



Université Claude Bernard



# DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **14 octobre 2021**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Madame HERRERO GUILLEN Cecilia**

Titre de la thèse : « *Hydrodynamique et conversion d'énergie dans les systèmes nanofluidiques : une perspective moléculaire* »

## Résumé



La nanofluidique, l'étude du transport des fluides à l'échelle nanométrique, apparaît comme un domaine prometteur pour relever certains grands défis auxquels notre société est confrontée, comme le développement d'énergies alternatives durables. Les dispositifs nanofluidiques pourraient contribuer à la conversion d'énergie, par exemple en utilisant des membranes à porosité nanométrique, qui permettent d'obtenir de l'électricité à partir des différentes concentrations en sel entre l'eau douce et l'eau de mer dans les estuaires, ou de récolter la chaleur perdue, par exemple en générant des écoulements osmotiques ou des courants électriques à partir de gradients de température par thermo-osmose ou thermoélectricité. À mesure que la taille diminue, les surfaces jouent un rôle de plus en plus important, et il est essentiel, à l'échelle nanométrique, de comprendre les mécanismes moléculaires qui se produisent aux interfaces liquide-solide. Une propriété importante est l'échec de la condition hydrodynamique de non glissement. Au lieu de cela, un saut de vitesse se produit à l'interface, définissant la vitesse de glissement, qui est liée au coefficient de frottement liquide-solide. Dans ce manuscrit, nous partons de la condition limite de glissement, et nous caractérisons la position où la limite s'applique d'un point de vue moléculaire, en utilisant des simulations classiques de dynamique moléculaire. Ensuite, nous étudions la dépendance en température du coefficient de frottement liquide-solide, et nous le comparons à son analogue en volume, la viscosité de cisaillement du fluide. En nous concentrant sur l'eau surfondue, nous révélons les mécanismes moléculaires qui contrôlent le frottement en décomposant le coefficient de transport interfacial en une contribution statique et une contribution dynamique, et nous expliquons l'effet important de la surfusion sur le glissement que nous observons aux basses températures. En dehors du transport hydrodynamique, nous étudions également le transport thermique interfacial en déterminant la structure de surface la plus appropriée, pour un système constitué d'eau sur de l'or nanotexturé recouvert d'une feuille de graphène, afin d'augmenter la résistance de l'interface. Nous effectuons également des simulations *ab initio*, qui résolvent explicitement la structure électronique, pour explorer l'évolution en température de la viscosité de cisaillement et du coefficient de diffusion de l'eau. Motivés par un lien entre la dynamique et la structure, nous évaluons la validité des lois d'échelle de l'excès d'entropie, qui relie les coefficients de transport en volume à des intégrales de fonctions de distribution radiale. Enfin, nous étudions également les écoulements thermo-osmotiques, en proposant un modèle analytique qui rend compte des interactions spécifiques du solvant et des ions avec la paroi. Dans ce modèle, nous étudions les paramètres qui contrôlent la réponse thermo-osmotique du système, et nous prédisons des réponses importantes pour les systèmes avec un grand glissement, ainsi qu'un changement de

la direction de l'écoulement osmotique avec la concentration en sel, ce qui pourrait expliquer les expériences où la direction de l'écoulement ne peut pas être prédite par la théorie classique.