théorie DLVO.

L'analyse de l'effet du sel sur la structure a abouti aux résultats suivants :

Dans le cas de système contenant un électrolyte symétrique monovalent 1 :1, la fonction de distribution de paires suit des tendances générales. Un accroissement de la concentration du sel abouti à un large écrantage et une perte de la structure colloïdale. Dans le régime d'écrantage dominé par les ions du sel ajouté, les fonctions de corrélation deviennent quasi-indépendantes de la densité des colloïdes. La charge effective des colloïdes ainsi que le potentiel effectif présentent une lente variation en fonction de la fraction de remplissage des colloïdes, ceci explique la variation lente des fonctions de structure. Pour des concentrations du sel très élevées, la structure des colloïdes devient sans importance car l'écrantage important exige à la structure de se comporter comme un gaz dans le sens où un colloïde chargé ne ressent pas l'effet de charge des proches voisins. L'équation intégrale SC2VM est

un outil théorique bien adapté pour la détermination de la structure de systèmes colloïdaux chargés à un seul composant et aux mélanges binaires.

Comme perspectives de nos travaux, il serait intéressant d'étudier l'effet de la partie attractive de Van der Waals du potentiel effectif sur la structure, d'appliquer nos connaissances pour l'étude des propriétés thermodynamiques et des transitions de phase de certains systèmes biologiques protéiques (enzyme urate oxydase) et d'élargir nos applications aux mélanges binaires en particulier le mélange colloïde polymère.