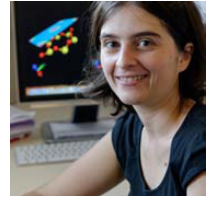


Séminaire du 14 Mai 2025 à 15 h, Salle de Conférence de l'IEM

*Understanding Wetting Differences in Clays:
A Molecular Simulation Study*

Pr. Virginie Marry
Laboratoire PHENIX
Sorbonne Université, Paris



Abstract: Clays are multi-scale, porous materials that exhibit very diverse behaviors in the presence of water: some clays, classified as hydrophilic, would exhibit a swelling, while others, rather hydrophobic, will swell at all, or only moderately. This diversity arises, among other things, from the crystalline structure of the clay, particularly its (negative) charge and its location in the cell, the nature of the counter-ions present between the clay layers, as well as the presence or absence of fluorine in the layer.

The behavior of these materials is quite well understood and known when they are saturated with water, but many questions remain in the case of unsaturated materials, that is, those with two fluid phases: aqueous solution and gas. One of the questions concerns the location of the liquid phase in the pores, which primarily depends on the wettability of the surfaces.

At the scale of the clay layer, we therefore seek to understand the origin of the differences in wettability of clays, using molecular simulations. When possible, the results of the simulations are compared to the experiments. It is observed, among other things, that the choice of force field used to describe the interactions between different species impacts the results, and that simulations, while undeniably helping to analyze experiments by detailing the physicochemical phenomena involved, must also be interpreted with a critical eye.

Biography: Virginie Marry is a former student from the École Normale Supérieure de Lyon. She holds a PhD in theoretical Chemistry and is recognized expert in the modeling of porous media, particularly clays, from molecular to mesoscopic scales. She has been a Professor at Sorbonne University, Paris, since 2011. She conducts her research in the Physical-Chemistry of Electrolytes and Interfacial Nano-systems laboratory (PHENIX). She is also deputy director of Sorbonne Université's Master of Chemistry program.

Résumé : Les argiles sont des matériaux lamellaires avec une porosité multi-échelle qui en présence d'eau, montrent des comportements très divers : certaines argiles qualifiées d'hydrophiles, gonflent, d'autres, plutôt hydrophobes, ne gonflent pas, ou modérément. Cette diversité vient entre autres de la structure cristalline de l'argile, en particulier sa charge (négative) et sa localisation dans la maille, la nature des contre-ions présents entre les feuillets, mais aussi la présence ou non de fluor dans le feuillet.

Le comportement de ces matériaux est assez bien compris et connu lorsqu'ils sont saturés en eau, mais de nombreuses questions demeurent dans le cas des matériaux insaturés, c'est à dire présentant deux phases fluides : solution aqueuse et gaz. L'une des questions concerne la localisation de la phase liquide dans les pores, qui dépend en premier lieu du mouillage des surfaces.

A l'échelle du feuillet, on cherche donc à comprendre l'origine des différences de mouillage des argiles, en utilisant les simulations moléculaires. Lorsque c'est possible, les résultats des modélisations sont comparés aux expériences. On constate entre autres que le choix du champ de force utilisé pour décrire les interactions entre les différentes espèces a un impact sur les résultats, et que les simulations, si elles aident indéniablement à analyser les expériences en détaillant les phénomènes physicochimiques mis en jeu, doivent aussi être interprétées avec un œil critique.

Biographie : Ancienne élève de l'École Normale Supérieure de Lyon, Agrégée et Docteur en chimie, Virginie Marry est une spécialiste de la modélisation des milieux poreux, les argiles en particulier, de l'échelle moléculaire à l'échelle mésoscopique. Elle est Professeur à Sorbonne Université, Paris, depuis 2011. Elle effectue sa recherche au sein du laboratoire Physicochimie des Électrolytes et Nano-systèmes Interfaciaux (PHENIX). Elle est par ailleurs directrice adjointe du master de Chimie de Sorbonne Université.