Conception aux petites échelles (échelles nanométriques)

I. Discrétisation de la matière

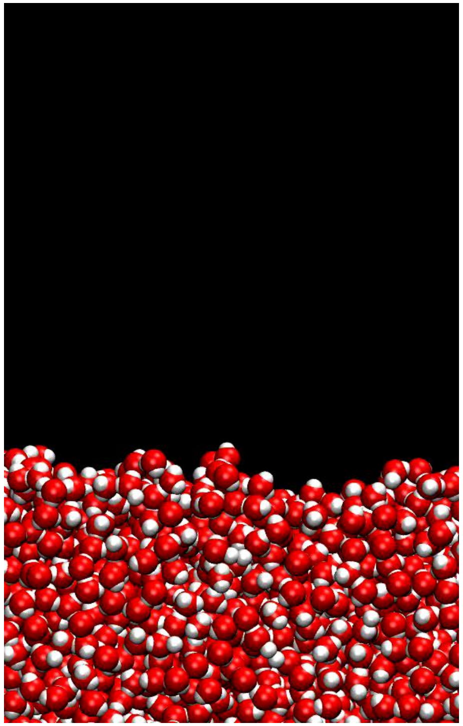
II. Forces d'Adhésion

III. Rugosité à petite échelle

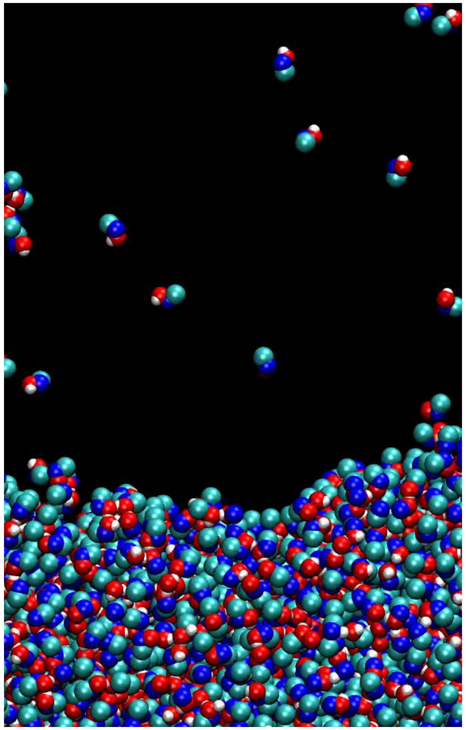
IV. Effet Tunnel (mécanique quantique)

V. Enjeux éthiques des nanosciences et des nanotechnologies

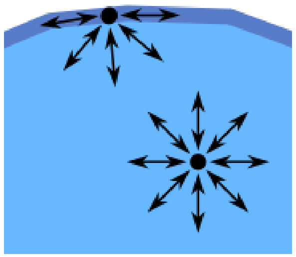
Surface Tension

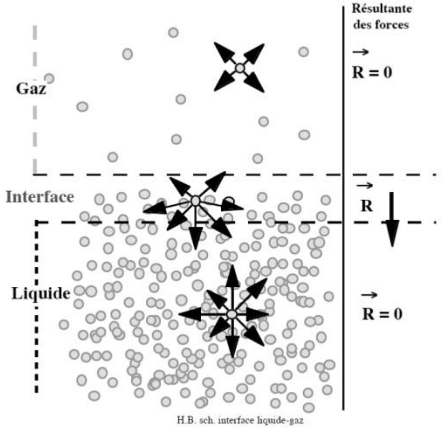


Water γ**(20°C)**=72.8 mN/m



Ethanol γ**(20°C)**=22.10 mN/m





Molecular Dynamics Simulations
at constant T and V (L. Joly, ILM)

Forces d’Adhésion

1) Origine Physique des Forces d’Adhésion

2) Combinaison Adhésion / Déformation mécanique: JKR vs. DMT

Forces d'Adhésion

1) Origine Physique des Forces d'Adhésion

2) Combinaison Adhésion / Déformation mécanique: JKR vs. DMT

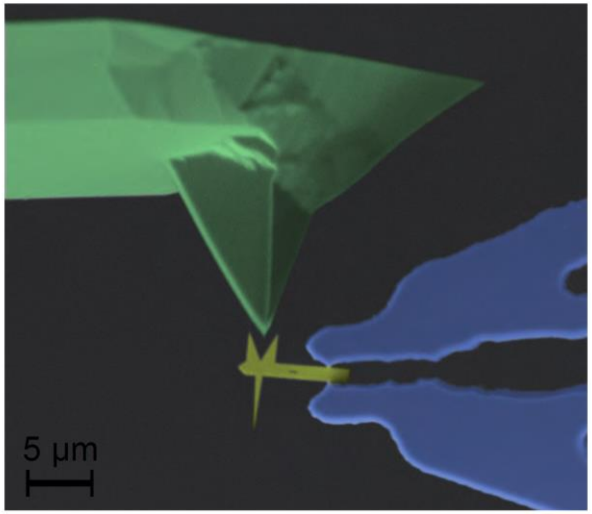
Matériau	Energie de surface 20°C ($mJ.m^{-2}$)	Matériau	Energie de surface 20°C ($mJ.m^{-2}$)
Téflon	18	Plexiglas	40.6
Polystyrène	33-43	Verre	170
Aluminium	1100	Silicium	1400
Argent	1500	Cuivre	2000

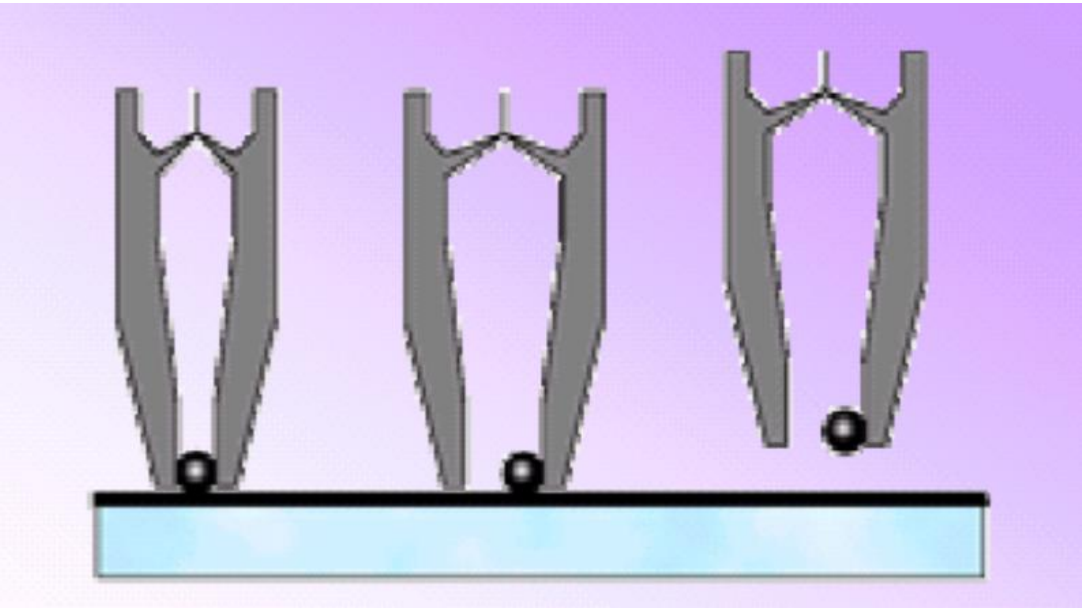
L'énergie de surface est reliée aux forces d'interaction interatomiques

Longueur Caractéristique

$$E_{Elasticit\acute{e}} \approx ER^3 \qquad\qquad E_{Surface} \approx 4\pi\gamma R^2$$

$$E_{Elasticit\acute{e}} \approx E_{surface} \Leftrightarrow R \approx \frac{4\pi\gamma}{E} \approx 100nm$$





L'exemple du Gecko

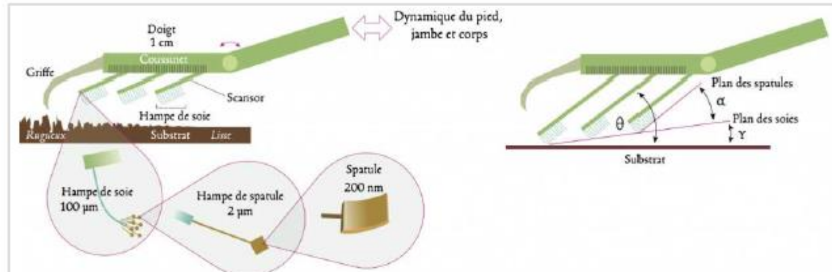
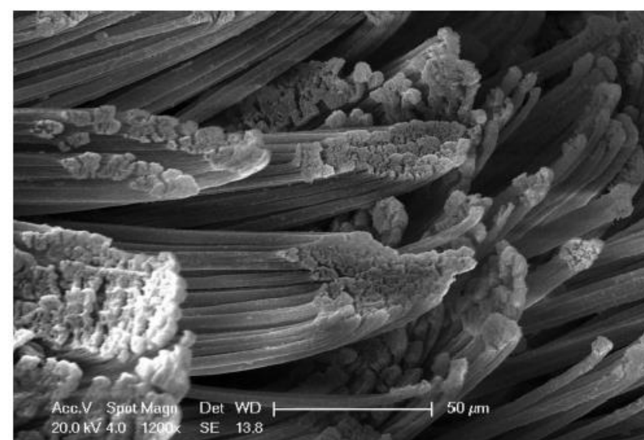
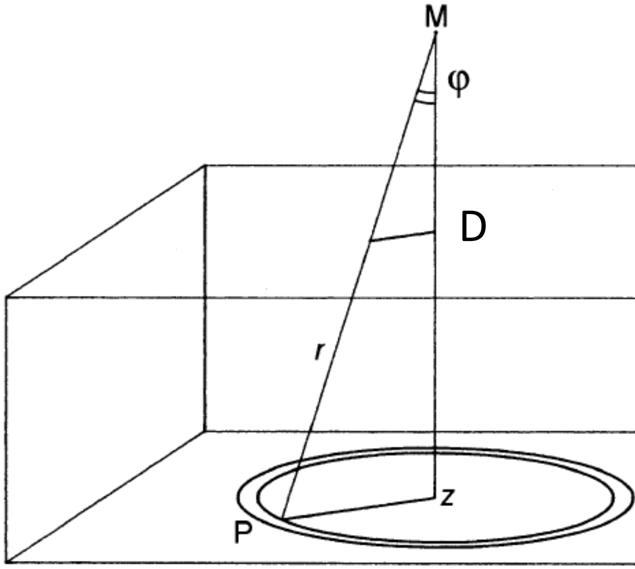


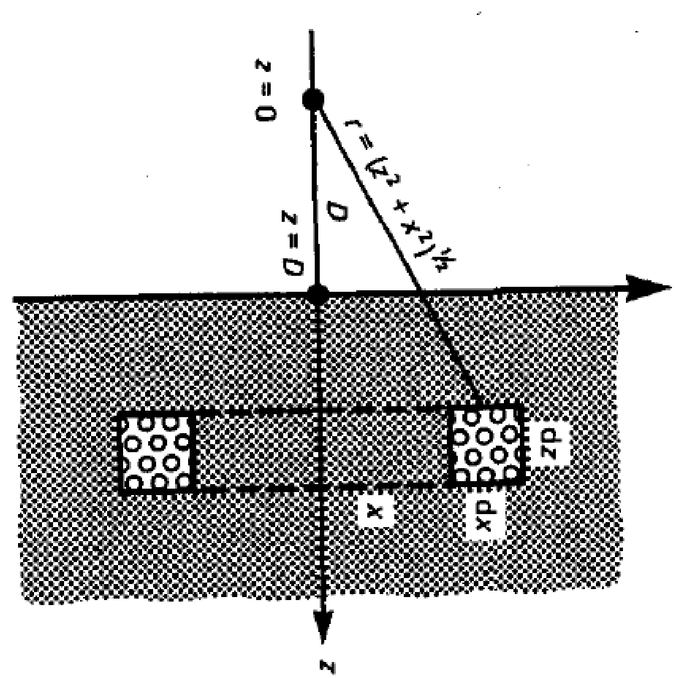
Schéma de la position des structures adhérentes d'un doigt de gecko sur le substrat et position des contacts de ce doigt sur une surface (d'après K. Autumn et alii 2006 et Y. Tian et alii, 2013).



Détail des soies spatulées à leur extrémité en microscopie

Interaction Atome / Milieu Semi-Infini

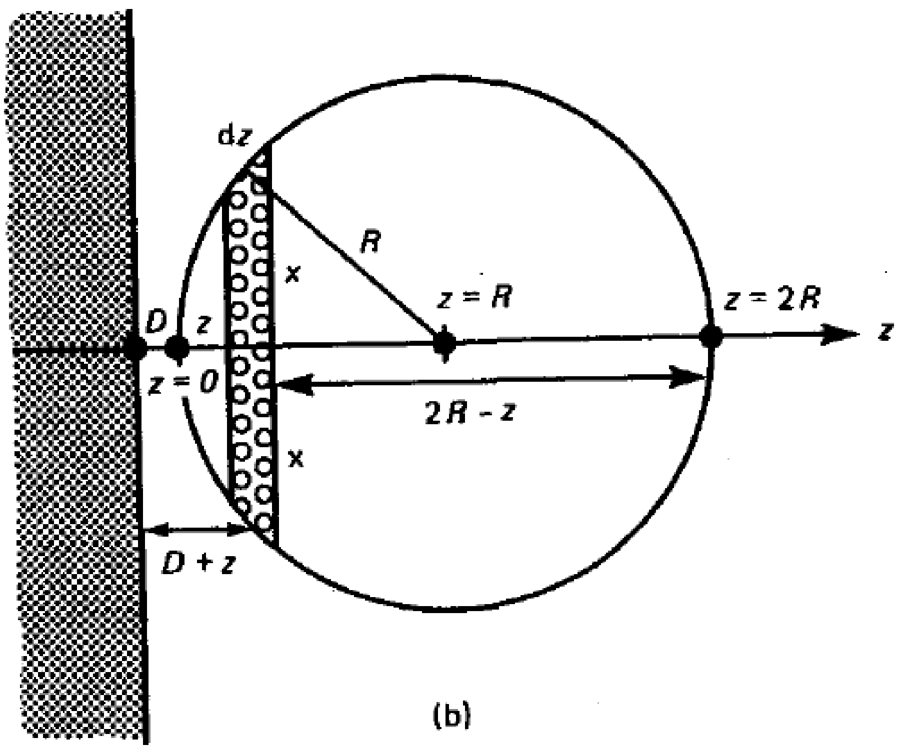




$$\boxed{E_{individuel}(d) = \frac{B}{d^m}} \Rightarrow E_{total}(D) = \int_{z=D}^{\infty} dz \int_{r=0}^{\infty} dr \frac{B}{\left(r^2+z^2\right)^{m/2}} 2\pi\rho r \Rightarrow \boxed{E_{total}(D) = \frac{B}{D^m}\frac{2\pi\rho D^3}{(m-2)(m-3)} \propto \frac{B}{D^{m-3}}}$$

L'effet de volume contribue à augmenter la portée des interactions

Interaction Sphère/Plan



(b)

$R >> D$ $(z \approx D)$

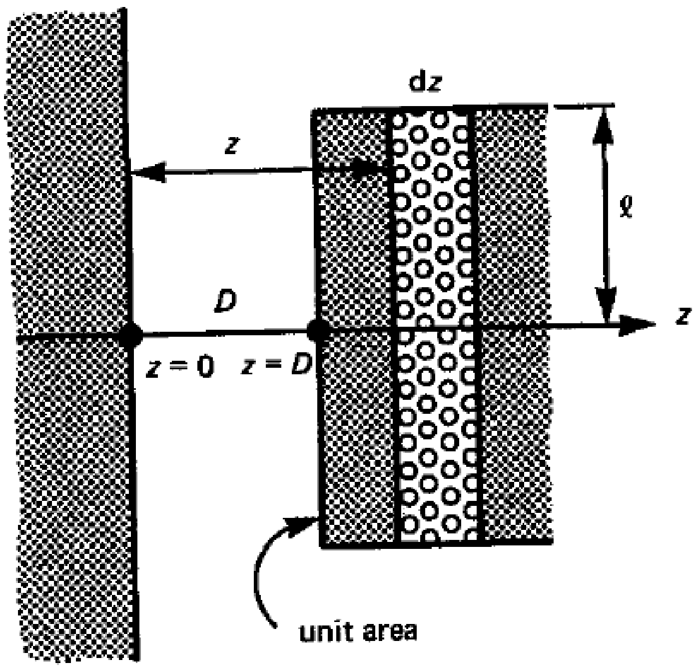
$$E_{total}(D) = \frac{B}{D^m} \frac{4\pi^2 \rho_1 \rho_2 R D^5}{(m-2)(m-3)(m-4)(m-5)}$$

$R << D$

$$E_{total}(D) = \frac{B}{D^m} \frac{2\pi \rho_1 D^3}{(m-2)(m-3)} \frac{4}{3} \pi R^3 \rho_2$$

(N particules concentrées en un point)

Interaction Plan/Plan (Hamaker, 1937)



$$\boxed{E_{total-Plan}(D) = S.\frac{B}{D^m}\frac{2\pi\rho_1\rho_2 D^4}{(m-2)(m-3)(m-4)}}$$

$\gamma = 1/2.E_{total-Plan}(D)/S$ **= Tension de surface**

$$E_{totalSphère/Plan}(D,R) = \frac{S_{eff}}{S}E_{total-Plan}(D)$$

si R>>D $S_{eff} = \frac{2\pi}{(m-5)}RD$; si R<<D $S_{eff} = \frac{4\pi(m-4)}{3}\frac{R^3}{D}$

$$E_{total-Plan}(D) = -\frac{S}{2\pi R}\frac{\partial E_{totalSphère/Plan}(D,R)}{\partial D}$$

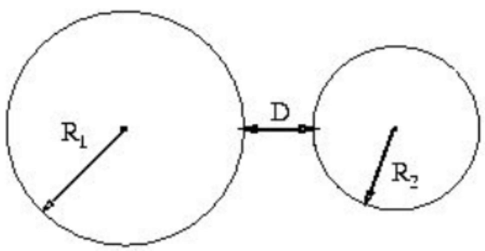
$$E_{total-Plan}(D) = \frac{S}{2\pi R}F_{totalSphère/Plan}(D,R)$$

$$\Rightarrow \boxed{F_{totalSphère/Plan}(D,R) = 2\pi R.E_{total-Plan}(D)/S = 4\pi R\gamma}$$

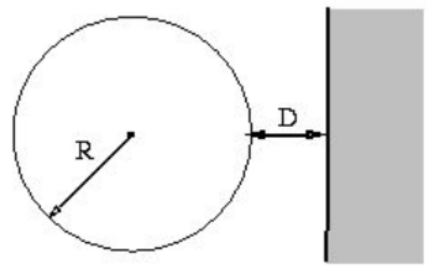
$\approx F_{Sphère/Sphère}(D,R)$ (approx. Derjaguin)

Influence de la Géométrie du Contact

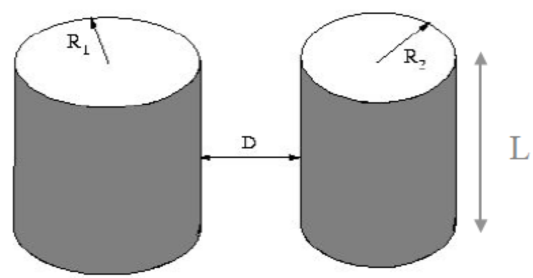
Exemple d'interactions de **van der Waals** (m=6)
D<<R



$$W = -\frac{A}{6D}\frac{R_1 R_2}{(R_1 + R_2)}$$

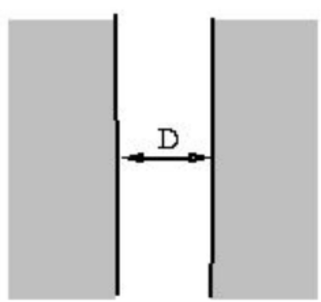


$$W = -\frac{AR}{6D}$$



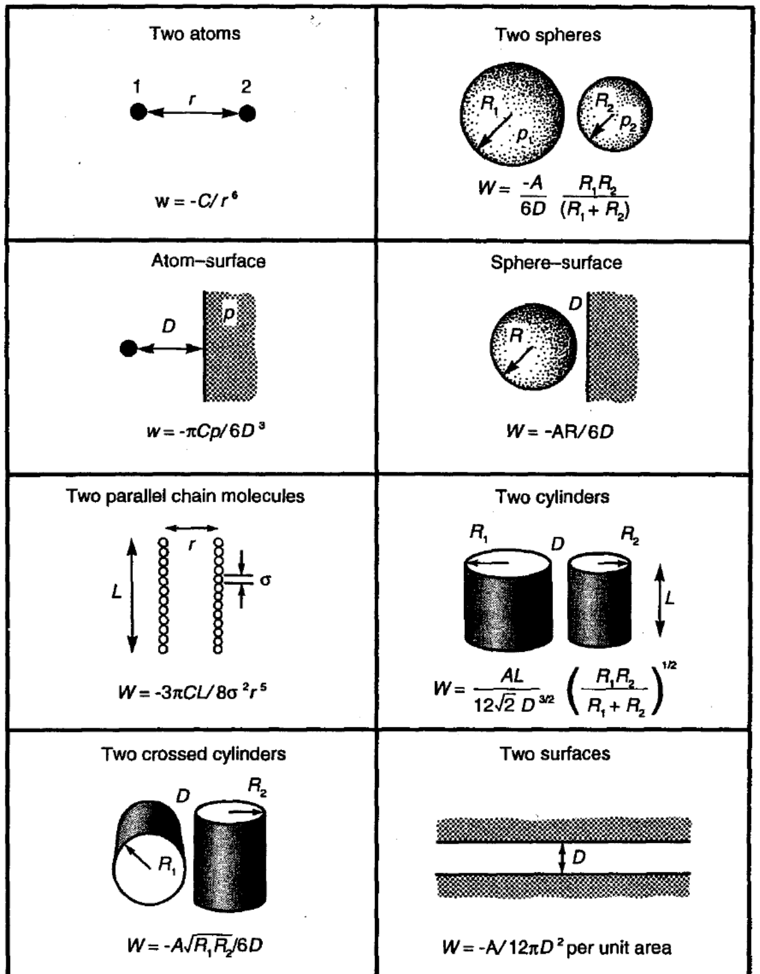
$$\boxed{F = \frac{\partial W}{\partial D}}$$

$$W = -\frac{AL}{12\sqrt{2}D^{3/2}}\left(\frac{R_1 R_2}{(R_1 + R_2)}\right)^{1/2}$$



$$W = -\frac{A}{12\pi D^2}$$

Constantes de Hamaker



Cas d'interactions de **van der Waals** (m=6)

D<<R

Constante de **Hamaker** (J)

$$\boxed{A = \pi^2 B \rho_1 \rho_2}$$

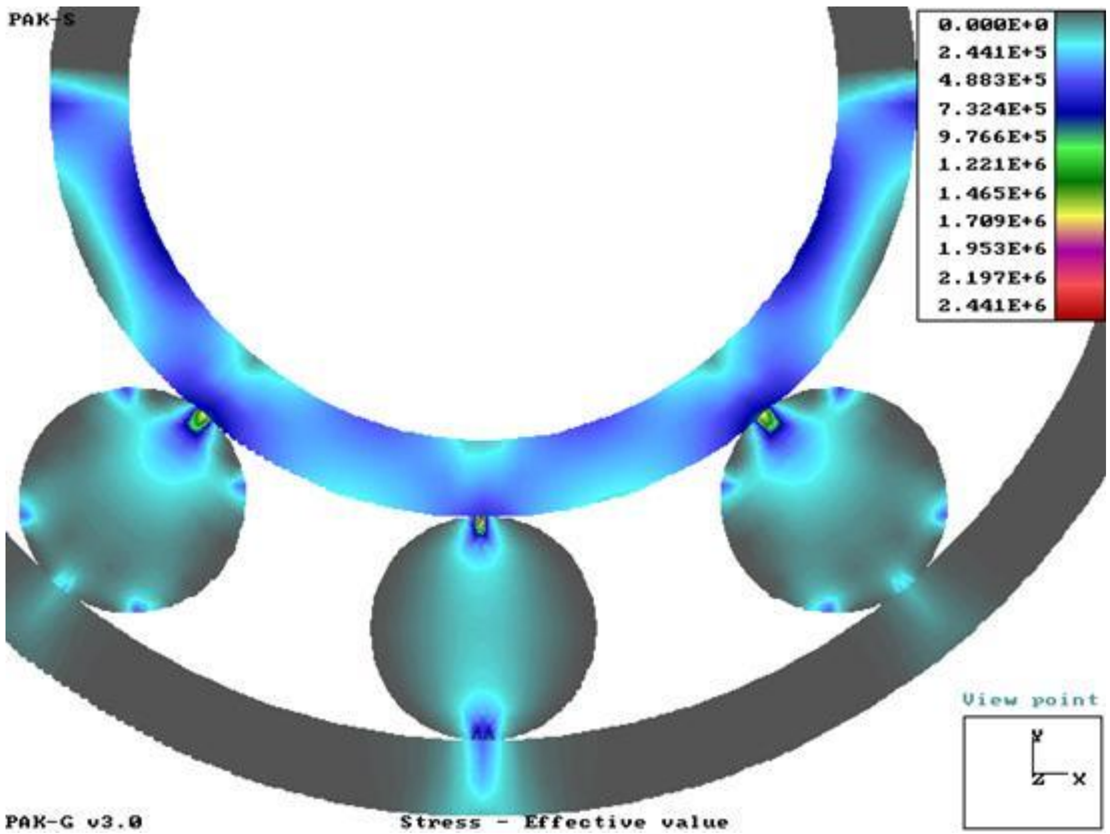
Medium	C $(10^{-79}\ \mathrm{J\,m^6})$	ρ $(10^{28}\ \mathrm{m^{-3}})$	A $(10^{-19}\ \mathrm{J})$
Hydrocarbon	50	3.3	0.5
CCl_4	1500	0.6	0.5
H_2O	140	3.3	1.5

Forces d'Adhésion

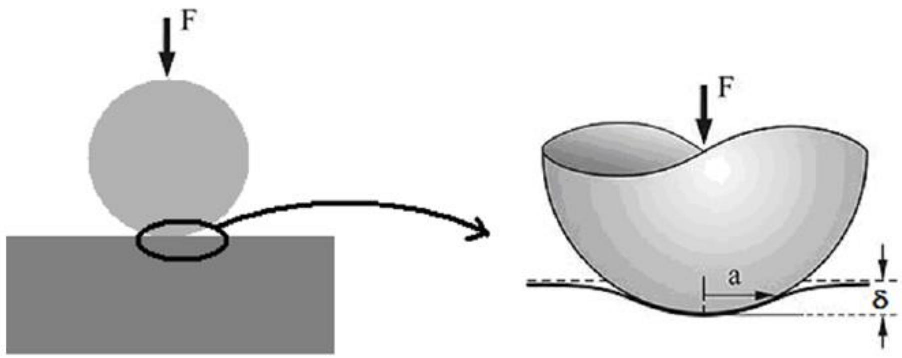
1) Origine Physique des Forces d'Adhésion

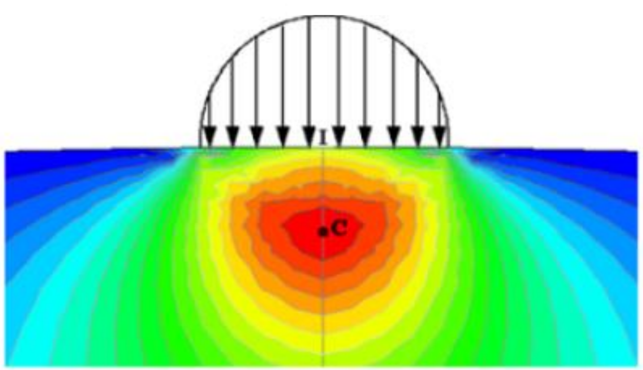
2) Combinaison Adhésion / Déformation mécanique: JKR vs. DMT

Cas d’une **déformation Elastique** dans un contact **sans Adhésion**



Contact **Elastique** de **Hertz**





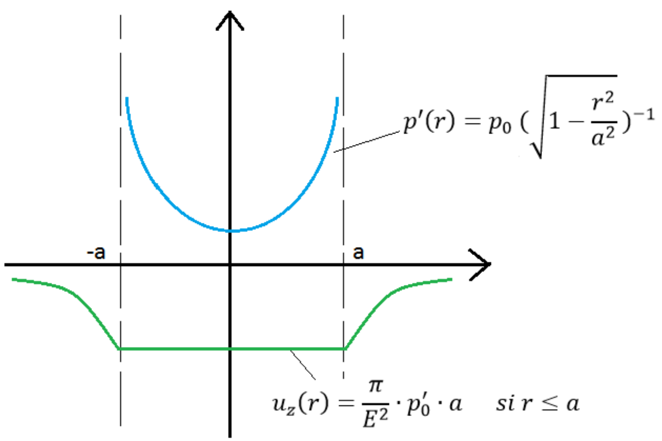
$$F_z = \frac{4}{3} E^* R^2 \left(\frac{\delta}{R} \right)^{3/2} \qquad \delta \ll R$$

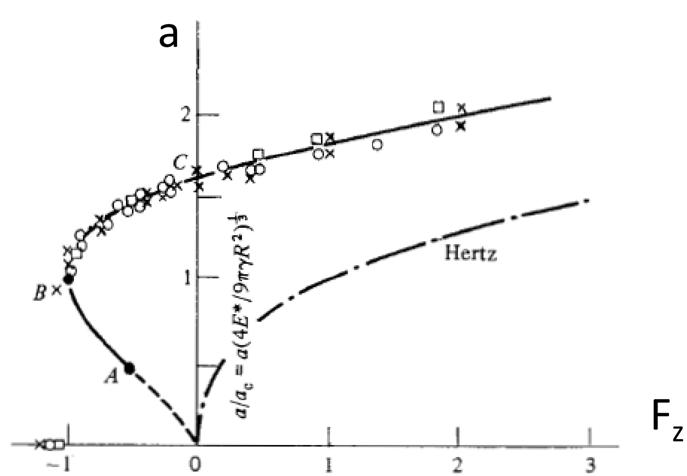
$$a = \sqrt{R\delta} = R \left(\frac{3}{4E^* R^2} F_z \right)^{1/3}$$

$$p(r) = P\sqrt{1 - \frac{r^2}{a^2}};\ u_z(r) = \frac{\pi P a}{4E^*} \left(2 - \frac{r^2}{a^2} \right)$$

Avec Adhésion:

Théorie de **Johnson-Kendall-Roberts**





$$E_{élastique} = U_E = \frac{1}{2}\int_{r=0}^{a} p(r) * 2\pi r * dr * u_z(r)\,,$$

$$avec\ p(r) = p_{hertz} + p_{adhesion} = p_0\sqrt{1-\frac{r^2}{a^2}} + p_0'\,(\sqrt{1-\frac{r^2}{a^2}})^{-1}$$

$$donc\quad E_{élastique} = \frac{\pi^2 a^3}{E^*}\left(\frac{2}{15}p_0^2 + \frac{2}{3}p_0 p_0' + p_0'^2\right)$$

$$et\qquad E_{adhésion} = -2\gamma\pi a^2$$

$$\left[\frac{\partial E_{total}}{\partial a}\right]_{\delta\ imposé} = 0\,,$$

$$avec\ p_0 = \frac{2aE^*}{\pi R}\quad donc\quad p_0' = -\sqrt{\frac{4\gamma E^*}{\pi a}}.$$

$$F_z = \int_{r=0}^{a} p(r) * 2\pi r dr$$

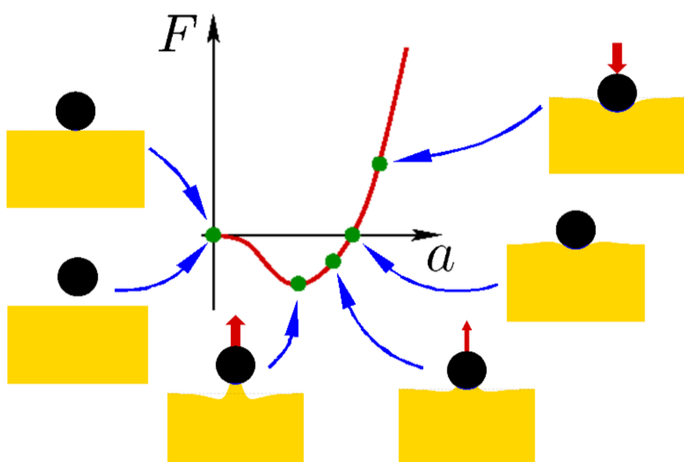
$$\boxed{\left(F_z - \frac{4E^* a^3}{3R}\right) = -4\sqrt{\pi\gamma E^*}\cdot a^{3/2}}$$

Avec Adhésion:

Théorie de **Johnson-Kendall-Roberts**

$$F_{Elasticité} \approx \frac{4E^* a^3}{3R} \qquad F_{Adhésion} \approx -4\sqrt{\pi \gamma E}\, a^{3/2}$$

$$F_{Elasticité} \approx F_{Adhésion} \Leftrightarrow \frac{a^3}{R^2} \approx \frac{9\pi\gamma}{E} \approx 200nm$$

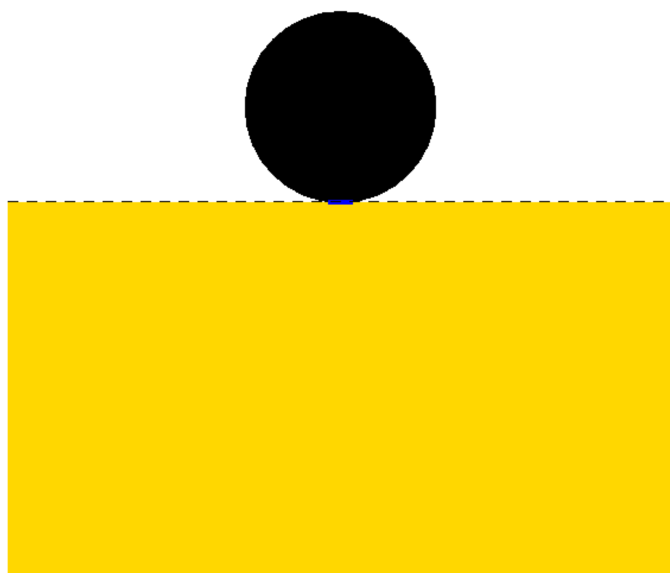


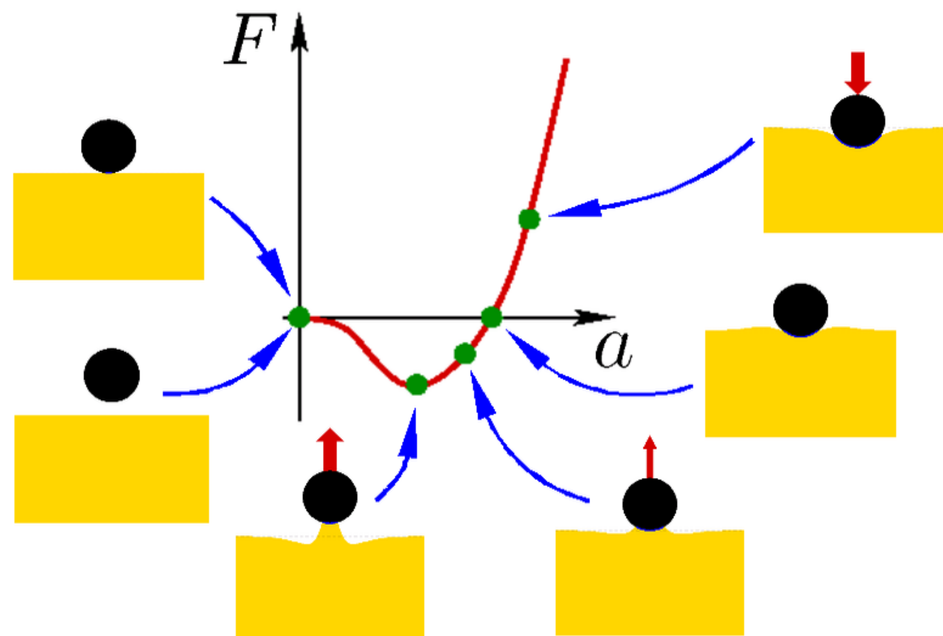
$$\boxed{F_z^{max} = -3\pi R \gamma}$$

Solides **déformables** avec adhésion **dans le contact** uniquement

Avec Adhésion:

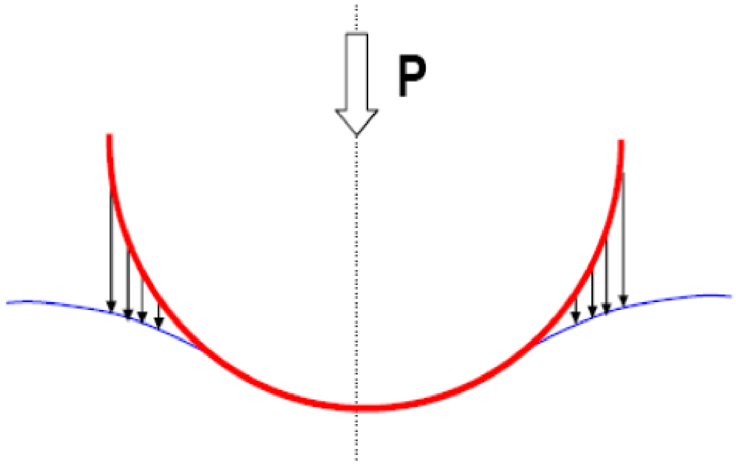
Théorie de **Johnson-Kendall-Roberts**

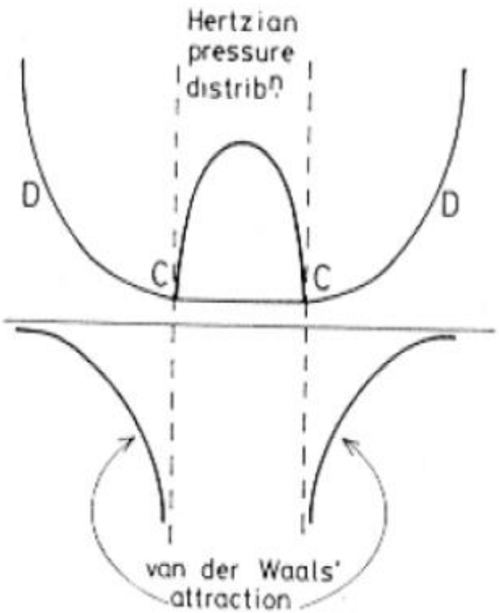




Avec Adhésion:

Théorie de **Derjaguin-Müller-Toporov**





$$F_z^{max} = -4\pi R\gamma \quad \text{si} \quad R_2 >> R$$

Cas de solides **peu déformables** avec une adhésion de **longue portée**

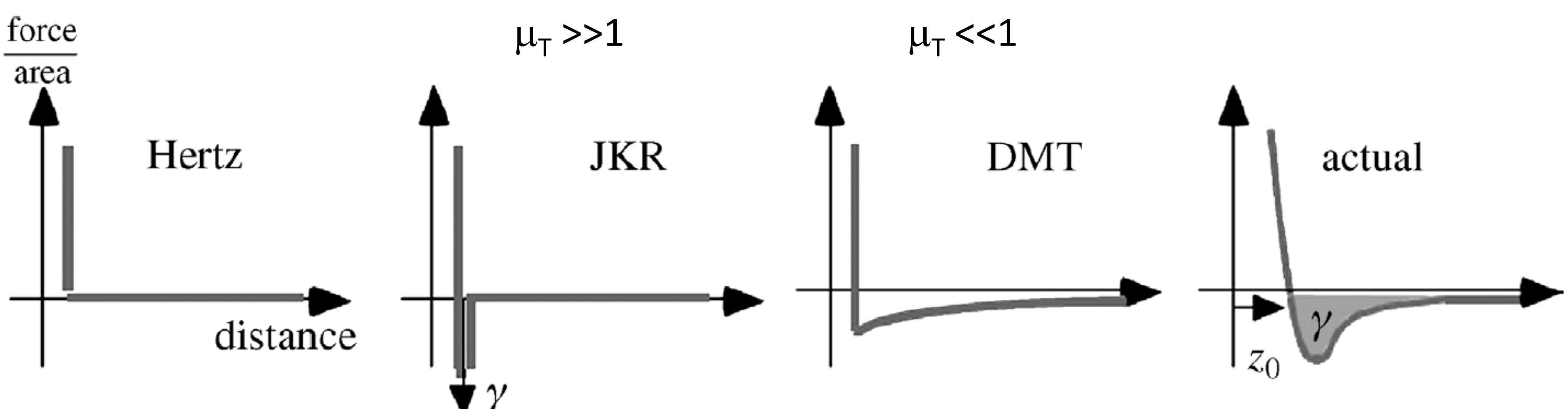
Avec Adhésion:

Paramètre de **Transition** (Tabor)

$$\mu_T = \left(\frac{16 R \gamma^2}{9 K^2 z_0^3} \right)^{1/3}$$

μ_T >>1

μ_T <<1

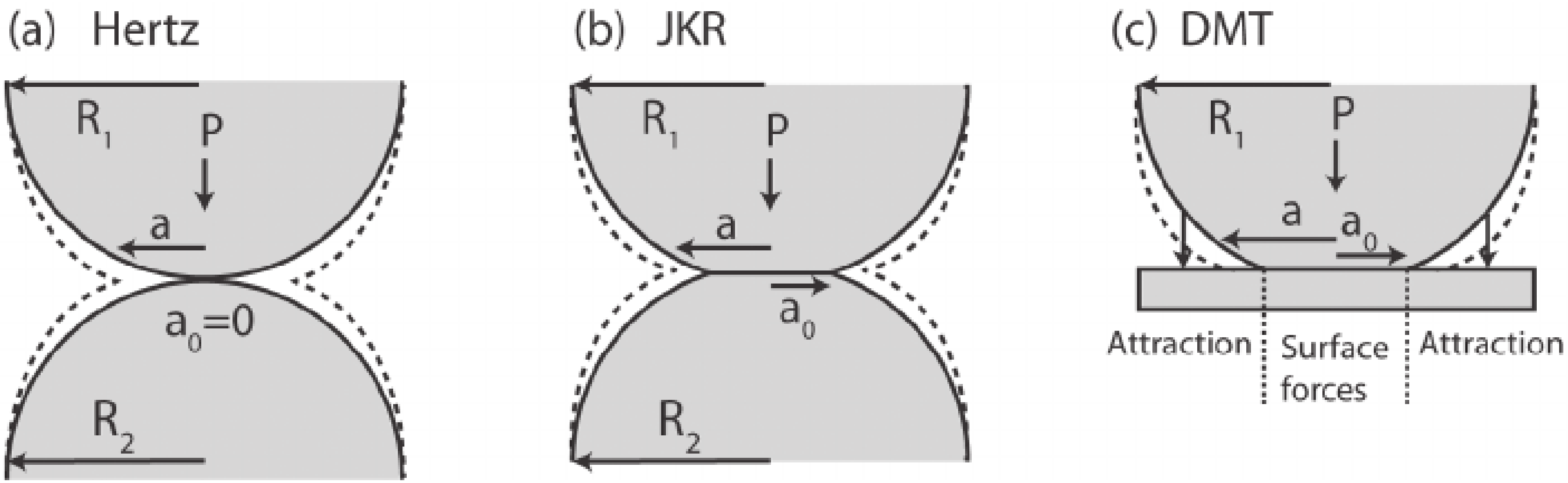


Forte adhésion,
Forte déformation

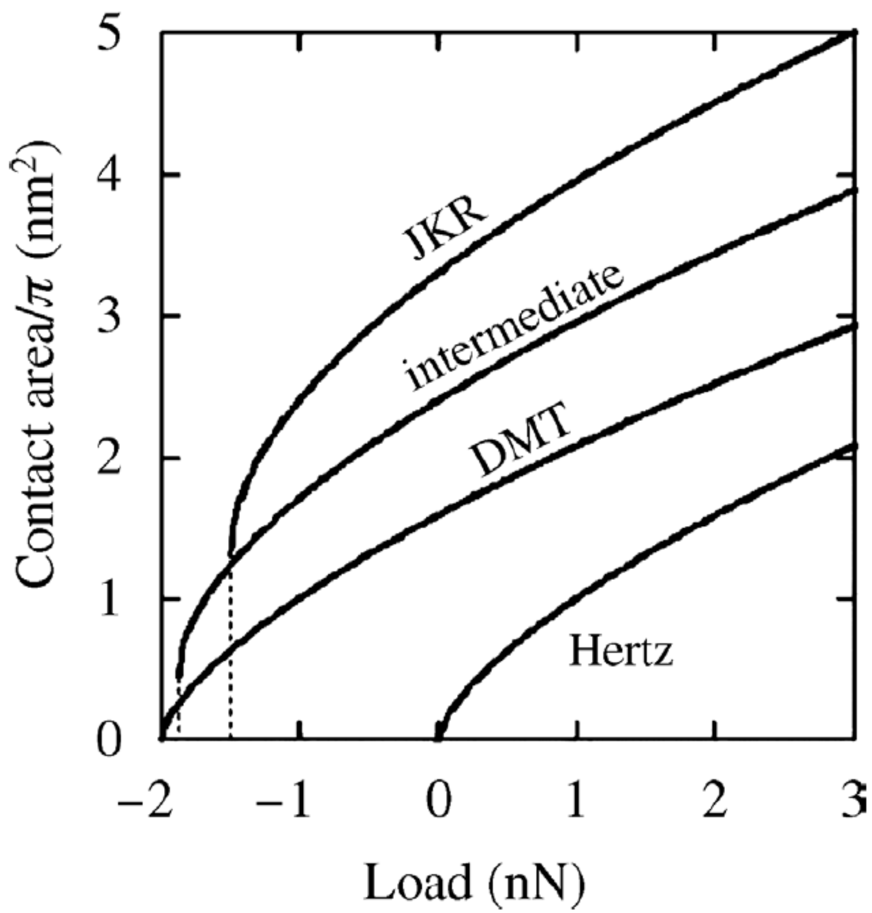
Faible adhésion,
Faible déformation

Grierson et al. (2005)

Avec Adhésion:



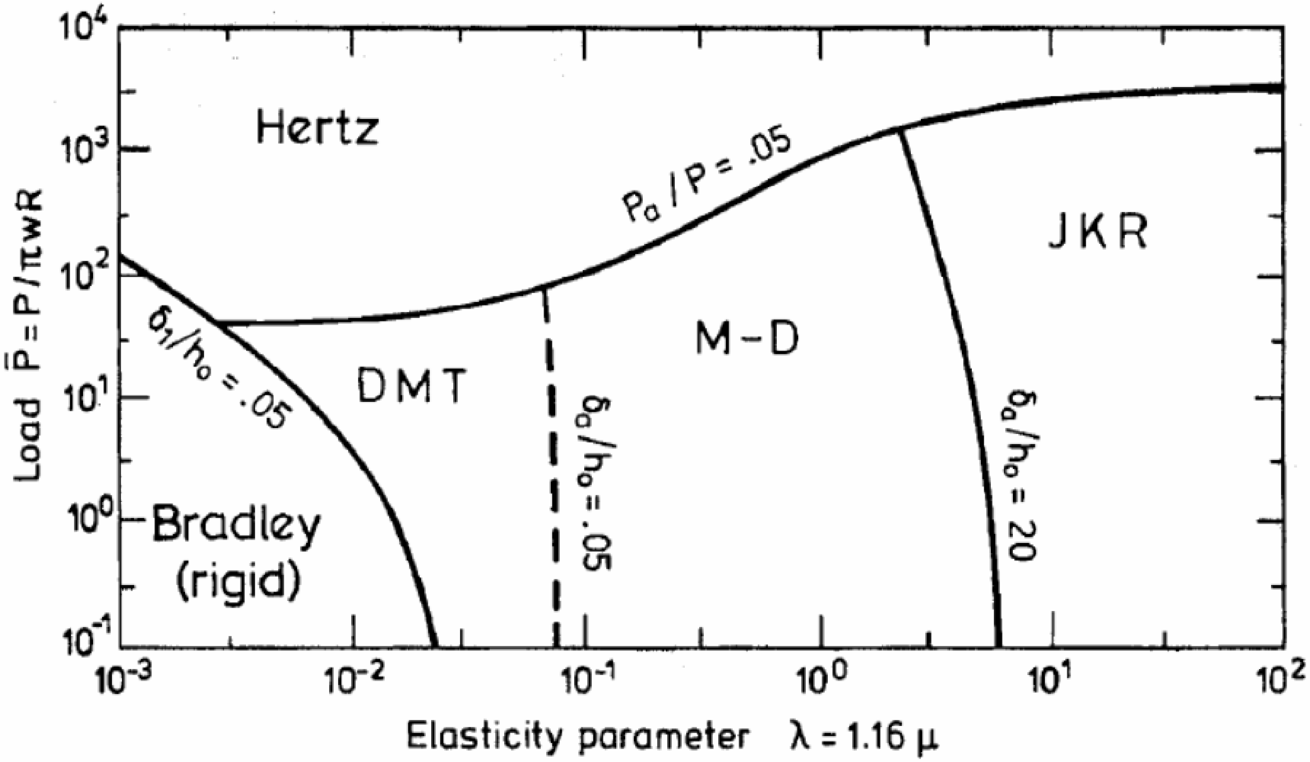
Avec Adhésion:



K=1 GPa ; R=1 nm ; $\pi\gamma$=1 J/m^2

Grierson et al. (2005)

Avec Adhésion:



K.R. Johnson and J.A. Greenwood (1997)

Take Home Message Partie II:

L’origine microscopique des forces d’adhésion réside dans les forces interatomiques.

La description continue simplifiée de l’élasticité en présence d’adhésion nécessite de faire des approximations.

On distingue 2 modélisations extrêmes:
le modèle de **Johnson-Kendall-Roberts**
et
le modèle de **Derjaguin-Müller-Toporov**

Conception aux petites échelles (échelles nanométriques)

I. Discrétisation de la matière

II. Forces d’Adhésion

III. Rugosité à petite échelle

IV. Effet Tunnel (mécanique quantique)

V. Ethique et Respect de l’Environnement

Surface vicinale

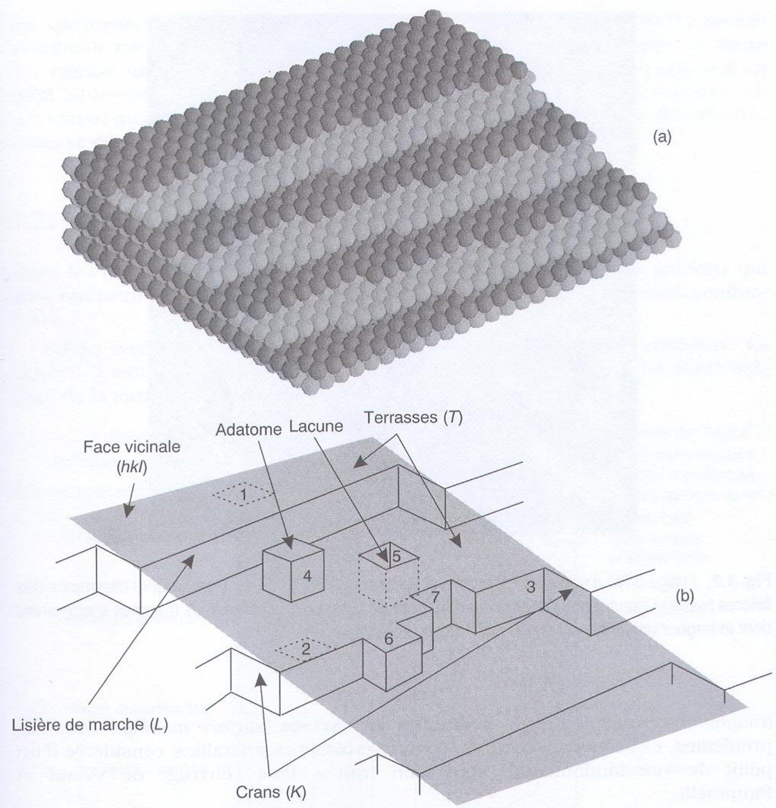
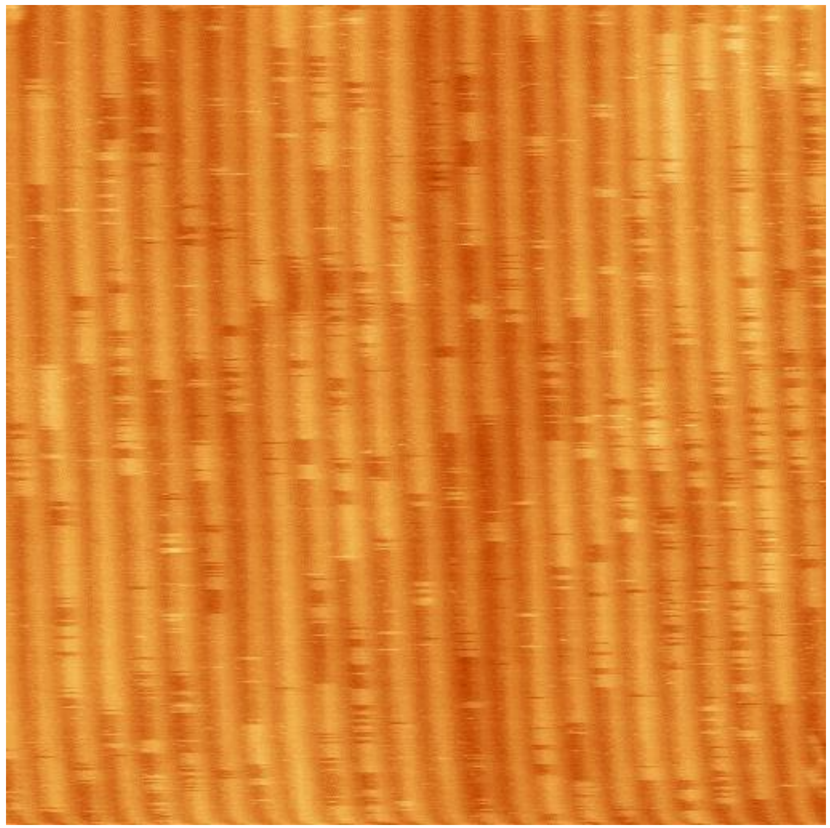


Fig. 1.1. Schéma d'une surface idéale à 0 K (a) et à température non nulle (b).

Figure 1.1. Marches [110] sur la face (001) du silicium. Largeur des terrasses : environ 100 Å. Remarquer l'alternance de marches d'allure différente (cf. chap. 9). Technique expérimentale : microscopie tunnel à balayage (STM). (Lagally et al. 1990, avec l'aimable autorisation des auteurs).



Transition Rugueuse Au (233) 395°K

Surface réelle

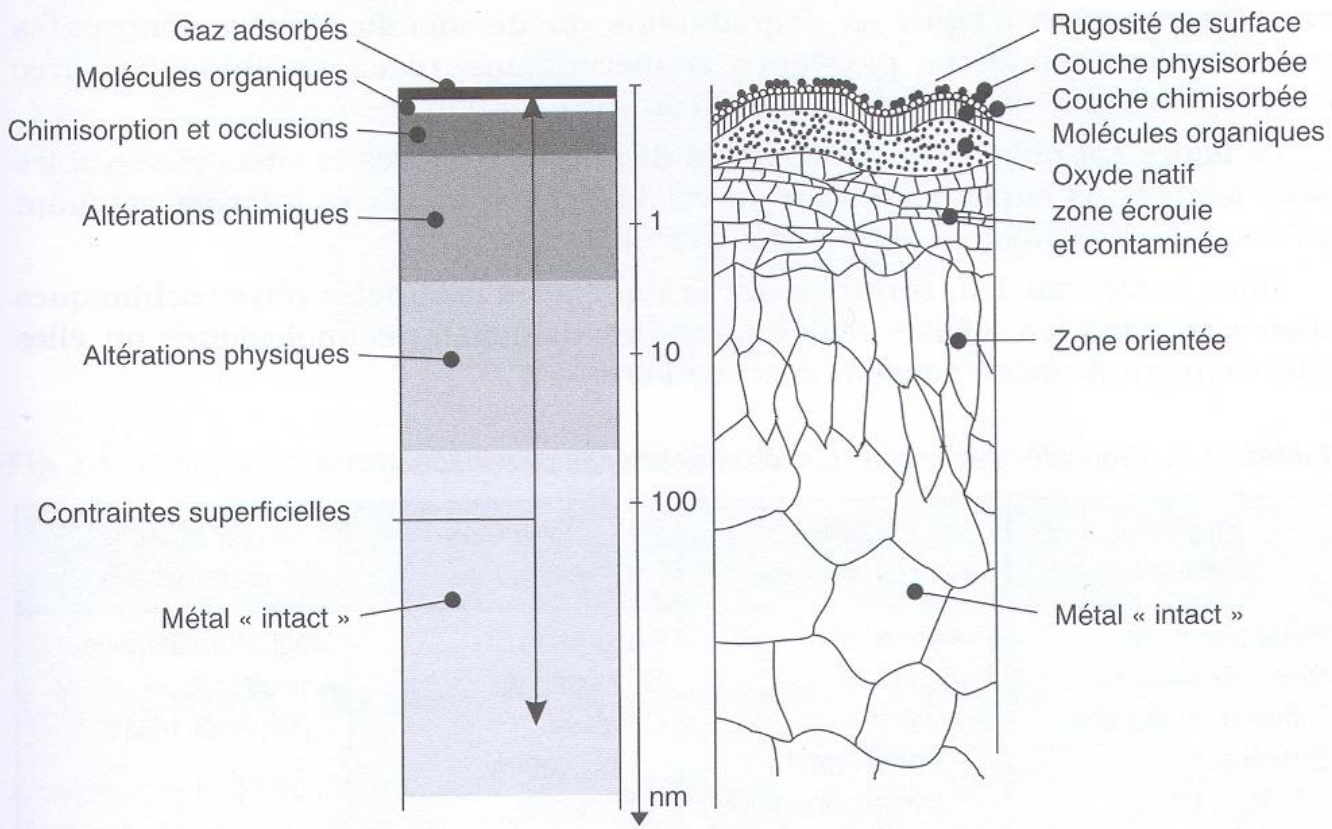


Fig. 1.3. Structure microscopique de la surface d'un métal usiné.

Self-Affine surfaces

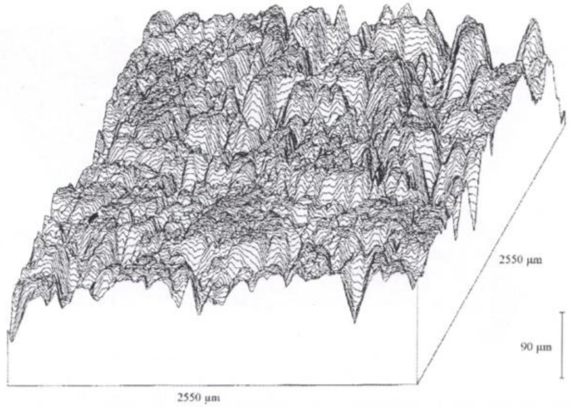


Figure 2.11: Image 3D de l'échantillon d'alumine/graphite rugueux avec un pas de 10 μm

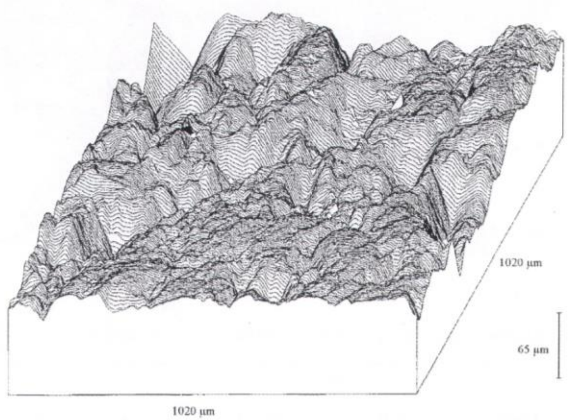


Figure 2.12: Image 3D de l'échantillon d'alumine/graphite rugueux avec un pas de 4 μm

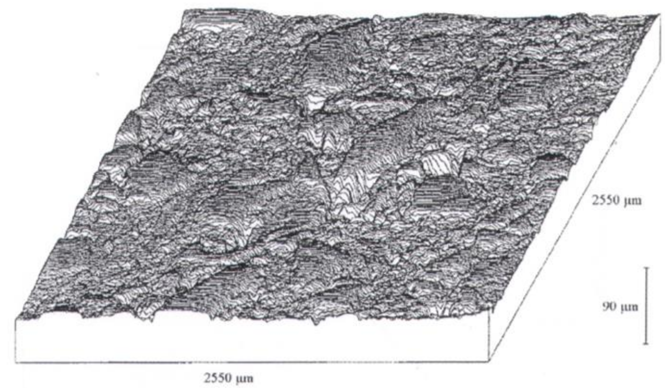


Figure 2.15: Image 3D de l'échantillon d'alumine/graphite poli avec un pas de 10 μm

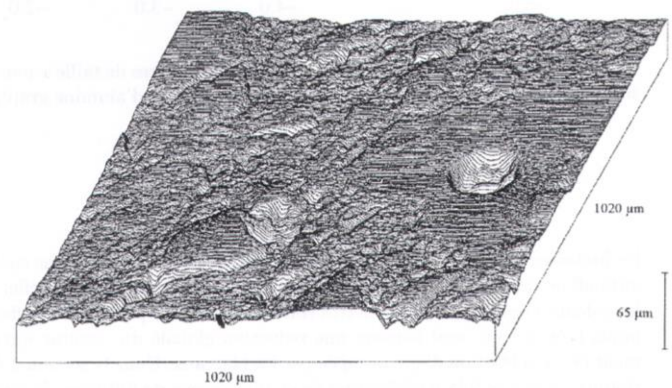
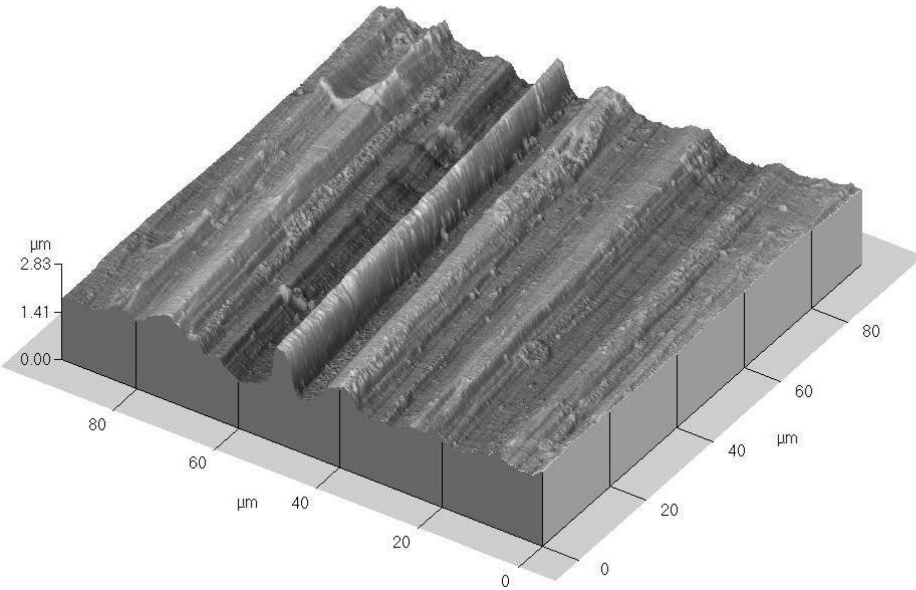
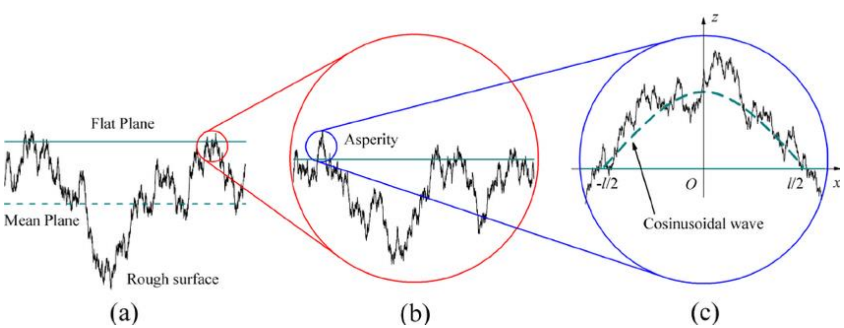


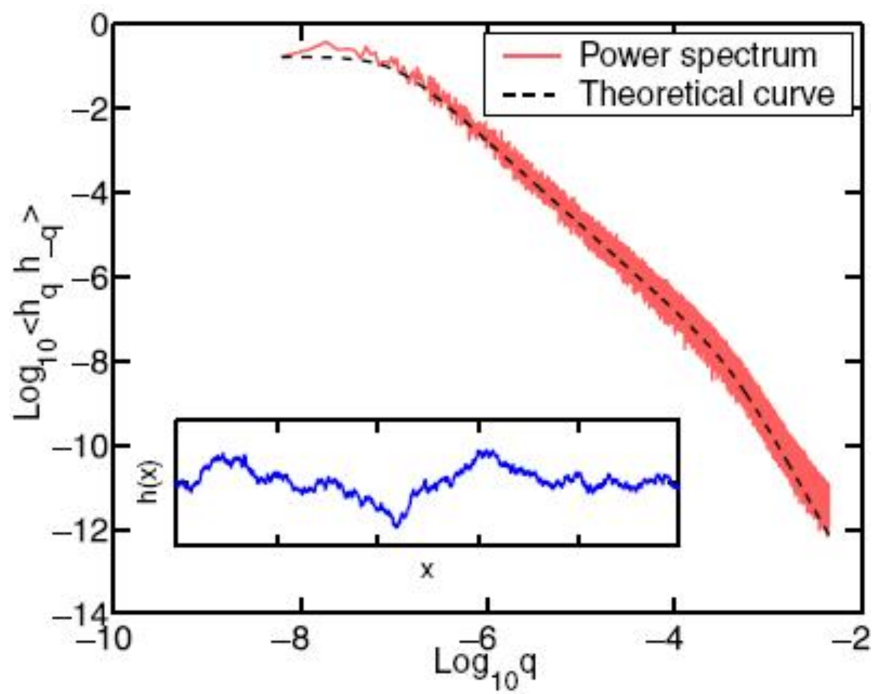
Figure 2.16: Image 3D de l'échantillon d'alumine/graphite poli avec un pas de 4 μm

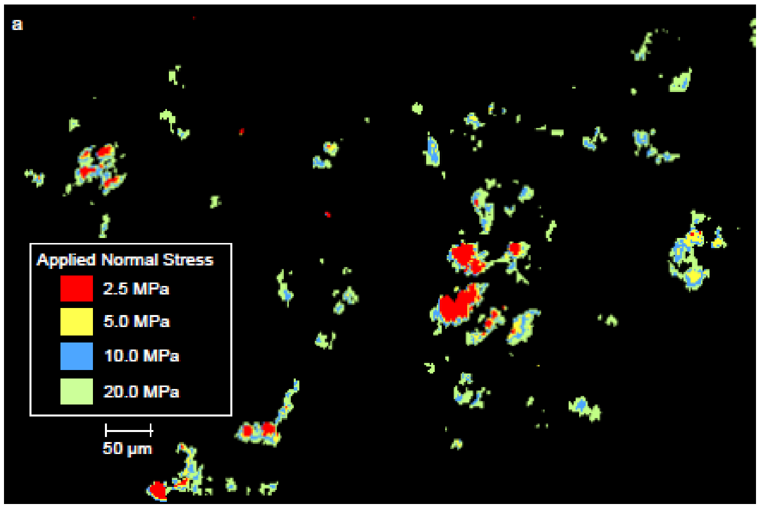
Self-Affine surfaces

$$\left\langle \left(h(x+\Delta x) - h(x) \right)^2 \right\rangle \propto \Delta x^{2\varsigma}$$









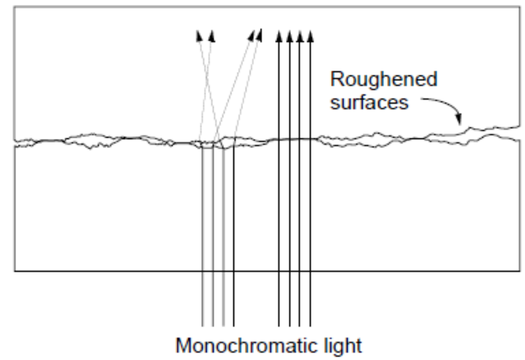
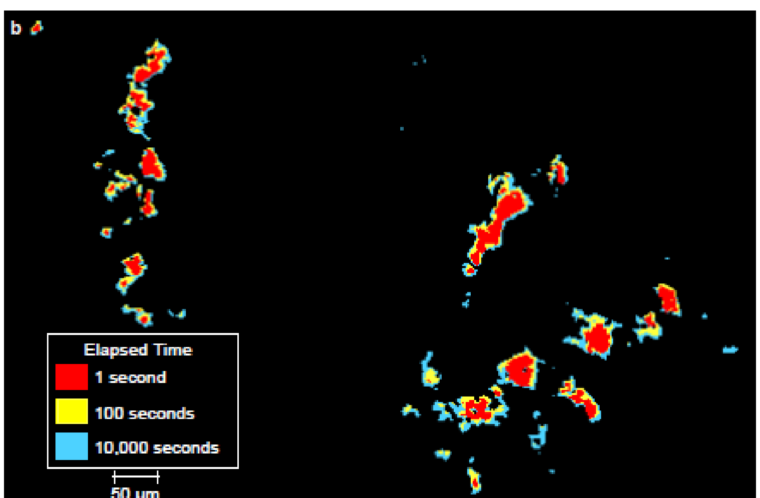
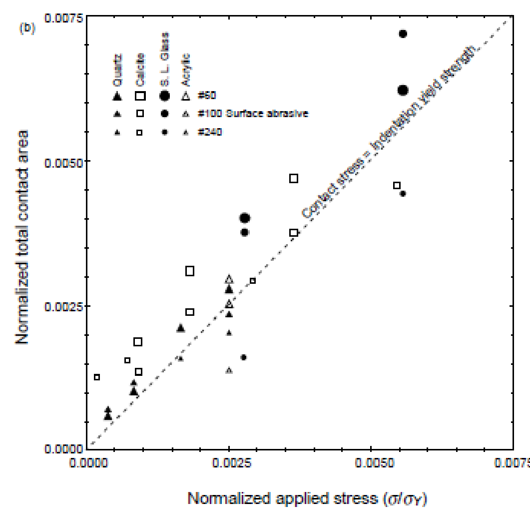
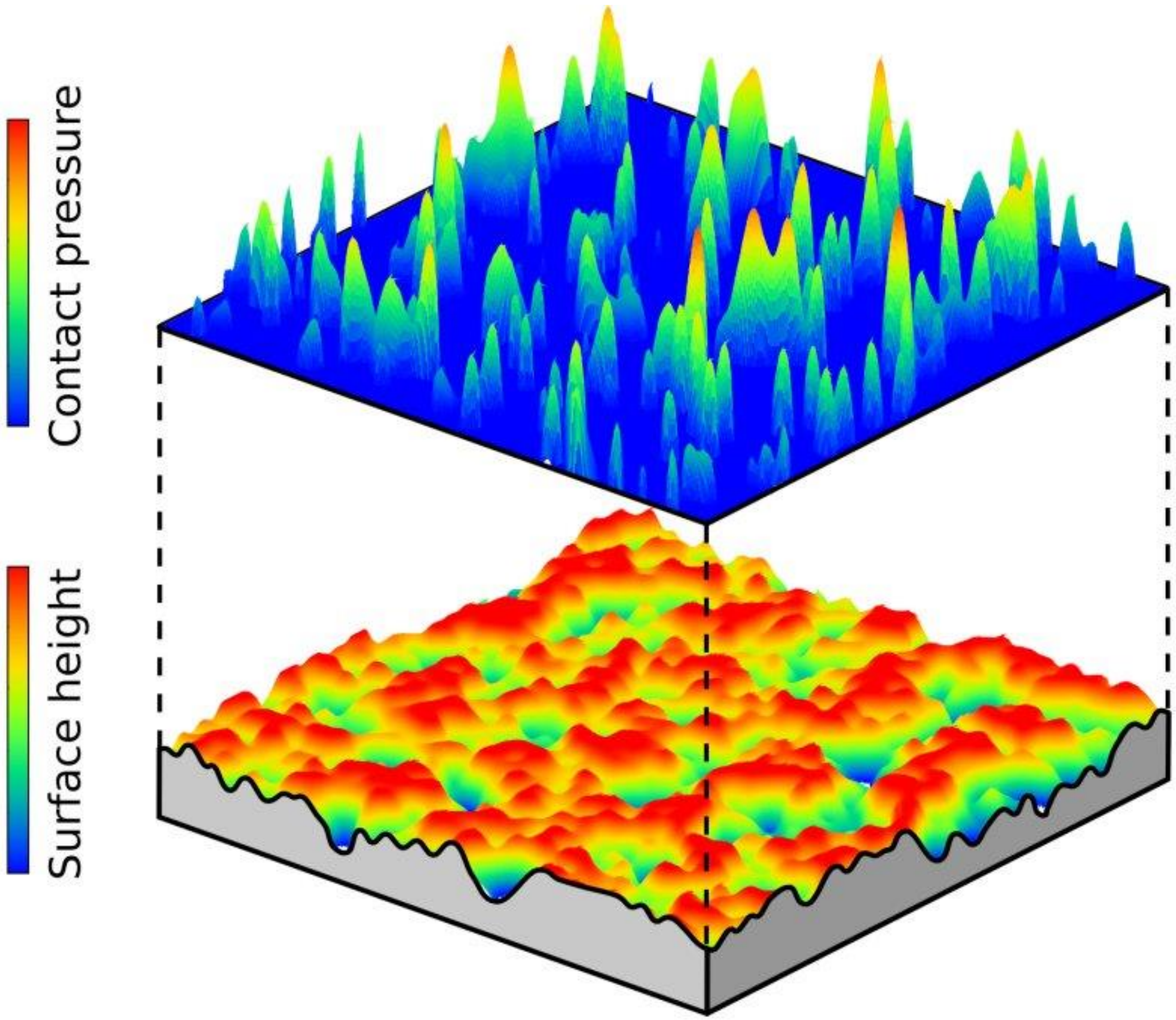


Figure 2
Schematic representation of roughened sliding surfaces. Light transmitted through the sliding blocks is scattered except at contacts.






Contact pressure
Surface height

Take Home Message Partie III:

Une surface réelle est rugueuse.

Il existe **plusieurs paramètres** pour caractériser la rugosité de surface:

Amplitude des aspérités vs. Corrélations spatiales entre les aspérités.

Au contact, il y a un fluage des aspérités (instationarité)