
Champs de Voronoï et liquides surfondus

DIRECTEUR DE THÈSE : JEAN FARAGO

INSTITUT CHARLES SADRON, EQUIPE THEORIE ET SIMULATION, 23, RUE DU LOESS
67034 STRASBOURG

TEL : 03 88 41 40 32 ; E-MAIL : JEAN.FARAGO@ICS-CNRS.UNISTRA.FR

Pour beaucoup de matériaux, qu'ils soient d'origine naturelle ou synthétisés par l'homme, on observe que la transition de cristallisation à basse température prédite par la thermodynamique est évitée, et que le système reste de manière métastable dans un état liquide surfondu. Il en va ainsi de matériaux aussi différents que le verre de fenêtre, les matières plastiques, l'ambre naturelle, certains fromages, l'orthoterphényl, etc... [1]. Ces liquides surfondus se caractérisent par une augmentation spectaculaire du temps de relaxation τ (incarné par exemple dans la mesure de leur viscosité) quand la température est abaissée. À température suffisamment basse, τ devient tellement grand que le système apparaît solide aux échelles de temps des expériences : on parle alors de transition vitreuse. Cette transition du liquide vers le verre, ainsi que l'étude des propriétés mécaniques et structurales des verres, a donné lieu à de très nombreuses études expérimentales, numériques et théoriques au cours des dernières décennies [2]. Récemment, des travaux ont montré l'importance des corrélations du champ de densité au-delà de l'ordre 2 (le facteur de structure dynamique) [3]. Ces corrélations, incarnées par la susceptibilité d'ordre 4 ou les propriétés des cellules de Voronoï [4] des configurations [5], sont primordiales pour appréhender les hétérogénéités dynamiques, caractéristiques de la relaxation non exponentielle des liquides surfondus. Cette thèse propose d'approfondir l'étude de l'importance de ces corrélations d'ordre élevé, via la polarisation géométrique, un champ vectoriel issu des tessellations de Voronoï et récemment mis au jour [6]. Par des études numériques et théoriques, il est proposé dans un premier temps d'analyser le lien qui peut exister entre la polarisation et la dynamique à temps intermédiaires, dont il a été montré qu'elle conditionne très largement les hétérogénéités de la relaxation finale. Dans un deuxième temps, il est proposé d'étudier un modèle complètement nouveau de fluide vitrifiable, dont le champ de forces est défini à l'aide des tessellations de Voronoï. La définition localement champ moyen du champ de forces dote le paysage d'énergie potentielle de ce modèle de caractéristiques particulières, plus simples, que n'ont pas les fluides vitrifiables ordinaires. De fait, on espère que ce modèle puisse permettre de faire quantitativement le lien existant entre les descriptions de la dynamique des liquides vitrifiables dans l'espace des phases, en couplage de modes et dans l'espace réel, un lien qui aujourd'hui manque très nettement dans l'ensemble des travaux du domaine.

Ce projet demande des développements théoriques et numériques importants. En conséquence, il s'adresse à un candidat ayant une réelle motivation pour ces domaines. Une bonne connaissance préalable de la physique des liquides est demandée.

[1] K. Binder and W. Kob, *Glassy Materials and Disordered Solids*, World Scientific (2005).

[2] A. Cavagna, *Physics Reports*, **476**, 51-124 (2009).

[3] L. Berthier et al., *Dynamical Heterogeneities in Glasses, Colloids and Granular Media*, Oxford Science Publications (2011).

[4] Okabe et al, *Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*, Wiley (2000).

[5] D. Coslovich, *Physical Review E*, **83**, 051505 (2011).

[6] J. Farago et al, *New conserved structural fields for supercooled liquids*,
<http://arxiv.org/abs/1312.3503>