LOLITA HILAIRE

soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Modélisation de la coalescence : connecter les échelles (de l'approche déterministe à l'approche stochastique)

Soutenance prévue le **jeudi 17 février 2022** à **9h30**

dans l'Auditorium de l'ICSM

Afin de respecter les procédures pour l'organisation de rassemblements publics dans l'auditorium de l'ICSM, les personnes qui souhaitent assister à la thèse peuvent s'inscrire auparavant en envoyant un e-mail à jean-françois.dufreche@icsm.fr. Le pass sanitaire et le port du masque chirurgical sont obligatoires.

La coalescence joue un rôle fondamental dans de nombreux procédés industriels tels que l'extraction liquide-liquide. Il s'agit d'un phénomène multi-échelle complexe qui repose sur l'interaction entre des gouttes déformables, parfois soumises à un écoulement. Toutefois, ce processus reste à ce jour mal compris, en particulier à l'échelle nanométrique. Dans cette thèse, la coalescence est étudiée à l'échelle moléculaire par le biais de simulations de dynamique moléculaire, dans le but de faire le lien entre les différentes échelles.

Le premier axe porte sur l'interaction entre une pointe AFM et un film liquide déposé sur un substrat. Il s'agit d'un cas simple en comparaison de la coalescence liquide-liquide, car une des gouttes (la pointe AFM) est rigide, et le milieu intermédiaire est gazeux. Les résultats montrent que les fluctuations de surface provoquent une instabilité de la déformation de l'interface et sont à l'origine du phénomène de saut par lequel le liquide entre en contact avec la pointe. Nos résultats, sur un système observable expérimentalement, ont confirmé la validité et les limites des modèles continus. Le second axe porte sur l'étude du drainage du film interfacial. Une approche originale est proposée, dans laquelle des couches planes d'eau et d'heptane sont construites et empilées en conditions périodiques. Les deux liquides sont soumis à des forces d'écoulement de sens opposés. Les profils de vitesse obtenus dans les simulations de dynamique moléculaire permettent de rendre compte de la viscosité effective des films confinés entre deux phases liquides et d'étudier le glissement aux interfaces. Nos résultats montrent qu'il y a un glissement important à l'interface liquide-liquide, que ce soit de l'eau sur l'heptane ou de l'heptane sur l'eau. Le rapport des longueurs de glissement est égal au rapport des viscosités des deux liquides. Ce glissement présent aux interfaces liquide-liquide joue un rôle important lors de la coalescence, puisqu'il accélère le drainage du film. Enfin, nous étudions les effets stochastiques contrôlant la formation du pont liquide à travers une série de simulations de coalescence de gouttes d'heptane dans l'eau. La boîte de simulation est la même dans chaque cas, mais une perturbation aléatoire est introduite par l'instabilité de Lyapunov, permettant d'imposer des états initiaux très proches mais des trajectoires divergentes. À partir de cette série de simulations nous avons établi que la probabilité de coalescence en fonction du temps suivait une loi de Poisson.

En résumé, nous avons proposé une description originale de la coalescence à l'échelle moléculaire à l'aide d'un modèle probabiliste décrivant le temps de coalescence et d'un modèle hydrodynamique décrivant le drainage à l'échelle moléculaire. Notre étude ouvre de nombreuses perspectives pour la simulation de la coalescence dans les approches continues utilisées en mécanique des fluides et en génie des procédés. Elle est également applicable à d'autres problèmes physiques dont la cinétique est gouvernée par l'échelle moléculaire.

Mots-clés : Coalescence de gouttes ; Dynamique Moléculaire ; Physico-chimie des interfaces ; Ecoulement liquide-liquide ; Modélisation