

# MATÉRIAUX À CHANGEMENT DE PHASE À LA CHALEUR ET/OU AU STRESS

GIORGIA FUGALLO, MIGUEL MOYERS-GONZALEZ, TEODOR BURGHELEA

Les matériaux pâteux sont pertinents pour un certain nombre d'applications pratiques liées à plusieurs secteurs industriels modernes, notamment (mais sans s'y limiter) l'industrie alimentaire, le traitement des polymères, l'industrie pharmaceutique, les cosmétiques, le pétrole, etc. Dans l'absence de contrainte externe (température et/ou stress), ils se comportent comme des solides (ils ne s'écoulent pas bien qu'ils puissent supporter une certaine contrainte externe finie), mais si la contrainte externe dépasse un certain seuil, leur intégrité micro-structurale est perdue et ils présentent un comportement liquide (ils s'écoulent). Selon leur structure moléculaire, cette transition solide-liquide peut être déclenchée par deux types distincts de contrainte externe : le chauffage ou le stress. Dans le cas spécifique des matériaux à changement de phase (PCM), ils subissent une transition solide-liquide lorsqu'ils sont chauffés [1], tandis que les gels physiques cèdent au stress lorsqu'ils sont progressivement cisailés [2]. Bien qu'il soit plutôt clair que la transition solide-liquide soit associée à des changements micro-structuraux déclenchés soit par la température soit par le stress appliqué, le scénario physique exact et l'image microscopique du processus de cession restent obscurs. En ce qui concerne la fluidization sous la contrainte mécanique, la grande majorité des études précédentes propose des modèles phénoménologiques macroscopiques qui ne font que "imiter" un changement d'un comportement rhéologique semblable à un solide (souvent un solide de Hooke) à un comportement de fluide à écoulement visqueux, Ref. [3, 4, 5, 2]. Bien que clairement utiles d'un point de vue technique, de tels modèles sont physiquement insatisfaisants. Il a été récemment suggéré qu'un cadre physiquement correcte pour comprendre la transition solide-liquide dans les matériaux pâteux soumis à un stress externe est celui des transitions de phase et des phénomènes critiques [6, 7, 8]. Le principal objectif du projet proposé est d'étendre les études initiales rapportées dans les références [6, 7, 8] en utilisant des simulations de dynamique moléculaire de pointe [9]. Cette approche couvrira à la fois le cas de la fluidization sous contrainte mécanique et le cas de la fluidization induite par la température. Plusieurs aspects clés recevront une attention particulière tout au long du projet. Premièrement, comment la dynamique de la transition solide-liquide est-elle affectée par le niveau d'interaction entre les constituants microscopiques ? Le scénario de fluidization d'un gel neutre (tel que le gel d'agar) principalement formé par des liaisons hydrogène est-il similaire à celui d'un gel colloïdal fortement attractif (tel que la bentonite, la laponite) ? Ensuite, lorsque le matériau est progressivement soumis aux contraintes mécaniques (ou, dans le jargon de l'ingénierie, "chargé"), comment la nature physique de la transition solide-liquide (premier, second ordre - nous

remettons donc principalement en question sa réversibilité) est-elle liée au degré de stabilité de la contrainte ? Dans quelle mesure le cas d'une contrainte quasi-stationnaire est-il comparable au cas d'une contrainte très rapide ? Des questions similaires seront abordées pour le cas de la cession à la chaleur (en présence ou en l'absence d'un champ de stress mécanique).

Ce projet de thèse sera mené en deux étapes. Pendant les 18 premiers mois, le candidat travaillera au LTeN Nantes sous la supervision du Dr. Giorgia Fugallo et du Dr. Teo Burghilea sur la mise en œuvre de simulations de dynamique moléculaire de pointe pour la cession d'un matériau pâteux. Sur la base d'une analyse statistique de ces résultats, de nouvelles relations constitutives pour les matériaux à contrainte de cession seront dérivées. La seconde moitié de la thèse sera déroulée à l'École de Mathématiques et de Statistiques de l'Université de Canterbury, en Nouvelle-Zélande, sous la supervision du professeur associé Miguel Moyers-Gonzalez. Dans cette partie du projet, les nouvelles relations constitutives seront mises à l'épreuve dans des simulations numériques pour des écoulements industriels pertinents.

#### REFERENCES

- [1] Rawad Himo, Cathy Castelain, and Teodor Burghilea. Chaos in a melting pot. *Journal of Fluid Mechanics*, 918:A47, 2021.
- [2] A. M. V. Putz and T. I. Burghilea. The solid-fluid transition in a yield stress shear thinning physical gel. *Rheol. Acta*, 48:673–689, 2009.
- [3] Paulo R. de Souza Mendes. Modeling the thixotropic behavior of structured fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 164(1-3):66 – 75, 2009.
- [4] Christopher J. Dimitriou and Gareth H. McKinley. A comprehensive constitutive law for waxy crude oil: a thixotropic yield stress fluid. *Soft Matter*, 10:6619–6644, 2014.
- [5] Guillemette Picard, Armand Ajdari, Lydéric Bocquet, and Francois Lequeux. Simple model for heterogeneous flows of yield stress fluids. *Phys. Rev. E*, 66:051501, Nov 2002.
- [6] R. Sainudiin, M. Moyers-Gonzalez, and T. Burghilea. A microscopic gibbs field model for the macroscopic yielding behaviour of a viscoplastic fluid. *Soft Matter*, 11 (27):5531–5545, 2015.
- [7] R. Sainudiin, M. Moyers-Gonzalez, and T. Burghilea. A microscopic gibbs field model for the macroscopic behavior of a viscoplastic fluid. *UCDMS Research Report 2014/1*, pages 1–17, 2014.
- [8] Teodor Burghilea, Miguel Moyers-Gonzalez, and Raazesh Sainudiin. A nonlinear dynamical system approach for the yielding behaviour of a viscoplastic material. *Soft Matter*, 13:2024–2039, 2017.
- [9] Giorgia Fugallo and Luciano Colombo. Calculating lattice thermal conductivity: a synopsis. *Physica Scripta*, 93(4):043002, feb 2018.