



Proposition de thèse - Physique de la matière condensée

## Etude par simulation moléculaire de la cavitation en situation de confinement nanométrique

**Equipe d'accueil :** ICMN – Systèmes Nanostructurés et Confinés, Orléans

**Responsable:** Joël Puibasset, Directeur de Recherche CNRS ; Contact : puibasset@cns-orleans.fr

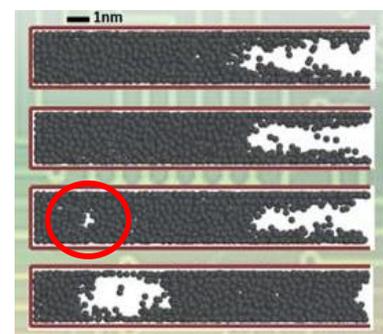
**Contexte :** L'équipe « [Systèmes Nanostructurés et Confinés](#) » de l'[ICMN](#) (Interfaces, Confinement, Matériaux et Nanostructures) s'intéresse depuis de nombreuses années à l'effet du confinement sur les propriétés dynamiques et thermodynamiques de liquides piégés au sein de milieux poreux. Notre approche, essentiellement numérique, vise la compréhension de phénomènes fondamentaux liés aux interactions du fluide avec le solide poreux, avec un focus particulier sur les pores nanométriques où les effets sont les plus impressionnants. Le sujet proposé s'inscrit dans le cadre d'une collaboration avec le [LPENS](#) (Paris) et l'[Institut Néel](#) (Grenoble) et du contrat ANR-17-CE30-0002 CavConf.

**Résumé :** Ce sujet de thèse s'inscrit dans le domaine des transitions de phase en matière condensée, et plus particulièrement dans le contexte des nanosystèmes et des nanomatériaux. Le phénomène étudié est le mécanisme par lequel un liquide se fracture sous l'effet d'une tension (cavitation). On le rencontre en autres en ingénierie (nettoyage à ultrasons, érosion des hélices de bateaux...) ou en sciences naturelles (embolie gazeuse chez les arbres, crevette pistolet...). La théorie classique de la nucléation est en accord qualitatif avec les données expérimentales, mais un certain nombre de points restent à élucider : Comment rendre l'accord quantitatif ? Et surtout, que se passe-t-il pour un liquide confiné dans des pores nanométriques ? En effet, des travaux expérimentaux récents montrent un effet significatif du confinement qui reste incompris sur le plan théorique. Ce travail numérique permettra, par des approches de simulations moléculaires, de mettre en évidence et de quantifier l'effet du confinement sur le phénomène de cavitation dans les milieux nanoporeux.

**Originalité :** Du point de vue des transitions de phases, la cavitation est la nucléation de la phase vapeur sous forme de bulles au sein d'une phase liquide métastable, c'est-à-dire soit au-dessous de sa pression de vapeur saturante, soit au-dessus de sa température d'ébullition. L'étude expérimentale du phénomène à l'échelle macroscopique est rendue difficile du fait de la présence inévitable de parois pour contenir de liquide qui constituent autant de points de faiblesse où peut se produire la nucléation de manière prépondérante. Toutefois, le confinement dans des systèmes nanométriques de type **bouteille d'encre** offrent une opportunité unique d'étudier le phénomène. Nous travaillons en collaboration avec les deux équipes qui ont été pionnières dans la mise au point de ces systèmes.

**Objectifs :** La théorie classique de la nucléation décrit le taux de nucléation comme une loi d'Arrhenius  $J = J_0 \exp(-E/kT)$ , avec un préfacteur cinétique  $J_0$  et une barrière d'énergie  $E$ . Cette loi est en accord qualitatif avec les données expérimentales, mais il reste à comprendre l'origine du désaccord quantitatif et l'effet du confinement nanométrique qui peut avoir une influence à la fois sur le préfacteur cinétique et sur la barrière d'énergie.

Nous proposons d'étudier ces questions par le biais de la simulation moléculaire avec pour objectif d'établir les bases théoriques de la dépendance de  $J_0$  et  $E$  avec la taille et la morphologie des pores, ce qui permettra aux expérimentateurs avec qui nous collaborons de démêler les effets thermodynamiques et cinétiques à travers leurs mesures très précises du taux de nucléation.



Ce travail permettra de mettre en évidence et de quantifier l'effet du confinement sur le phénomène de cavitation.

**Compétences requises :** Une solide formation en physique de la matière condensée et physique statistique est requise ; une bonne maîtrise des outils informatiques et de Linux serait appréciée.

**Durée :** 3 ans, à compter du **1<sup>er</sup> octobre 2023**.

**Pour candidater :** envoyer un CV, une lettre de motivation, les relevés de notes de L3, M1 et M2, et si possible une lettre de recommandation (stage master par exemple) à : [joel.puibasset@cns-orleans.fr](mailto:joel.puibasset@cns-orleans.fr) avant le 23 avril 2023.