

Mouillage statique et dynamique : Influences géométriques aux échelles moléculaires

Antonin Marchand

PMMH – ESPCI
10 rue Vauquelin 75005 Paris

Soutenance de thèse
4 novembre 2011



Aperçu de la thèse

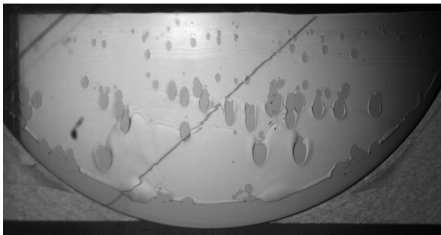
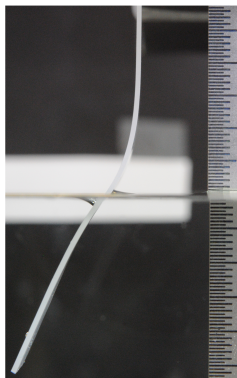
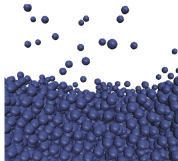
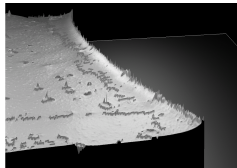
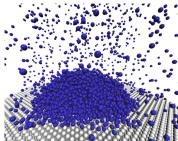
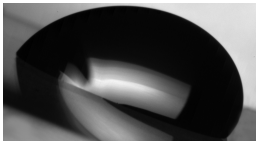
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Aperçu de la thèse

Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

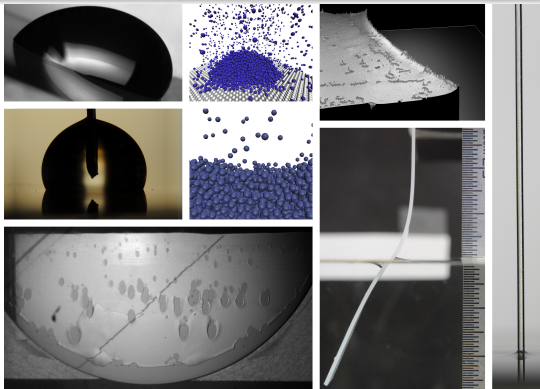
Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

Fil conducteur

- Influences des échelles microscopiques aux échelles macroscopiques
- Phénomènes contrôlés par la géométrie



Aperçu de la thèse

Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

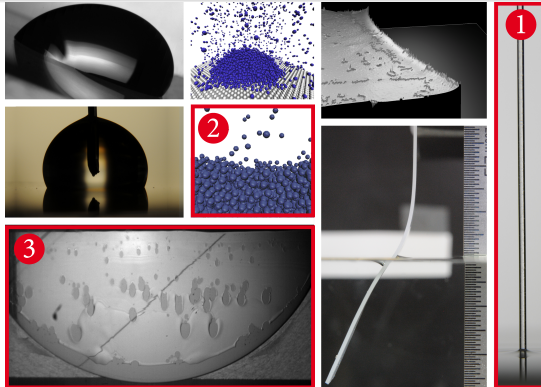
Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

Fil conducteur

- Influences des échelles microscopiques aux échelles macroscopiques
- Phénomènes contrôlés par la géométrie



La tension de surface – un déficit d'énergie de liaison

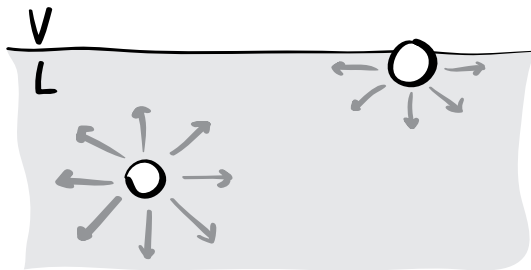
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Définition

$$\gamma_{LV} = \left(\frac{\partial F}{\partial A} \right)_{T, V, n}$$

La tension de surface – une force linéique

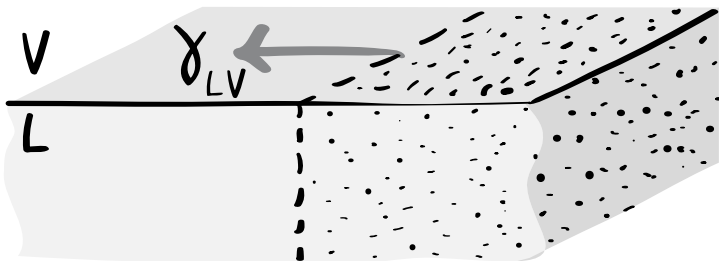
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Principe des travaux virtuels

$$dE = \gamma_{LV} L dx$$

Caractéristiques

- une force linéique attractive
- parallèle à l'interface, normale au contour

La pression de Laplace

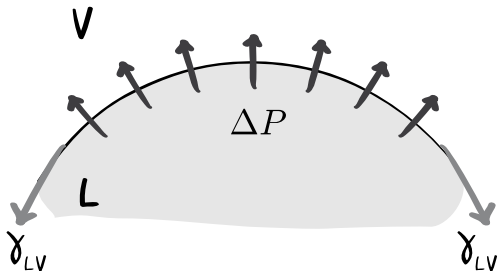
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Pression de Laplace

$$\Delta P = \gamma_{LV} \kappa$$

La ligne de contact

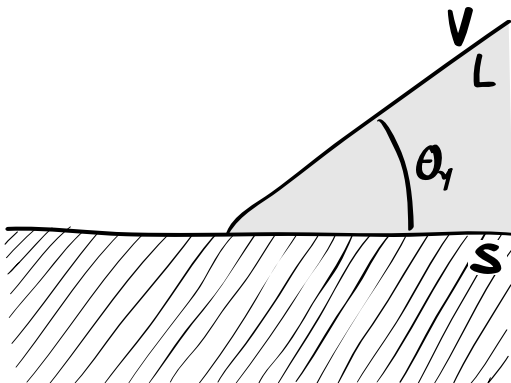
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Loi d'Young

$$\gamma_{LV} \cos \theta_Y = \gamma_{SV} - \gamma_{SL}$$

Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion

Distribution des forces capillaires dans les solides

Un solide élastique immergé

Introduction

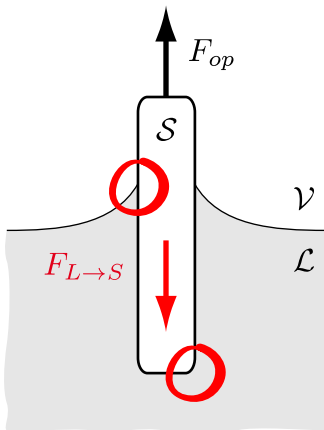
Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

Un solide élastique est-il déformé par un liquide ?



Problématique

Quelles sont les forces qui s'appliquent :

- aux **lignes de contact** ?
- aux interfaces liquide-solide, quelle **pression de Laplace** ?

Observation des déformations élastiques des substrats

Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

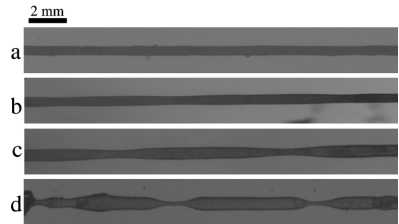
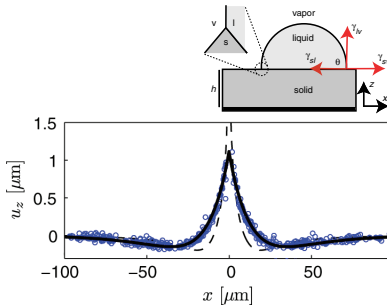
Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

Forces localisées sous la ligne de contact

Pression de Laplace à l'interface solide-liquide



Jerison *et al.*, PRL, 2011

Mora *et al.*, PRL, 2011

Raisonnement macroscopique

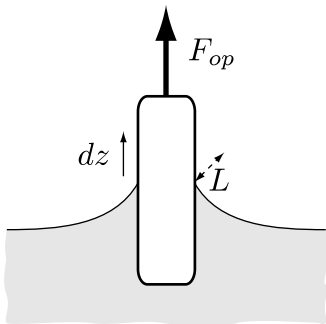
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Principe des travaux virtuels

$$\begin{aligned}dE &= (\gamma_{SV} - \gamma_{SL})L dz \\ &= -F_{L \rightarrow S} dz\end{aligned}$$

Force résultante

$$\frac{\vec{F}_{L \rightarrow S} \cdot (-\vec{u}_z)}{L} = \gamma_{SV} - \gamma_{SL}$$

Raisonnement erroné n°1 : À la ligne de contact

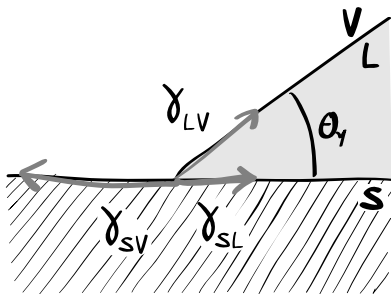
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Une représentation problématique

- Quel **ystème** ?
- Résultante **verticale** ?

$$\gamma_{LV} \cos \theta_Y = \gamma_{SV} - \gamma_{SL}$$

Raisonnement erroné n°1 : À la ligne de contact

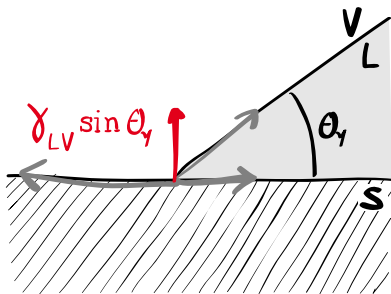
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



exercée par le liquide sur le solide

- Jerison *et al.*, PRL, 2011
- Pericet-Cámara *et al.*, Langmuir, 2008
- Carré *et al.*, Nature, 1996
- Long *et al.*, Langmuir, 1996
- Rusanov, Colloid J. USSR, 1975
- Lester, J. Colloid Sci., 1961

Raisonnement erroné n°1 : distribution correspondante

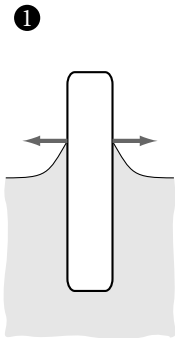
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Raisonnement erroné n°1 : distribution correspondante

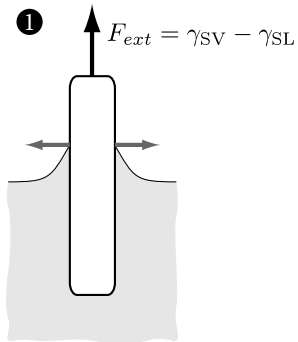
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Raisonnement erroné n°1 : distribution correspondante

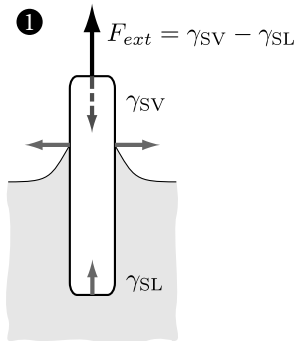
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Raisonnement erroné n°1 : distribution correspondante

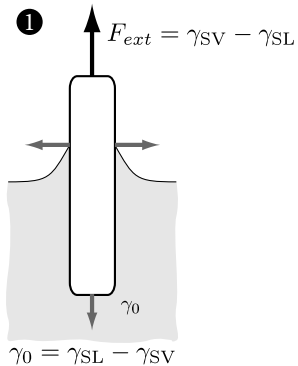
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Raisonnement erroné n°2 : distribution correspondante

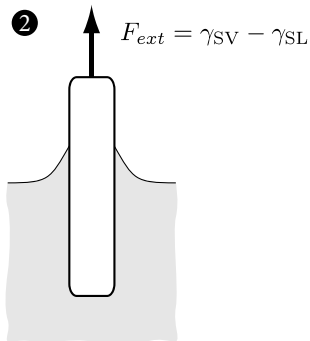
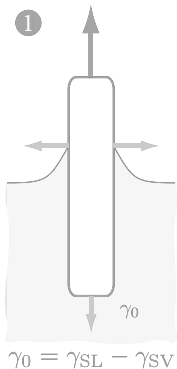
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Raisonnement erroné n°2 : distribution correspondante

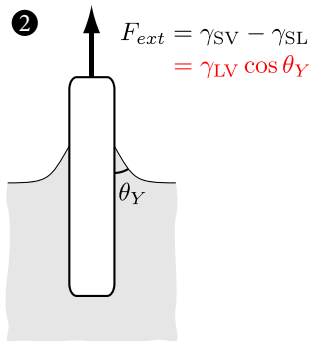
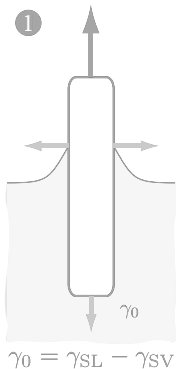
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Raisonnement erroné n°2 : distribution correspondante

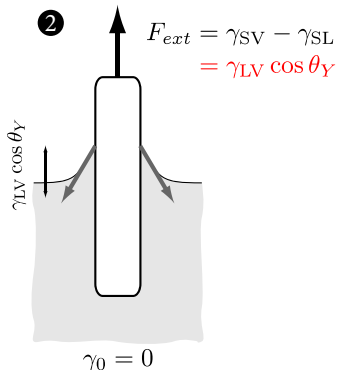
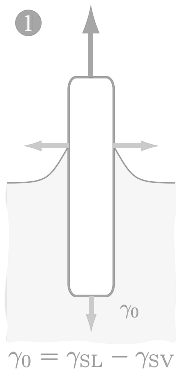
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Pericet-Cámara *et al.*, Langmuir, 2008

Quelle distribution ?

Introduction

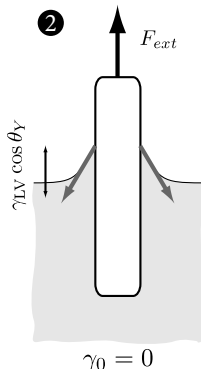
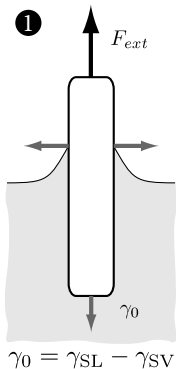
Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

$$F_{ext} = \gamma_{LV} \cos \theta_Y$$



Des représentations problématiques

- à la ligne de contact : une seule force / trois forces ?
- aux interfaces courbées : quelle pression de Laplace ?

Quelle distribution ?

Introduction

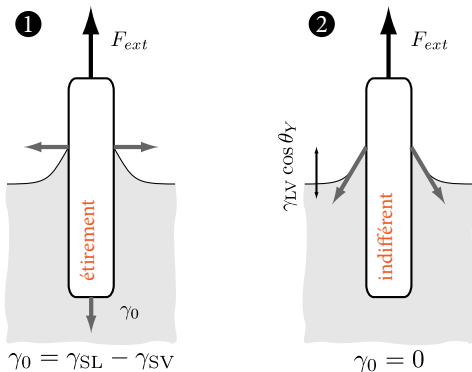
Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

$$F_{ext} = \gamma_{LV} \cos \theta_Y$$



Distinction dans la partie immergée

effets de compression/étirement

Quelle distribution ?

Introduction

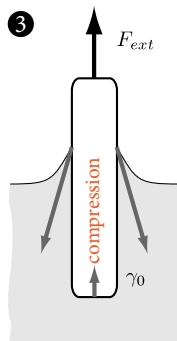
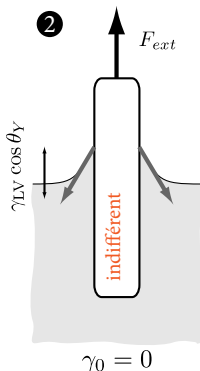
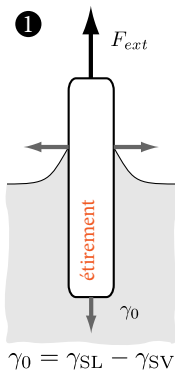
Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

$$F_{ext} = \gamma_{LV} \cos \theta_Y$$



Distinction dans la partie immergée

effets de compression/étirement

Capillaire élastique

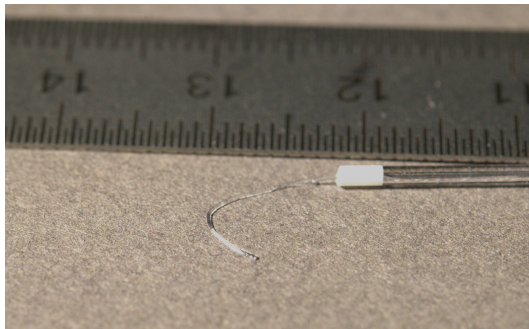
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Suivi du déplacement local

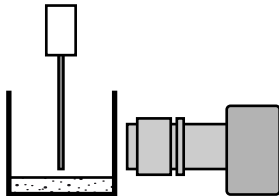
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Suivi du déplacement local

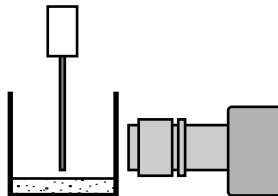
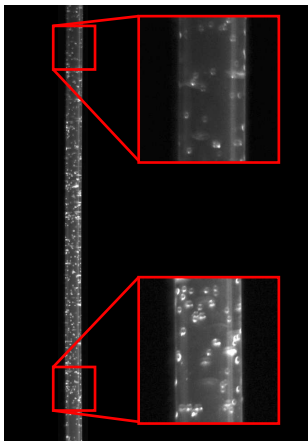
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Suivi du déplacement local

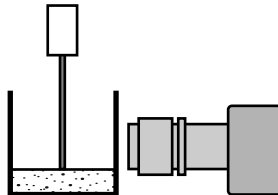
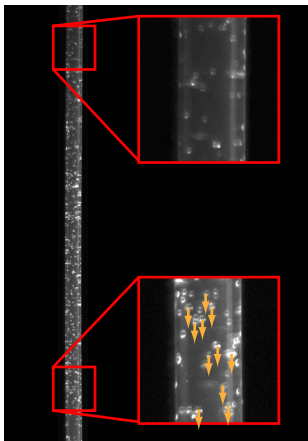
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Suivi du déplacement local

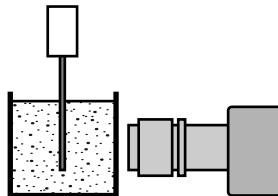
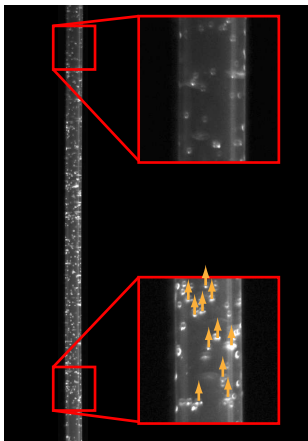
Introduction

**Distribution
des forces
capillaires dans
les solides**

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Déplacement relatif des marqueurs

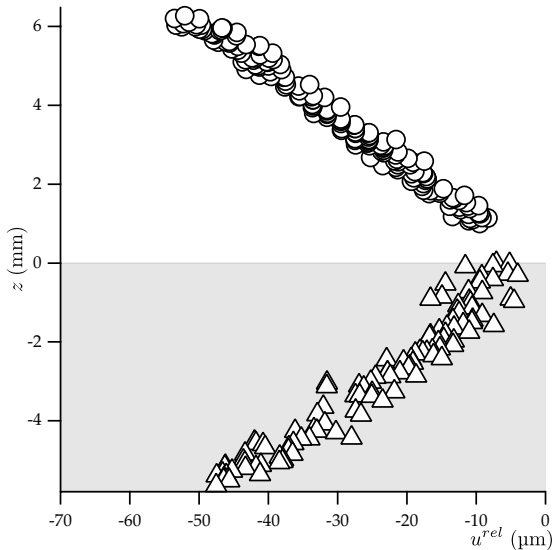
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Déplacement relatifs des marqueurs

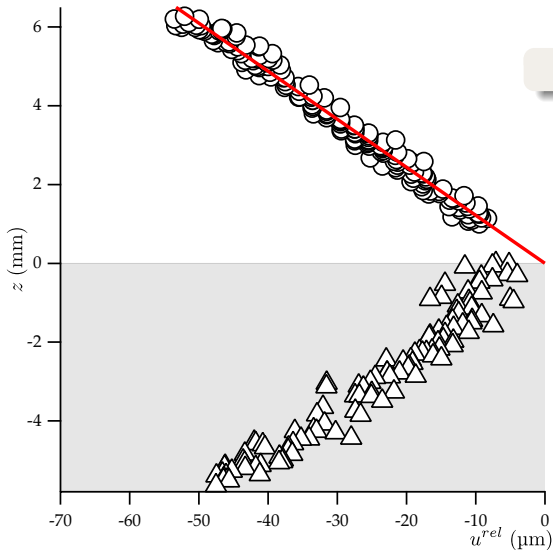
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Dans l'air

- Pente mesurée :
 $(8,06 \pm 0,1) \times 10^{-3}$

- Déformation attendue :

$$\frac{2\gamma_{LV} \cos \theta_Y}{ER}$$

$$= (6,4 \pm 1,9) \times 10^{-3}$$

Déplacement relatifs des marqueurs

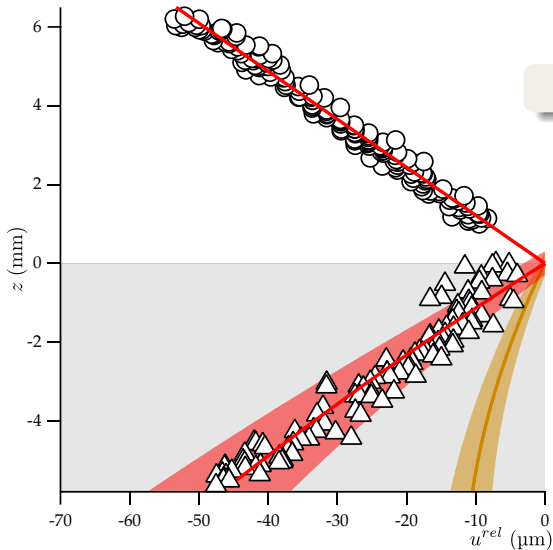
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Dans le liquide

- Pression hydrostatique (jaune)
- Pression de Laplace supplémentaire

$\gamma_0 \kappa$:

$$\frac{\gamma_0}{\gamma_{LV}} = 1,2 \pm 0,3$$

Distribution des forces capillaires

Introduction

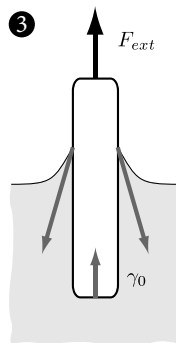
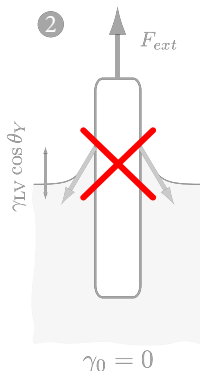
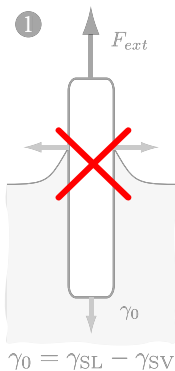
Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

$$F_{ext} = \gamma_{LV} \cos \theta_Y$$



Seul un modèle **microscopique** peut expliciter la distribution des forces

Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

**Modèle de
distribution
microscopique
des forces**

Entraînement
d'air

Conclusion

Modèle de distribution microscopique des forces

La tension de surface en dynamique moléculaire

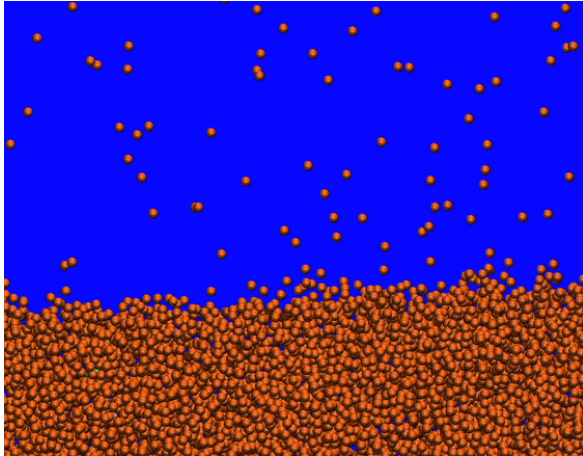
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

**Modèle de
distribution
microscopique
des forces**

Entraînement
d'air

Conclusion



Contraintes à l'interface

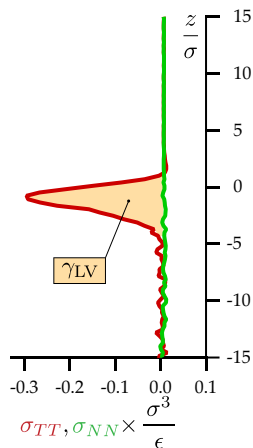
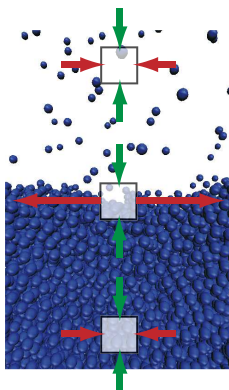
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Quelle est l'origine de l'**anisotropie** des contraintes à l'interface ?

Répulsion et attraction

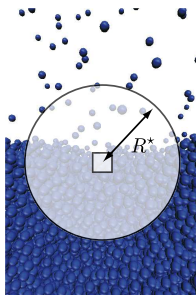
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

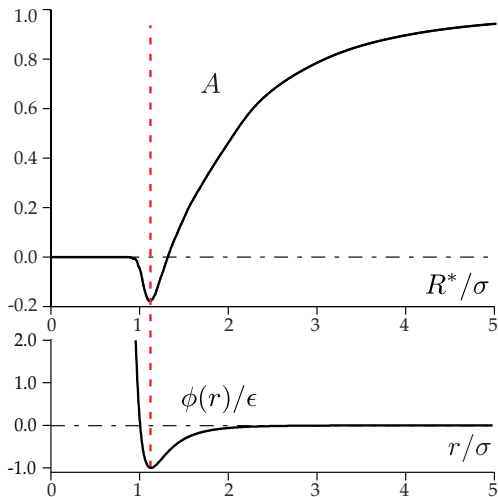
Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



$$A(R^*) = \frac{\bar{\sigma}^{TT}(R^*) - \bar{\sigma}^{NN}(R^*)}{\bar{\sigma}^{TT}(\infty) + \bar{\sigma}^{NN}(\infty)}$$



Modèle géométrique des interactions

Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

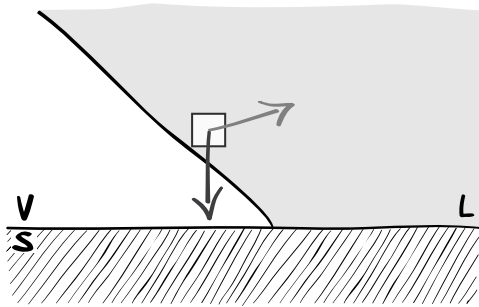
Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion

Hypothèses

- Phases homogènes
- Interfaces infiniment fines
- La répulsion est une force de **contact isotrope**, et détermine la **structure** du liquide loin des interfaces
- L'attraction est une force **volumique** sensible à la **géométrie** de l'environnement



Conséquences 1

Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

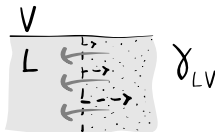
Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

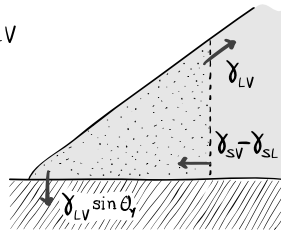
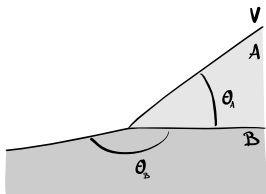
Conclusion

Réinterprétation de la capillarité
quelle que soit la forme du potentiel intermoléculaire

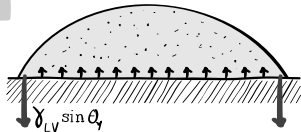
- γ_{LV}



- Loi d'Young



- Loi de Neumann



- Loi de Laplace

Conséquences 2 : Force du liquide sur le solide

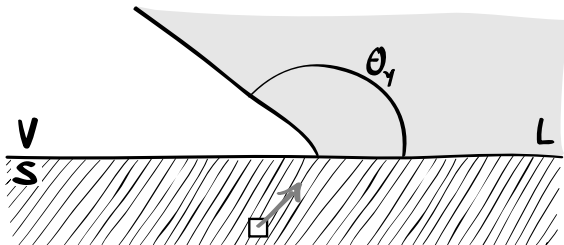
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Conséquences 2 : Force du liquide sur le solide

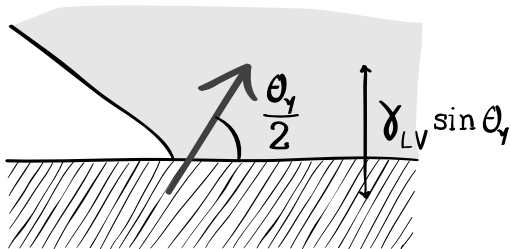
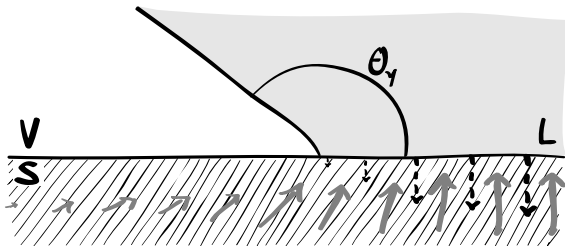
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion



Conséquences 3 : Pression de Laplace à l'interface liquide-solide

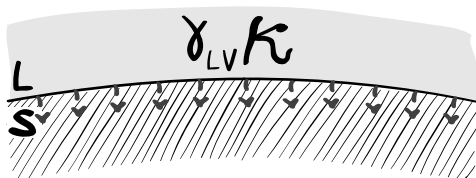
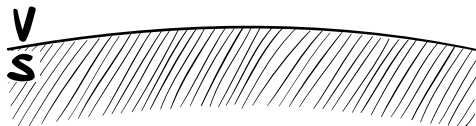
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Interprétation de l'exemple de la plaque

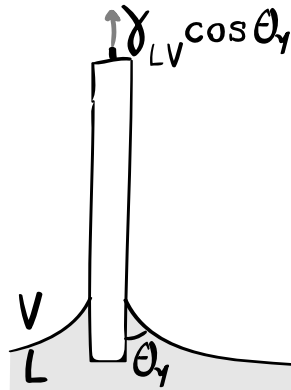
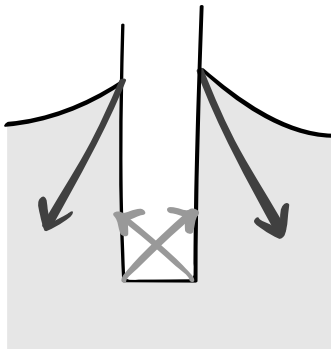
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Compatible avec le bilan thermodynamique

Conclusion

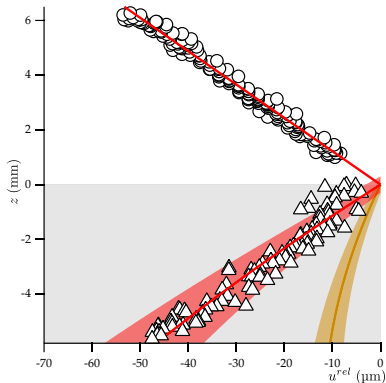
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



$$\frac{\gamma_0}{\gamma_{LV}} = 1,2 \pm 0,3$$

Distribution des forces capillaires

- Deux résultats importants :
 - $F_{L \rightarrow S}$ à la ligne de contact selon la bissectrice du coin de liquide
 - Pression de Laplace $\gamma_{LV} \kappa$ sur le solide

Applications du modèle développées dans la thèse

Introduction

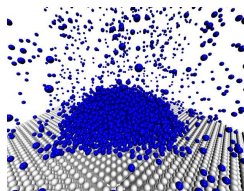
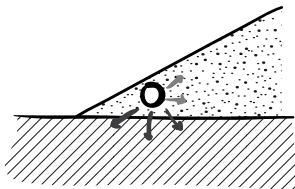
Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion

- Tension de ligne



- Saturation de l'électromouillage
- Déformation du substrat au voisinage de la ligne de contact

Applications du modèle développées dans la thèse

Introduction

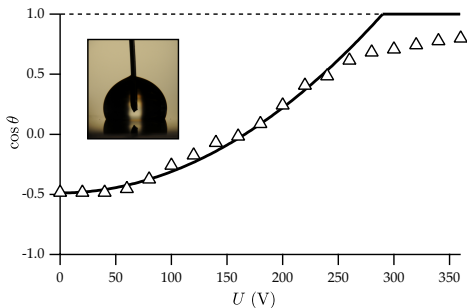
Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

- Tension de ligne
- Saturation de l'électromouillage
- Déformation du substrat au voisinage de la ligne de contact



Applications du modèle développées dans la thèse

Introduction

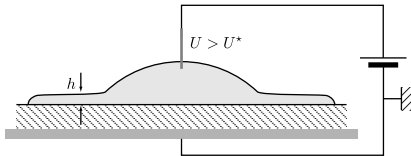
Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

**Modèle de
distribution
microscopique
des forces**

Entraînement
d'air

Conclusion

- Tension de ligne
- Saturation de l'électromouillage
- Déformation du substrat au voisinage de la ligne de contact



Applications du modèle développées dans la thèse

Introduction

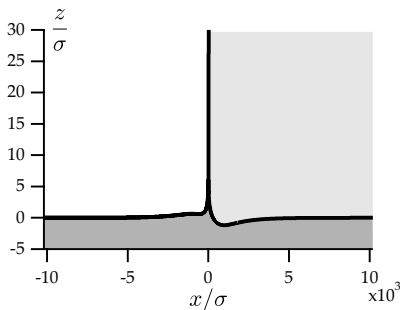
Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion

- Tension de ligne
- Saturation de l'électromouillage
- Déformation du substrat au voisinage de la ligne de contact



Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

**Entraînement
d'air**

Conclusion

Entraînement d'air

Tirage d'un film

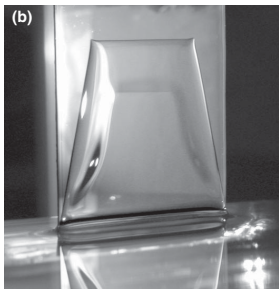
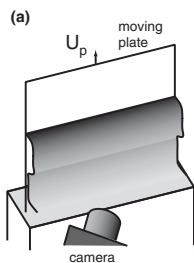
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

**Entraînement
d'air**

Conclusion



Seuil d'entraînement
du liquide

$$U_p > U_e$$

Snoeijer *et al.*, PRL, 2006

Physique de la transition de mouillage dynamique

Introduction

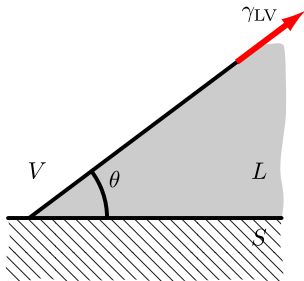
Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

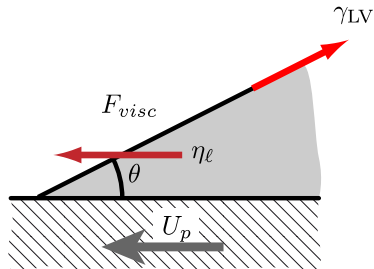
Entraînement d'air

Conclusion

Statique



En reculée



Comparaison contraintes visqueuses / capillaires :

$$Ca = \frac{\sigma_{visc}}{\sigma_{cap}} \approx \frac{\eta l U_p / h}{\gamma_{LV} / h} = \frac{\eta l U_p}{\gamma_{LV}}$$

Dissipation à l'approche de la ligne de contact

Introduction

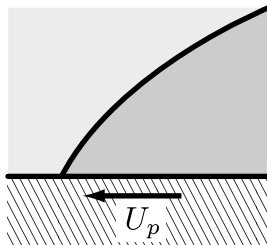
Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion

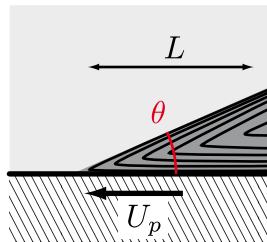
Dissipation sur l'ensemble des échelles micro \rightarrow macro



$$h \searrow \quad \sigma_{visc} \sim \frac{\eta_l U_p}{h} \nearrow$$

$$Ca_e = \frac{\eta_l U_p}{\gamma_{LV}} \approx 10^{-2}$$

Effet de pointe en reculée



à une échelle L donnée :

$$\sigma_{visc} \sim \frac{\eta_l U_p}{L\theta}$$

Avancée de la ligne de contact

Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

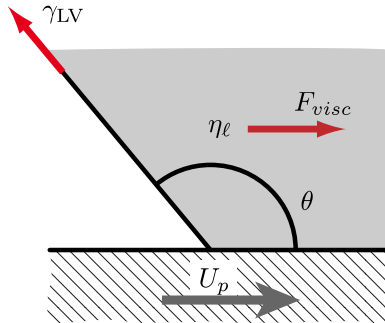
Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion

En avancée ?

$\theta \rightarrow \pi$: l'effet de pointe disparaît !



Entraînement d'air

Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Lorenceau *et al.*, PRL, 2003

Seuil contrôlé par la viscosité du liquide

$$\eta_l$$



Duez *et al.*, Nature Physics, 2007

Importance des propriétés de mouillage



0.24 ms

Driscoll *et al.*, PRE, 2010
Benkreira *et al.*, Chem. Eng. Sci., 2008 et 2010

La réduction de la pression augmente le seuil d'entraînement

Problématique

- Physique de la transition ?
- Dépendance du seuil vis à vis des propriétés du liquide et du gaz ?

Transition de mouillage dynamique en avancée

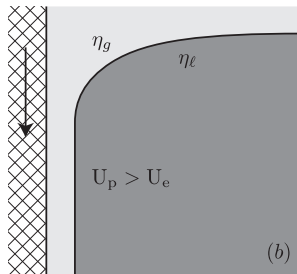
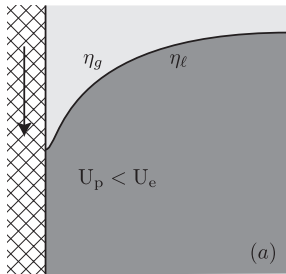
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

**Entraînement
d'air**

Conclusion



Montage expérimental

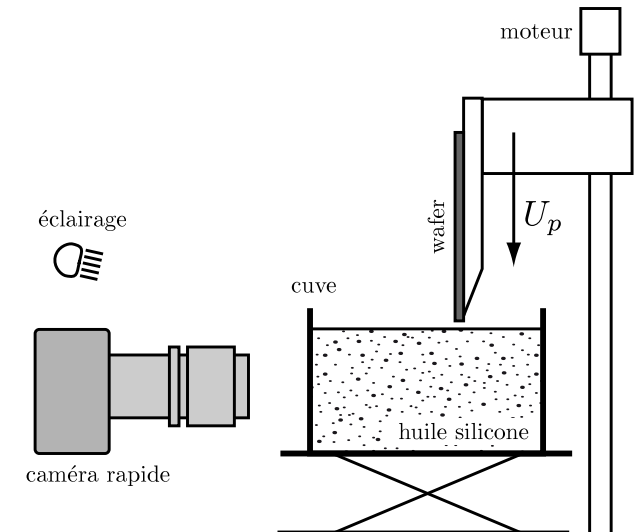
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Au delà du seuil

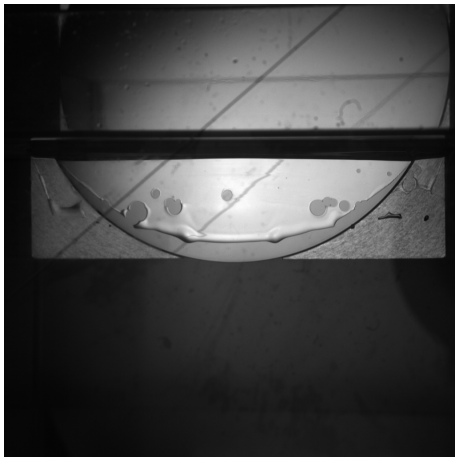
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

**Entraînement
d'air**

Conclusion



Résultats

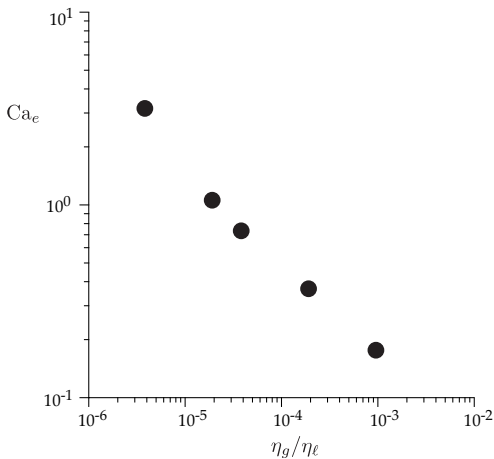
Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

**Entraînement
d'air**

Conclusion



Forte influence de la viscosité de l'air

Interprétation

Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

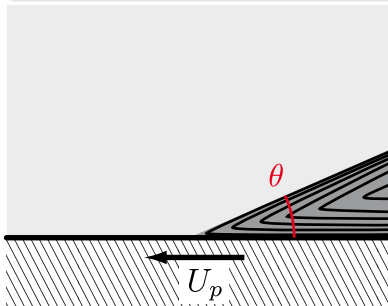
Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion

lorsque le liquide recule

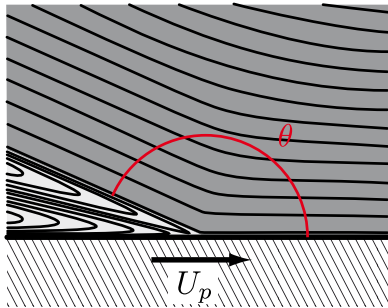
$$\theta \rightarrow 0$$



$$\sigma_\ell \sim \frac{\eta_\ell U_p}{L\theta}$$

lorsque le liquide avance

$$\theta \rightarrow \pi$$



$$\sigma_\ell \sim \frac{\eta_\ell U_p}{L} (\pi - \theta)^2, \quad \sigma_g \sim \frac{\eta_g U_p}{L(\pi - \theta)}$$

Modélisation

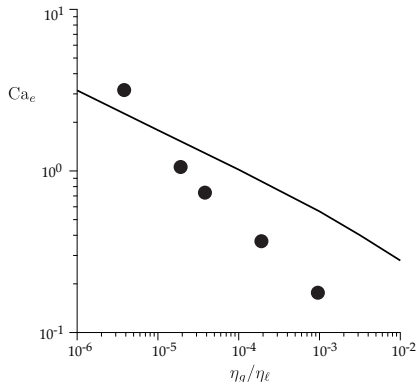
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



Théorie de la lubrification étendue

- À deux phases
- Pente arbitraire mais courbure faible

- Bon ordre de grandeur
- Bon comportement
- Mais solutions fortement courbées

Modélisation : influence de la pression

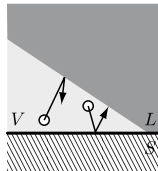
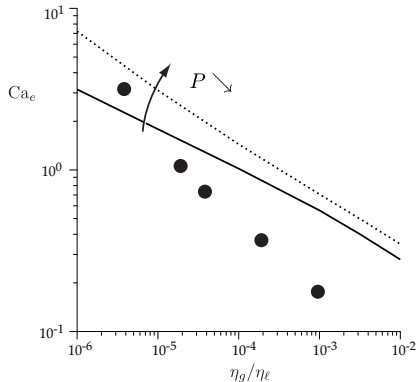
Introduction

Distribution des forces capillaires dans les solides

Modèle de distribution microscopique des forces

Entraînement d'air

Conclusion



$$\ell_{mfp} \sim \frac{1}{P}$$

- Si l'échelle de dissipation dominante dans le gaz \sim le libre parcours moyen, la dissipation baisse.

Conclusion

Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

**Entraînement
d'air**

Conclusion

- Forte influence de la dissipation dans la phase gazeuse
- La pression a une influence sur le libre parcours moyen et donc sur le seuil d'entraînement

Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion

Conclusion

Conclusion

Introduction

Distribution
des forces
capillaires dans
les solides

Modèle de
distribution
microscopique
des forces

Entraînement
d'air

Conclusion

- 1 Élaboration d'un modèle **géométrique** de la capillarité à l'échelle **microscopique**
 - Réinterprète les lois classiques de Young, Neumann, Laplace
 - Explicite la distribution des forces dans un solide
 - Saturation de l'électromouillage
 - Tension de ligne (confirmation par des simulations numériques)
- 2 **Confirmation expérimentale** par l'étude de la compression d'un capillaire élastique
- 3 Étude de la **transition d'entraînement d'air**
 - Effet de confinement **géométrique**
 - Effet des **paramètres microscopiques** : ℓ_{mfp}

Annexes

DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat

Annexes

Interprétation microscopique

Annexes

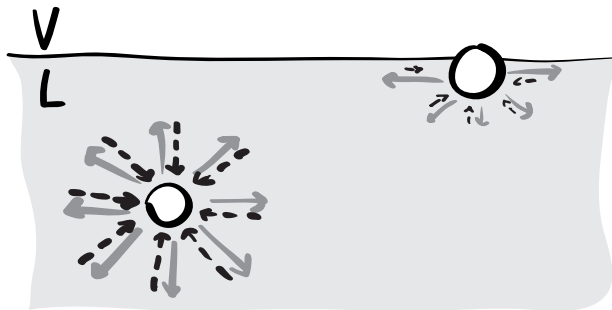
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat



L'interface liquide-vapeur

Annexes

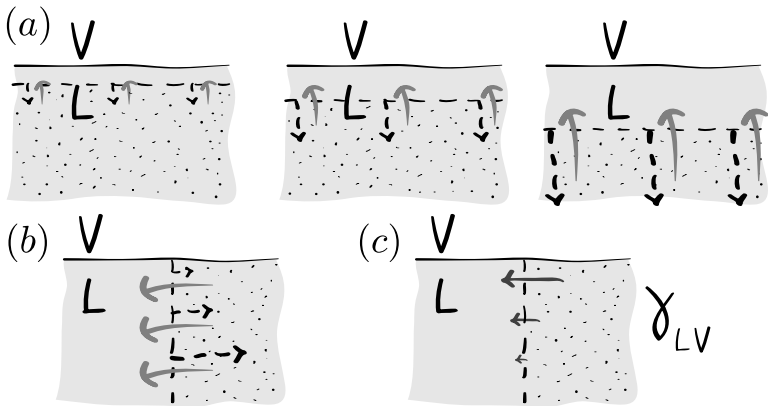
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat



L'interface liquide-solide

Annexes

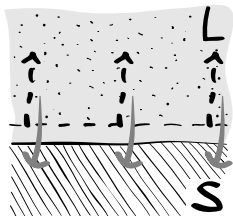
DFT

Tension de
ligne

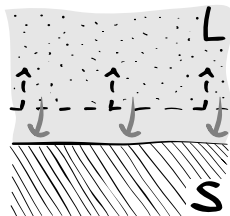
Inhomogénéités

Electromouillage

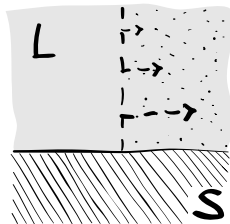
Dissipation
dans le
substrat



(a)



(b)



$$\gamma_{SV} + \gamma_{LV} - \gamma_{SL}$$

Amplitude de l'interaction solide-liquide

Annexes

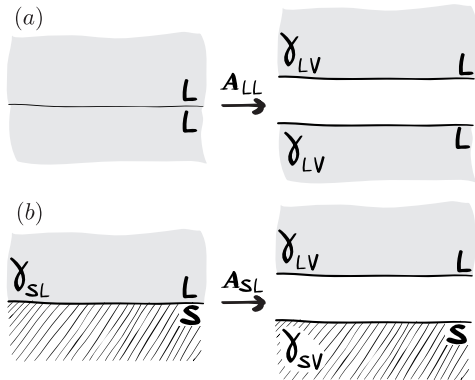
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat



$$A_{LL} = 2\gamma_{LV}$$

$$\begin{aligned} A_{SL} &= \gamma_{SV} + \gamma_{LV} - \gamma_{SL} \\ &= \gamma_{LV}(1 + \cos\theta_Y) \end{aligned}$$

Construction d'Young

Annexes

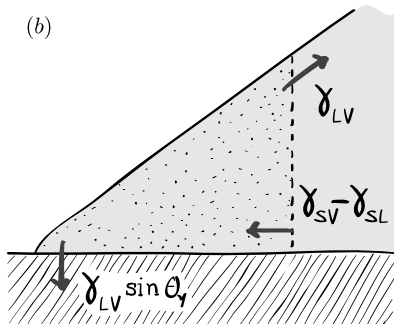
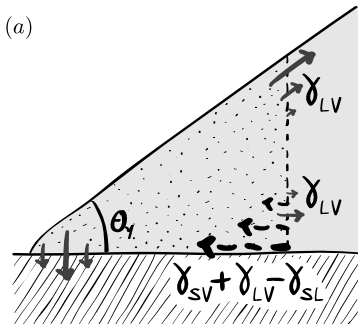
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat



Pression de Laplace

Annexes

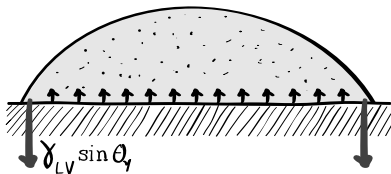
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat



Pression de Laplace

Annexes

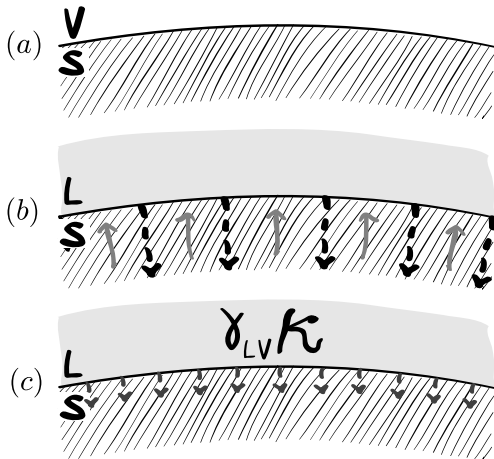
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat



Propriétés de la pression de Laplace

Annexes

DFT

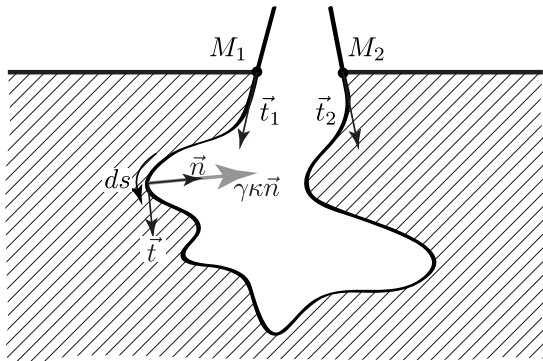
Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat

$$\frac{\vec{F}}{W} = - \int_S \gamma \kappa \vec{n} ds = \gamma (\vec{t}_1 + \vec{t}_2)$$
$$\frac{\vec{M}_O}{W} = - \int_S \gamma \kappa \vec{n} \wedge \vec{OM} ds = \gamma (\vec{t}_1 \wedge \vec{OM}_1 + \vec{t}_2 \wedge \vec{OM}_2)$$



Tension de Ligne

Annexes

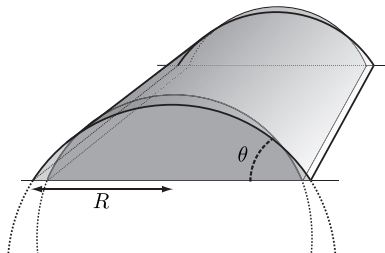
DFT

Tension de ligne

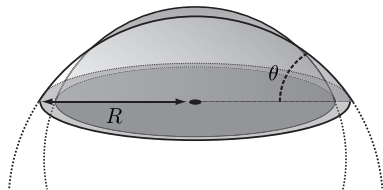
Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation dans le substrat



$$\cos \theta = \cos \theta_Y$$



$$\cos \theta = \cos \theta_Y - \frac{\tau / \gamma_{LV}}{R}$$

Nanogouttes en Dynamique Moléculaire

Annexes

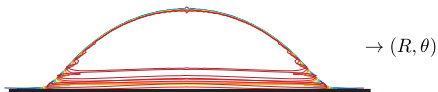
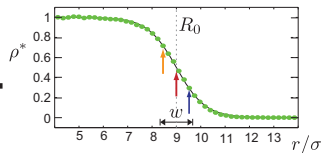
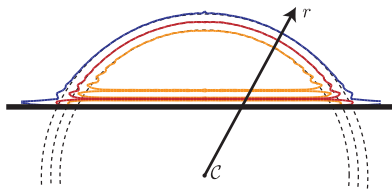
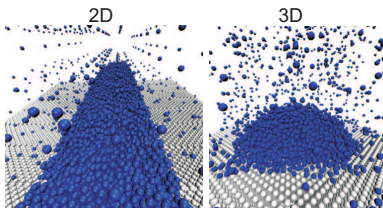
DFT

Tension de ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation dans le substrat



Tension de ligne

Annexes

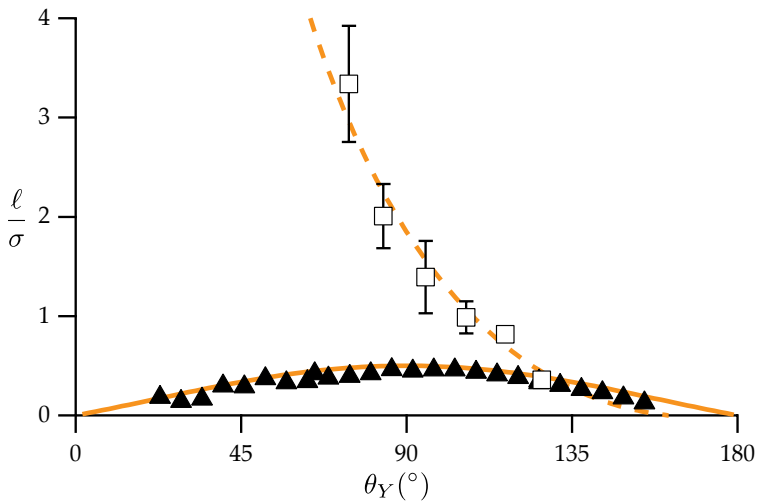
DFT

Tension de ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation dans le substrat



$$\zeta_{LL}^{MD} = (2,9 \pm 0,3) \sigma \quad \zeta_{LS}^{MD} = (0,4 \pm 0,3) \sigma$$

Interprétation géométrique

Annexes

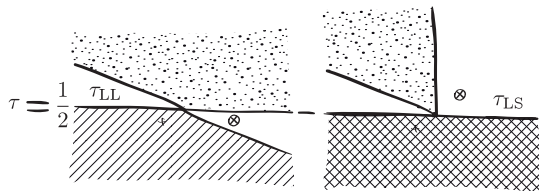
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat



$$\begin{aligned} \ell &= - \frac{\tau_{LL} + \tau_{SL}}{\gamma_{LV}} \\ &= \zeta_{LL} \frac{2}{\pi} \left(1 + \frac{\pi - \theta_Y}{\tan \theta_Y} \right) - \zeta_{SL} \frac{1 + \cos \theta_Y}{\tan \theta_Y} \end{aligned}$$

Tension de ligne – résumé

Annexes

DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat

- Provient du **surcroît d'énergie** de liaison par rapport à un espace semi-infini
- Dominée par les **interactions liquide-liquide**
- $\tau < 0$
- $l \approx \sigma$; $\tau \approx -10^{-11} \text{ J.m}^{-1}$.

Enfin, le **faible ordre de grandeur** de τ explique pourquoi il est très difficile à mesurer expérimentalement.

L'interface liquide-solide

Annexes

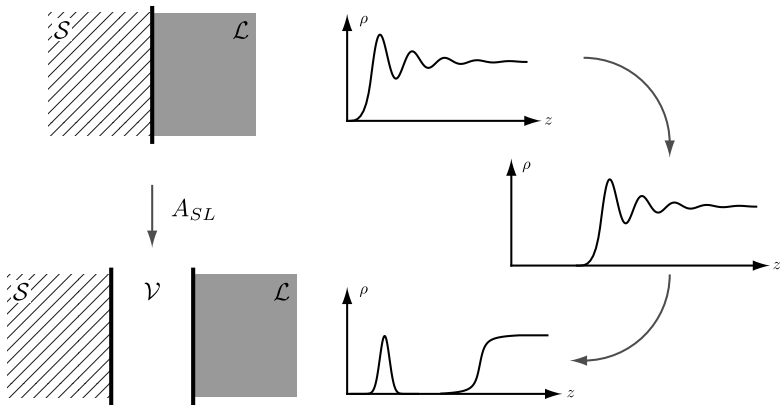
DFT

Tension de ligne

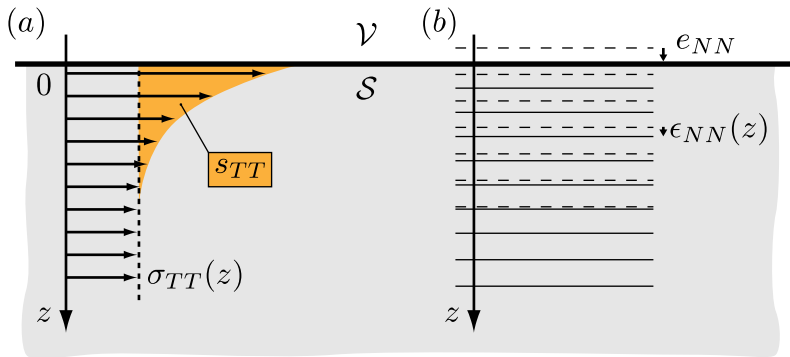
Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation dans le substrat



La tension de surface des solides



$$s_{TT} = \gamma_{SV} + \left(\frac{\partial \gamma_{SV}}{\partial \epsilon_{TT}} \right)_{\mu_i, T, e_{NN}}$$

Electromouillage

Annexes

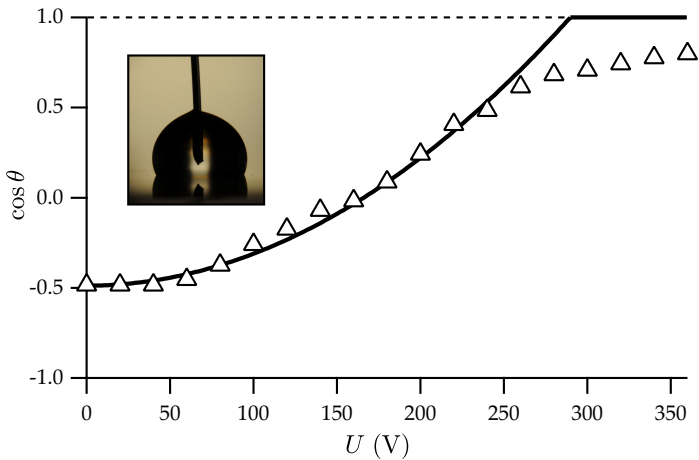
DFT

Tension de ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation dans le substrat



Electromouillage

Annexes

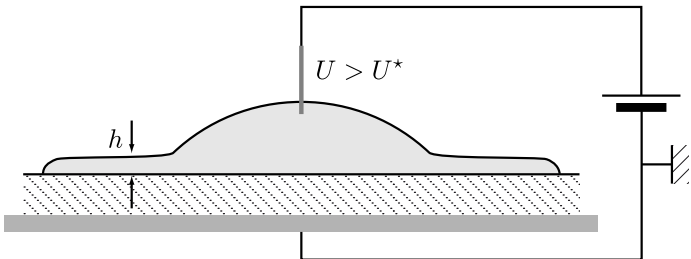
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation
dans le
substrat



Dissipation dans le substrat

Annexes

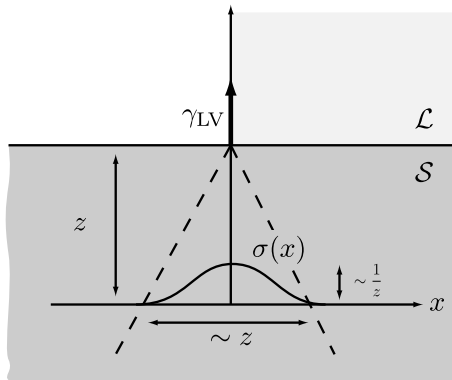
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

**Dissipation
dans le
substrat**



Dissipation dans le substrat

Annexes

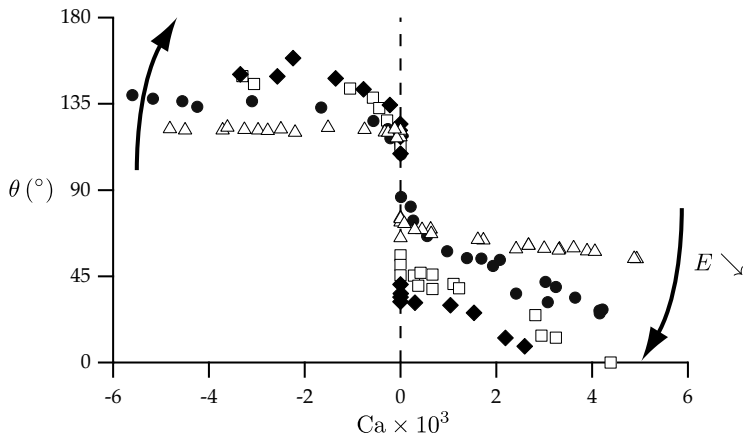
DFT

Tension de ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation dans le substrat



Dissipation dans le substrat

Annexes

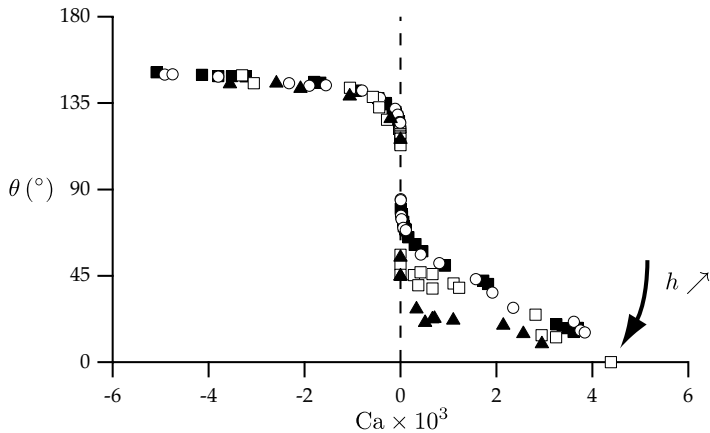
DFT

Tension de
ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

**Dissipation
dans le
substrat**



Dissipation dans le substrat

Annexes

DFT

Tension de ligne

Inhomogénéités

Electromouillage

Dissipation dans le substrat

