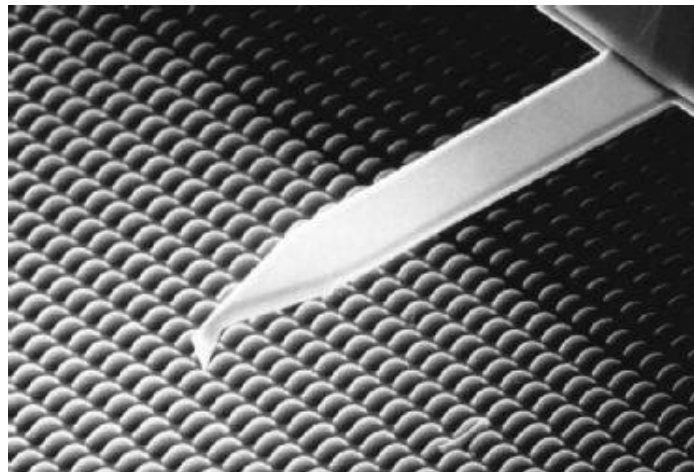


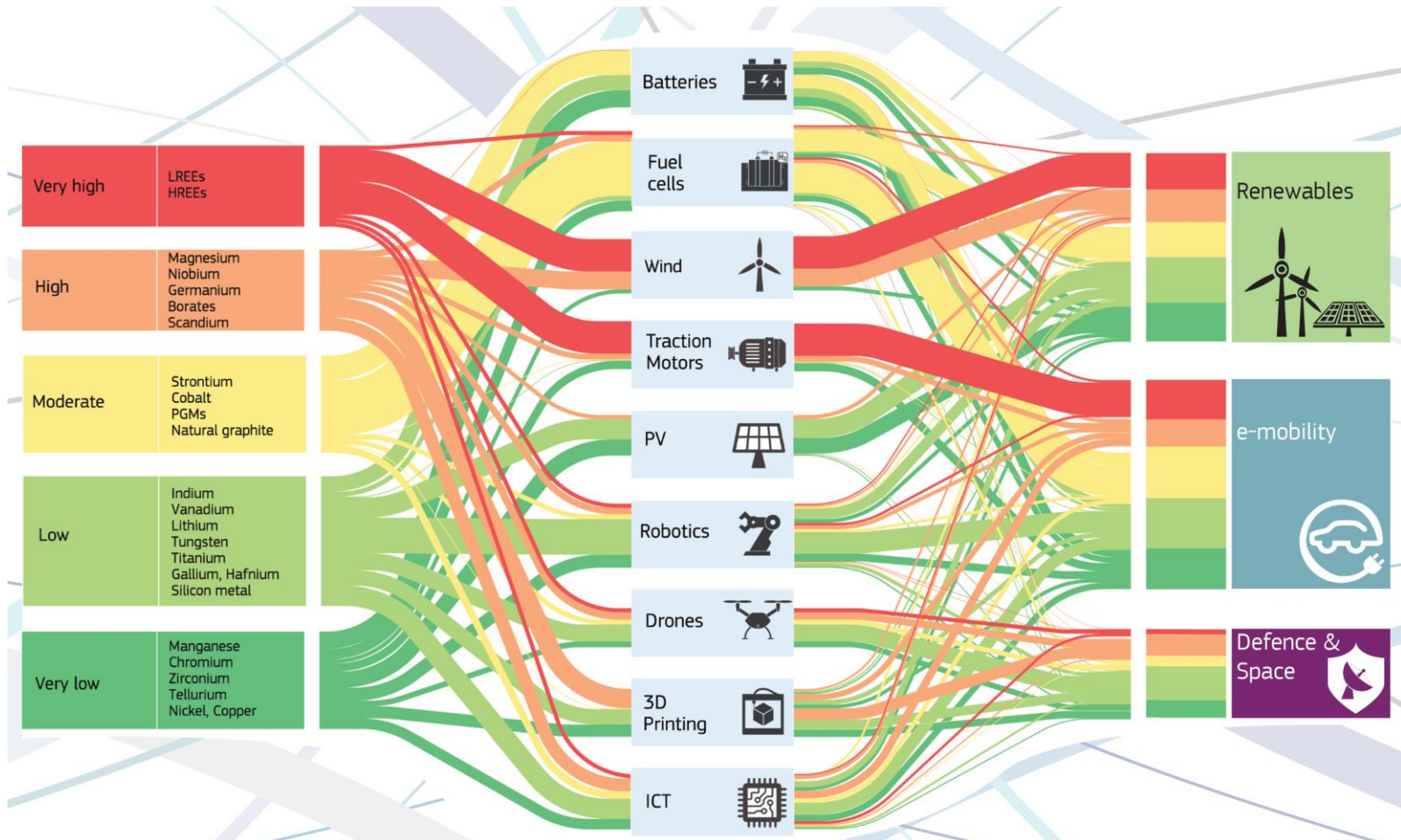
Introduction à la Mécanique aux petites échelles



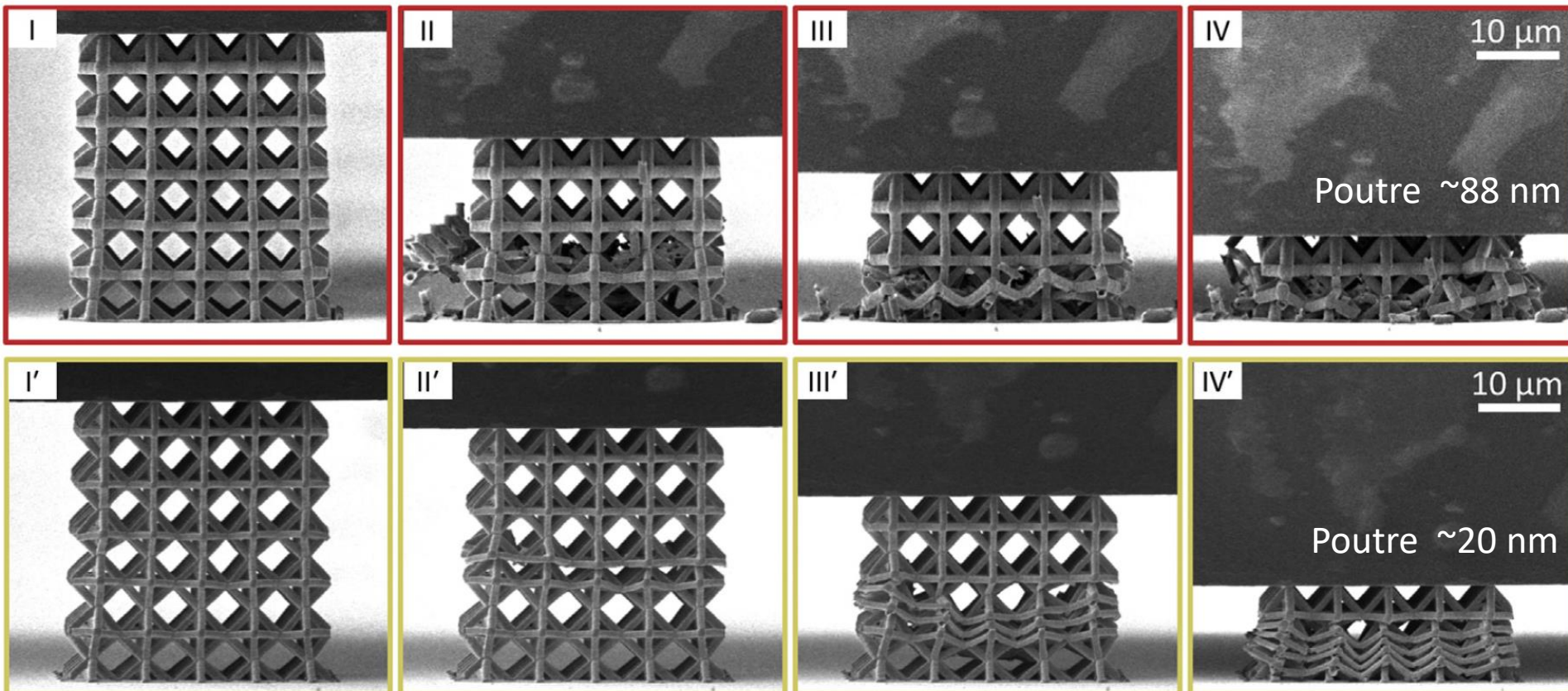
Anne Tanguy
Anne.Tanguy@insa-lyon.fr

INSA Lyon 2026

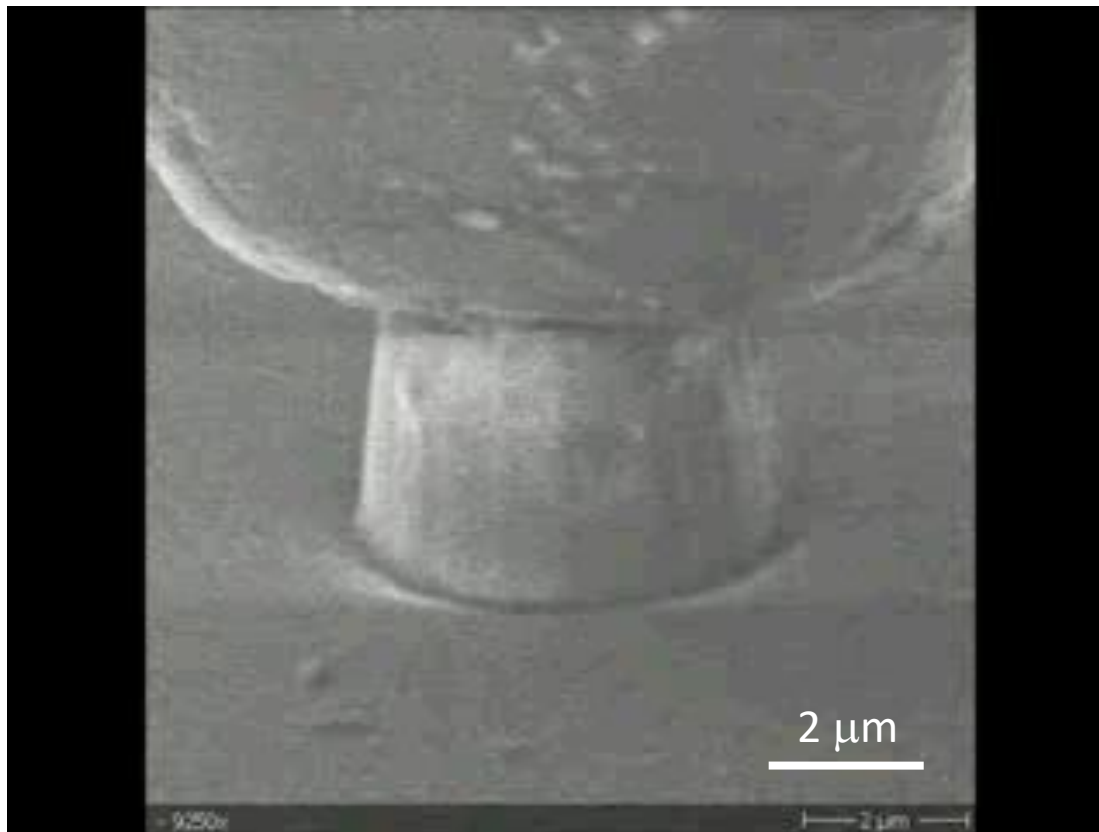
Etre capable de **concevoir en limitant**
les matières premières **stratégiques** ou **préjudiciables** pour l'environnement



Des propriétés **inattendues** peuvent se manifester à toute **petite** échelle



Ductilité du Verre à **petite** échelle



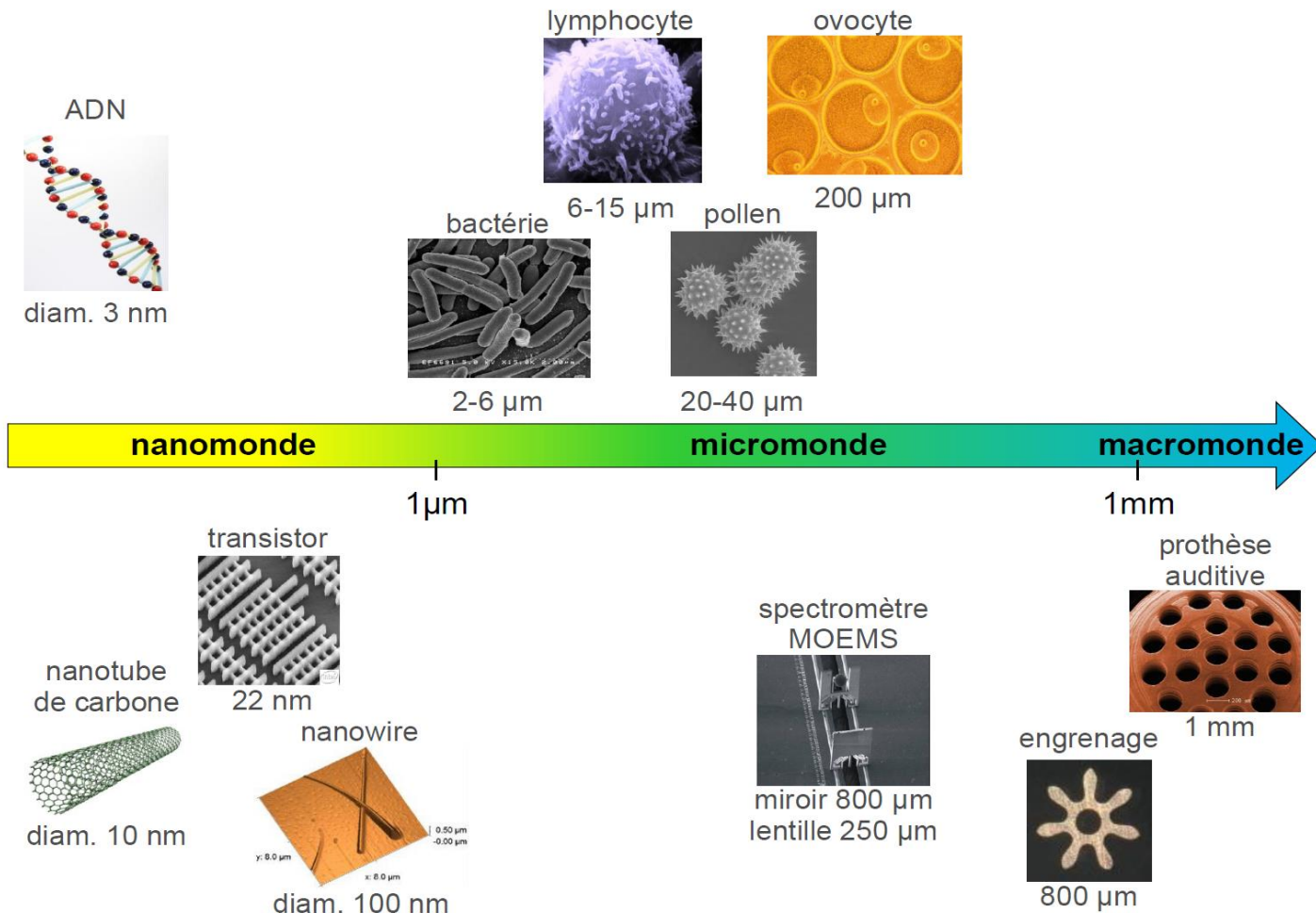
G. Kermouche, E. Barthel (2015)

Micro-pilier en verre de silice pure SiO_2



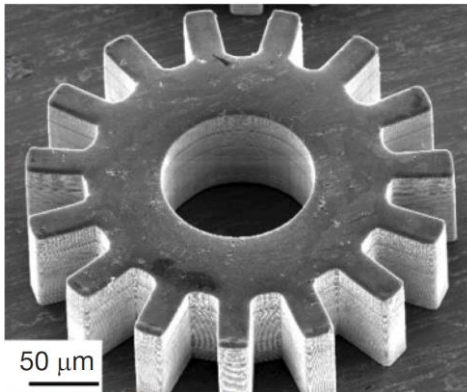
Des dispositifs de taille de plus en plus réduite

Les **petites** échelles sont de plus en plus **accessibles**,
y compris pour les **systèmes manufacturés**

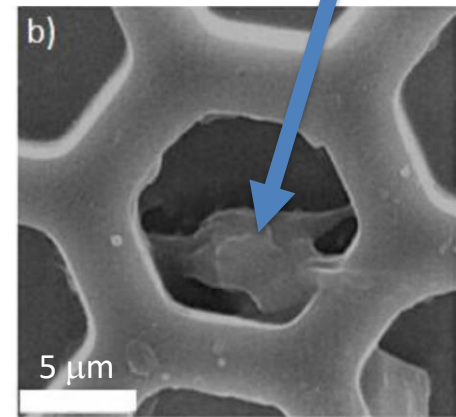
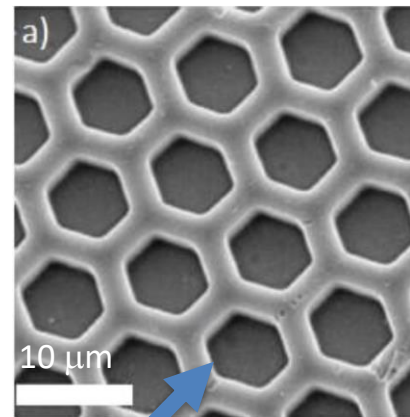
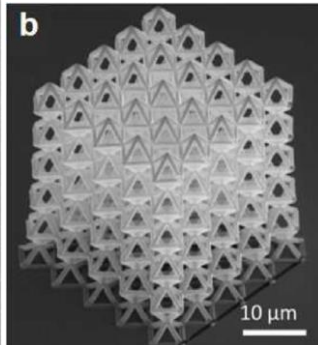


Exemples de Dispositifs miniatures

Moulage Thermoplastique

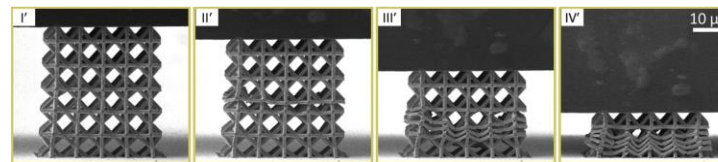


Verre Métallique
Massif (BMG)



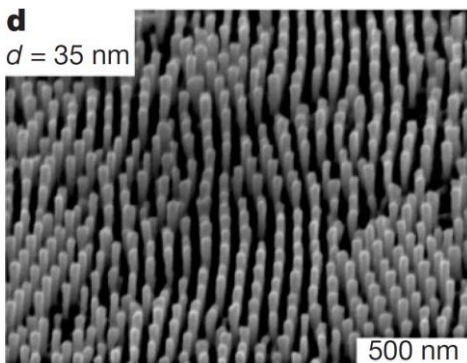
L.C. Taylor (2000)

Micropuits (gravure humide
de fibres optiques)

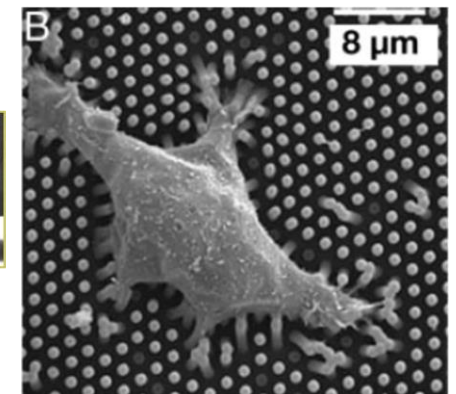


J.R. Greer et al. (2017)

- Effets de taille finie ?
- Hétérogénéités et interfaces ?
- Effets de tension de surface ?



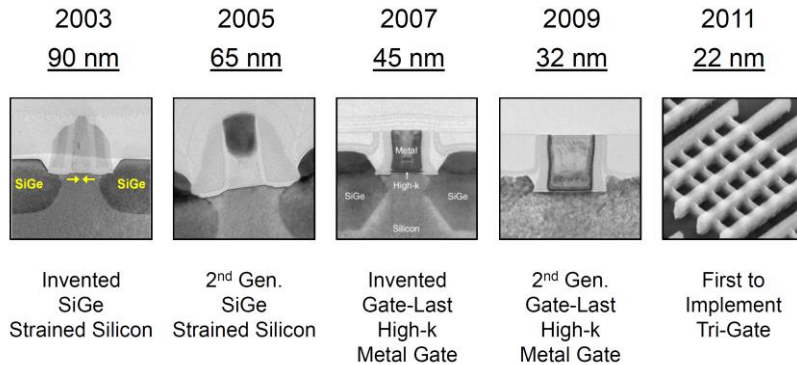
G. Kumar (2009)



Du Roure et al. (2005)

Mesure de la force de
traction des cellules

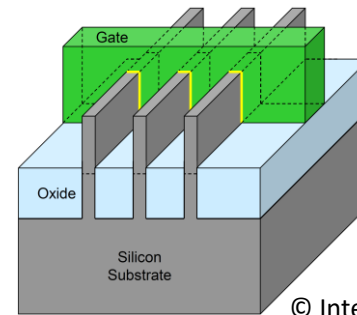
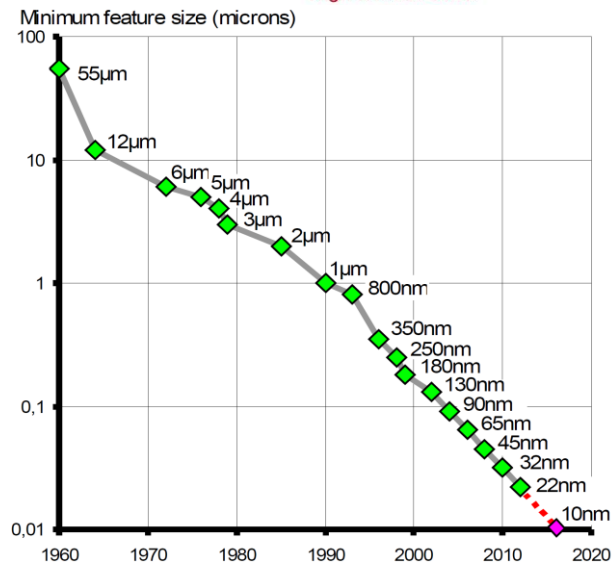
L'exemple des transistors MOSFET (1925)



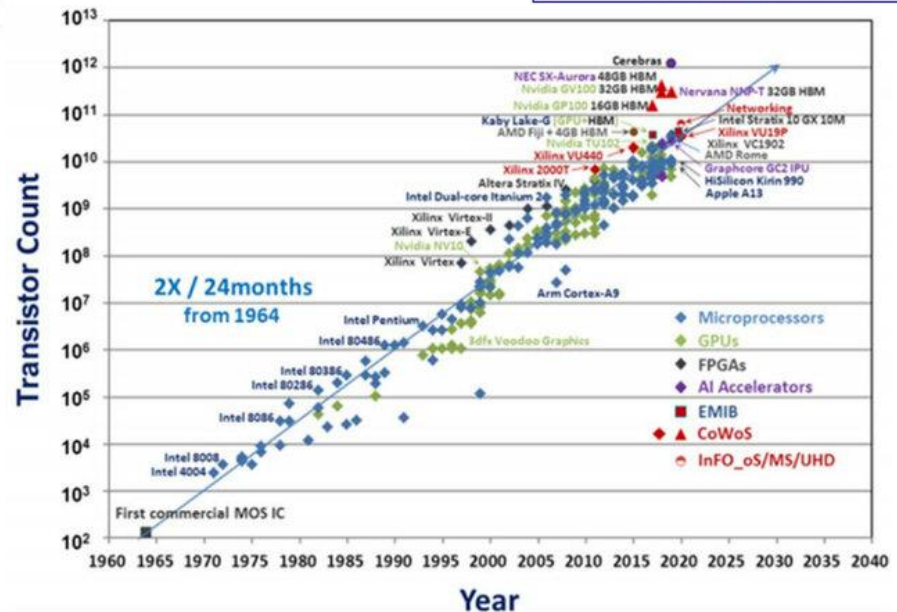
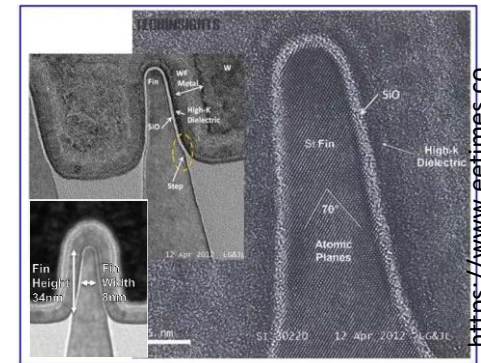
Strained Silicon

High-k Metal Gate

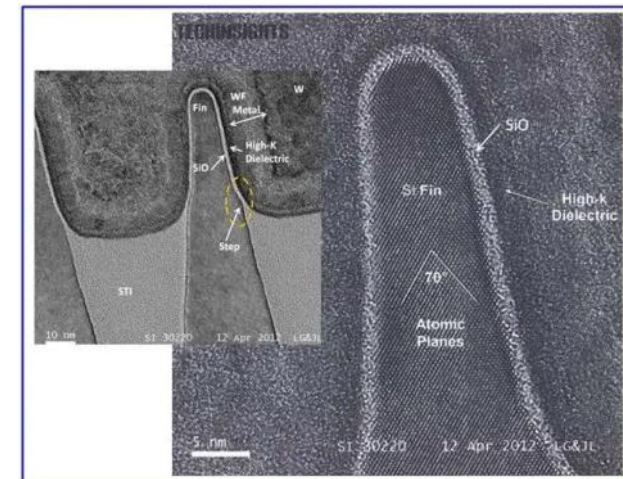
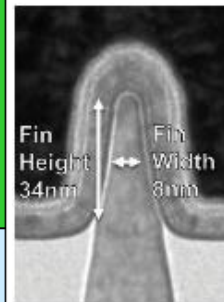
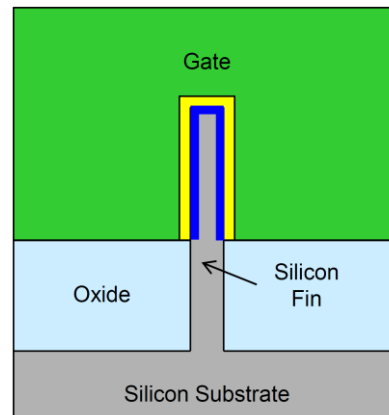
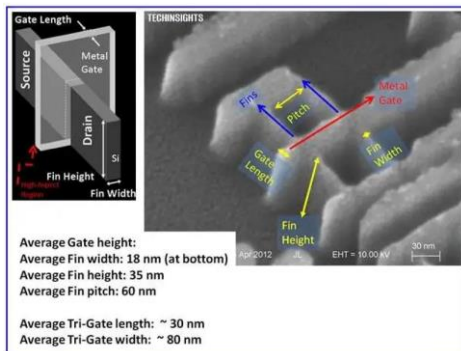
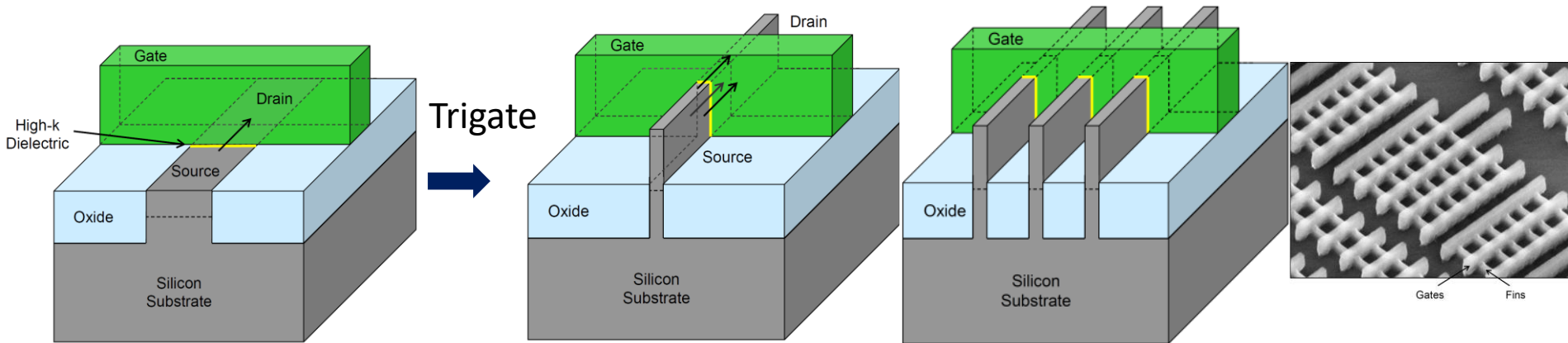
Tri-Gate



© Intel



Exemple 2: metal-oxide-semiconductor FET (MOSFET) Transistors (1925)

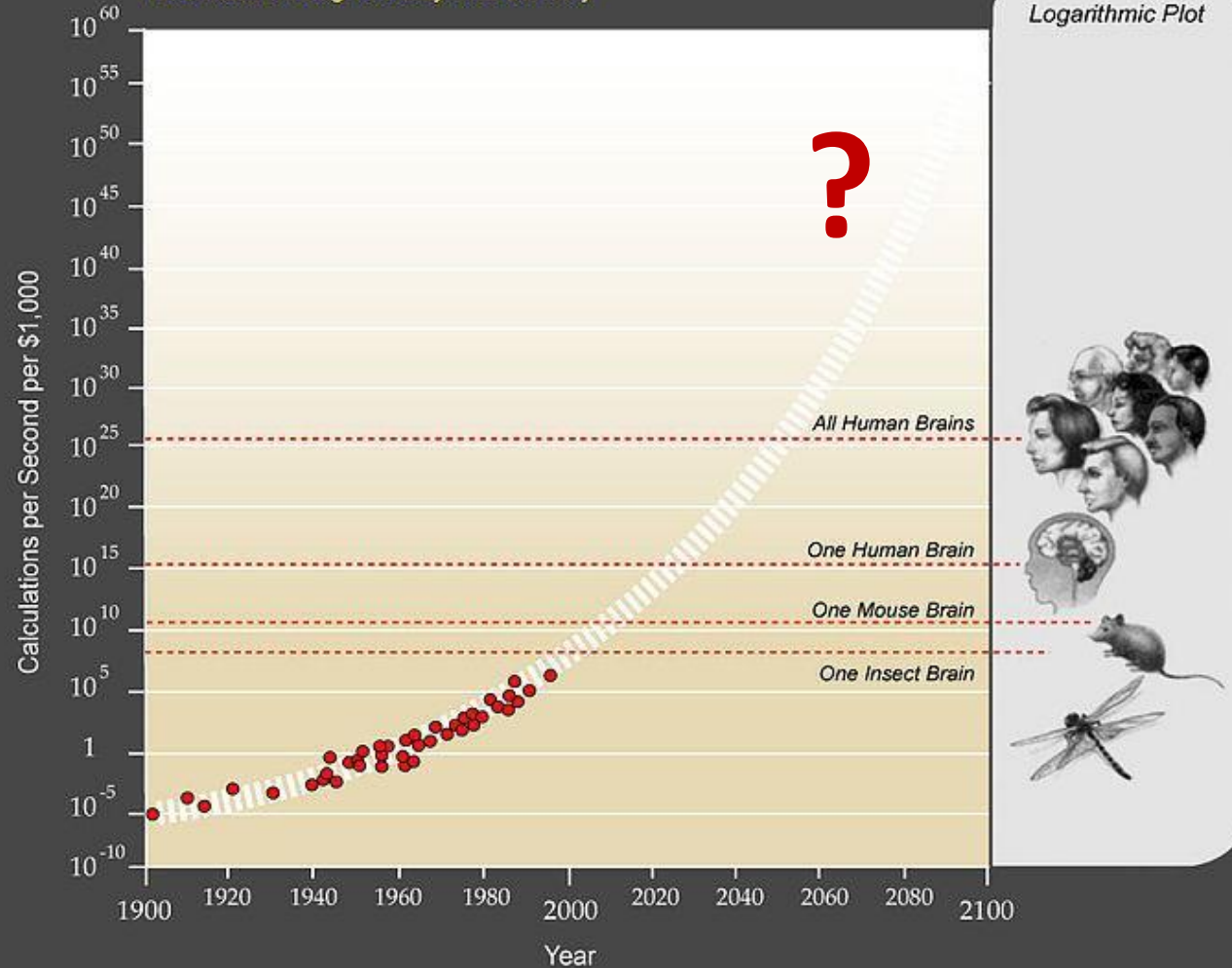


(2011)

High accuracy
CVD process

	22nm SoC	14nm SoC	22FFL
Fin Height	34nm	42nm	42nm*
Fin Width	8nm	8nm*	8nm*
Fin Pitch	60nm	42nm	45nm
Gate Pitch	90nm/108nm	70nm/84nm	108nm/144nm
Min. Metal Pitch	80nm	52nm	90nm
Cell Height	840nm	399nm	540nm

Exponential Growth of Computing Twentieth through twenty first century



Gestion de la Chaleur dans les nano-dispositifs

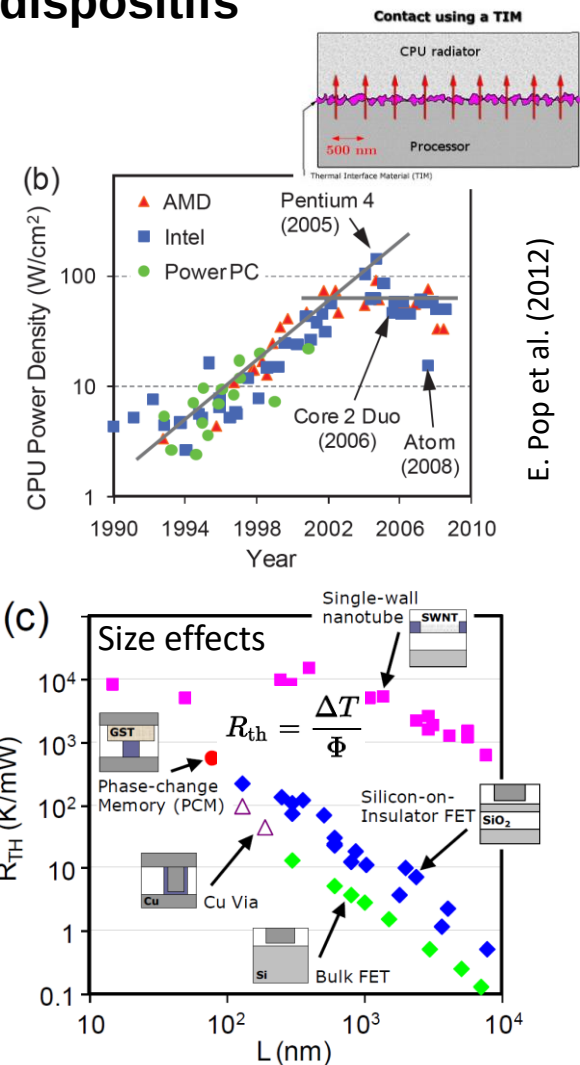
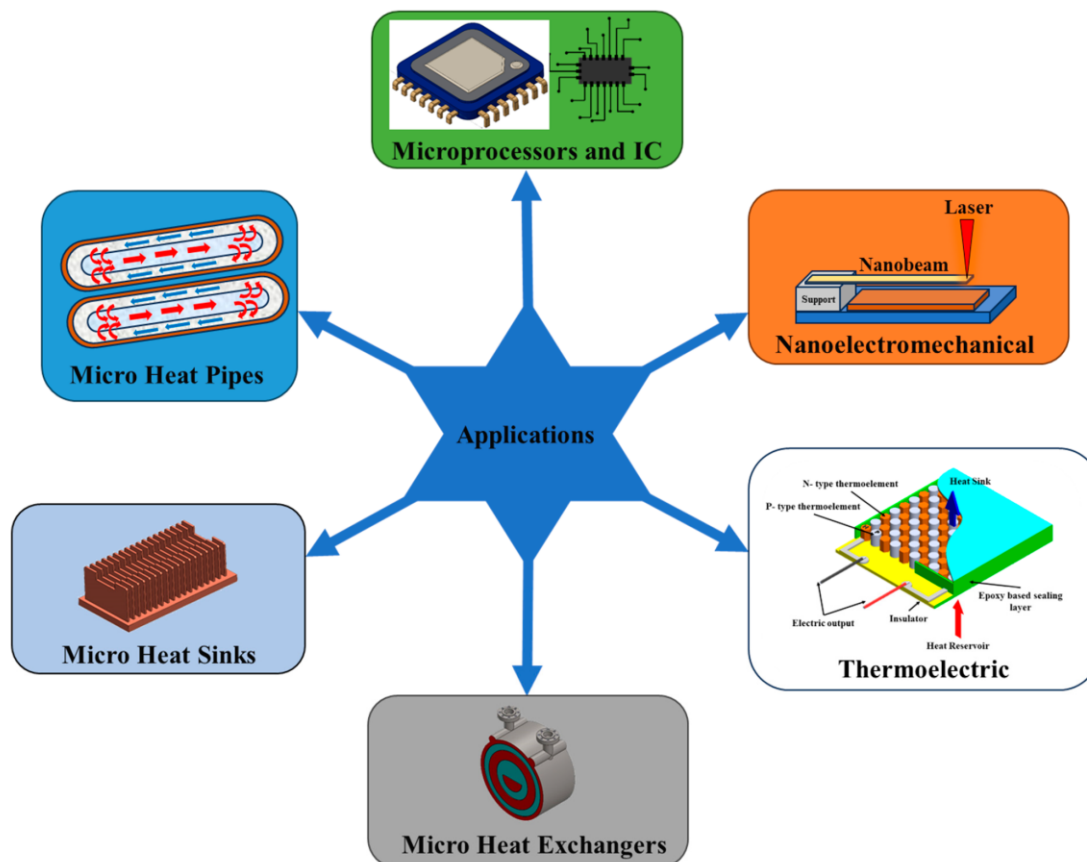


Figure 13. Applications of Micro/nanoscale heat transfer.

S. Chaterjee et al. (2023)

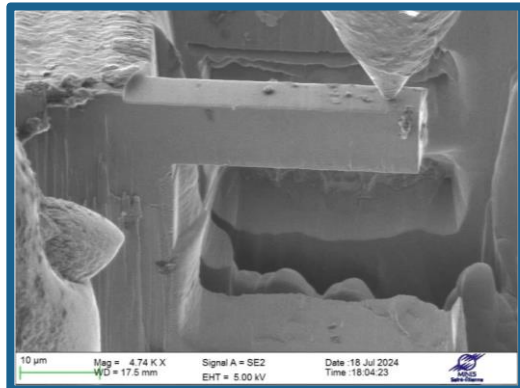
E. Pop et al. (2012)



Comment observer aux échelles nanométriques ?

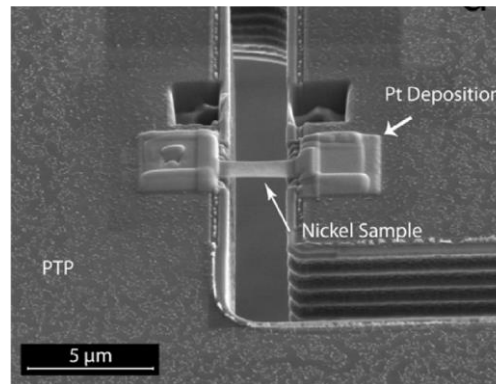
Dispositifs expérimentaux pour sonder la réponse mécanique aux petites échelles

MEB



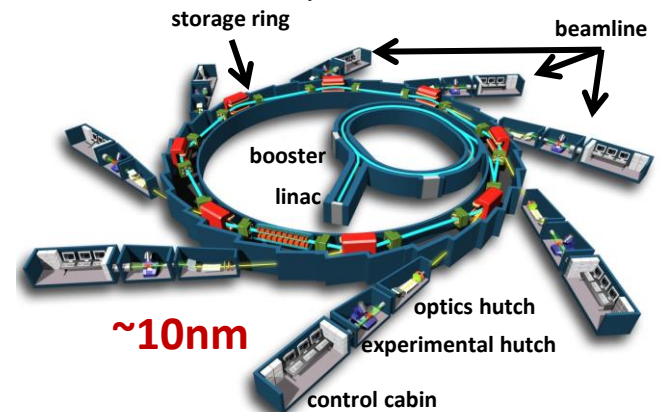
Y. Taïbi, M. Rusinowicz (2025)

MET

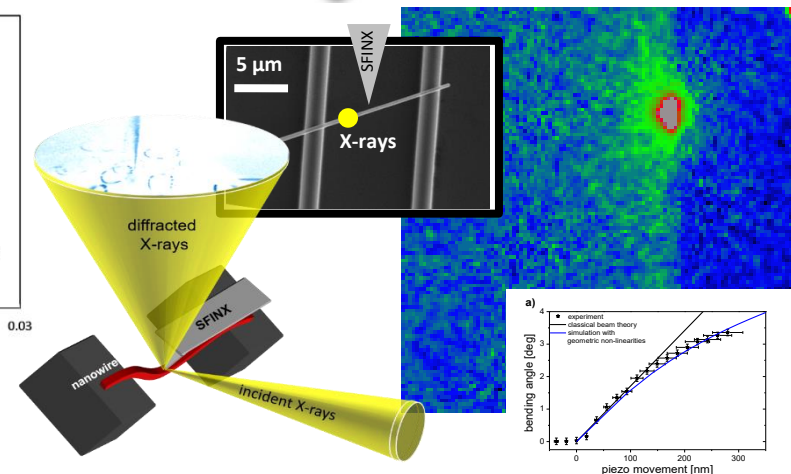
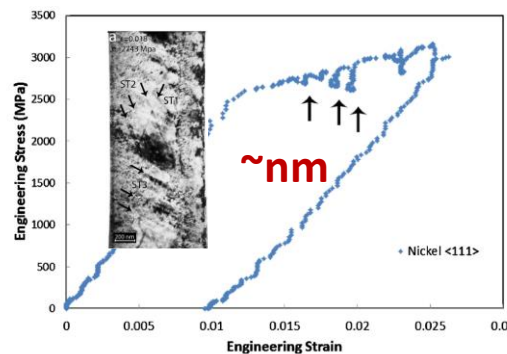
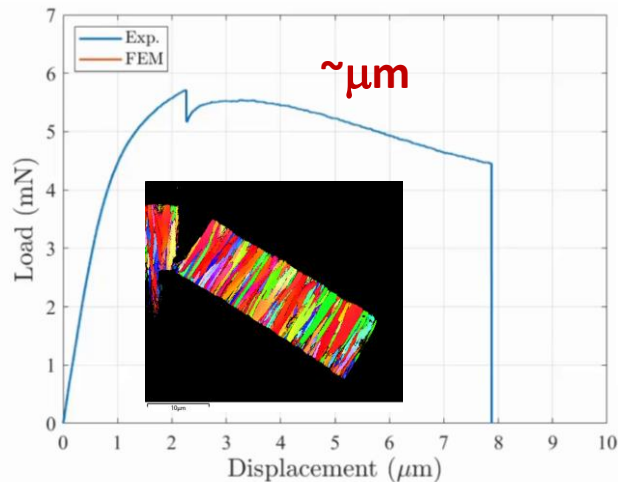


H. Idressi et al. (2017)

Synchrotron

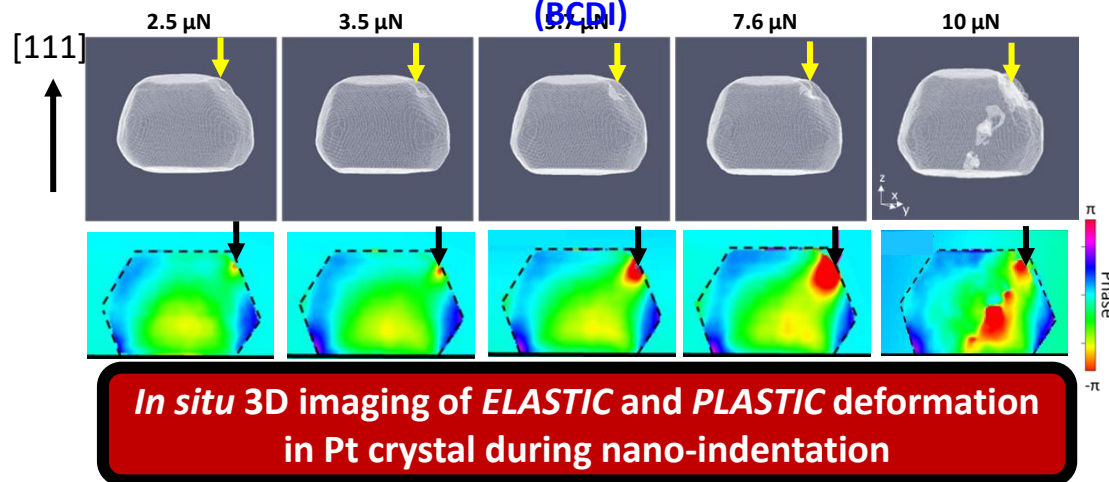


T.W. Cornelius et al. (2014)

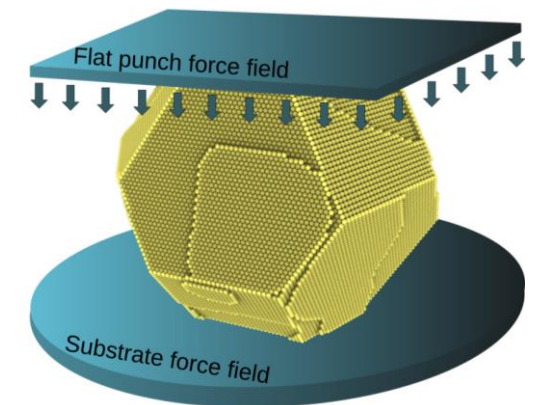


Dispositifs expérimentaux pour sonder la réponse mécanique aux petites échelles

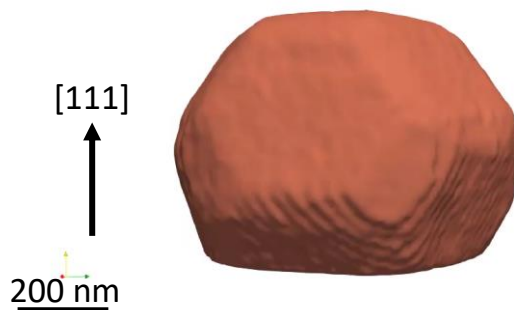
In situ nano-indentation coupled with Bragg coherent X-ray diffraction (BCD)



Molecular Dynamics Simulations (MD)

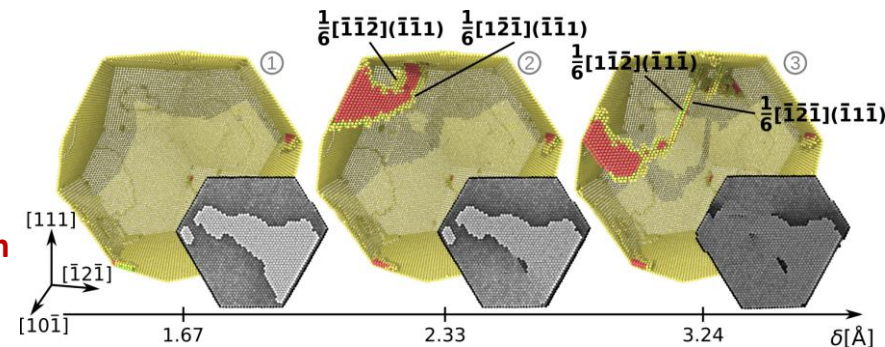


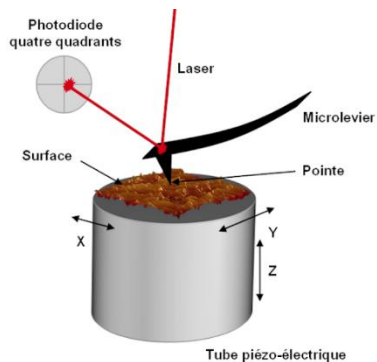
J. Amedeo et al., Nacta Mater. (2024)



Train of equidistant prismatic dislocation loops emerging from point of indentation oriented along [110]

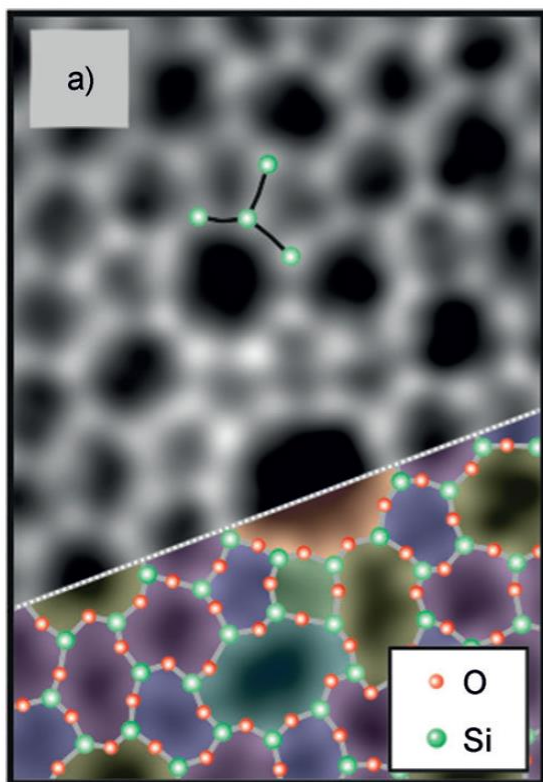
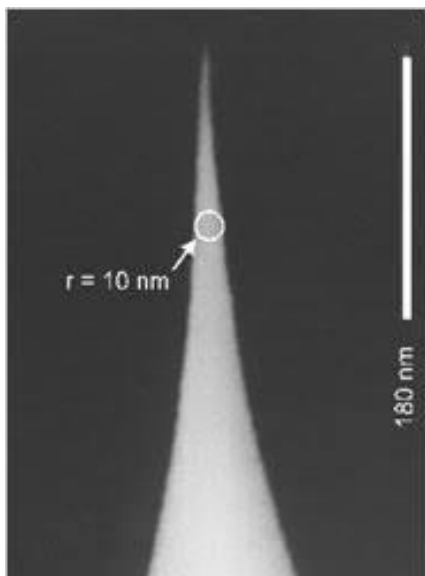
Spatial resolution: ~10 nm
Displacement field resolution: ~pm



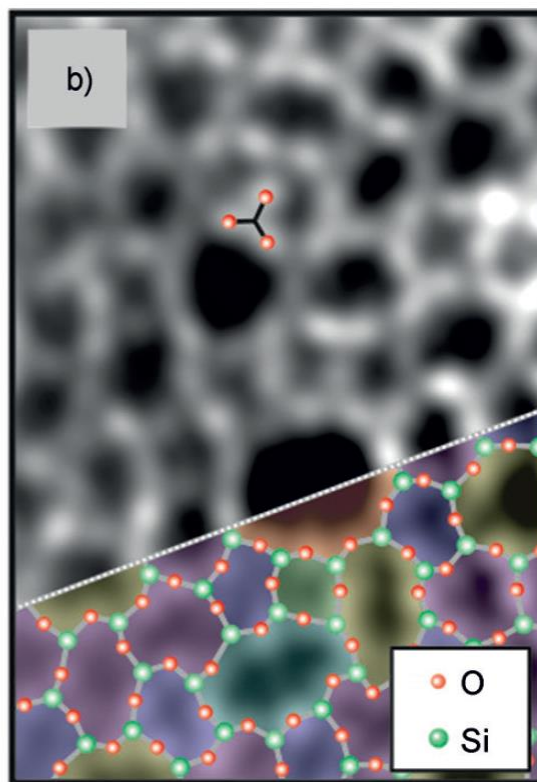


Visualisation à l'échelle atomique

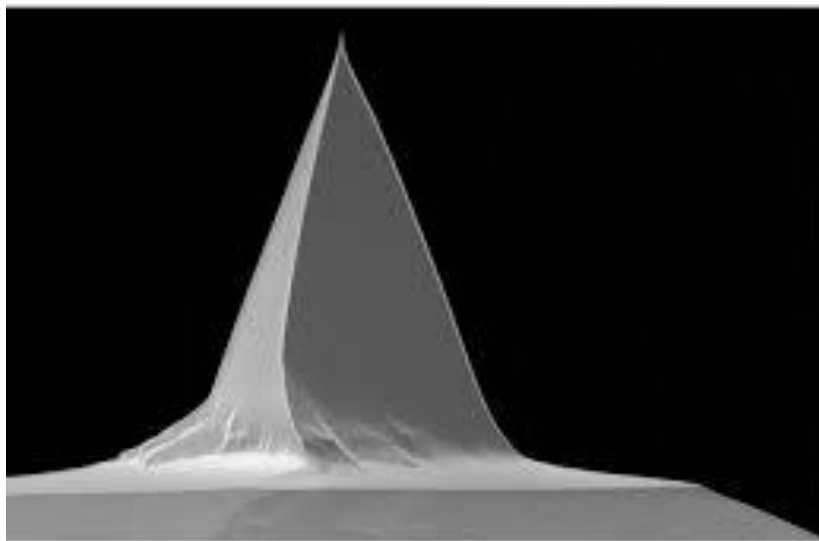
Imagerie atomique par une pointe d'AFM/STM



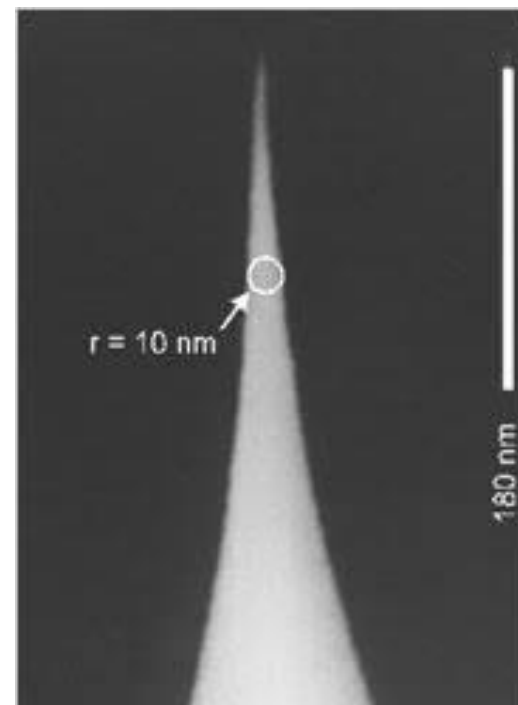
AFM

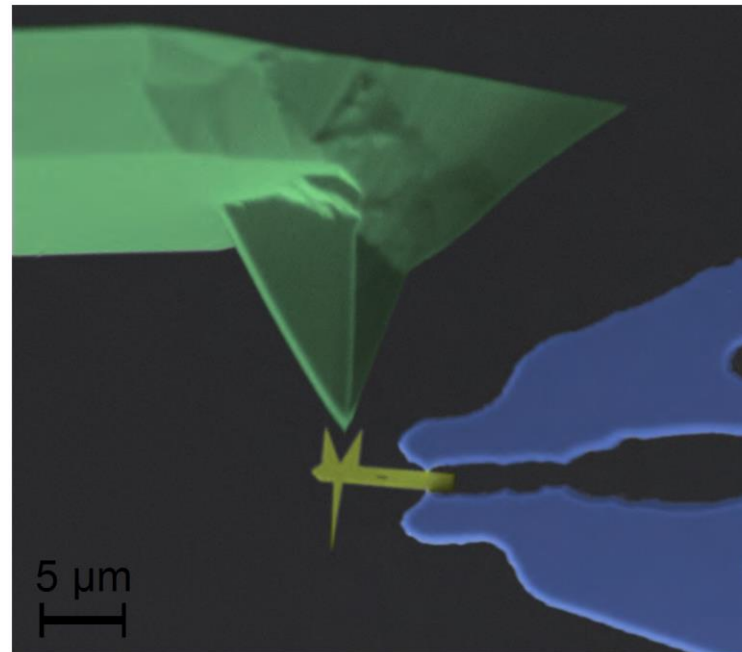


STM



Pointe Microscope à Force Atomique (AFM)





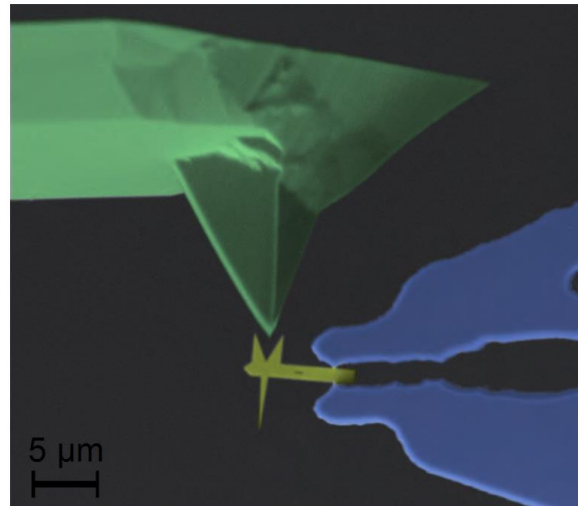
Assemblage d'une pointe de diamètre
nanométrique (120-150 nm) sur une pointe AFM
(Atomic Force Microscope)
Projet NanoBits, Oldenburg, Germany (2012)

Longueur Caractéristique:

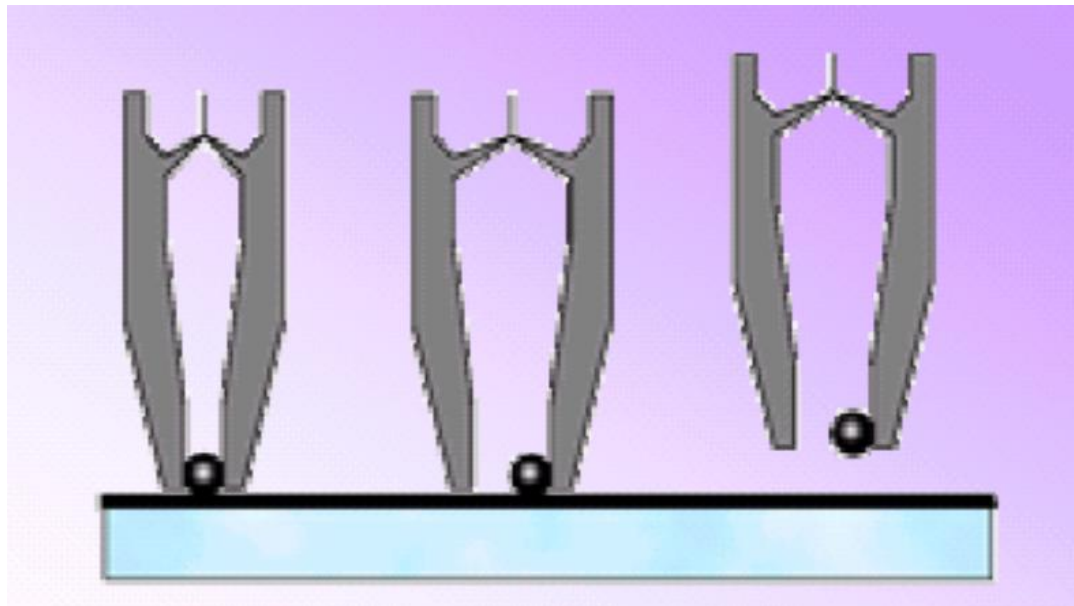
Approche qualitative pour un système sphérique de taille R

$$E_{Elasticité} \approx 0.1 ER^3 \quad \& \quad E_{Surface} \approx 4\pi\gamma R^2$$

$$E_{Elasticité} \approx E_{surface} \Leftrightarrow R \approx \frac{40\pi\gamma}{E} \approx 10 \text{ nm}$$



Adhésion



Microscopie à effet Tunnel

EFFET TUNNEL

Toutes les animations et explications sur
www.toutestquantique.fr

Binning
& Rohrer
1986

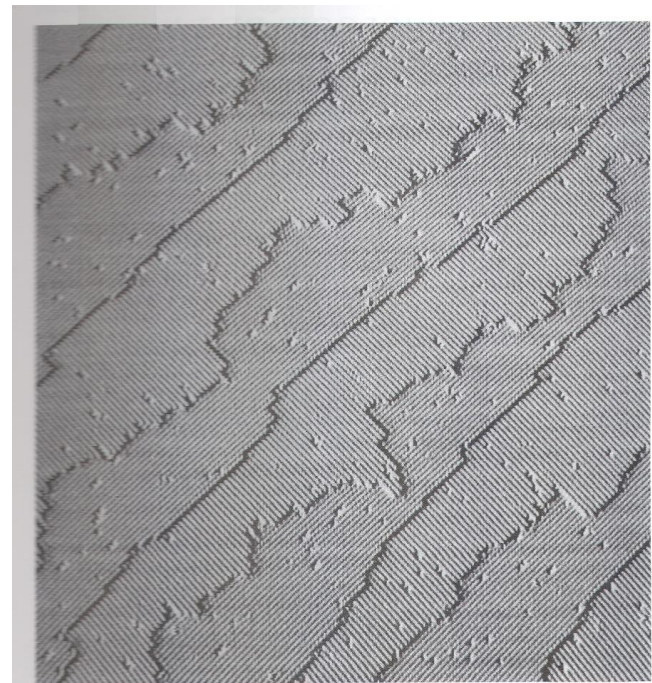


Figure 1.1. Marches [110] sur la face (001) du silicium. Largeur des terrasses : environ 100 Å. Remarquer l'alternance de marches d'allure différente (cf. chap. 9). Technique expérimentale : microscopie tunnel à balayage (STM). (Lagally et al. 1990, avec l'aimable autorisation des auteurs).

Plan du cours

- ➡ Définition des **grandeurs mécaniques** aux **échelles atomiques**
- ➡ Description et rôle de l'**Adhésion** aux petites échelles
- ➡ Initiation à la **Mécanique Quantique** et à l'**Effet Tunnel**



Plan du cours

- ➔ Définition des **grandeurs mécaniques** aux **échelles atomiques**
- ➔ Description et rôle de l'**Adhésion** aux petites échelles
- ➔ Initiation à la **Mécanique Quantique** et à l'**Effet Tunnel**



La matière est constituée d'atomes (1869)

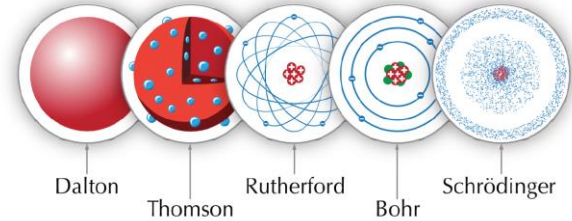


TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H Hydrogène 1,0																	2 He Hélium 4,0
3 Li Lithium 6,94	4 Be Béryllium 9,0																
11 Na Sodium 23,0	12 Mg Magnésium 24,3																
19 K Potassium 39,1	20 Ca Calcium 40,1	21 Sc Scandium 45,0	22 Ti Titane 47,9	23 V Vanadium 50,9	24 Cr Chrome 52,0	25 Mn Manganèse 54,9	26 Fe Fer 55,8	27 Co Cobalt 58,9	28 Ni Nickel 58,7	29 Cu Cuivre 63,5	30 Zn Zinc 65,4	31 Ga Gallium 69,7	32 Ge Germanium 72,6	33 As Arsenic 74,9	34 Se Sélénium 79,0	35 Br Brome 79,9	36 Kr Krypton 83,8
37 Rb Rubidium 85,5	38 Sr Strontium 87,6	39 Y Yttrium 88,9	40 Zr Zirconium 91,2	41 Nb Niobium 92,9	42 Mo Molybdène 95,9	43 Tc Technétium (98)	44 Ru Ruthénium 101,1	45 Rh Rhodium 102,9	46 Pd Palladium 106,4	47 Ag Argent 107,9	48 Cd Cadmium 112,4	49 In Indium 114,8	50 Sn Étain 118,7	51 Sb Antimoine 121,8	52 Te Tellure 127,6	53 I Iode 126,9	54 Xe Xénon 131,3
55 Cs Césium 132,9	56 Ba Baryum 137,3	57 La Lanthane 138,9	72 Hf Hafnium 178,5	73 Ta Tantale 180,9	74 W Tungstène 183,8	75 Re Rhenium 186,2	76 Os Osmium 190,2	77 Ir Iridium 192,2	78 Pt Platine 195,1	79 Au Or 197,0	80 Hg Mercure 200,6	81 Tl Thallium 204,4	82 Pb Plomb 207,2	83 Bi Bismuth 209,0	84 Po Polonium (209)	85 At Astate (210)	86 Rn Radon (222)
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)	89 Ac Actinium (227)	104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (266)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (269)	109 Mt Meitnerium (268)	110 Uun Ununillium (272)	111 Uuu Ununium (272)	112 Uub Unbium (277)		114 Uuq Ununquadium (289)	116 Uuh Unhassium (289)		118 Uuo Ununoctium (294)	

Numéro atomique

Symbole atomique

Z

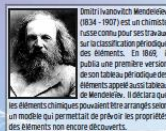
X

Nom

M

Famille

Masse molaire atomique (g.mol⁻¹)

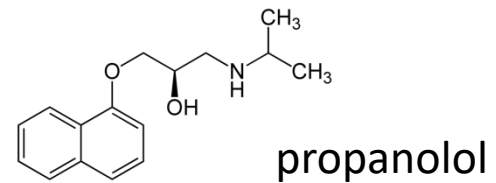
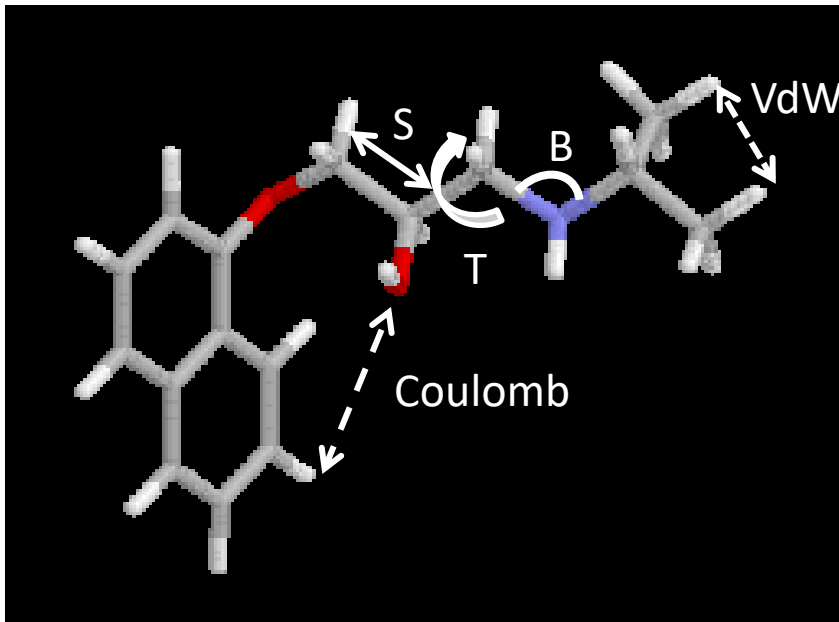


Dmitri Ivanovitch Mendeleïev (1834 - 1907) est un chimiste russe connu pour ses travaux sur la classification périodique des éléments. En 1869, il publia une première version d'un tableau périodique des éléments appelé aussi tableau de Mendeleïev. L'idée était que les éléments chimiques pouvaient être arrangés selon un modèle qui permettait de prévoir les propriétés des éléments non encore découverts.

58 Ce Cérium 140,1	59 Pr Praséodyme 140,9	60 Nd Néodyme 144,2	61 Pm Prométhium (145)	62 Sm Samarium 150,4	63 Eu Europium 152,0	64 Gd Gadolinium 157,4	65 Tb Terbium 158,9	66 Dy Dysprosium 162,5	67 Ho Holmium 164,9	68 Er Erbium 167,3	69 Tm Thulium 168,9	70 Yb Ytterbium 173,0	71 Lu Lutétium 175,0
90 Th Thorium 232,0	91 Pa Protactinium 231,0	92 U Uranium 238,0	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Américium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkélium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (254)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobélium (259)	103 Lw Lawrencium (260)

Éléments solides	Éléments gazeux	Éléments métalliques	Éléments non métalliques
Éléments métalliques	Éléments non métalliques	Éléments métalliques	Éléments non métalliques
Éléments métalliques	Éléments non métalliques	Éléments métalliques	Éléments non métalliques
Éléments métalliques	Éléments non métalliques	Éléments métalliques	Éléments non métalliques

Représentation empirique des énergies d'interaction



Molécule = Système Mécanique

$$E_{total} = \sum_{bonds} K_S (r - r_{eq})^2 + \sum_{angles} K_B (\theta - \theta_{eq})^2 + \sum_{diedrals} \frac{V_T}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)] + \sum_{i < j} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \dots \right]$$

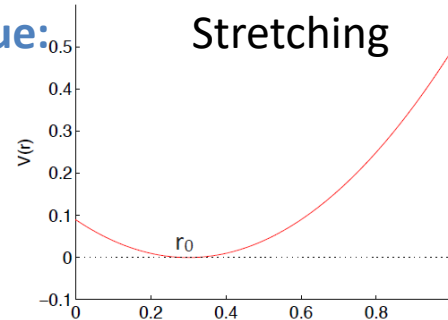
Stretching (S)	Bending (B)	Torsion (T)	Rep. VdW	Coulomb...
<i>Etirement</i>	<i>Flexion</i>			

+ couplages entre les forces.

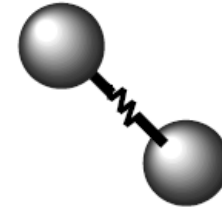
= description empirique

Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures

Interactions Harmonique:



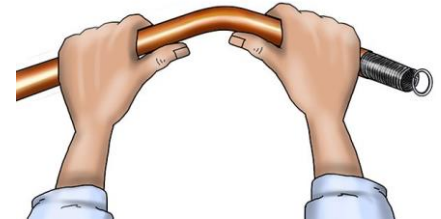
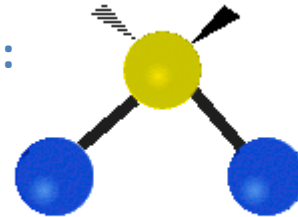
$$V_{ij} = A(r_{ij} - r_0)^2$$



Interactions fonction de l'angle de valence θ :

Bending

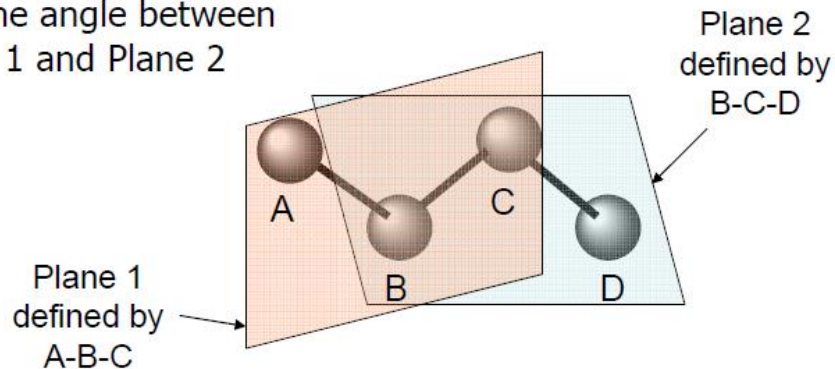
$$V(\theta) = k(\theta - \theta_0)^2$$



Interactions fonction de l'angle diedral ϕ :

Torsion

ϕ is the angle between
Plane 1 and Plane 2

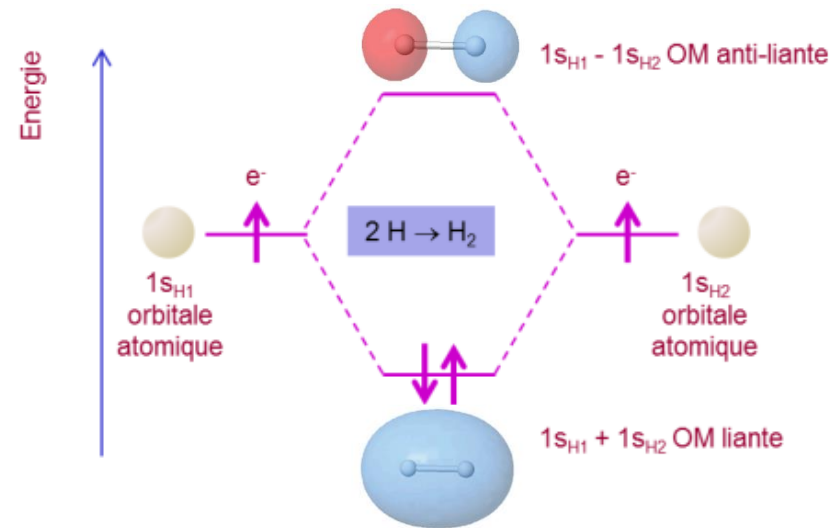
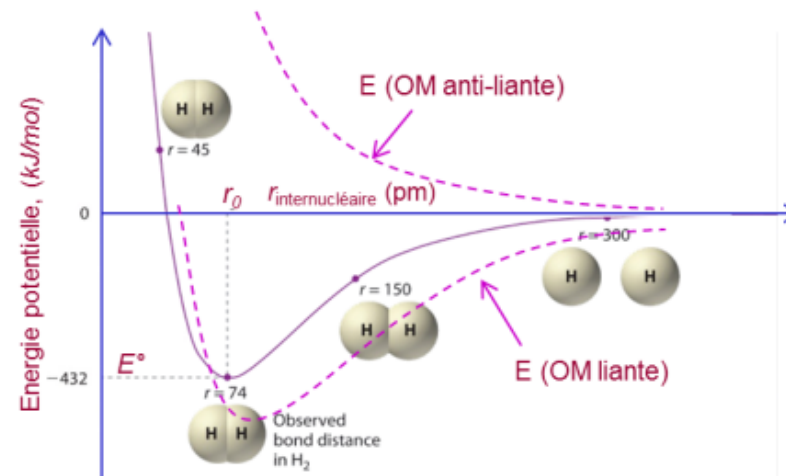


$$V(\phi) = V_0[1 + A \cos n\phi]$$

Min for $\phi = k \frac{\pi}{n}$

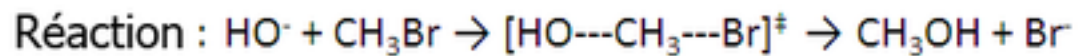
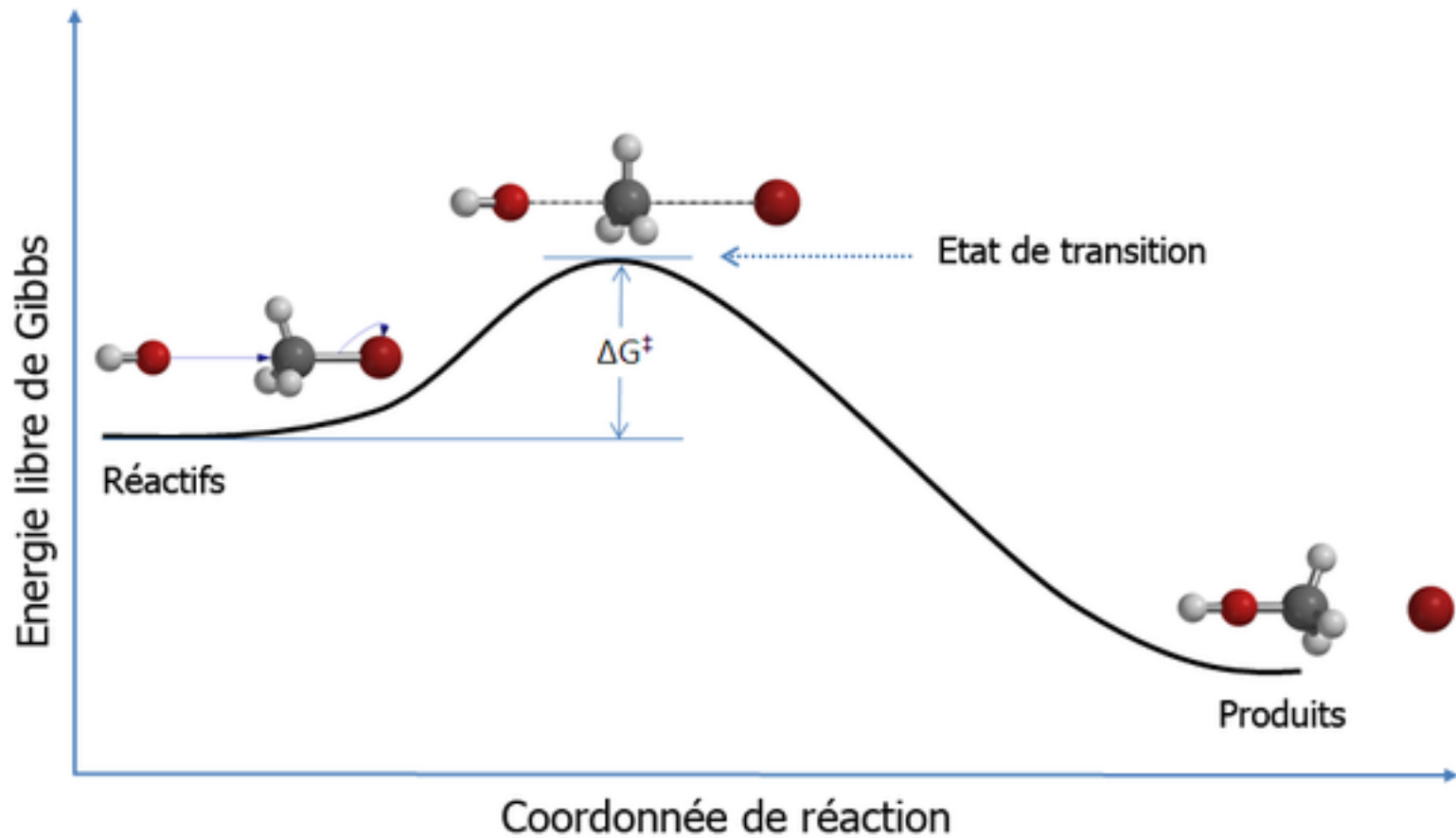
Max for $\phi = k \frac{2\pi}{n}$

Molécule H₂ et Energie de liaison: la liaison covalente





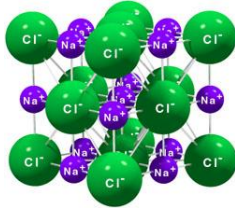
Energie d'activation: réactions chimiques



La liaison ionique

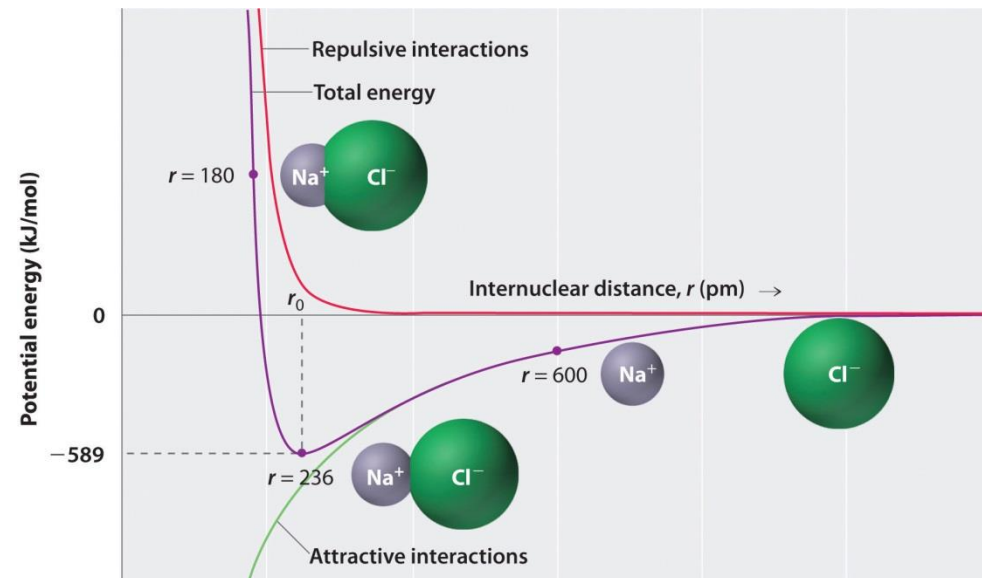
Liaison Ionique: charges électriques + intensité ~ 2 eV/at

Exemple: NaCl

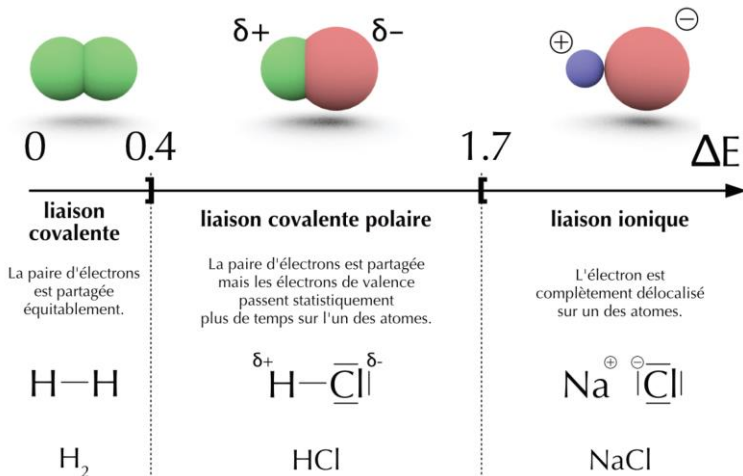


$$E_{NaCl} = E_i + E_{rep} + \frac{q_{Na} \cdot q_{Cl}}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{ij}}$$

$$E_i = +1,12eV$$



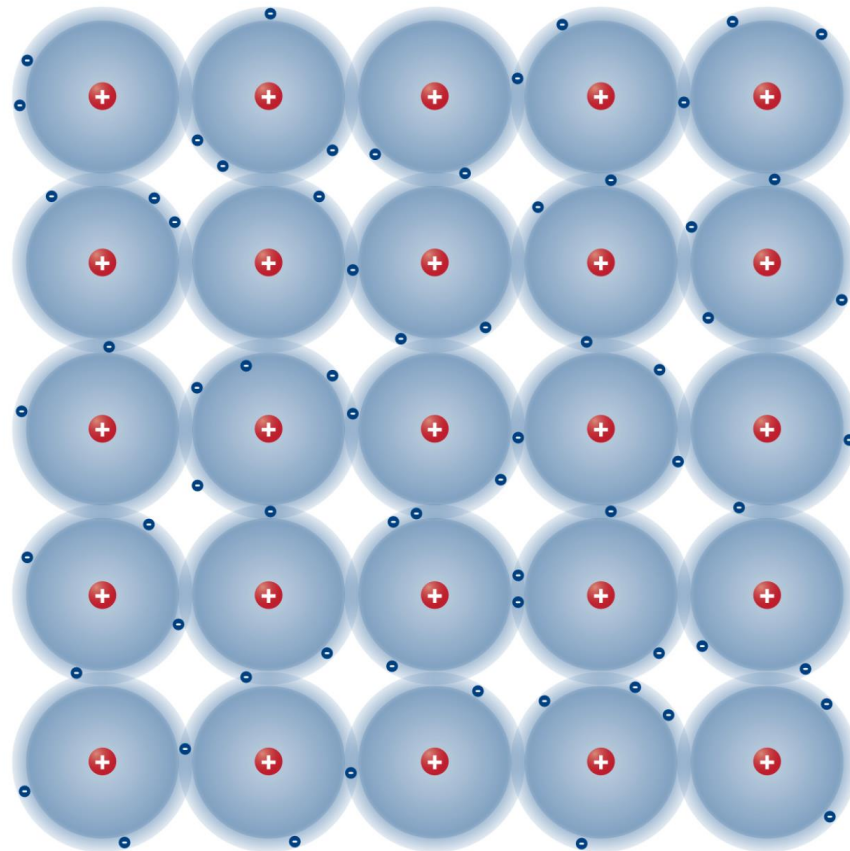
Liaisons ioniques et Electronégativité



Increasing electronegativity →																			
Decreasing electronegativity ↓											H 2.1								
	Li 1.0		Be 1.5												B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0
	Na 0.9		Mg 1.2												Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
	K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.9	Ni 1.9	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8		
	Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5		
	Cs 0.7	Ba 0.9	La-Lu 1.0-1.2	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.9	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2		
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.4	U 1.4	Np-No 1.4-1.3													

La liaison métallique

« Super liaison covalente »

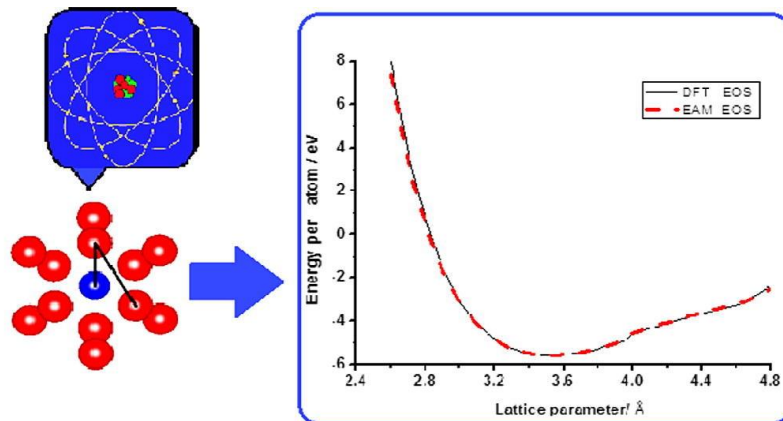


Exemple de description empirique de liaison métallique:

Potentiers « Embedded Atom Model » (EAM)

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

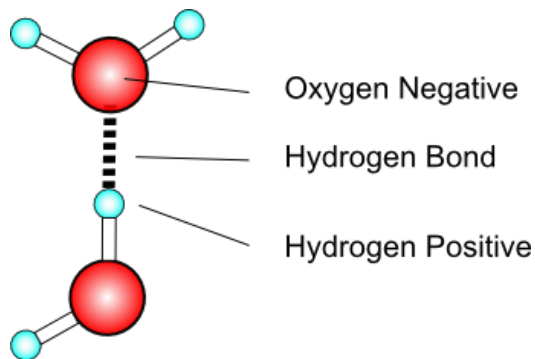
densité de charge pour tous les atomes j



E. Symianakis et al. (2017)

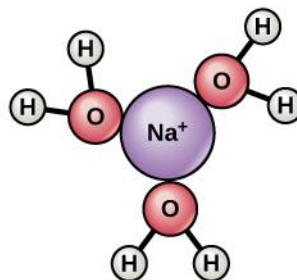
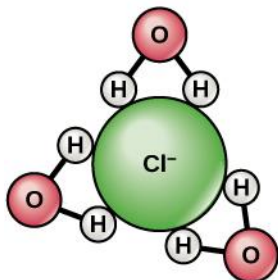
Les interactions dipolaires

Liaison Hydrogène: interaction dipôle-dipôle $\sim 0,25$ eV/at



$$E_{H_2O}(r) = E_{rep} - A \cdot \frac{p_1 \cdot p_2}{r^3}$$

Forces de Solvation: interaction ion-dipôle ~ 25 eV/at



$$E_{sol}(r) = E_{rep} - \frac{q \cdot p}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$E_{sol}(r) \propto \frac{B}{r^4} \left. \vphantom{\frac{B}{r^4}} \right\} \text{en tenant compte de l'agitation thermique}$$

La liaison de Van der Waals

Intéractions Van der Waals: interactions dipolaires instantannées ~ 0.01 eV/at

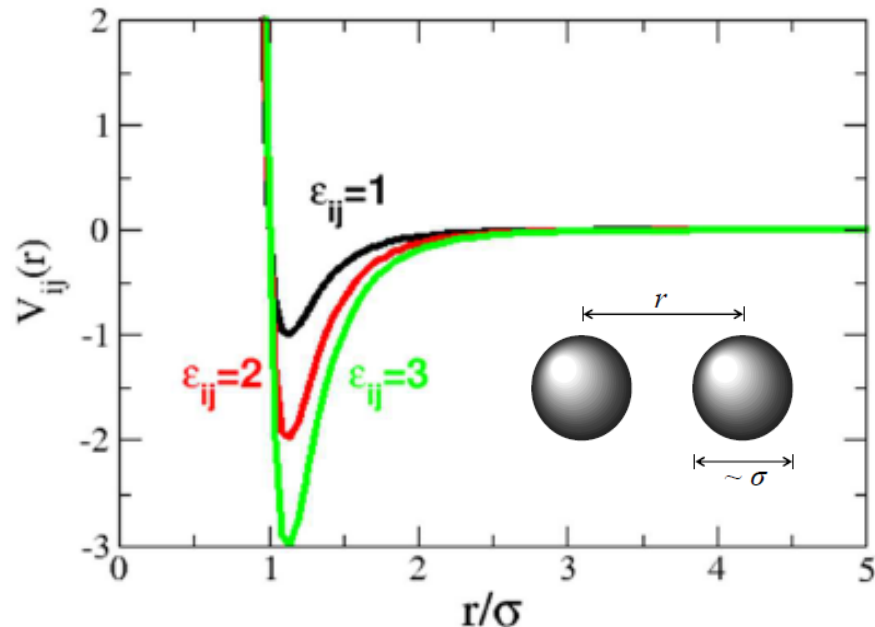
Lennard-Jones potential (pair potential)

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

- ☐ Repulsive in $1/r^{12}$
- ☐ Attractive in $-1/r^6$
- ☐ Defined by 2 parameters

Collision diameter σ_{ij}
Energy level ϵ_{ij}

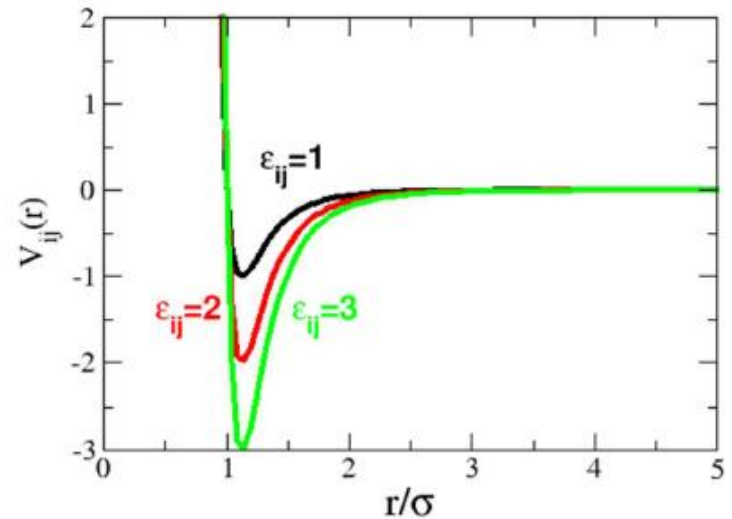
- ☐ Minimum found at $r/\sigma = 1.122$
- ☐ Typical cut-off at $r/\sigma = 2.5$ (avoid computing V_{ij} for all pairs)





Potentiel de Lennard-Jones:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$



Atome	$\epsilon/k_B[K]$	$\sigma[pm]$
He	10.2	258
Ne	35.7	279
Ar	124	342
CH	137	382

Modélisation microscopique des grandeurs mécaniques

Expression de **l'énergie de l'ensemble des particules**:

Théorie des Solides de Cauchy-Born (1915)

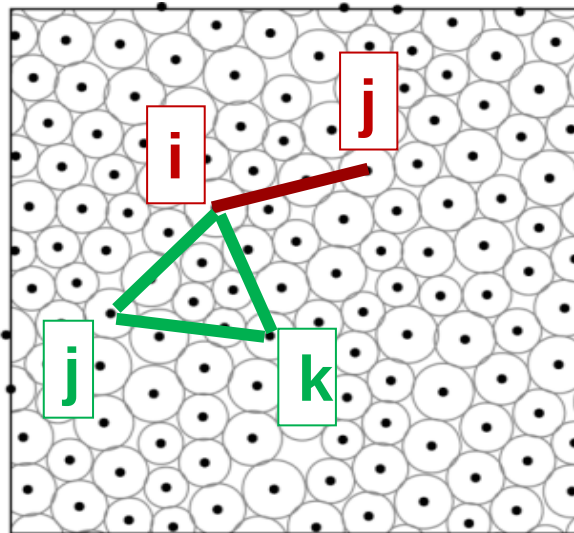
$$E_{\text{total}}(\{\underline{r}_i\}) = \sum_{(i,j)} E_{ij}(\underline{r}_{ij}) + \sum_{(i,j,k)} E_{ijk}(\underline{r}_{ij}, \underline{r}_{jk}, \underline{r}_{ik}) + \dots$$

$$= E_{\text{total}}(\{\underline{r}_{ij}\})$$

ne dépend que des
distance relatives r_{ij}

Interactions 2-corps
(Modèle de Cauchy)
Ex. Lennard-Jones
Mousses
Modèle BKS pour Silice

Int. 3-corps
Ex. Silicium



N particules
D dimensions

N.D paramètres
-D(D+1)/2 translations et rotations rigides

N.D -D(D+1)/2 distances indépendantes

Théorie Classique de l'Elasticité:

$$\delta\pi = \underline{\underline{\sigma}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \dots$$

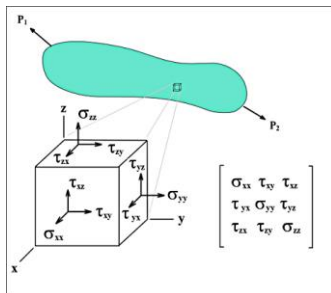
Tenseur de déformations linéarisé $\varepsilon_{\alpha\beta} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right)$

Tenseur de contraintes

$$\sigma_{ij} \equiv \frac{\partial \pi}{\partial \varepsilon_{ij}} \approx \sigma_{ij}^0 + \sum_{k,l} C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl}$$

Equations du mouvement:

$$\rho \frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial t^2}(\underline{r}) = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{f}$$



Description à l'échelle atomique:

$$E(\{\underline{r}_{ij}\}) = \sum_{(i,j)} E_{ij}(\underline{r}_{ij}) + \sum_{(i,j,k)} E_{ijk}(\underline{r}_{ij}, \underline{r}_{jk}, \underline{r}_{ik}) + \dots$$

Interactions à 2-corps
(modèle de Cauchy)
Ex. Lennard-Jones
mousses
BKS modèle Silice

inter. à 3-corps
Ex. Silicium

Equations du mouvement sur chaque particule:

$$m_i \cdot \frac{\partial^2 \underline{u}_{\alpha}}{\partial t^2}(\underline{r}_i) = - \frac{\partial E_{total}}{\partial r_{i\alpha}} \approx - \sum_j M_{ij}^{\alpha\beta} \cdot \underline{u}_{\beta}(\underline{r}_j) + f_{\alpha}(\underline{r}_i)$$

$$\underline{u}(\underline{r}_i) \equiv \underline{r}_i - \underline{r}_i^0 \quad \text{déplacement}$$



Modélisation **microscopique** des grandeurs mécaniques:

Expression des **forces** locales

Force interne exercée sur l'atome **i**: $\underline{f}_i(\{\underline{r}\}) \equiv -\frac{\partial E_{\text{total}}(\{\underline{r}\})}{\partial \underline{r}_i} = \sum_j \underline{f}_{ij}(\{\underline{r}\})$

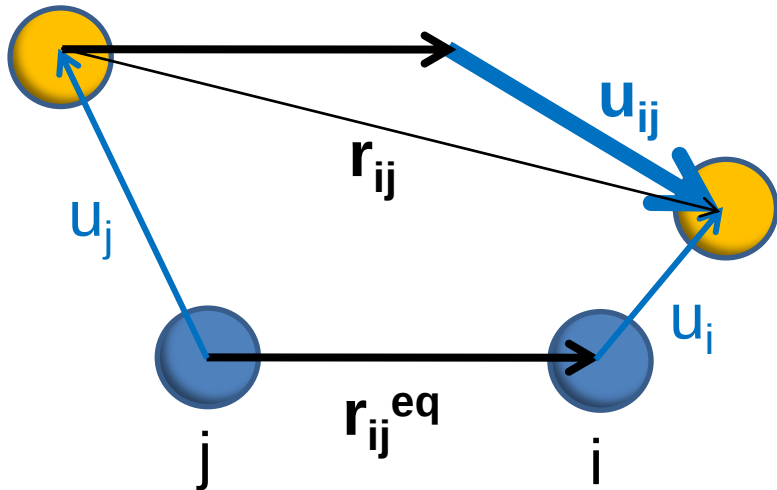
Force de l'atome **j** sur l'at. **i**: $\underline{f}_{ij}(\{\underline{r}\}) \equiv -\frac{\partial E_{\text{total}}(\{\underline{r}\})}{\partial \underline{r}_{ij}}$ avec $\underline{r}_{ij} \equiv \underline{r}_i - \underline{r}_j$

$$= -T_{ij}(\{\underline{r}\}) \frac{r_{ij}}{r_{ij}} \text{ et } T_{ij}(\{\underline{r}\}) \equiv \frac{\partial E_{\text{total}}(\{\underline{r}\})}{\partial r_{ij}}$$

Tension de la liaison (i,j)
dans la configuration $\{\underline{r}\}$

Modélisation **microscopique** des grandeurs mécaniques:

Déplacements et déformations:



Développement des déplacements

$$\underline{r}_{ij}^{eq} \equiv \underline{r}_i - \underline{r}_j$$

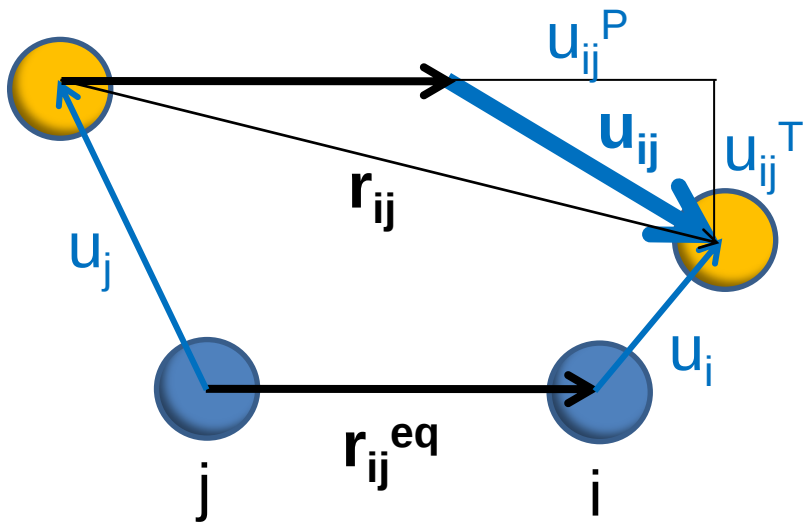
$$\begin{aligned} \underline{u}_i &= \underline{u}(\underline{r}_i^{eq}) = \underline{u}(\underline{r}_j^{eq} + \underline{r}_{ij}^{eq}) \\ &\approx \underline{u}(\underline{r}_j^{eq}) + (\underline{r}_{ij}^{eq} \cdot \underline{\nabla}) \underline{u}(\underline{r}_j^{eq}) \\ &\approx \underline{u}\left(\frac{\underline{r}_i^{eq} + \underline{r}_j^{eq}}{2}\right) + \left(\frac{\underline{r}_i^{eq} - \underline{r}_j^{eq}}{2} \cdot \underline{\nabla}\right) \underline{u}\left(\frac{\underline{r}_i^{eq} + \underline{r}_j^{eq}}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\approx \underline{u}(\underline{r}_j^{eq}) + (\underline{r}_{ij}^{eq} \cdot \underline{\nabla}) \underline{u}\left(\frac{\underline{r}_i^{eq} + \underline{r}_j^{eq}}{2}\right)$$

Modélisation **microscopique** des grandeurs mécaniques:

Déplacements et déformations:

$$\underline{u}_{ij} \equiv \underline{u}_i - \underline{u}_j \approx (\underline{r}_{ij}^{eq} \cdot \underline{\nabla}) \underline{u} \left(\frac{\underline{r}_i^{eq} + \underline{r}_j^{eq}}{2} \right) \approx \left(\sum_{\alpha} r_{ij}^{eq, \alpha} \partial_{\alpha} \right) \underline{u}(\underline{r})$$



$$\underline{u}_{ij} = \underline{u}_{ij}^P + \underline{u}_{ij}^T$$

$$\underline{u}_{ij}^P = \underline{u}_{ij} \cdot \frac{\underline{r}_{ij}^{eq}}{r_{ij}^{eq}} = (\underline{r}_{ij}^{eq} \cdot \underline{\nabla}) \underline{u} \cdot \frac{\underline{r}_{ij}^{eq}}{r_{ij}^{eq}}$$

$$= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{r_{ij}^{eq, \alpha} r_{ij}^{eq, \beta}}{r_{ij}^{eq}} \partial_{\alpha} u^{\beta}(\underline{r}^{eq})$$

$$\underline{u}_{ij}^P = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{r_{ij}^{eq, \alpha} r_{ij}^{eq, \beta}}{r_{ij}^{eq}} \varepsilon_{\alpha\beta}$$

Lien
déplacement
relatif /
déformations

Développement au 1^{er} ordre de l'énergie: contraintes locales:

$$\begin{aligned}
 E_{\text{total}}(\{\underline{r}_i\}) &= E_{\text{total}}(\{\underline{r}_i^{eq}\}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial r_{ij}} \underline{u}_{ij} + \dots \\
 &= E_{\text{total}}(\{\underline{r}_i^{eq}\}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}^{eq}}{r_{ij}^{eq}} \underline{u}_{ij} + \dots \\
 &= E_{\text{total}}(\{\underline{r}_i^{eq}\}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j T_{ij} u_{ij}^P + \dots \\
 &= E_{\text{total}}(\{\underline{r}_i^{eq}\}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j T_{ij} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}} \varepsilon_{\alpha\beta} + \dots
 \end{aligned}$$

A comparer avec: $E_{\text{total}} = \iiint dV \underline{\underline{\sigma}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \dots$

Développement au 1^{er} ordre de l'énergie: **contraintes** locales:

$$E_{\text{total}}(\{\underline{r}_i\}) = E_{\text{total}}(\{\underline{r}_i^{eq}\}) + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_i \sum_j \frac{1}{2} T_{ij} \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}} \varepsilon_{\alpha\beta} + \dots$$

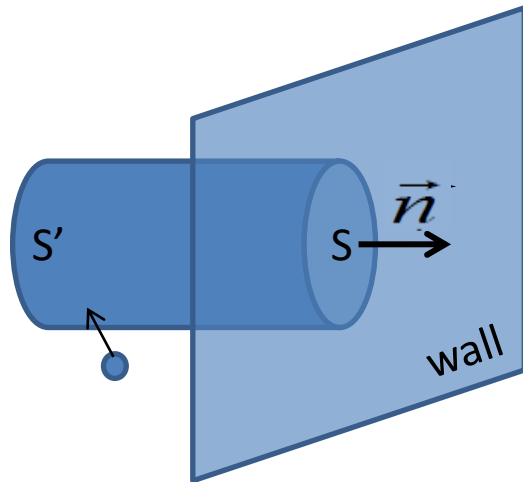
A comparer avec: $E_{\text{total}} = \iiint dV \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sigma^0_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} + \dots$

$$\Rightarrow \sum_i \iiint_{V_i} \sigma^0_{\alpha\beta}(\underline{r}) dV = \sum_i \sigma^0_{\alpha\beta}(i) \cdot V_i = \sum_{i,j} \frac{1}{2} T_{ij} \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}}$$

Contrainte locale: $\sigma^0_{\alpha\beta}(i) \equiv \frac{1}{V_i} \sum_j \frac{1}{2} T_{ij} \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}} \quad (Pa)$

Volume de Voronoï

Rappel: Théorie cinétique des gaz, contrainte d'origine cinétique



À l'intérieur de S' : centre de masse fixé $\sum_i m_i \vec{v}_i = \vec{0}$

Conservation des moments (quantité de mouvement):

$$\Delta \sum_i m_i \vec{v}_i = \vec{0} = \vec{F}_{wall \rightarrow gas} dt + \vec{F}_{inter} dt + d\vec{p}_{cin}$$

pression
$$P = \frac{\vec{F}_{gas \rightarrow wall} \cdot \vec{n}}{S} = \frac{1}{S} \frac{d\vec{p}_{cin} \cdot \vec{n}}{dt} + \frac{\vec{F}_{inter} \cdot \vec{n}}{S}$$

Pression cinétique, P_{cin}
(flux, convection, mouvement des particles)

Pression dynamique, P_{dyn}
(interactions)

$$d\vec{p}_{cin} \cdot \vec{n} = \int dN_{new}(\vec{v}) m \vec{v} \cdot \vec{n} \text{ with } dN_{new}(\vec{v}) = \frac{N}{V} S \vec{v} \cdot \vec{n} dt dP_{proba}(\vec{v})$$

$$d\vec{p}_{cin} \cdot \vec{n} = \frac{NS}{V} \int dP_{proba}(\vec{v}) m (\vec{v} \cdot \vec{n})^2 dt = \frac{NS}{V} \langle m v_x^2 \rangle dt = P_{cin} S dt$$

$$\Rightarrow P_{cin} = \frac{1}{3} \frac{N}{V} \langle m \|\vec{v}\|^2 \rangle = \frac{N}{V} k_B T \Rightarrow \left\langle \frac{1}{2} m \|\vec{v}\|^2 \right\rangle = \frac{3}{2} k_B T \quad (\Rightarrow E_c = 3(N-1) \frac{k_B T}{2})$$

cf. gaz parfait

Définition Température

$$P_{dyn} = \frac{-1}{6V} \sum_{i,j,\alpha} T_{ij} \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} \cdot r_{ij}^{eq,\alpha}}{r_{ij}^{eq}}$$

=0 si gaz parfait

Expression globale des **contraintes** locales:

➔ Contrainte dynamique locale:

$$\sigma^0_{\alpha\beta}(i) \equiv \frac{1}{V_i} \sum_j \frac{1}{2} T_{ij} \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}} \quad (Pa)$$

Volume de Voronoï

➔ Contrainte cinétique locale:

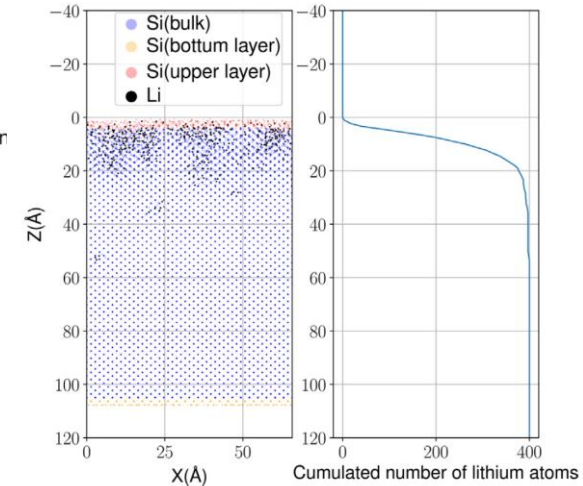
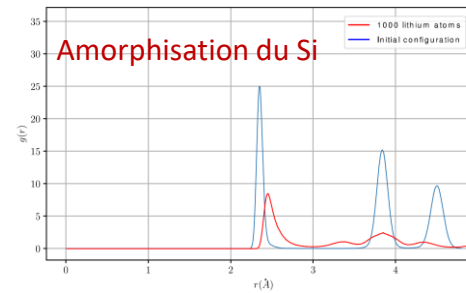
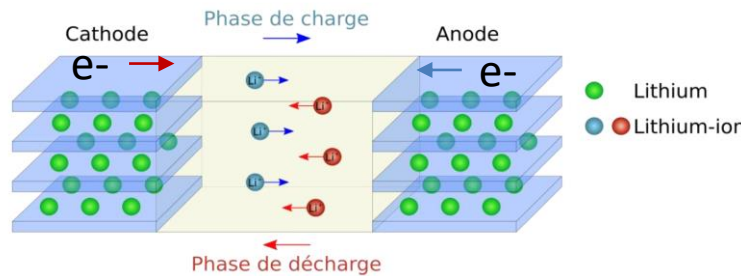
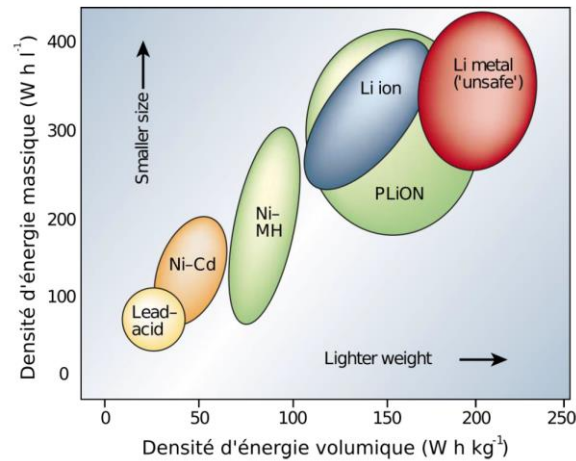
$$\sigma^{cin}_{\alpha\beta}(i) \equiv -\frac{m_i}{V_i} v_i^\alpha v_i^\beta \quad (Pa)$$

$$\sigma^{tot}_{\alpha\beta}(i) \equiv \sigma^0_{\alpha\beta}(i) + \sigma^{cin}_{\alpha\beta}(i) = \frac{1}{V_i} \sum_j \frac{1}{2} T_{ij} \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} r_{ij}^{eq,\beta}}{r_{ij}^{eq}} - \frac{m_i}{V_i} v_i^\alpha v_i^\beta \quad (Pa)$$

Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures

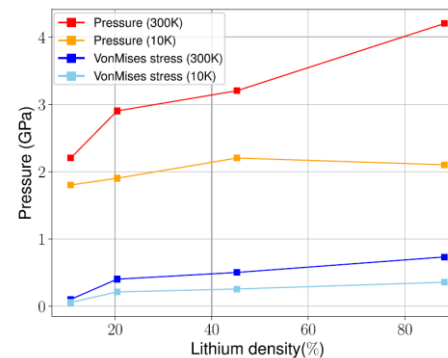
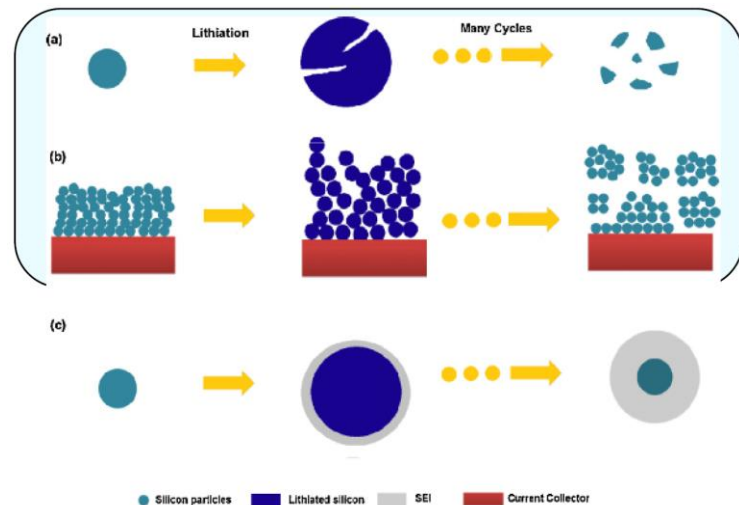
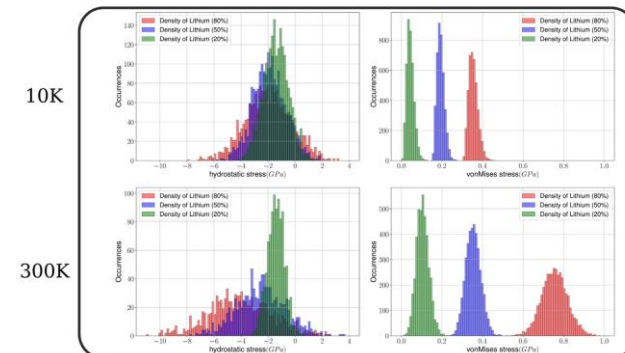
- Les différentes technologies de batterie

Exemple d'une batterie lithium-ion :



Augmentation des contraintes locales

<100>



Développement au 2^{ème} ordre de l'énergie: modules d'élasticité:

$$E(\{\underline{r}_i\}) = E(\{\underline{r}_i^{eq}\}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{\partial E}{\partial \underline{r}_{ij}} \cdot \underline{u}_{ij} + \frac{1}{2!} \sum_{(i,j)(k,l)} \underline{u}_{ij} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial \underline{r}_{ij} \partial \underline{r}_{kl}} \cdot \underline{u}_{kl} + \dots$$

avec

$$\begin{aligned} \underline{u}_{ij} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial \underline{r}_{ij} \partial \underline{r}_{kl}} \cdot \underline{u}_{kl} &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{\partial^2 E}{\partial r_{ij}^{\alpha} \partial r_{kl}^{\beta}} (eq) \cdot u_{ij}^{\alpha} \cdot u_{kl}^{\beta} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial r_{kl}^{\beta}} \left(\frac{\partial E}{\partial r_{ij}^{\alpha}} \cdot \frac{r_{ij}^{\alpha}}{r_{ij}} \right) (eq) \cdot u_{ij}^{\alpha} \cdot u_{kl}^{\beta} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{\partial^2 E}{\partial r_{ij} \partial r_{kl}} \cdot \frac{r_{kl}^{eq,\beta}}{r_{kl}^{eq}} \cdot \frac{r_{ij}^{eq,\alpha}}{r_{ij}^{eq}} \cdot u_{ij}^{\alpha} \cdot u_{kl}^{\beta} + \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{\partial E}{\partial r_{ij}} \cdot \delta_{(ij),(kl)} \cdot u_{ij}^{\alpha} \cdot u_{kl}^{\beta} \cdot \left(\frac{\delta_{\alpha\beta}}{r_{ij}^{eq}} - \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} \cdot r_{ij}^{eq,\beta}}{(r_{ij}^{eq})^3} \right) \\ &= \frac{\partial^2 E}{\partial r_{ij} \partial r_{kl}} \cdot u_{ij}^P \cdot u_{kl}^P + T_{ij} \cdot \delta_{(ij),(kl)} \cdot \frac{(u_{ij}^T)^2}{r_{ij}^{eq}} \end{aligned}$$



Raideurs locales

élongation de la liaison

rotation

Développement au 2^{ème} ordre de l'énergie: **modules** d'élasticité:

Approximation de Born-Huang pour les modules d'élasticité:

$\mathbf{T}_{ij} = 0$ soit: absence de contraintes « gelées ».

$$\begin{aligned}
 E^Q \left(\{ \underline{r}_i \} \right) &\approx \frac{1}{2!} \sum_{(ij), (kl)} \frac{\partial^2 E}{\partial r_{ij} \partial r_{kl}} \cdot u_{ij}^P \cdot u_{kl}^P \\
 &= \frac{1}{2!} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{\delta} \sum_{(ij), (kl)} \frac{\partial^2 E}{\partial r_{ij} \partial r_{kl}} \cdot \frac{r_{ij}^{eq, \alpha} \cdot r_{ij}^{eq, \beta} \cdot r_{kl}^{eq, \gamma} \cdot r_{kl}^{eq, \delta}}{r_{ij}^{eq} \cdot r_{kl}^{eq}} \cdot \varepsilon_{\alpha\beta} \cdot \varepsilon_{\gamma\delta}
 \end{aligned}$$

Développement au 2^{ème} ordre de l'énergie: modules d'élasticité:

$$E^Q(\{\underline{r}_i\}) \approx \frac{1}{2!} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{\delta} \sum_{(ij),(kl)} \frac{\partial^2 E}{\partial r_{ij} \partial r_{kl}} \cdot \frac{r_{ij}^{eq,\alpha} \cdot r_{ij}^{eq,\beta} \cdot r_{kl}^{eq,\gamma} \cdot r_{kl}^{eq,\delta}}{r_{ij}^{eq} \cdot r_{kl}^{eq}} \cdot \varepsilon_{\alpha\beta} \cdot \varepsilon_{\gamma\delta}$$

A comparer avec:

$$\varepsilon^Q = \iiint dV \frac{1}{2} \underline{\varepsilon} : \underline{\underline{C}} : \underline{\varepsilon}$$

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(i) = \frac{1}{V_i} \sum_{(i_1 i_2 i_3 i_4)} \frac{\partial^2 E}{\partial r_{i_1 i_2} \partial r_{i_3 i_4}} \cdot \frac{r_{i_1 i_2}^{eq,\alpha} \cdot r_{i_1 i_2}^{eq,\beta} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq,\gamma} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq,\delta}}{r_{i_1 i_2}^{eq} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq}} \cdot n_{(i_1 i_2 i_3 i_4)} \quad i \in (i_1 i_2 i_3 i_4)$$

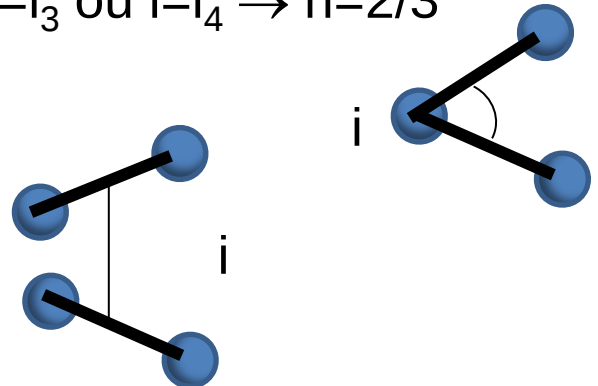
Développement au 2^{ème} ordre de l'énergie: modules d'élasticité:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(i) = \frac{1}{V_i} \sum_{(i_1 i_2 i_3 i_4)} \frac{\partial^2 E}{\partial r_{i_1 i_2} \partial r_{i_3 i_4}} \cdot \frac{r_{i_1 i_2}^{eq, \alpha} \cdot r_{i_1 i_2}^{eq, \beta} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq, \gamma} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq, \delta}}{r_{i_1 i_2}^{eq} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq}} \cdot n$$

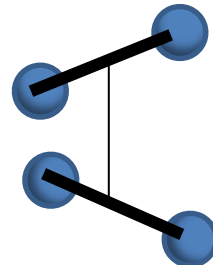
Contribution termes à 2-corps (forces centrales): $(i_1 i_2) = (i_3 i_4) \rightarrow n=1/2$



Contribution 3-corps (flexion angulaire): $i=i_1$ eq. à $i=i_3$ ou $i=i_4 \rightarrow n=2/3$



Interactions 4-body (twists): $(i_1 i_2) \neq (i_3 i_4) \rightarrow n=1/2$



Développement au 2^{ème} ordre de l'énergie: modules d'élasticité:

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta}(i) = \frac{1}{V_i} \sum_{(i_1 i_2 i_3 i_4)} \frac{\partial^2 E}{\partial r_{i_1 i_2} \partial r_{i_3 i_4}} \cdot \frac{r_{i_1 i_2}^{eq,\alpha} \cdot r_{i_1 i_2}^{eq,\beta} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq,\gamma} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq,\delta}}{r_{i_1 i_2}^{eq} \cdot r_{i_3 i_4}^{eq}} \cdot n$$

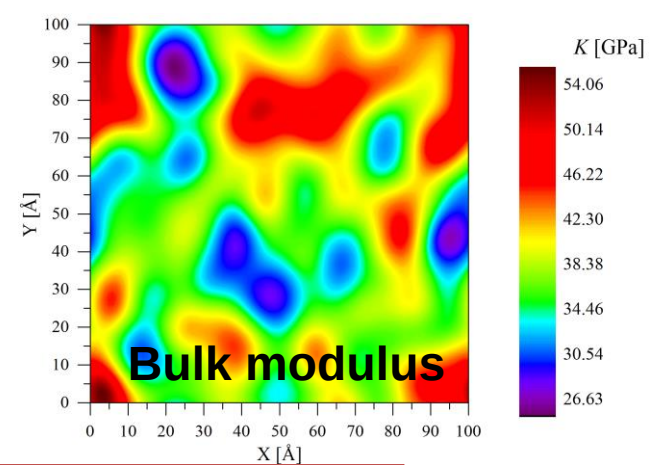
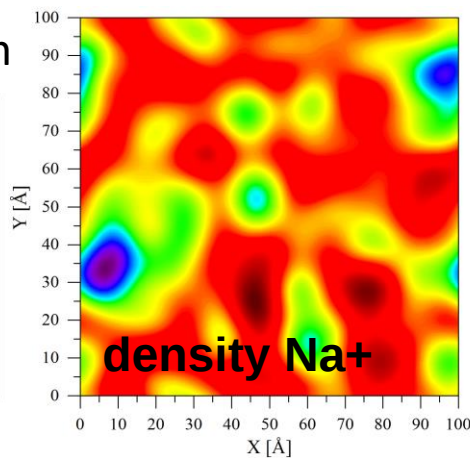
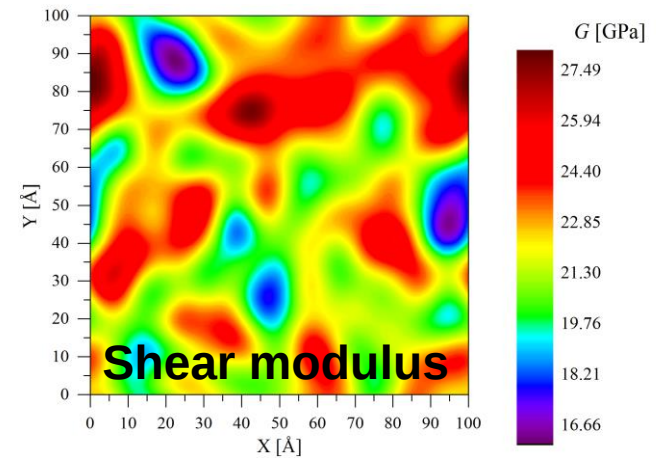
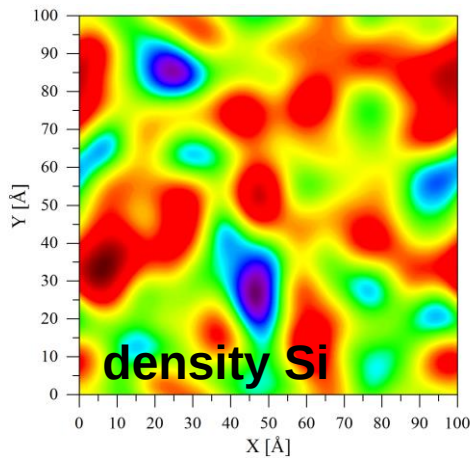
$$\begin{aligned} C_{\alpha\beta\gamma\delta} &= C_{\beta\alpha\gamma\delta} \quad \text{et} \quad C_{\alpha\beta\gamma\delta} = C_{\alpha\beta\delta\gamma} \rightarrow 36 \text{ modules} \\ C_{\alpha\beta\gamma\delta} &= C_{\gamma\delta\alpha\beta} \rightarrow 21 \text{ modules} \end{aligned}$$

Symétries supplémentaires, si **interactions à 2-corps** (Modèle de Cauchy):

Permutations de tous les indices: $C_{\alpha\alpha\beta\beta} = C_{\alpha\beta\alpha\beta}$ et $C_{\alpha\beta\gamma\gamma} = C_{\alpha\gamma\beta\gamma}$
(Relations de Cauchy pour les interactions à 2-corps)

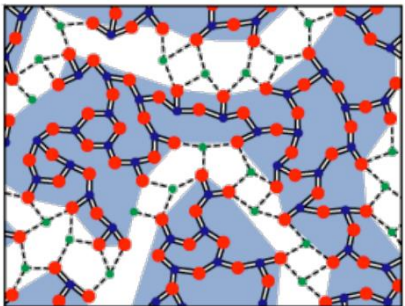
$$\rightarrow 3 C_{\alpha\alpha\alpha\alpha} + 6 C_{\alpha\alpha\alpha\beta} + 3 C_{\alpha\alpha\beta\beta} + 3 C_{\alpha\beta\gamma\gamma} \rightarrow 15 \text{ modules (localement)}$$

Exemple d'un verre sodo-silicate:



Structure en

« Canaux » de sodium



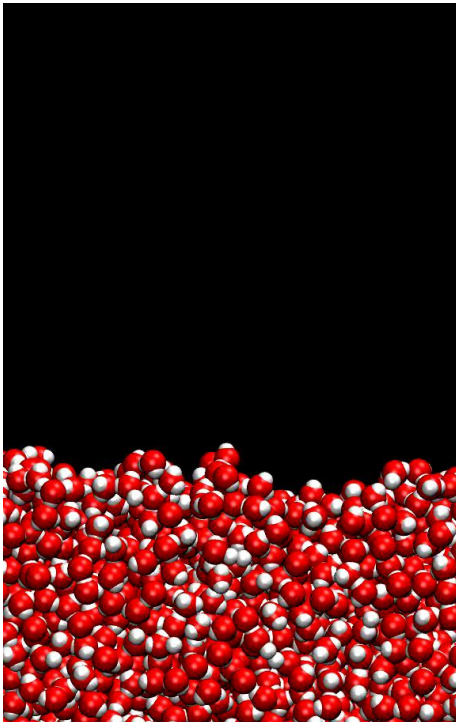
High Na+ density $\leftrightarrow$ Low Elastic Moduli



Plan du cours

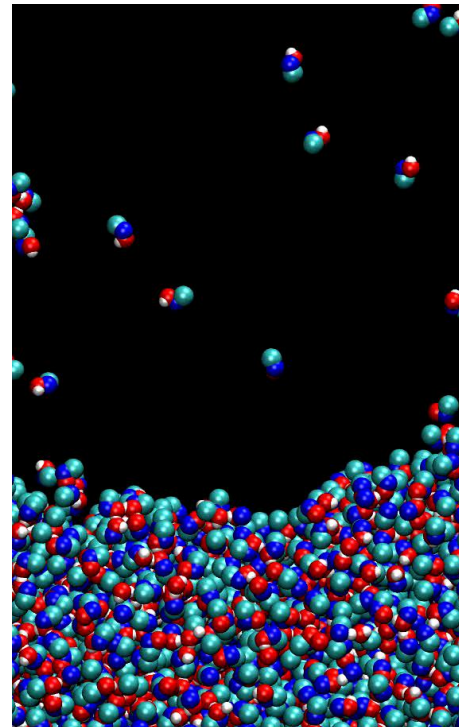
- ➔ Définition des **grandeurs mécaniques** aux **échelles atomiques**
- ➔ Description et rôle de l'**Adhésion** aux petites échelles
- ➔ Initiation à la **Mécanique Quantique** et à l'**Effet Tunnel**

Tension de Surface

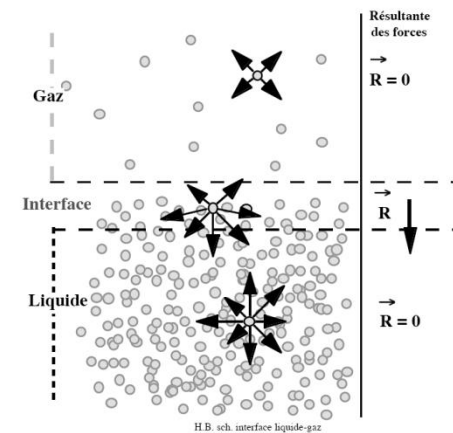
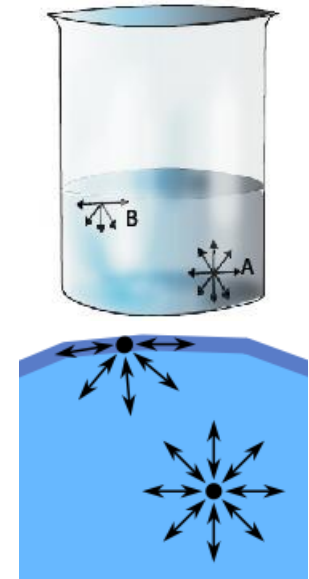


Eau $\gamma(20^{\circ}\text{C})=72.8 \text{ mN/m}$

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



Ethanol $\gamma(20^{\circ}\text{C})=22.10 \text{ mN/m}$

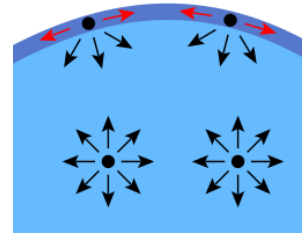


Tension de Surface



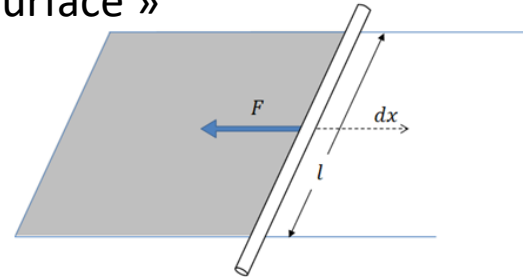
➔ Définition de la « Tension de surface »

$$dE = \gamma dS$$



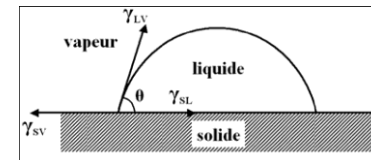
➔ Notion de « Force de surface »

$$F = \gamma l$$



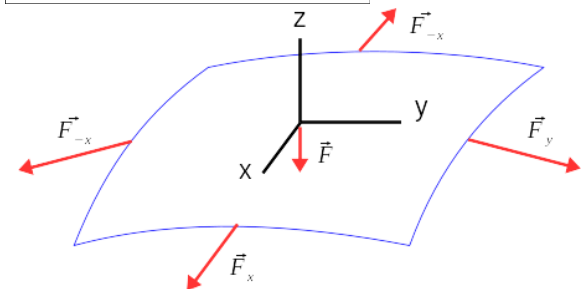
➔ Loi d'Young-Dupré

$$\cos \theta = (\gamma_{SV} - \gamma_{SL}) / \gamma_{LV}$$



➔ « Pression de Laplace »

$$\Delta P = \gamma(1/R_x + 1/R_y)$$



Ordres de grandeur

Tensions de surface avec l'air

liquide	γ (N.m ⁻¹) à 20°C	liquide	γ (N.m ⁻¹) à 20°C
eau (à 20°C)	73×10^{-3}	éthanol	22×10^{-3}
eau (à 0°C)	$75,6 \times 10^{-3}$	éther	17×10^{-3}
huile végétale	32×10^{-3}	mercure	480×10^{-3}

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 liée aux forces d'interaction interatomiques

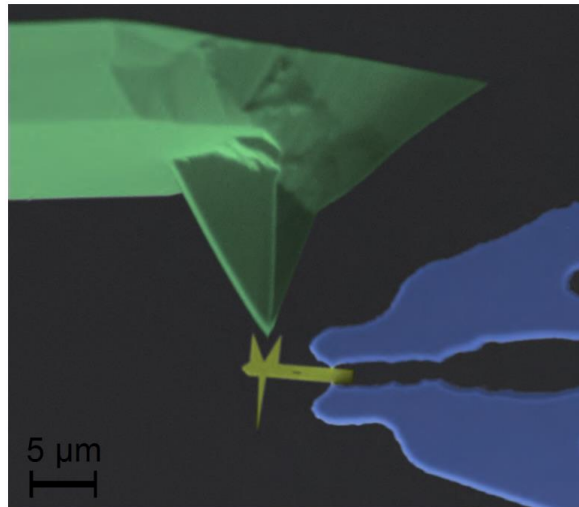
Longueur Caractéristique:

$$dW = \int_V \underline{\underline{\sigma}} : \delta \underline{\underline{\varepsilon}} dV + \int_S \gamma dS$$

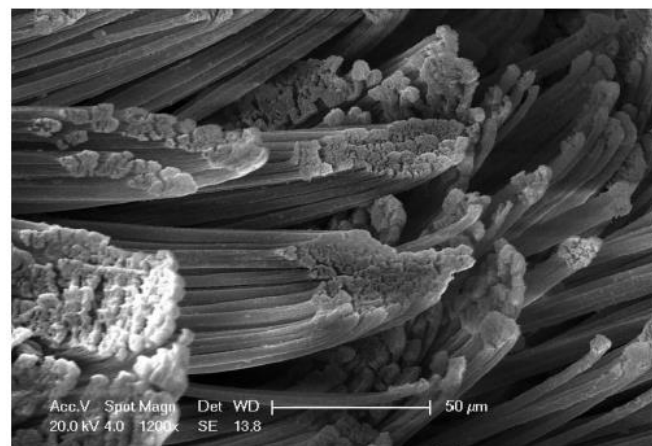
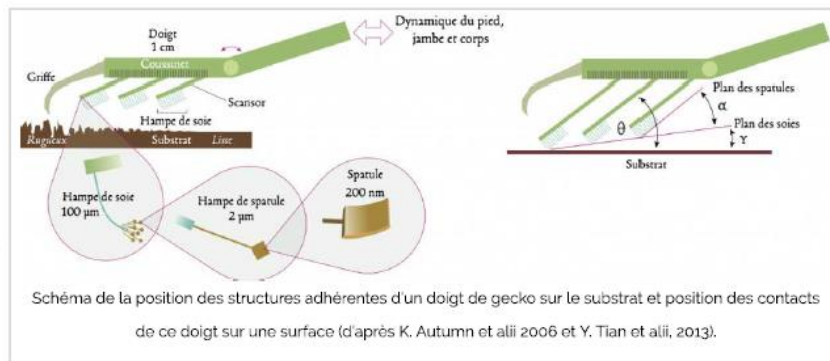
Approche qualitative pour un système sphérique de taille R

$$E_{Elasticité} \approx 0.1 ER^3 \quad \& \quad E_{Surface} \approx 4\pi\gamma R^2$$

$$E_{Elasticité} \approx E_{surface} \Leftrightarrow R \approx \frac{40\pi\gamma}{E} \approx 10 \text{ nm}$$

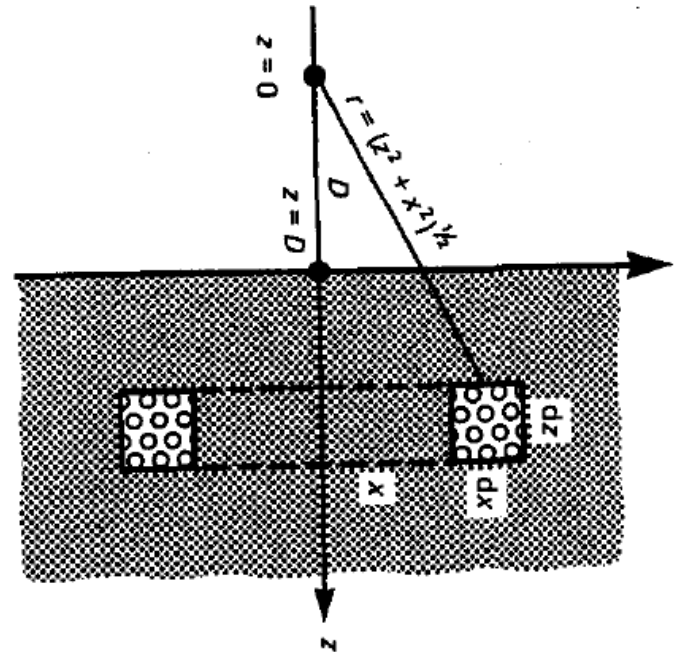
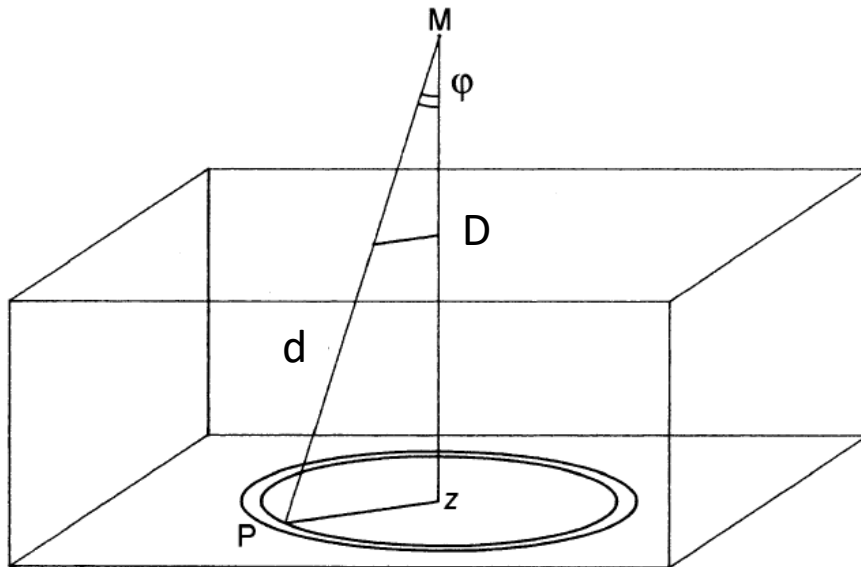


L'exemple du Gecko



Détail des soies spatulées à leur extrémité en microscopie

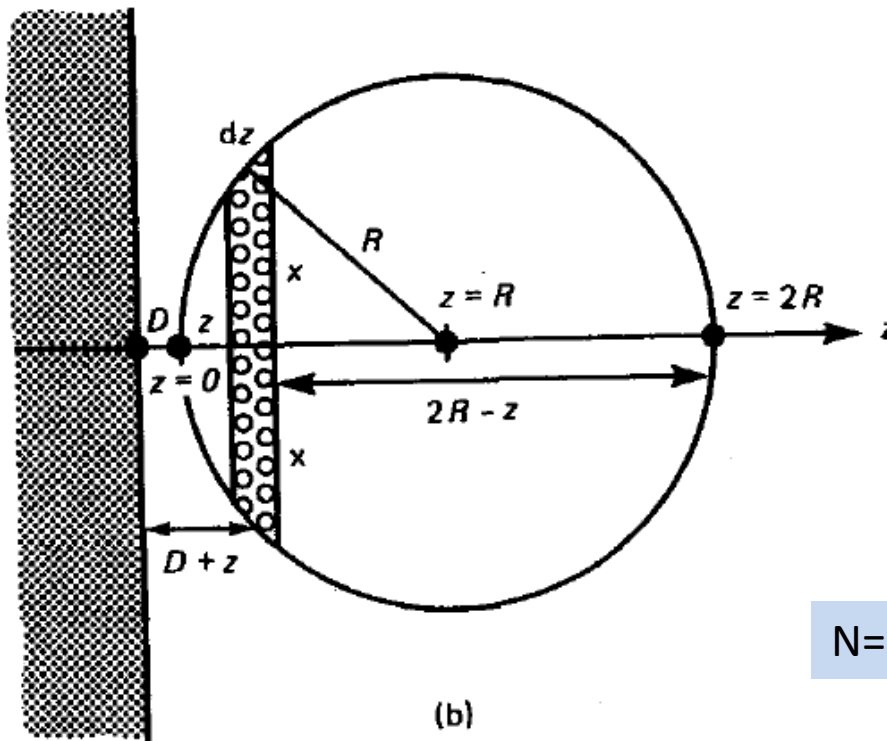
Interaction Atome / Milieu Semi-Infini



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

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

Interaction Sphère/Plan



$$R \gg D \quad (z \approx D)$$

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

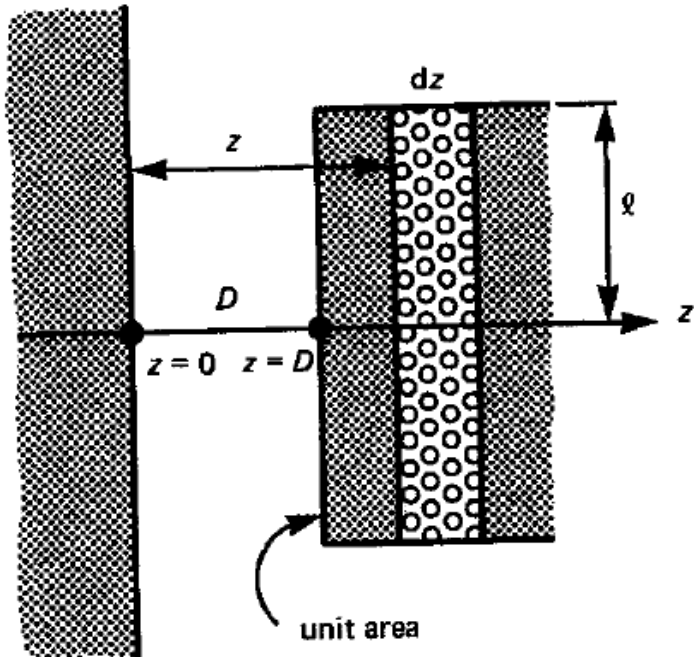
Effet de Courbure R

$$R \ll D$$

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

$N = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho_2$ particules concentrées en un point

Interaction Plan/Plan (Hamaker, 1937)



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

$$\gamma = 1/2 \cdot E_{total-Plan}(D)/S$$

Tension de surface

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

$$\text{si } R \gg D \quad S_{eff} = \frac{2\pi}{(m-5)} RD; \quad \text{si } R \ll D \quad S_{eff} = \frac{4\pi(m-4)}{3} \frac{R^3}{D}$$

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

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

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

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

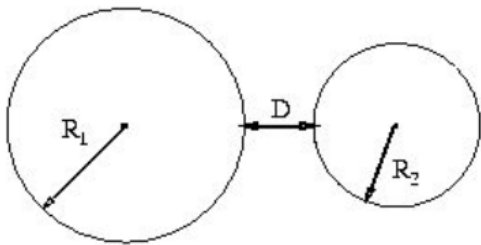
$$\text{si } R \gg D$$

➤ **Tension de surface**

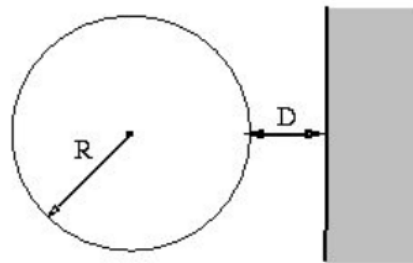
Influence de la Géométrie du Contact

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

$$D \ll R$$



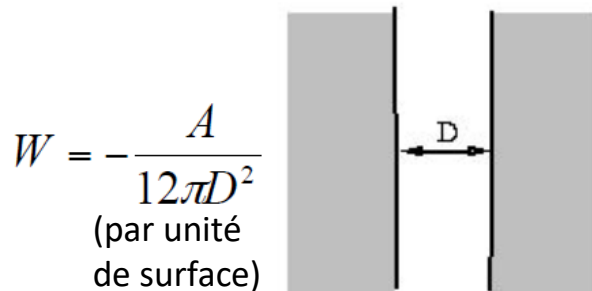
$$W = -\frac{A}{6D} \frac{R_1 R_2}{(R_1 + R_2)}$$



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

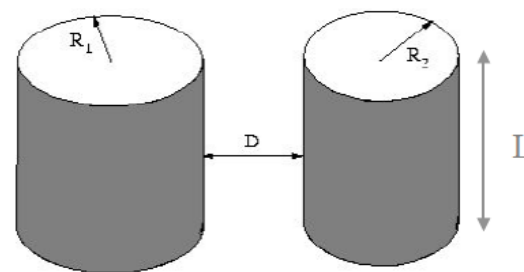
$$A = \pi^2 B \rho_1 \rho_2$$

Constante de
Hamaker



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

(par unité
de surface)



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

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

Constantes de Hamaker

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

$$D \ll R$$

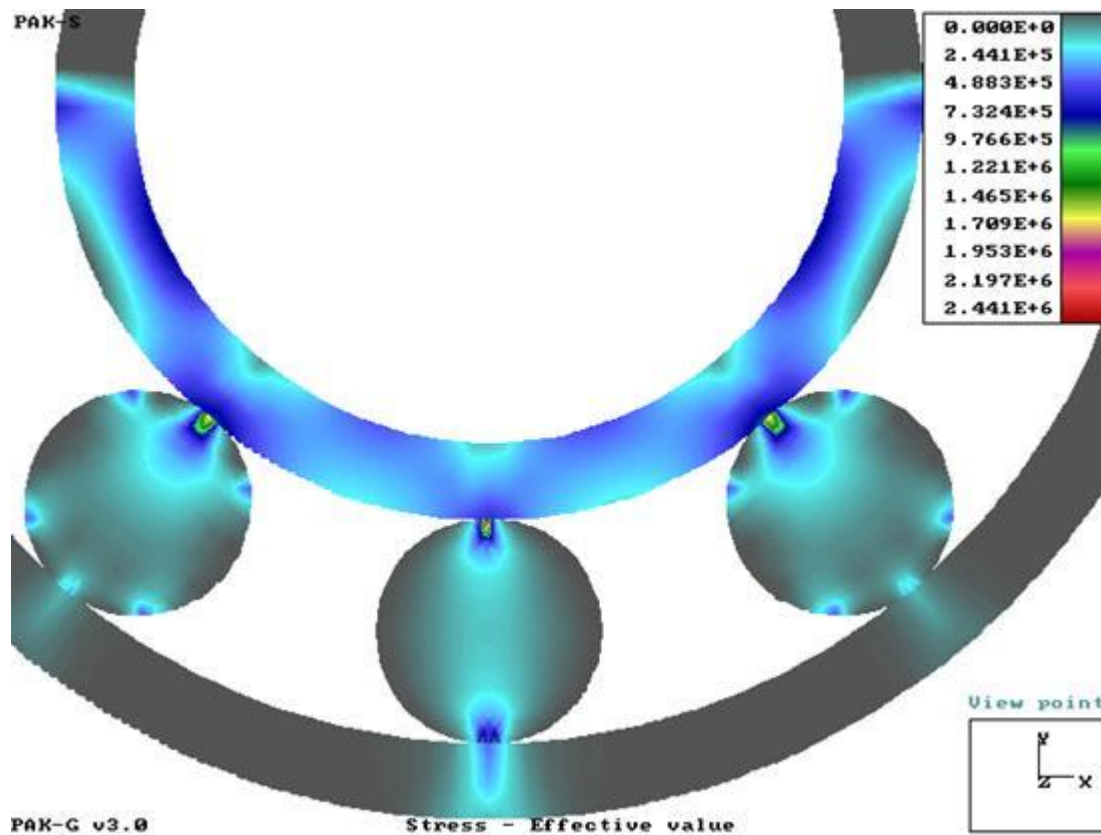
Constante de **Hamaker** (J)

$$A = \pi^2 B \rho_1 \rho_2$$

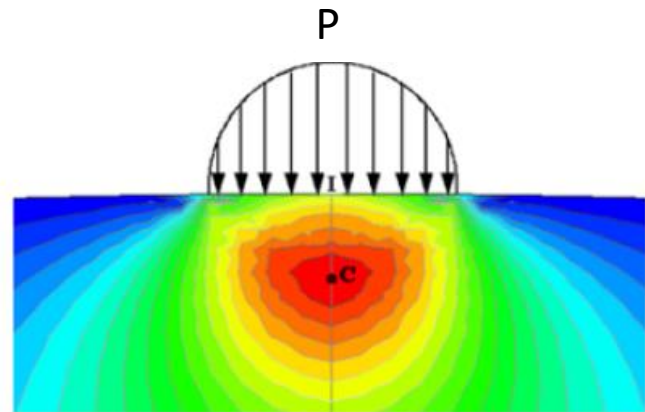
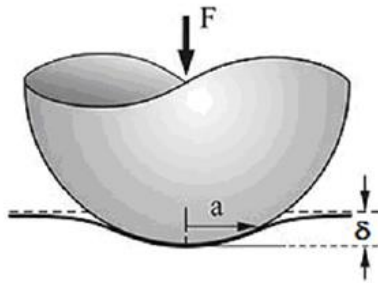
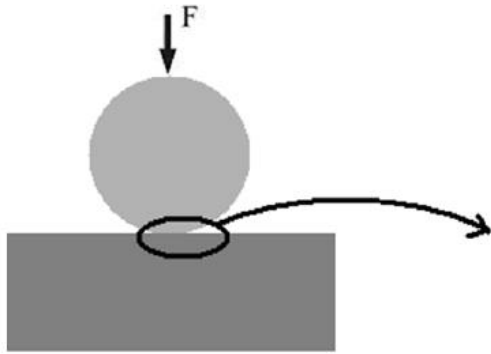
Medium	C (10^{-79} J m^6)	ρ (10^{28} m^{-3})	A (10^{-19} J)
Hydrocarbon	50	3.3	0.5
CCl_4	1500	0.6	0.5
H_2O	140	3.3	1.5

Two atoms $w = -C/r^6$	Two spheres $W = \frac{-A}{6D} \frac{R_1 R_2}{(R_1 + R_2)}$
Atom-surface $w = -\pi C \rho / 6D^3$	Sphere-surface $W = -AR/6D$
Two parallel chain molecules $W = -3\pi CL / 8\sigma^2 r^5$	Two cylinders $W = \frac{AL}{12\sqrt{2} D^{3/2}} \left(\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right)^{1/2}$
Two crossed cylinders $W = -A\sqrt{R_1 R_2} / 6D$	Two surfaces $W = -A/12\pi D^2 \text{ per unit area}$

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



Contact Elastique de Hertz



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

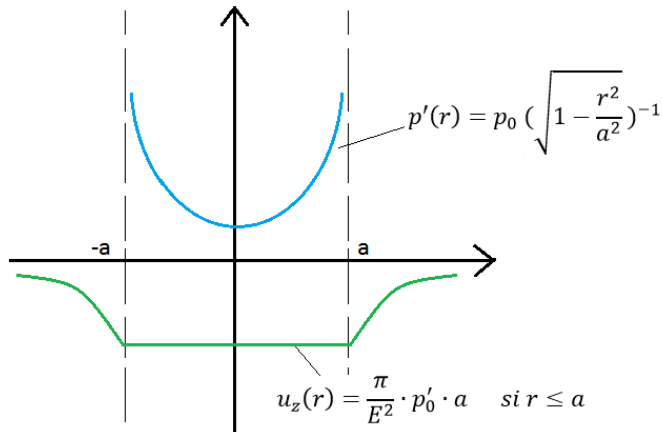
$$a = \sqrt{R\delta} = R \left(\frac{3}{4E^* R^2} F_z \right)^{1/3}$$

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

- ➔ Résolution exacte
- ➔ Résolution géométrique approchée
- ➔ Résolution en loi d'échelle

Avec Adhésion:

Théorie de Johnson-Kendall-Roberts



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

$$\text{avec } p(r) = p_{\text{hertz}} + p_{\text{adhésion}} = p_0 \sqrt{1 - \frac{r^2}{a^2}} + p'_0 \left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right)^{-1}$$

$$\text{donc } E_{\text{élastique}} = \frac{\pi^2 a^3}{E^*} \left(\frac{2}{15} p_0^2 + \frac{2}{3} p_0 p'_0 + p_0'^2 \right)$$

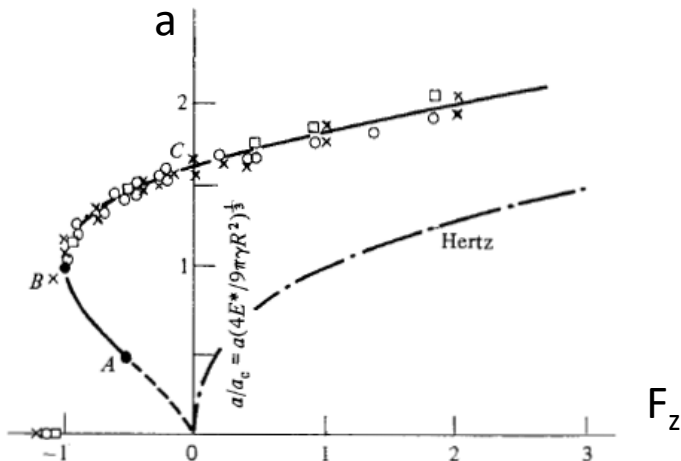
$$\text{et } E_{\text{adhésion}} = -2\gamma\pi a^2$$

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

$$\text{avec } p_0 = \frac{2aE^*}{\pi R} \quad \text{donc } p'_0 = -\sqrt{\frac{4\gamma E^*}{\pi a}}.$$

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

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

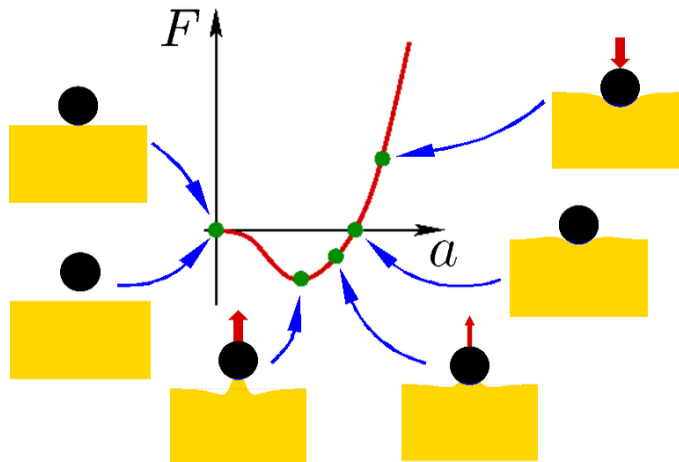


Avec Adhésion:

Théorie de Johnson-Kendall-Roberts

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

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

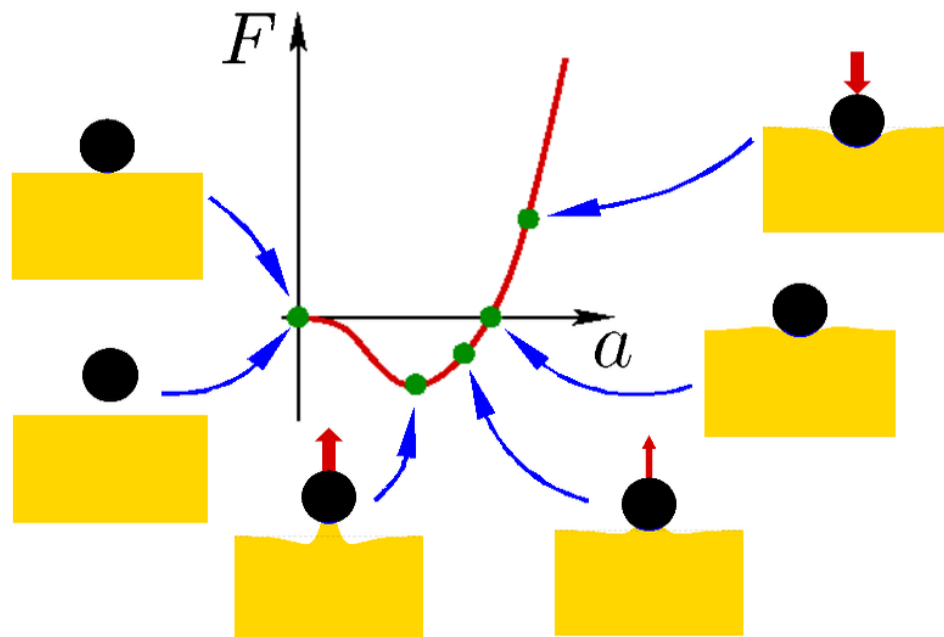
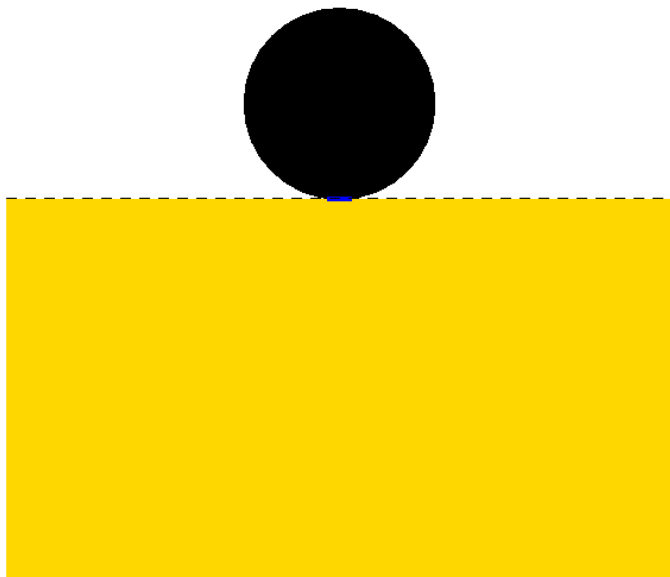


$$F_z^{\text{max}} = -3\pi R\gamma$$

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

Avec Adhésion:

Théorie de Johnson-Kendall-Roberts



Avec Adhésion:

Théorie de Derjaguin-Müller-Toporov

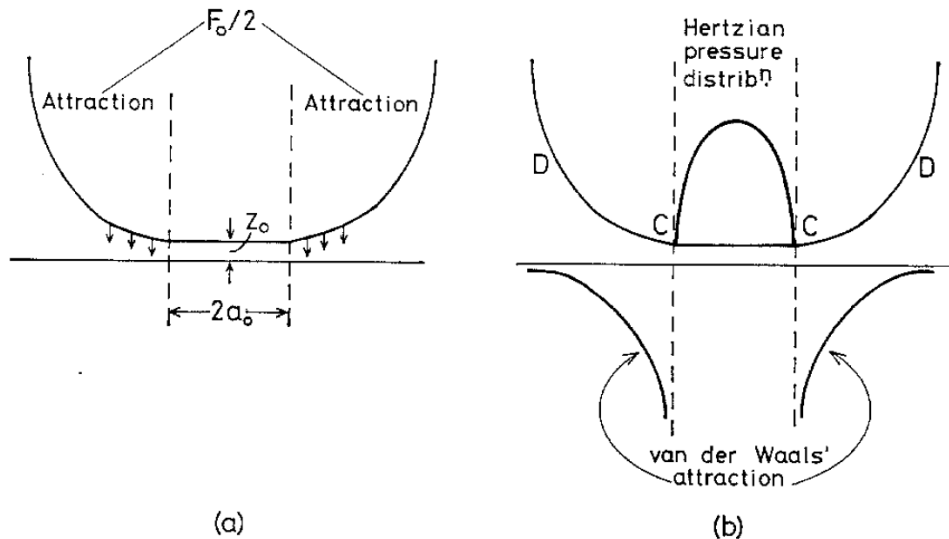


FIG. 5. Interaction between an elastic sphere and a hard flat surface according to Derjaguin *et al.* (10). (a) When the applied normal load is zero, the attractive forces produce a finite circle of contact of diameter $2a_0$. There is repulsion over this area and attraction in the annular region outside. (b) The pressure distribution implied in the Derjaguin analysis (schematic).

$$F_Z^{max} = -4\pi R\gamma \quad si \quad R_2 \gg R$$

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

Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures



Kenneth Johnson

Heinrich Rudolf Hertz

David Tabor

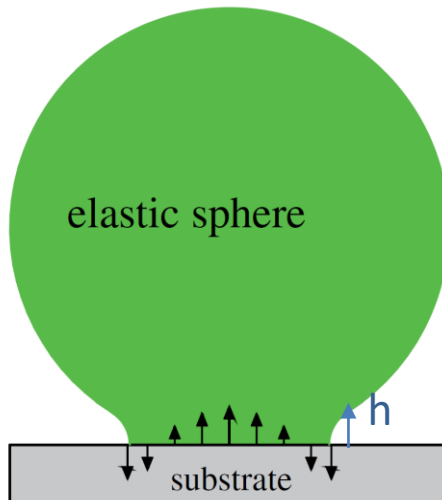
Avec Adhésion:

Paramètre de **Transition** (Tabor)



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

$\mu_T \gg 1$ $\downarrow P$ Forte adhésion,
Forte déformation

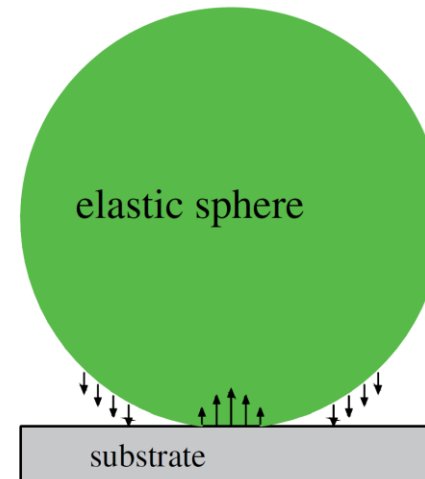


JKR

$$F_z \approx 0$$

$$\mu_T = \frac{h}{z_0} \gg 1$$

$\mu_T \ll 1$ $\downarrow P$ Faible adhésion,
Faible déformation



DMT

$$F_z \approx 0$$

$$\mu_T = \frac{\sigma_{ad}}{\sigma_{Hertz}} \ll 1$$

D. Tabor (1977)

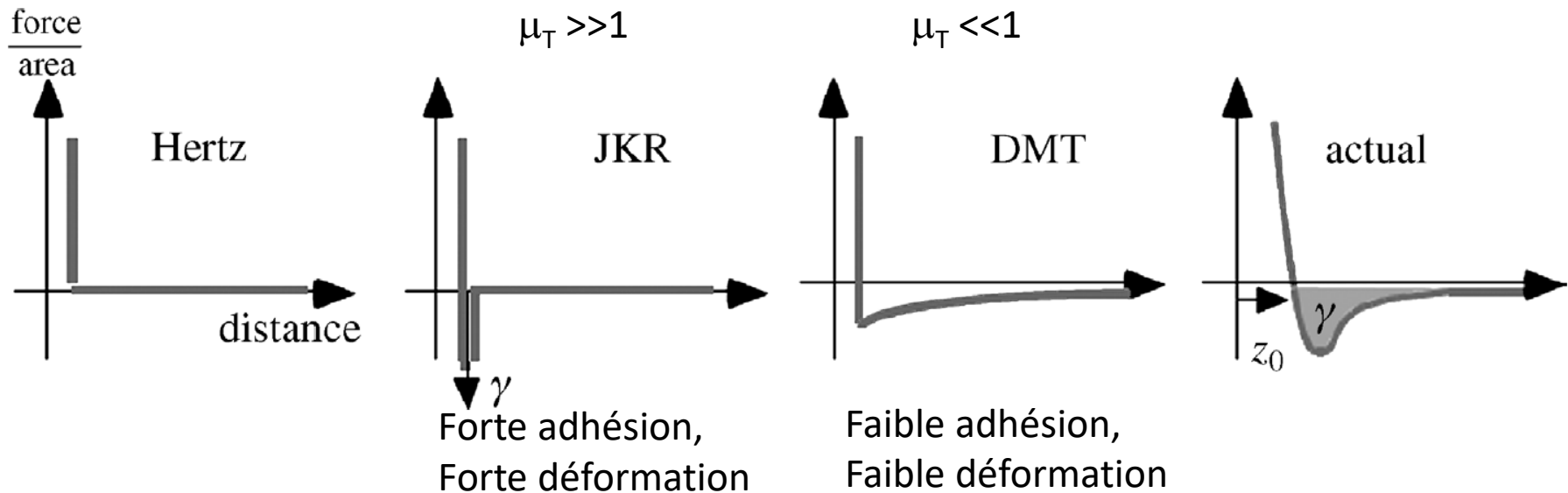
Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures



Avec Adhésion:

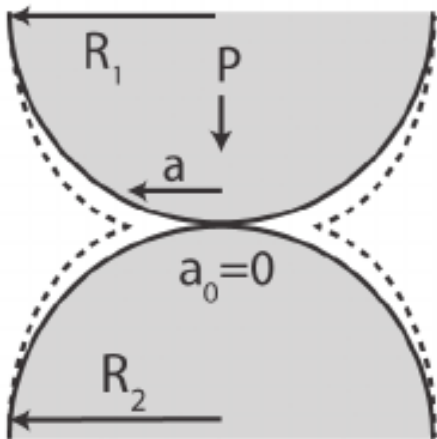
Paramètre de **Transition** (Tabor)

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

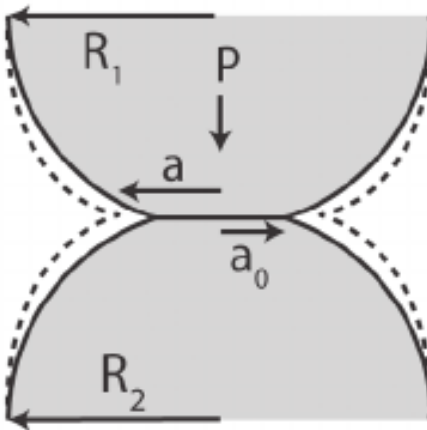


Avec Adhésion:

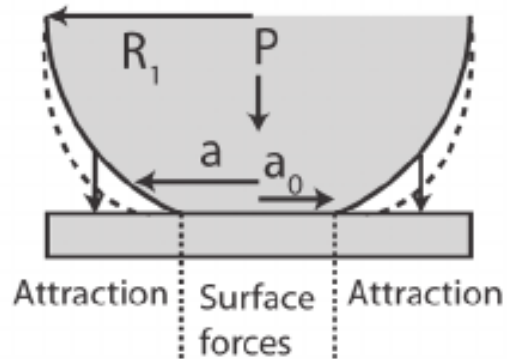
(a) Hertz



(b) JKR



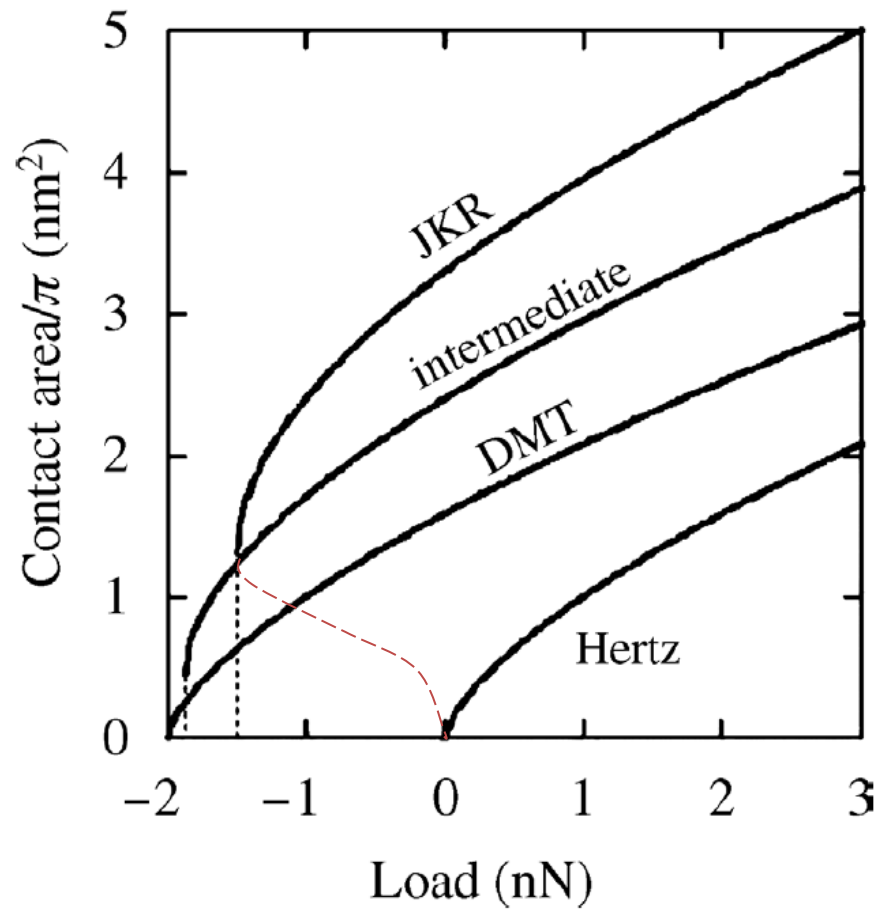
(c) DMT



$$F_z \approx 0$$

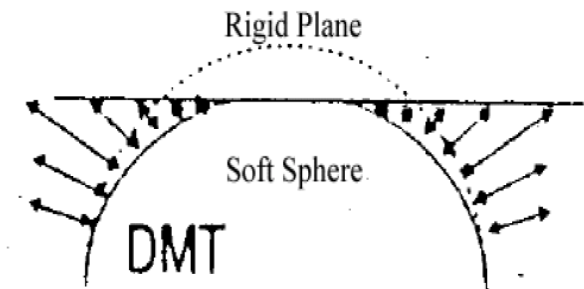
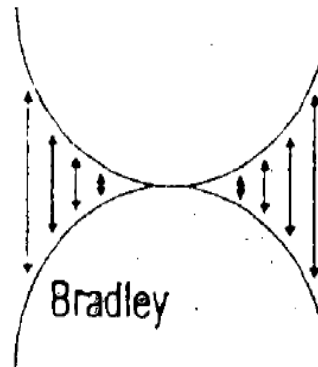
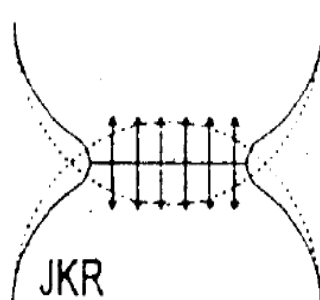
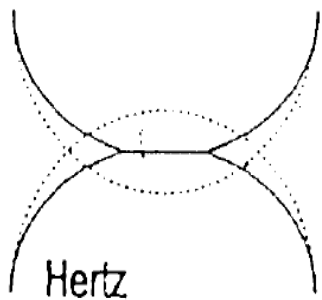
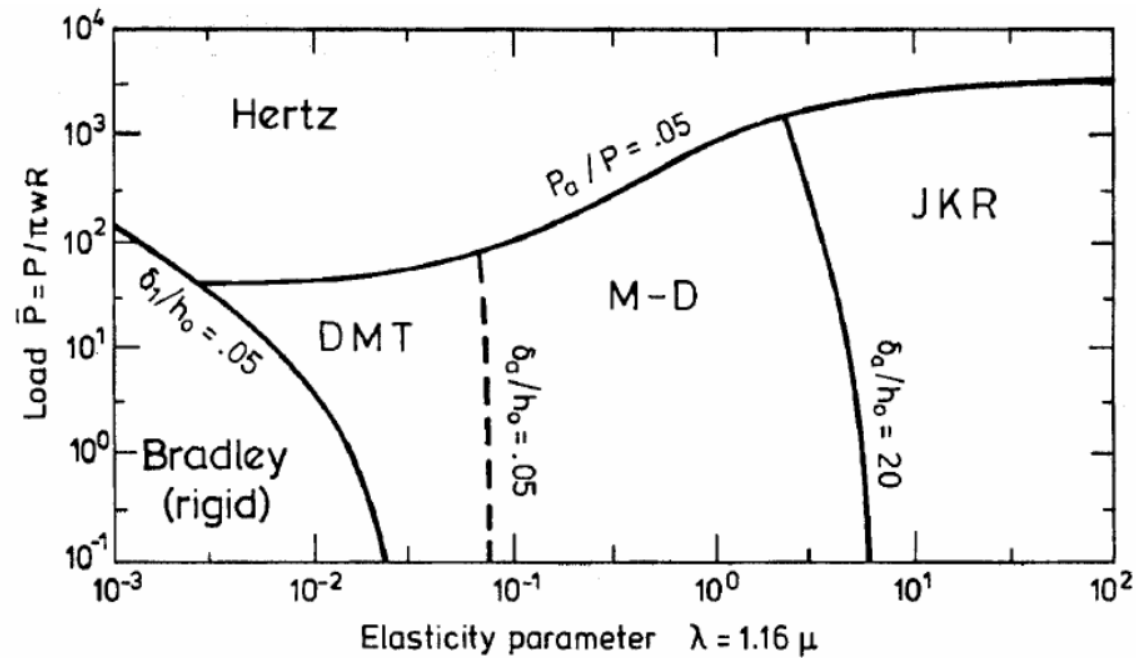


Avec Adhésion:



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

Avec Adhésion:

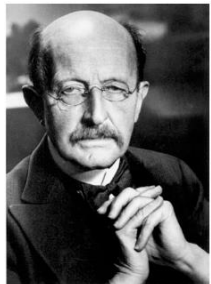




Plan du cours

- ➡ Définition des **grandeurs mécaniques** aux **échelles atomiques**
- ➡ Description et rôle de l'**Adhésion** aux petites échelles
- ➡ Initiation à la **Mécanique Quantique** et à l'**Effet Tunnel**

Premières Mises en évidence de phénomènes Quantiques



$$h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

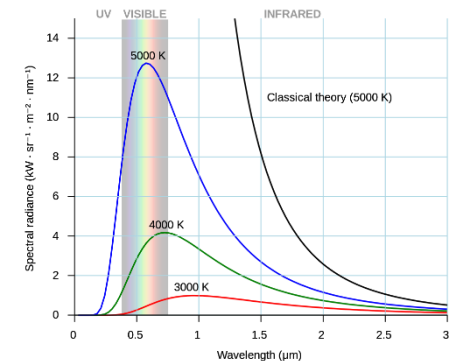
Planck
1918



Rayonnement du corps noir

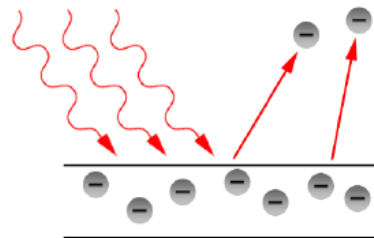
Oscillateurs

$$\Delta E = N h \nu = N \hbar \omega$$



Millikan

1923



Effet Photo-électrique

Quantification de la charge de l'électron
 $e = -1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$



Einstein

1921



**Quantification
du rayonnement**

$$E = \hbar \omega$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad |k| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

**Nature ondulatoire
de la matière** De Broglie

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$$

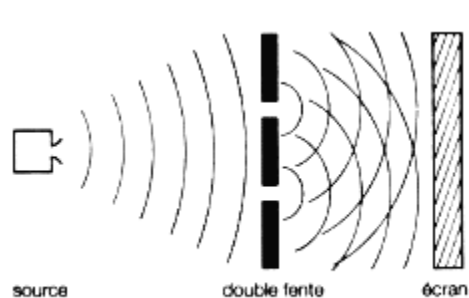
1929



Caractère corpusculaire, ondulatoire et probabiliste de la physique des petites échelles

Premières Mises en évidence de phénomènes Quantiques

Dualité
Onde / Corpuscule



Fentes d'Young

Davison et Germer(1927)

intensité de l'onde
en fonction de la
position sur l'écran

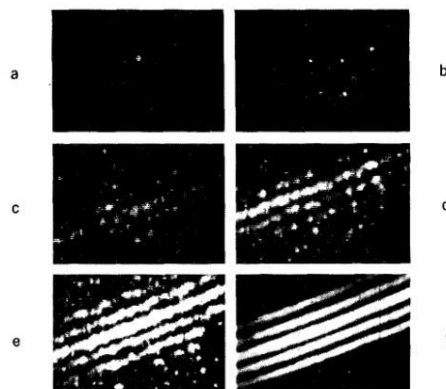
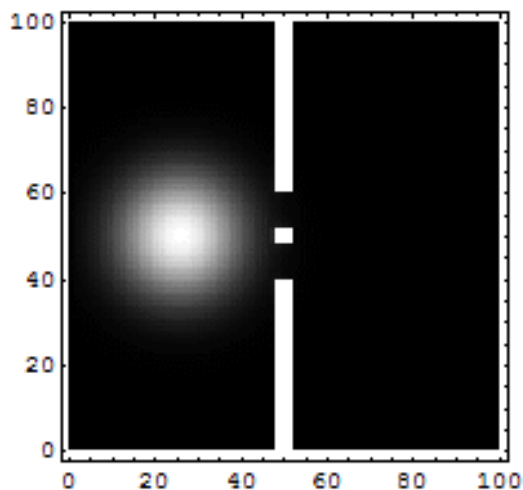
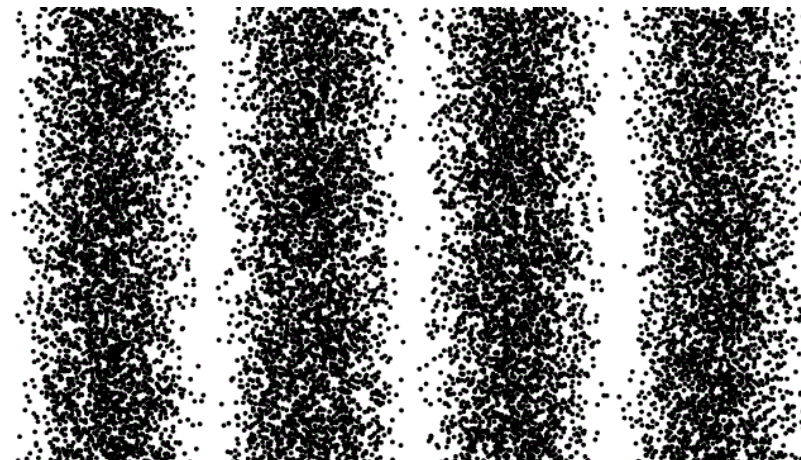
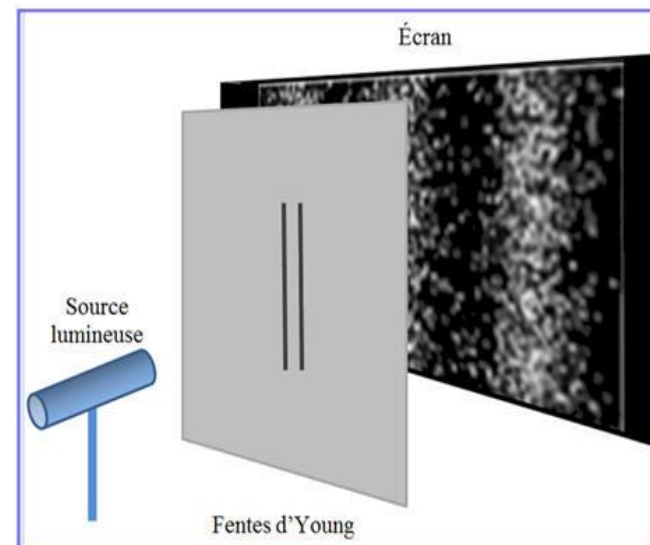


Fig. 1. (a-f) Electron interference fringe patterns filmed from a TV monitor at increasing current densities.



Principe Fondamental de la **Mécanique Classique**:
Equation de Newton ou Hamilton-Jacobi

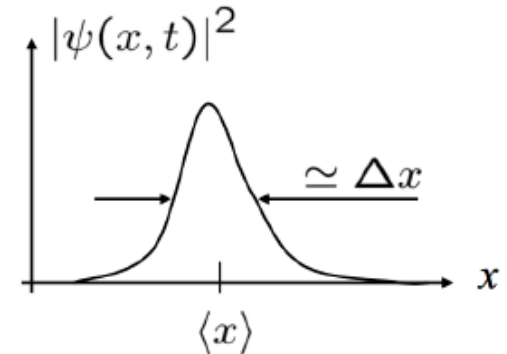
$$\dot{\vec{r}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p}}{m}$$

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \vec{F}(\vec{r}, \vec{v}, t) = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}}(\vec{r}) + \vec{F}_{\text{ext}} \quad \text{ou} \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}}$$

Etat caractérisé par la **position** et l'**impulsion** $(\vec{r}, \vec{p} = m\vec{v})$

Principe Fondamental de la **Mécanique Quantique**:
Equation de Schrödinger (1926)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$$



Etat caractérisé par la **fonction d'onde complexe** $\Psi(\vec{r}, t)$, amplitude de probabilité

$$dP(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = \text{Probabilité de trouver la particule en } \vec{r} \pm d^3\vec{r} \text{ à l'instant } t$$

↙ densité de probabilité de présence

Position moyenne $\langle \vec{r} \rangle = \int \vec{r} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$ Ecart quadratique $\Delta \vec{r}^2 = \langle \vec{r}^2 \rangle - \langle \vec{r} \rangle^2$

DUALITÉ ONDE-PARTICULE

Toutes les animations et explications sur
www.toutestquantique.fr

De Broglie (1929)

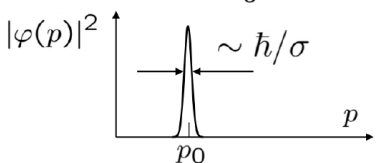
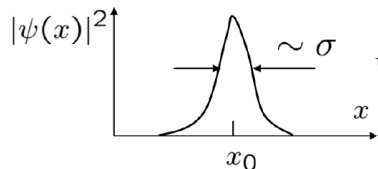
Résolution de l'équation d'évolution dans le vide (**particle libre**):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t)$$

Onde De Broglie $\Psi(\vec{r}, t) = \chi(\vec{r}) e^{-i\omega t} = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} t - \vec{p} \cdot \vec{r}\right)\right)$ onde plane $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$

$\hbar\omega = \frac{p^2}{2m} \approx E_c$ Relation de dispersion

Paquet d'Onde $\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{h^{3/2}} \int d^3\vec{p} \varphi(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (Et - \vec{p} \cdot \vec{r})\right)$ $E = \frac{p^2}{2m} = \hbar\omega$



$$\Psi(\vec{r}, t) \leftrightarrow \varphi(\vec{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right)$$

Transformée de Fourier

Vitesse de groupe $\vec{v}_G = \left. \frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_0} = \left. \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left(\frac{p^2}{2m} \right) \right|_{\vec{p}=\vec{p}_0} = \frac{\vec{p}_0}{m}$ cf. description classique

Inégalité de Schwarz (relation d'incertitude)

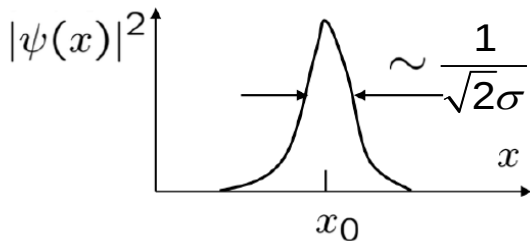
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$



Exemple d'un paquet d'onde Gaussien

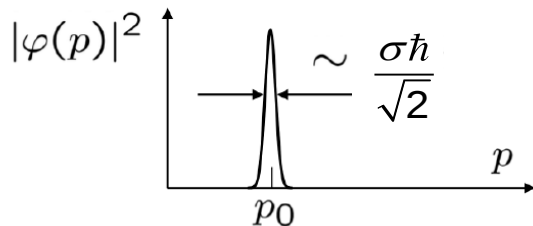
$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(\pi\sigma^2\hbar^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(\vec{p} - \vec{p}_0)^2}{2\sigma^2\hbar^2}\right] \Leftrightarrow \Psi(x, t) = \frac{1}{h^{1/2}} \int dp \varphi(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}t - p.x\right)\right)$$

$$\Rightarrow |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{t^2\sigma^2\hbar^2}{m^2}\right)} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right)^2}{\left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{t^2\sigma^2\hbar^2}{m^2}\right)^2}\right]$$



$$\langle p \rangle = p_0 \quad \langle x \rangle = \frac{p_0}{m} t$$

$$\Delta p = \frac{\sigma\hbar}{\sqrt{2}} \quad \Delta x = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{t^2\sigma^2\hbar^2}{m^2}\right)} = \sqrt{\Delta x^2(t=0) + t^2\Delta v^2}$$



$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{t^2\sigma^4\hbar^2}{m^2}} \geq \frac{\hbar^2}{2}$$

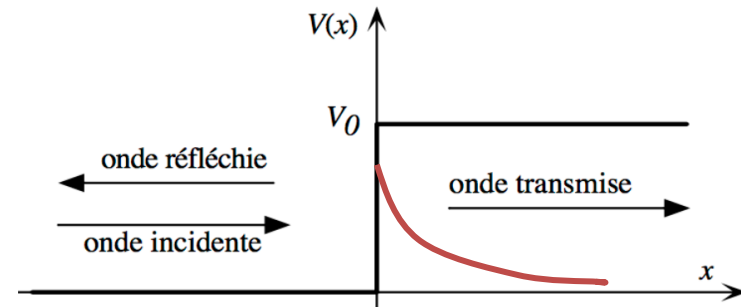
Etalement spatial
 m grand $\Leftrightarrow \sigma\hbar$ petit
 $\Rightarrow$ confinement (limite classique)

Dynamique d'une particule dans un champ de forces

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t)$$

Marche de Potentiel $V=cst$

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$



- Cas 1 : $E < V_0$

Dans ce cas les solutions s'écrivent :

$$x < 0 : \psi(x) = e^{ikx} + \xi e^{-ikx}$$

$$x > 0 : \psi(x) = \beta e^{-\kappa'x}$$

avec $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

$$\kappa' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

A l'aide de la continuité en $x=0$ de ψ et ψ' on en déduit $\xi = \frac{k - i\kappa'}{k + i\kappa'}$

Longueur de pénétration $l = 1/\kappa' = \hbar / \sqrt{2m(V - E)} \neq 0$

- Cas 2 : $E > V_0$

Dans ce cas les solutions s'écrivent :

$$x < 0 : \psi(x) = \xi_+ e^{ikx} + \xi_- e^{-ikx},$$

$$x > 0 : \psi(x) = \beta_+ e^{ik'x} + \beta_- e^{-ik'x}$$

avec $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

$$k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$$

Si on prend une particule incidente venant de gauche : $\beta_- = 0$ et $\xi_+ = 1$

On peut en déduire $\xi_- = \frac{k - k'}{k + k'}$, $\beta_+ = \frac{2k}{k + k'}$



Dynamique d'une particule dans un champ de forces

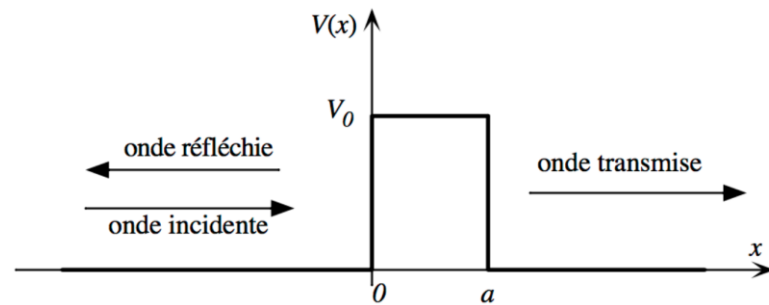
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t)$$

Effet Tunnel

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

On cherche une solution de la forme :

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \xi e^{-ikx} & x < 0 \\ \gamma e^{-\kappa'x} + \delta e^{\kappa'x} & 0 \leq x \leq a \\ \beta e^{ikx} & a < x \end{cases}$$



avec $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $\kappa' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

A l'aide de la continuité en $x=0$ de ψ et ψ' on déduit :

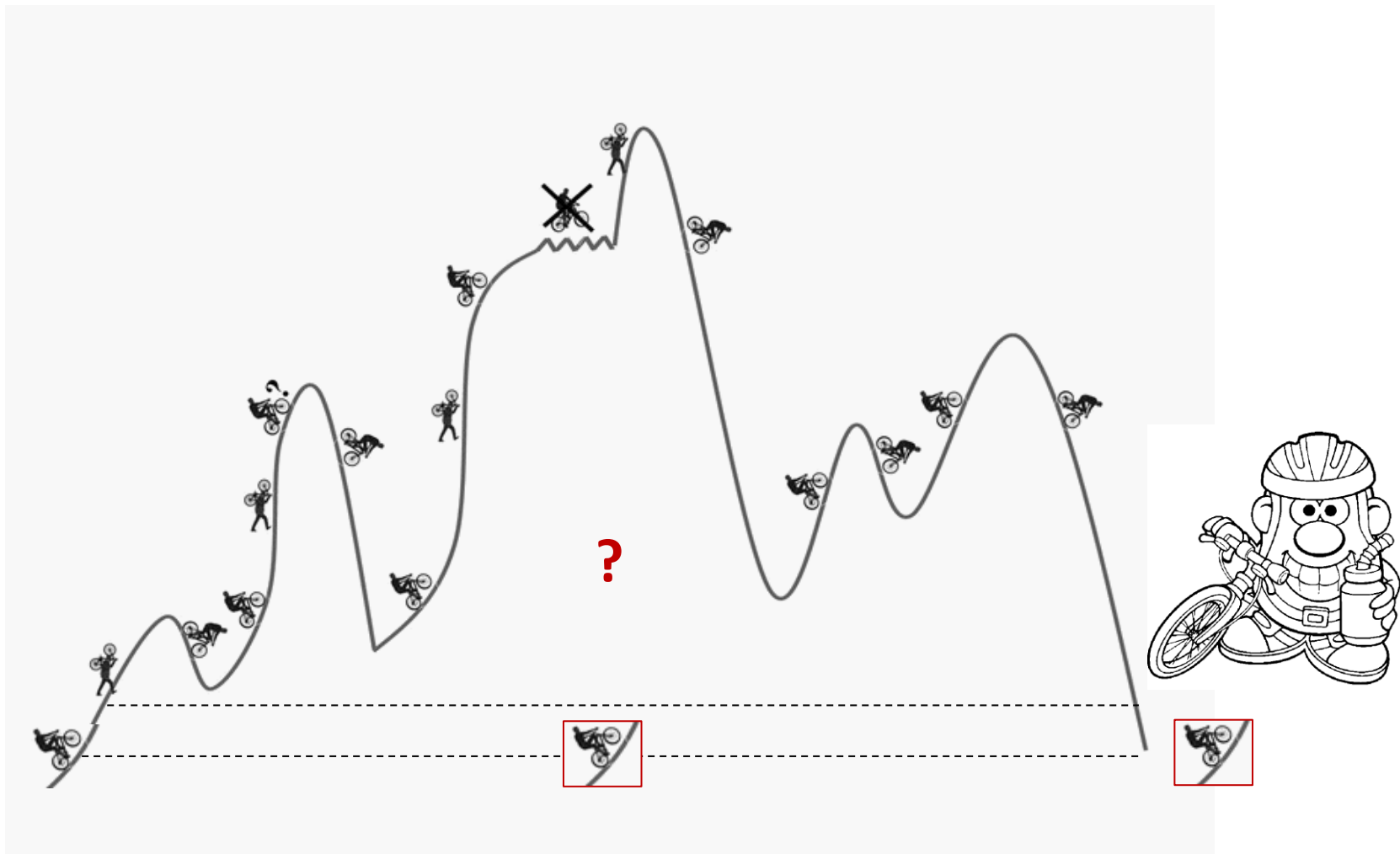
$$\beta = \frac{4i k \kappa' e^{-ika}}{(k + i\kappa')^2 e^{\kappa'a} - (k - i\kappa')^2 e^{-\kappa'a}}$$

qui se simplifie pour $\kappa'a \gg 1$ en

$$|\beta|^2 \approx \frac{16k^2 \kappa'^2}{(k^2 + \kappa'^2)^2} e^{-2\kappa'a}$$

Probabilité de passage

$$\begin{aligned} |\beta|^2 &\rightarrow 0 \\ \Leftrightarrow \hbar &\rightarrow 0 \\ \Leftrightarrow m &\rightarrow \infty \\ \Leftrightarrow (V_0 - E) &\rightarrow \infty \\ \Leftrightarrow a &\rightarrow \infty \end{aligned}$$



Probabilité non nulle (bien que très faible) de passer de l'autre côté par effet Tunnel



BIBLIOGRAPHIE

Bibliography

Pour ceux qui souhaitent approfondir...

Y. Quéré: *Physique des matériaux*, Ellipses (1988)

N. Ashcroft, N. Mermin, *Solid State Physics*, Brooks/Cole (2021)

D. François, A. Pineau, A. Zaoui: *Comportement des Matériaux Vol.1 Elasticité et Plasticité*, Hermès (1995)

J. Salençon: *Handbook of Continuum Mechanics*, Springer (2001)

E.B. Tadmor, R.E. Miller: *Modeling Materials*, Cambridge University Press (2011)

J.-L. Basdevant, *Introduction à la Mécanique Quantique*, De Boeck (2017)

B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet: *Physique Statistique*, Hermann (2001)

D. Frenkel, B. Smit: *Understanding molecular simulations: from algorithms to applications*, Academic Press, San Diego (1996).

