

Viscosité de cisaillement pour des fluides de type Chaînes de Lennard-Jones en milieu peu dense

S. Delage Santacreu,¹ G. Galliero,² M. Odunlami,³ and C. Boned²

¹*Laboratoire de Mathématiques Appliquées (UMR-5142 avec CNRS), Université de Pau et des Pays de l'Adour, BP 1155, F-64013 PAU Cedex.*

²*Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs (UMR-5150 avec CNRS et TOTAL), Université de Pau et des Pays de l'Adour, BP 1155, F-64013 PAU Cedex.*

³*Equipe de chimie Physique (IPREM-CNRS UMR 5254 – ECP), Université de Pau et des Pays de l'Adour, Hélioparc Pau Pyrénées - 2 av. du Président Angot - 64053 – Pau Cedex 09.*

Ce travail concerne l'amélioration de la modélisation de la viscosité de cisaillement de chaînes de Lennard-Jones en milieu peu dense, via des simulations de dynamique moléculaire hors équilibre. On s'intéresse plus particulièrement à des chaînes courtes (au plus des hexadecamère) et de rigidité variable.

La réalisation de simulations sur un nombre représentatif de molécules et en faisant varier certains paramètres physiques, telles la température, la longueur de chaîne et leur rigidité, nous ont permis de mettre en évidence une relation universelle entre la viscosité de cisaillement et le rayon de giration de ces molécules modèles. Une corrélation entre la viscosité de cisaillement et la longueur de chaîne a aussi été établie pour deux cas limites (molécules totalement flexibles et complètement rigides).