

Scaling thermodynamique pour la viscosité de cisaillement de fluides de Lennard-Jones: Application aux Alcanes

Stephanie DELAGE SANTACREU

Laboratoire de Mathématiques et de leurs Applications de Pau,
IPRA, UMR5142, e2s UPPA

On étudie le comportement de fluides de type Lennard-Jones sous certaines conditions thermodynamiques et mécaniques afin de mieux appréhender des propriétés de transport de fluides réels. On s'intéresse plus particulièrement à la mise en évidence d'un scaling thermodynamique entre la viscosité de cisaillement et le terme $\frac{\rho^\gamma}{T}$, où ρ est la densité, T la température et γ un paramètre dépendant des caractéristiques physiques du fluide considéré. De nombreuses simulations de dynamique moléculaire hors équilibre (*NEMD*) ont été effectuées grâce au code *Transpore* développé au *LFCR* et aux moyens de calculs mis à disposition par l'UPPA. Les résultats de simulations sont ensuite confrontés aux résultats expérimentaux effectués par le *NIST* et le *LFCR* sur des alcanes.