

Sujet de thèse  
2023

## Simulation moléculaire du vieillissement et de la thixotropie des suspensions colloïdales

**Laboratoire d'accueil :** Laboratoire Navier (UMR ENPC - UGE et CNRS),  
6 et 8 avenue Blaise- Pascal - Champs-sur-Marne

**Superviseurs :** F. Puosi ([francesco.puosi@univ-eiffel.fr](mailto:francesco.puosi@univ-eiffel.fr))  
A. Lemaitre ([anael.lemaitre@univ-eiffel.fr](mailto:anael.lemaitre@univ-eiffel.fr))

**Mots-clés :** Physique de la matière, modélisation, simulations, vieillissement, élasto-plasticité

**Contexte :** De nombreuses suspensions du génie civil et environnement sont thixotropes, c'est-à-dire que leurs propriétés mécaniques (seuil au repos, viscosité à l'écoulement) dépendent du temps. Ce phénomène joue un rôle majeur dans la mise en œuvre des ciments modernes et tout particulièrement dans l'impression 3D qui dépend d'un contrôle très précis de la rhéologie et de la reprise de contrainte une fois qu'une pâte de ciment a été déposée. Des travaux récents réalisés au Laboratoire Navier [1,2] ont montré que la thixotropie résulte de la formation de contacts solide-solide entre particules colloïdales et que l'évolution des propriétés macroscopiques au repos est associée au vieillissement des contacts. Ces résultats constituent un changement radical de point de vue sur la thixotropie pour les matériaux du génie civil et de l'environnement qui ouvre la voie à des développements dans nombreux domaines de recherche. Mais progresser sur ces thématiques nécessite de comprendre le lien entre contact et propriétés macroscopiques. De plus, les mesures expérimentales ne peuvent pas accéder à la microstructure des suspensions, ni au mécanisme d'écoulement. Il est donc indispensable de mettre en œuvre des travaux théoriques et numériques sur ces questions.

[1] Bonacci, F., Chateau, X., Furst, E. M., Fusier, J., Goyon, J. & Lemaître, A. Contact and macroscopic ageing in colloidal suspensions. *Nature Materials* 19, 775 (2020).

[2] Bonacci, F., Chateau, X., Furst, E. M., Goyon, J. & Lemaître, A. Yield stress aging in adhesive colloidal suspensions. *Physical Review Letters* 28, 018003 (2022).

**Objectives :** Dans cette thèse nous proposons de réaliser des simulations de Dynamique Moléculaire pour clarifier les mécanismes à l'échelle des particules qui contrôlent le comportement rhéologique des suspensions de colloïdes de tailles de l'ordre du micron. À cette fin, des modèles de particules discrètes seront construits, intégrant les interactions colloïdales et les forces de contact solide-solide dépendant du temps, comme le frottement, l'adhésion et les forces de flexion. La simulation de la phase de gélification d'une suspension au repos, au cours de laquelle des contacts entre les particules se forment, fournira des microstructures aux caractéristiques réalistes. Ensuite, les effets du vieillissement des contacts seront introduits dans le but de comprendre le lien entre le module

de flexion des contacts et le module de cisaillement macroscopique, tous les deux dépendants du temps. Le comportement mécanique et rhéologique de tels systèmes après un certain degré de vieillissement sera étudié, sous différentes conditions de chargement, dans les régimes élastiques et plastiques. Pour cela, on peut s'appuyer sur des caractérisations expérimentales précises du seuil de roulement des contacts. En particulier, nous déterminerons comment la rupture du contact roulant entraîne une perte de rigidité macroscopique et détermine la contrainte seuil.

**Details pratiques et candidatures :** Le contrat doctoral est prévu pour une durée de trois ans à compter de l'automne 2023, avec une rémunération brute d'environ 1800€/mois (hors remboursement transport).

Les candidats doivent être titulaires d'un master 2 en physique, science des matériaux ou dans des domaines connexes au moment du recrutement, de préférence avec une formation en matière molle, simulations numériques et physique statistique. Des connaissances en programmation sont indispensables. Une expérience dans l'utilisation des outils de simulation (LAMMPS,...) sera appréciée. La maîtrise de l'anglais (écrit et oral) est requise.

Les candidats intéressés doivent envoyer leur CV et une lettre de motivation exprimant leur intérêt pour le projet à F. Puosi ([francesco.puosi@univ-eiffel](mailto:francesco.puosi@univ-eiffel)) et A. Lemaitre ([anael.lemaitre@univ-eiffel.fr](mailto:anael.lemaitre@univ-eiffel.fr))  
Les demandes informelles sont encouragées.

**Source de financement :** Agence Nationale de la Recherche (ANR).