

AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

# Madame MEYER Nadège

École Doctorale SESAMES - Discipline Physique

présentera publiquement ses travaux en vue de l'obtention du grade de docteur  
de l'Université de Lorraine

**le mercredi 20 décembre 2017 à 13 h 45**

dans l'Amphithéâtre de l'ISEA - METZ Technopôle

***Simulation numérique de la viscosité de liquides :  
effets des paramètres d'interaction, de la température et de la pression sous  
conditions ambiantes et extrêmes***

Ce travail est consacré à l'étude de la viscosité de cisaillement par simulation numérique de dynamique moléculaire classique à l'équilibre avec une attention particulière à l'influence des hautes pressions sur cette propriété. La viscosité est obtenue à partir des trajectoires générées par ces simulations et en appliquant la formule de Green-Kubo. Un large panel de systèmes a été étudié, allant de fluides atomiques purs à un liquide moléculaire, en passant par des mélanges binaires.

En premier lieu, nous nous sommes focalisés sur les métaux alcalins. La conclusion majeure de cette étude est que la viscosité des alcalins a un comportement universel sur une large plage du diagramme de phases. Par ailleurs, sur cet intervalle, la relation universelle que nous avons proposée permet de prédire la valeur de la viscosité de n'importe quel élément avec une incertitude inférieure à 10%. La validité de la relation de Stokes-Einstein, reliant le coefficient d'autodiffusion à la viscosité, a également été vérifiée.

Une étude systématique a ensuite été menée sur des mélanges modèles de type Lennard-Jones afin de tester l'influence des paramètres d'interaction sur le comportement de la viscosité. Une estimation théorique basée sur le modèle de fluide effectif pur a été proposée. D'autre part, la relation de Stokes-Einstein a été étendue aux mélanges avec succès. Ces observations ont été confrontées aux cas de deux alliages réels : K-Cs et Li-Bi.

Pour finir, une étude préliminaire a été entreprise sur l'eau en modélisant les interactions par deux potentiels : SPC/E, non polarisable, et BK3, polarisable. L'effet de l'introduction de la polarisabilité sur le calcul de la viscosité a été étudié. La validité des relations de Stokes-Einstein et de Stokes-Einstein-Debye, faisant intervenir la rotation de la molécule, a été évaluée à très haute pression.

## Composition du Jury :

|                      |   |                        |
|----------------------|---|------------------------|
| M. Noël JAKSE        | Institut polytechnique de Grenoble                | Rapporteur             |
| M. Jean-Yves RATY    | Université de Liège                               | Rapporteur             |
| Mme Livia BOVE       | Université Pierre et Marie Curie (IMPMC) de Paris | Examinatrice           |
| M. Mark JOHNSON      | Institut Laue-Langevin de Grenoble                | Examinateur            |
| M. Claude MILLOT     | Université de Lorraine                            | Examinateur            |
| M. Jean-François WAX | Université de Lorraine                            | Directeur de thèse     |
| Mme Hong XU          | Université de Lorraine                            | Co-directrice de thèse |