



HAL
open science

Analyse numérique du mouillage sur surfaces texturées par la méthode Lattice Boltzmann

Vincent Neyrand

► **To cite this version:**

Vincent Neyrand. Analyse numérique du mouillage sur surfaces texturées par la méthode Lattice Boltzmann. Autre. Université de Lyon, 2021. Français. NNT : 2021LYSEC013 . tel-03283213

HAL Id: tel-03283213

<https://theses.hal.science/tel-03283213>

Submitted on 9 Jul 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



ÉCOLE
CENTRALE LYON

N° d'ordre NNT : 2021LYSEC13

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LYON
PRÉSENTÉE DEVANT L'ÉCOLE CENTRALE DE LYON

ÉCOLE DOCTORALE N° 34
ÉCOLE DOCTORALE DES MATÉRIAUX DE LYON

SPÉCIALITÉ DE DOCTORAT : SCIENCE DES MATÉRIAUX

Vincent NEYRAND

Préparée au Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes - UMR CNRS 5513

**Analyse numérique du mouillage sur surfaces texturées
par la méthode Lattice Boltzmann**

Devant le jury composé de :

Étienne Barthel	DR CNRS, Sorbonne Université	Rapporteur
Julien Bruchon	Professeur, École des Mines de Saint-Étienne	Rapporteur
Juliette Cayer-Barrioz	DR CNRS, École Centrale de Lyon	Présidente du jury
Karine Anselme	DR CNRS, Institut de Science des Matériaux de Mulhouse	Examinatrice
Sophie Costil	Professeur, Université de technologie de Belfort-Montbéliard	Examinatrice
Emmanuel Leveque	DR CNRS, École centrale de Lyon	Examinateur
Stéphane Valette	Professeur, École Centrale de Lyon	Directeur de thèse
Jean-Michel Bergheau	Professeur, École Nationale d'Ingénieur de Saint-Étienne	Co-encadrant

36 Avenue Guy de Collongue, 69134 Ecully Cedex France

Remerciements

Je souhaite remercier ici toutes les personnes qui ont contribué à l'aboutissement du travail de thèse présenté dans ce manuscrit.

Je remercie tout d'abord les membres du jury, pour le temps qu'ils ont consacré à la lecture et à l'évaluation de ce mémoire. Je remercie ainsi M. Julien Bruchon et M. Etienne Barthel, qui ont accepté de rapporter mon travail de thèse. Je remercie également Mme Juliette Cayer-Barrioz, présidente du jury ainsi que les examinateurs Mme Karine Anselme, Mme Sophie Costil et M. Emmanuel Leveque. J'ai particulièrement apprécié la discussion scientifique et nous échanges qui ont suivi la présentation de mes travaux.

Je remercie sincèrement M. Stéphane Valette, directeur de thèse, et M. Jean-Michel Bergheau, co-encadrant, pour le temps qu'ils m'ont accordé, pour leur confiance, leurs conseils et pour l'investissement dont ils ont fait preuve durant mes années de doctorat. Ces années de thèse m'ont donné le goût de la recherche, et l'environnement riche dans lequel j'ai évolué, d'un point de vue scientifique, technique et humain, m'a permis d'évoluer en tant que personne et jeune chercheur.

Je remercie aussi le laboratoire d'excellence MANUTECH-SISE de l'Université de Lyon qui a accordé un financement pour le fonctionnement de la thèse dans le cadre du projet MOST. Je remercie Stéphane pour cela, qui a permis d'avoir ce financement spécifique pour réaliser les simulations de ma thèse sur une machine performante.

Je remercie aussi l'école doctorale Matériaux de Lyon pour leur encadrement et le financement d'un déplacement en conférence à l'étranger.

Je remercie également les personnes bienveillantes avec qui j'ai évolué pendant ces années de thèse, et qui m'ont été d'un grand support technique, scientifique ou administratif. Je remercie ainsi Mme Dominique Vincentelli, Mme Hélène Schoch, Mme Béatrice Chervet, M. Bernard Beaugiraud, M. Stéphane Benayoun et M. Sébastien Leone pour tous les bons moments passés. Merci également aux chercheurs avec qui j'ai pu discuter de mes travaux de recherche durant ces années passées au LTDS. Merci aux doctorants et post-doctorants pour leur aide, leur soutien, mais également pour tous les bons moments passés ensemble : les pauses cafés, les sorties, les conférences, les parties de jeu vidéo ou autre activité ludique! Je remercie également les "anciens doctorants" qui ont assisté à ma soutenance de thèse. Pour finir, je remercie plus particulièrement Johann, Alixe, Quentin, Johnny et Alexandre - vous m'avez beaucoup apporté durant ces années. Merci pour ces bons moments et ces bons souvenirs.

Pour finir, je remercie ma famille pour leur soutien pendant mes années d'étude. J'espère vous avoir rendu fier de m'avoir soutenu toutes ces années.

Université de Lyon

Résumé

Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes

École Centrale de Lyon

Docteur en Science des matériaux

Analyse numérique du mouillage sur surfaces texturées par la méthode Lattice Boltzmann

par Vincent NEYRAND

Ce mémoire de thèse présente une analyse numérique de l'influence de la texturation chimique ou topographique de surface sur le comportement statique et dynamique d'une goutte.

La méthode numérique utilisée pour ces travaux est la méthode Lattice Boltzmann. C'est une méthode qui peut à la fois prendre en compte des interactions globales d'un fluide et des interactions locales entre fluide et solide ce qui est idéal pour simuler le mouillage. Cette méthode est couplée à un modèle d'interaction par pseudo-potentiel qui permet de simuler les interactions entre deux fluides. De plus, afin de contrôler les interactions entre les fluides et un solide texturé chimiquement, une amélioration d'un modèle d'interaction fluide-solide est proposée. En simulant le mouillage sur surfaces texturées à l'aide de cet outil numérique, deux phénomènes de ligne triple sont observés en fonction des textures : le collage et la relâche.

Le phénomène de collage a pour effet de bloquer la ligne triple dans certaines conditions, en fonction de l'intensité des textures. Si ces conditions ne sont pas respectées, la ligne triple est tout de même ralentie en fonction de l'intensité de la texture. Le phénomène de collage tend à réduire l'étalement d'une goutte.

Le phénomène de relâche est opposé au collage, il a pour effet de forcer un déplacement de ligne triple. Ce déplacement est induit par une accélération de ligne triple lorsqu'une texture est franchie. Le phénomène de relâche tend à augmenter l'étalement d'une goutte.

Par l'étude dynamique, il a été montré que l'interface liquide-gaz se déforme pendant l'étalement. Cette déformation se propage dans la goutte et peut localement dépasser les conditions d'équilibre d'une goutte sur une surface. De plus, lorsque la ligne triple traverse une texture, une déformation au niveau de l'interface liquide-gaz est aussi générée et propagée.

A la lumière de ces résultats, est finalement discutée l'influence de la texturation sur l'étalement d'une goutte : le comportement de la ligne triple et la déformation de l'interface liquide-gaz.

Mots clés : Simulation numérique, Méthode Lattice Boltzmann, Mouillage, Texturation de surface, ligne triple.

Université de Lyon

Abstract

Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes

École Centrale de Lyon

PhD in Materials Science

Numerical analysis of wetting on textured surfaces by Lattice Boltzmann Method

by Vincent NEYRAND

This manuscript presents a numerical analysis of the influence of chemical or topographic surface texturing on the static and dynamic behaviour of a drop.

The numerical method used for this work is the Lattice Boltzmann method. It is a method that can both consider the global interactions of a fluid and the local interactions between fluid and solid which is ideal for simulating wetting. This method is coupled to a pseudo-potential interaction model which allows to simulate the interactions between two fluids. In addition, in order to control the interactions between fluids and a chemically textured solid, an improvement of a fluid-solid interaction model is proposed. By simulating wetting on textured surfaces using this numerical tool, two triple line phenomenons are observed as a function of the textures: sticking and release.

The sticking phenomenon has the effect of blocking the triple line under certain conditions, depending on the intensity of the textures. If these conditions are not respected, the triple line is still slowed down depending on the intensity of the texture. The phenomenon of sticking tends to reduce the spread of a drop.

The releasing phenomenon is the opposite of sticking, it has the effect of forcing a displacement of the triple line. This displacement is induced by a triple line acceleration when a texture is crossed. The releasing phenomenon tends to increase the spread of a drop.

By dynamic study, it has been shown that the liquid-gas interface is deformed during spreading. This deformation propagates within the drop and can locally exceed the equilibrium conditions of a drop on a surface. In addition, when the triple line crosses a texture, deformation at the liquid-gas interface is also generated and propagated.

In the light of these results, the influence of texturing on the spreading of a drop is finally discussed: the behaviour of the triple line and the deformation of the liquid-gas interface.

Keywords: Numerical Simulation, Lattice Boltzmann Method, Wetting, Surface texturation, Triple line.

Sommaire

Remerciements	iii
Résumé	v
Introduction générale	1
I État de l’art	5
1 Mouillabilité	7
1.1 Forces capillaires	8
1.1.1 Tension de surface fluide-fluide	9
1.1.2 Interface courbe	13
1.2 Propriété de mouillabilité	16
1.2.1 Goutte sessile	16
1.2.2 Hystérèse d’angle de contact	16
1.3 Mouillage statique	18
1.3.1 Goutte en équilibre	18
1.3.2 Approche par aire de contact	19
1.3.3 Approche par ligne triple	22
Goutte en suspension	24
Goutte imprégnée	26
1.3.4 Mouillage mixte	28
1.4 Mouillage dynamique	30
1.4.1 Approche énergétique	30
1.4.2 Echelle Macroscopique	34
1.4.3 Echelle mésoscopique	35
1.4.4 Echelle microscopique	36
1.5 Conclusion	38
2 Simulation numérique du mouillage	39
2.1 Simulation du mouillage par l’approche macroscopique	41
2.1.1 Comment suivre une interface ?	41
2.1.2 Etude avec éléments finis et level-set avec une approche variationnelle	44
2.1.3 Combinaison de l’approche macroscopique avec la VOF et de l’approche microscopique avec la MD	45
2.1.4 Etude de la dynamique de l’étalement d’une goutte sur surface plane avec ou sans vitesse initiale par Front Tracking et Navier-Stokes	46
2.2 Simulation du mouillage par l’approche mésoscopique	48
2.2.1 Etude de la transition entre l’état Cassie et l’état Wenzel	48
2.2.2 Etude de la texturation chimique	50
2.2.3 Etude dynamique	50
2.2.4 Etude sur surface réelle	51

2.3	Choix de la méthode	54
3	Présentation de la Méthode Lattice Boltzmann	55
3.1	Origine physique de la méthode	56
3.2	Discretisation de l'équation de transport de Boltzmann pour la LBM	63
3.2.1	Restriction de l'espace des vitesses	63
3.2.2	La fonction de distribution discrète des particules	64
3.2.3	Loi de conservation	65
3.2.4	Equilibre local	65
3.2.5	Opérateur de collision	65
3.2.6	Conditions aux bords	66
3.2.7	Algorithme	69
3.3	LBM appliquée au mouillage	70
3.3.1	Modèle du gradient de couleur	70
3.3.2	Modèle Multi-phase Multi-composants	71
3.3.3	Modèle avec l'énergie libre	73
3.3.4	Conclusion	74
II	Méthode numérique et résultats	75
4	Modélisation numérique du mouillage par la LBM	77
4.1	LBM appliquée au mouillage	78
4.1.1	Choix des modèles numériques pour simuler le mouillage avec la Méthode Lattice Boltzmann	78
4.1.2	Modification du modèle d'interaction fluide solide	79
4.2	Présentation de l'outil de simulation	81
4.2.1	Caractéristiques techniques	81
4.2.2	Paramétrage des simulations	82
4.3	Validation de l'outil	84
4.3.1	Interface fluide-fluide	84
4.3.2	Interface solide-fluide	85
4.3.3	Conclusion	86
5	Etude du mouillage statique sur des surfaces de référence	89
5.1	Présentation de l'étude	90
5.1.1	Principe	90
5.1.2	Paramétrage numérique pour l'étude de l'effet de la texturation chimique	91
5.1.3	Paramétrage numérique pour l'étude de l'effet de la texturation topographique	94
5.1.4	Données caractéristiques	96
5.2	Résultats pour l'étude de la texturation chimique	98
5.2.1	Résultats de l'étude numérique	98
5.2.2	Résultats de l'étude théorique de la force de déplacement de ligne triple	102
5.2.3	Conclusion	106
5.3	Résultats pour l'étude de la texturation topographique	109
5.3.1	Résultats de l'étude numérique	109
5.3.2	Résultats de l'étude théorique de la force de déplacement de ligne triple	120
5.3.3	Conclusion	123
5.4	Conclusion	125
6	Caractérisation phénoménologique et limites du mouillage statique	127

6.1	Introduction	128
6.2	Comportements caractéristiques identifiés	128
6.2.1	Collage	128
6.2.2	Relâche	130
6.3	Limites des études statiques	132
6.3.1	L'infinité de points triples	132
6.3.2	Texturation périodique	133
6.3.3	Priorité d'étalement	138
6.3.4	Mouillage 3D	141
6.3.5	Influence de la dynamique	144
6.4	Conclusion	146
7	Caractérisation de la dynamique de l'étalement d'une goutte sur une surface par simulation numérique	147
7.1	Etude du comportement dynamique d'une goutte sur une surface plane et chimiquement homogène	148
7.2	Etude de l'effet de la texturation chimique sur le comportement dynamique d'une goutte pour des surfaces à une texture	154
7.2.1	Paramétrage de l'étude	154
7.2.2	Effet du collage chimique sur le comportement dynamique d'une goutte	154
	Texture dans le domaine I (fig. 7.7)	154
	Texture dans le domaine II (fig. 7.8)	156
	Texture dans le domaine III (fig. 7.9)	157
	Texture dans le domaine IV (fig. 7.10)	159
7.2.3	Effet de la relâche chimique sur le comportement dynamique d'une goutte	160
7.2.4	Conclusion sur l'effet de la texturation chimique sur le comportement dynamique de l'étalement d'une goutte	160
7.3	Etude de l'effet de la texturation topographique sur le comportement dynamique d'une goutte pour des surfaces à une texture	161
7.3.1	Paramétrage de l'étude	161
7.3.2	Effet du collage topographique sur le comportement dynamique d'une goutte	162
	Texture dans le domaine I (fig. 7.14)	162
	Texture dans le domaine II (fig. 7.15)	162
	Texture dans le domaine III (fig. 7.16)	165
	Texture dans le domaine IV (fig. 7.17)	166
7.3.3	Effet de la relâche topographique sur le comportement dynamique d'une goutte	166
7.3.4	Effet de la texturation topographique continue sur le comportement dynamique d'une goutte	168
7.3.5	Conclusion sur l'effet de la texturation topographique sur le comportement dynamique de l'étalement d'une goutte	168
7.4	Etude de l'effet des texturations périodiques sur le comportement dynamique d'une goutte	172
7.4.1	Etude de l'effet de la texturation chimique périodique sur le comportement dynamique d'une goutte	172
7.4.2	Etude de l'effet de la texturation topographique périodique sur le comportement dynamique d'une goutte	175
7.4.3	Conclusion sur l'effet de la texturation périodique chimique et topographique	176
7.5	Discussions et conclusion	179

Conclusion générale et perspectives	181
A Etude de l'effet de la relâche chimique sur le comportement dynamique d'une goutte	185
Texture dans le domaine I (fig. A.1)	185
Texture dans le domaine II (fig. A.2)	185
Texture dans le domaine III (fig. A.3)	186
Texture dans le domaine IV (fig. A.4)	187
B Etude de l'effet de la relâche topographique sur le comportement dynamique d'une goutte	191
Texture dans le domaine I (fig. B.1)	191
Texture dans le domaine II (fig. B.2)	191
Texture dans le domaine III (fig. B.3)	192
Texture dans le domaine IV (fig. B.4)	192
Références	197

Table des figures

1	Surface d'une feuille de lotus (image de William Thielicke)	1
2	Topographie de la peau de requin [10]	2
3	Patte de Gecko (image de Ali Dhinojwala, University of Akron)	2
1.1	Gouttes d'eau sur une feuille de bambou (photo de Q. Legrand LTDS).	8
1.2	Bulle de savon : sphère parfaite (photo libre de droits de Pixabay).	9
1.3	Force de tension appliquée à l'interface.	9
1.4	Représentation du manque de liaisons pour une molécule en surface par rapport à une molécule dans le bulk [34].	10
1.5	Représentation des forces d'attraction (gris) et répulsion (pointillés) pour une molécule proche de l'interface et une molécule dans le bulk [34].	11
1.6	Interface diffuse [34].	11
1.7	Forces de répulsion (pointillés) et d'attraction (gris) verticales exercées dans un espace semi infini de liquide sur un sous-système donné (région grise tachetée) par le reste du liquide (région grise non tachetée).	12
1.8	Forces de répulsion (pointillés) et d'attraction (gris) horizontales exercées dans un espace semi infini de liquide sur un sous-système donné (région grise tachetée) par le reste du liquide (région grise non tachetée).	12
1.9	Résultante de la force attractive et répulsive [34].	12
1.10	Goutte sphérique de liquide (L) à l'équilibre et entouré de gaz (G).	13
1.11	Tube capillaire avec remontée capillaire du liquide.	14
1.12	Équilibre des forces dans le cas d'une ascension capillaire.	15
1.13	Essai de mouillabilité par le test de la goutte sessile.	16
1.14	Hystérèse d'angle de contact.	17
1.15	Mesure de l'hystérèse par variation de volume.	17
1.16	Mesure de l'hystérèse par tiltage.	17
1.17	Equilibre de Young.	18
1.18	Régime de Wenzel [46].	19
1.19	Régime de Cassie-Baxter [46].	20
1.20	Deux configurations : a) Etat Wenzel, b) Etat Cassie.	20
1.21	Représentation des états de Cassie-Baxter et de Wenzel selon l'approche de Marmur faisant intervenir l'énergie libre de Gibbs des systèmes [49].	20
1.22	Angle critique de transition Cassie vers Wenzel.	21
1.23	Essais d'Extrand [50].	22
1.24	Configurations étudiées : a) un seul matériau sans textures, b) texture chimique centrale, c) texture topographique centrale [51].	23
1.25	Textures proposées par Gao et McCarthy [51], d est le diamètre de l'aire texturée et D est le diamètre de la goutte. La taille de la barre dans l'image d vaut $10 \mu\text{m}$	23
1.26	Mesure des hystérèses intrinsèques [54].	24
1.27	Substrat proposé par Extrand en 2002 pour étudier l'hystérèse [52].	25
1.28	Évolution de l'angle d'avancée [52].	25
1.29	Evolution de l'angle de reculée [52].	26

1.30	Résultats du premier modèle d'Extrand 2002 [52].	26
1.31	Représentation de la ligne triple externe et interne de l'équation (1.62) [59].	28
1.32	Représentation du mouillage en fonctions des échelles d'étude : échelle macroscopique, mésoscopique et microscopique [63].	30
1.33	Barrières énergétiques W_1 et W_2 entre deux états stables [67].	31
1.34	Goutte avec déplacement imposé par une texture [68].	31
1.35	Deux configuration O et O' [68].	32
1.36	Schéma de l'étude de Dubov <i>et al.</i> [69].	33
1.37	Comparaison des résultats avec la méthode de Dubov [69]	34
1.38	Angle macroscopique [63].	35
1.39	Allure de la force de déplacement de la ligne triple en fonction de l'angle d'équilibre θ_e et de l'angle dynamique θ_d	35
1.40	Angle mésoscopique [63].	36
1.41	Angle microscopique [63].	36
1.42	Représentation de la MKT.	37
2.1	Approches pour simuler les équations de transport des fluides en fonction de l'échelle considérée.	40
2.2	Traceurs sur l'interface.	42
2.3	Maillage VOF [81].	42
2.4	Méthodes de reconstruction [81].	43
2.5	Simulations sur surfaces planes. a) surface hydrophobe, b) surface hydrophile [94].	44
2.6	Simulation de montée capillaire [94].	44
2.7	Simulation de coalescence de gouttes [94].	45
2.8	Approche multi échelle, les frontières de type I et II sont présimulées avec la dynamique moléculaire. La méthode VOF est appliquée à tout le système [78].	45
2.9	Calcul de l'angle dynamique avec la MKT [78].	45
2.10	Comparaison des simulations MD et approche multi-echelle [78].	46
2.11	Etats d'équilibre à 60° et 90° [80].	46
2.12	Etude dynamique de Manservigi et Scardovelli sur l'étalement d'une goutte [80].	47
2.13	Schéma de l'étude de Gong <i>et al.</i> [96].	48
2.14	Résultats de la validation sur plan a) angle de 105° et b) angle de 130°	48
2.15	Résultats de la validation de l'état d'équilibre : a) Etat de Wenzel pour $\theta_Y = 105^\circ$ et b) Etat de Cassie pour $\theta_Y = 130^\circ$	49
2.16	Transition d'un état Wenzel vers un état Cassie.	49
2.17	Images de la forme de la goutte pour des bandes de taille $\delta_1/R = \delta_2/R = 7/25$	50
2.18	Angle de contact obtenus par simulation en fonction de paramètre de mouillage η_{wet} imposé.	51
2.19	Etalement d'une goutte sur une surface à bande hydrophile et hydrophobes.	51
2.20	Vue de profil du déplacement d'une goutte induit par un gradient topographique.	52
2.21	Evolution de la ligne triple avant (Edge C) et arrière (Edge D) en fonction du temps.	52
2.22	Simulation par la méthode Lattice Boltzmann d'une goutte sur les surfaces produites par abrasion [104].	53
2.23	Simulation de mouillage anisotrope sur des surfaces en alliage de titane rayées avec un angle de contact de 50° à 150° [105].	53
3.1	Evolution de la position et du vecteur vitesse d'une particule	56
3.2	Représentation d'une particule qui se déplace librement dans un tube en suivant la direction x	57

3.3	Représentation des points compris entre deux sphères centrées de rayon c et $c + dc$ qui correspondent aux particules de vitesse comprise entre c et $c + dc$.	59
3.4	Schéma a)D2Q9 et b)D3Q15.	64
3.5	Inconnues aux bords	66
3.6	Conditions périodiques pour la frontière gauche.	67
3.7	Condition de non-glissement, half-way bounce-back.	67
3.8	Schéma du cas Zou He [115].	68
3.9	Algorithme LBM.	69
3.10	Nouvel algorithme LBM pour le mouillage intégrant l'étape de calcul des forces d'interactions suivant le modèle Shan-Chen.	71
3.11	Algorithme LBM avec méthode Shan-Chen et deux fluides	72
4.1	Schéma des conditions aux bords des études en mouillage.	78
4.2	Conditions de simulation.	79
4.3	Schéma de l'étude du potentiel d'interaction modifié.	79
4.4	Evolution de la fonction $F_{ads,\sigma}$ en fonction du solide.	80
4.5	Paramétrage d'une simulation.	82
4.6	Etude de l'interface fluide-fluide, a-b) États initial et final de la simulation 2D, c-d) États initial et final de la simulation 3D.	85
4.7	Circularité et perte de masse du liquide pour l'étude de l'interface fluide-fluide.	86
4.8	Interface liquide-solide, a) sans amorce (50% liquide en contact) et b) avec amorce (100% de liquide en contact avec le solide).	87
4.9	États initiaux et finaux pour des gouttes en 2D et 3D sur des substrats plans.	88
4.10	Résultats des tests de validation de l'interface liquide-solide.	88
5.1	Configurations pour l'étude de la texturation chimique.	90
5.2	Configurations pour l'étude de la texturation topographique.	91
5.3	Côté droit de la texturation symétrique de la surface, et le rayon de domaine central r .	92
5.4	Etats initiaux pour l'étude chimique d'une goutte statique	93
5.5	Configurations initiales pour l'étude statique de l'effet de la texturation chimique.	93
5.6	Design des surfaces avec une texture brusques.	94
5.7	Cas impossible pour $\psi = 315^\circ$.	94
5.8	Substrats pour l'étude topographique continue.	95
5.9	Configurations initiales pour l'étude statique de l'effet de la texturation topographique brusque et continue.	95
5.10	États initiaux (A, C) et finaux (B, D) pour la simulation à l'avancée et reculée de ligne triple. États finaux B et D identiques.	96
5.11	Simulations de référence A) substrat hydrophile, B) substrat neutre et C) substrat hydrophobe.	97
5.12	Angle d'équilibre et rayon mouillé en fonction de la position de la frontière r pour une transition $Hi \rightarrow Ho$ avec une ligne triple qui avance : a) angle statique et b) rayon mouillé.	98
5.13	Angle d'équilibre et rayon mouillé en fonction de la position de la frontière r pour une transition $Hi \rightarrow Ho$ avec une ligne triple qui recule : a) angle statique et b) rayon mouillé.	99
5.14	Angle d'équilibre et rayon mouillé en fonction de la position de la frontière r pour une transition $Ho \rightarrow Hi$ avec une ligne triple qui avance: a) angle statique et b) rayon mouillé.	100

5.15	Angle d'équilibre et rayon mouillé en fonction de la position de la frontière r pour une transition $Ho \rightarrow Hi$ avec une ligne triple qui recule: a) angle statique et b) rayon mouillé.	101
5.16	Évolution de la force de déplacement de ligne triple avec un phénomène de collage induit par une texturation chimique.	103
5.17	Evolution de la force de déplacement de ligne triple avec un phénomène de relâche induit par une texturation chimique.	104
5.18	Représentation du système pour calculer la force d'avancée de ligne triple en prenant en compte l'hétérogénéité chimique de la surface.	105
5.19	Représentation des états d'équilibre pour des surfaces hydrophiles et hydrophobes planes et homogènes.	106
5.20	Représentation de l'effet de collage et ses conditions sur une surface texturée chimiquement.	106
5.21	Représentation de l'effet de relâche et ses conditions.	107
5.22	Schéma des surfaces entrantes simulées	109
5.23	Évolution de l'angle de contact statique et du rayon mouillé en fonction de la position du changement de plan r pour les substrats hydrophile, neutre et hydrophobe avec une texture entrante.	110
5.24	Étude de l'angle statique et du rayon mouillé en fonction de la position de la texture r pour un substrat hydrophile et des textures sortantes.	111
5.25	Trois états caractéristiques pour $\theta_{int} = 60^\circ$ et $\psi = 135^\circ$ avec a) $r > r_{Hi}$, b) $r \in [r_c; r_{Hi}]$ et c) $r < r_c$	111
5.26	Schéma de la texture topographique utilisée par Extrand pour le calcul de l'angle maximal d'avancée [53].	112
5.27	Nouvelles simulations avec $\theta_{int} = 60^\circ$, $\psi = 90^\circ$ qui vérifie le dépassement de texture avec $r < 51lu$: a) $r = 60lu$, b) $r = 50lu$	112
5.28	Représentation du collage métastable et ses conditions sur une surface texturée topographiquement.	113
5.29	Schéma des surfaces sortantes simulées.	113
5.30	Évolution de l'angle de contact statique et du rayon mouillé en fonction de la position du changement de plan r pour les substrats hydrophile, neutre et hydrophobe avec une texture entrante.	114
5.31	Étude de l'angle statique et du rayon mouillé en fonction de la position de la texture r pour un substrat hydrophile ($\theta_{int} = 60^\circ$) et des textures sortantes.	115
5.32	Hypothèse d'un sur-étalement dynamique qui permet à la ligne triple de toucher une texture au-delà de son domaine d'équilibre théorique.	115
5.33	Deux états caractéristiques pour $\theta_{int} = 60^\circ$ et $\psi = 225^\circ$ avec a) $r > r_{Hi}$, on observe que $\theta_e = 60^\circ$ et b) $r < r_{Hi}$, on observe que $\theta_e = 15^\circ$	116
5.34	Schéma des surfaces convexes et concaves.	117
5.35	Evolution du rayon mouillé en fonction du rayon de courbure d'une surface convexe.	117
5.36	Représentation d'une surface convexe segmentée et la variation d'angle résultant de la longueur de discrétisation dx	118
5.37	Evolution du rayon mouillé en fonction du rayon de courbure d'une surface concave.	119
5.38	Représentation d'une surface convexe segmentée et la variation d'angle résultant de la longueur de discrétisation dx	119
5.39	Représentation des forces de déplacement de ligne triple en fonction des plans de texture pour une texturation topographique brute entrante.	120
5.40	Forces de déplacement dans le cas de la texture entrante en $\theta = 120^\circ$	121
5.41	Force de déplacement pour le cas d'une texture sortante.	122

5.42	Représentation de l'effet de collage sur une texture topographique abrupte. . .	123
5.43	Représentation de l'effet de relâche sur une texture topographique abrupte. . .	123
6.1	Représentation des interfaces liquide-gaz statiques des simulations pour une texturation chimique.	128
6.2	Phénomène de collage par texturation chimique et phénomène d'hystérèse pour une hétérogénéité chimique.	129
6.3	Phénomène de collage par texturation topographique et phénomène d'hystérèse pour une hétérogénéité topographique.	129
6.4	Représentation des interfaces liquide-gaz statiques des simulations pour une texturation chimique.	131
6.5	Représentation du phénomène de relâche sur une surface texturée chimiquement et une surface texturée topographiquement.	131
6.6	Simulation 2D avec deux interfaces fluide-fluide.	132
6.7	Simulations sur substrat texturé chimiquement avec des bandes de largeur c hydrophiles (gris clair) et hydrophobes (gris foncé).	133
6.8	Algorithme de l'étalement sur une surface texturée périodiquement avec comme texture centrale une bande hydrophile.	134
6.9	Algorithme de l'étalement sur une surface texturée périodiquement avec comme texture centrale une bande hydrophobe.	135
6.10	Simulations sur substrat texturé chimiquement avec des bandes de largeur c hydrophiles (gris clair) et hydrophobes (gris foncé) et une goutte décalée à l'état initial.	137
6.11	Texturations chimiques comparées pour les tests de priorité d'étalement. . . .	138
6.12	Résultats des simulations des tests de priorité d'étalement sur surfaces texturées chimiquement. a) plan N vs collage, b) plan Hi vs plan Ho , c) relâche vs plan N et d) relâche vs collage.	139
6.13	Texturations topographiques comparées pour les tests de priorité d'étalement. . . .	140
6.14	Résultats des simulations des tests de priorité d'étalement sur surfaces texturées topographiquement. a) collage vs plan, b) plan vs relâche et c) collage vs relâche.	140
6.15	Résultats des simulations 3D sur surface texturée chimiquement.	143
6.16	Surface texturée chimiquement avec deux bandes hydrophobes et goutte à l'état initial.	144
6.17	Etat final avec un cas de sur-étalement sur une surface texturée chimiquement avec deux bandes hydrophobes.	145
7.1	Etats initiaux des simulations pour l'étude de la dynamique de l'étalement sur surface non texturée. a) Avancée de ligne triple, b) reculée de ligne triple. . .	148
7.2	Evolution de la position de la ligne triple et de l'angle de contact en fonction des pas de temps. a)-b) Avancée de ligne triple, c)-d) Reculée de ligne triple. . . .	149
7.3	Évolution des paramètres de la goutte en fonction du temps et pour un substrat d'angle intrinsèque de 90° et une ligne triple qui avance : a) Évolution de la position de la ligne triple, b) Évolution de l'angle de contact dynamique, c) Évolution de la hauteur de goutte.	150
7.4	Évolution d'une goutte sur un substrat d'angle intrinsèque de 90° . Les états initial et final sont présentés ainsi que les temps caractéristiques, A pour la transition entre les domaines I et II, B transition entre les domaines II et III, C pour la transition entre les domaines III et IV et enfin, D la cas où la goutte présente le rayon mouillé maximal et la hauteur de goutte minimale.	151
7.5	Schéma des quatres comportements de la goutte pendant son étalement. . . .	152

7.6	États initiaux de l'étude de l'influence de la texturation chimique sur le comportement dynamique d'une goutte qui s'étale. a) Effet de collage, b) effet de relâche.	154
7.7	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de collage placée dans le domaine I.	155
7.8	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de collage placée dans le domaine II.	157
7.9	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de collage placée dans le domaine III.	158
7.10	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de collage placée dans le domaine IV.	159
7.11	Représentation de l'effet des texturations chimiques sur le comportement dynamique d'une goutte qui s'étale.	161
7.12	États initiaux de l'étude de l'influence de la texturation topographique brusque sur le comportement dynamique d'une goutte qui s'étale. a) Effet de collage pour une texturation entrante, b) effet de relâche pour une texturation sortante.	161
7.13	États initiaux de l'étude de l'influence de la texturation topographique continue sur le comportement dynamique d'une goutte. a) Surface concave, b) surface convexe.	162
7.14	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine I.	163
7.15	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine II.	164
7.16	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine III.	165
7.17	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine IV.	167
7.18	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact et de la hauteur de goutte en fonction du temps pour une texturation concave et une texturation convexe.	170
7.19	Représentation de l'effet de la texturation concave et convexe sur l'angle de contact dynamique. a) Angle du plan 2 supérieur à l'angle du plan 1 ($\theta_2 > \theta_1$), b) angle du plan 2 inférieur à l'angle du plan 1 ($\theta_2 < \theta_1$).	171
7.20	Représentation de l'effet des texturations topographique brusque sur le comportement dynamique d'une goutte qui s'étale.	171
7.21	Représentation de l'état initial de la simulation numérique sur surface texturée périodiquement par texturation chimique avec des bandes de $20lu$ hydrophiles (60°) et hydrophobes (120°).	172
7.22	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact et de la hauteur de goutte en fonction du temps pour une surface texturée chimiquement par une alternance de bandes hydrophiles (60°) et hydrophobes (120°).	174
7.23	Représentation de l'état initial de l'étude de l'étalement sur surface texturée topographiquement avec une succession d'effet de collage et relâche.	175

7.24	Evolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact et de la hauteur de ligne triple en fonction du temps pour une surface texturée topographique-ment par alternance d'effet de collage et de relâche.	177
7.25	Contact entre l'interface fluide-fluide et le solide au sommet de la texture à 25 000 itérations. Création d'un pont liquide entre les deux textures.	178
7.26	Schéma de l'effet d'écrasement de la goutte qui entraîne le contact avec la seconde texture.	178
7.27	Observation de l'effet de vague à différents pas de temps : évolution d'une déformation de l'interface fluide-fluide lorsque la ligne triple subit un effet de relâche. La surface jaune est hydrophile et la surface rouge est hydrophobe.	180
7.28	Observation de l'effet de vague qui part de la gauche à différents pas de temps : évolution d'une déformation de l'interface fluide-fluide lorsque la ligne triple subit un effet de relâche. La surface jaune est hydrophile et la surface rouge est hydrophobe.	180
A.1	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de relâche placée dans le domaine I.	186
A.2	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de relâche placée dans le domaine II.	187
A.3	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de relâche placée dans le domaine III.	188
A.4	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de relâche placée dans le domaine IV.	189
B.1	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine I.	193
B.2	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine II.	194
B.3	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine III.	195
B.4	Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine IV.	196

Liste des tableaux

1.1	Résultats des essais d'Extrand pour de l'eau [50].	22
1.2	Résultats des essais de Gao et McCarthy [51].	24
4.1	Table de valeur maximale des systèmes simulables en fonction du schéma de discrétisation choisi	81
4.2	Table des temps caractéristiques des simulations	81
4.3	Table des matériaux de référence avec leur angle de contact intrinsèque	85
5.1	Table des valeurs de référence déterminées par simulation	96
5.2	Résultats de la transition $Hi \rightarrow Ho$	107
5.3	Résultats de la transition $Ho \rightarrow Hi$	108
5.4	Valeur des angles de contact et du seuil simulés (fig. 5.30) pour des textures topographiques brusques.	115
5.5	Résultats de la transition brute	124
5.6	Résultats de la transition continue	124
6.1	Mesures des caractéristiques de l'état final des simulations en fonction de la largeur de bande c	134
6.2	Résultats de l'application de l'algorithme 6.8 en fonction de la largeur de bande c	135
6.3	Mesures des caractéristiques de l'état final des simulations en fonction de la largeur de bande c	136
6.4	Résultats des tests de priorité d'étalement sur surfaces texturées chimiquement	138
6.5	Résultats des tests de priorité d'étalement sur surfaces texturées topographiquement	139
6.6	Caractéristiques des textures pour l'étude 3D	141
6.7	Grandeurs caractéristiques des résultats de l'étude 3D	141
7.1	Caractéristiques des domaines d'évolution dynamique d'une goutte pendant son étalement sur une surface plane (\rightarrow : constant, \nearrow : augmente, \searrow : diminue et \updownarrow : oscille).	152

Introduction générale

Dans la nature, il a été observé que les espèces vivantes sont capables d'interagir avec leur environnement. Ces capacités sont parfois liées à des propriétés de surfaces comme la peau, les feuilles, les carapaces, ... Ces surfaces sont source d'études scientifiques qui cherchent à reproduire et comprendre leur fonctionnement. Par exemple les ailes du papillon Morpho sont de couleur bleue mais cette couleur ne vient pas de pigments mais des écailles micrométriques qui utilisent le phénomène d'iridescence pour avoir sa teinte bleutée [1, 2]. La feuille de lotus (Fig 1) est étudiée car elle est super-hydrophobe. Cette fonctionnalité permet de faire des surfaces auto-nettoyantes. Cependant la feuille de lotus a une rugosité multi-échelle complexe à répliquer [3–8]. D'autres études se sont intéressées aux propriétés de la peau de certains animaux comme le requin (Fig 2) pour le contrôle de l'écoulement de liquide grâce à la topographie rugueuse qui permet à l'animal de dépenser moins d'énergie pour un déplacement et qui dans le contexte actuel de réduction de consommation énergétique est une source d'information importante [6, 9, 10]. Il y a aussi les pattes du gecko (Fig 3) qui permettent à l'animal d'adhérer à des surfaces en pouvant se déplacer à plusieurs mètres par seconde en portant jusqu'à 40 fois sa masse sur des surfaces lisses et même en milieu aqueux. Ces capacités viennent de l'utilisation des interactions de Van Der Waals entre la surface et les nano textures de la patte du lézard [11, 12].

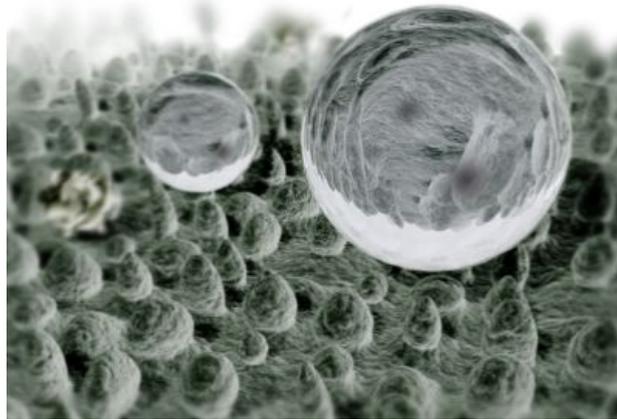


FIGURE 1 – Surface d'une feuille de lotus (image de William Thielicke)

Toutes ces surfaces naturelles sont une source d'informations à recenser et exploiter [13]. On parle de biomimétisme [6] lorsque l'on cherche à reproduire un objet naturel afin de copier ses fonctions.

Dans cette thèse, c'est la propriété de mouillabilité des surfaces qui est recherchée. C'est à dire, le comportement d'un liquide sur la surface, l'interaction fluide-solide. Dans l'étude du mouillage par biomimétisme, on va chercher à reproduire une surface naturelle avec des technologies de fabrication. Il y a des limites à ces technologies, par exemple, des feuilles composées de plusieurs matériaux, qui vont combiner à la fois des fonctions liées à la topographie de la surface mais aussi des fonctions liées à la chimie particulière de la surface [14–16]. Il

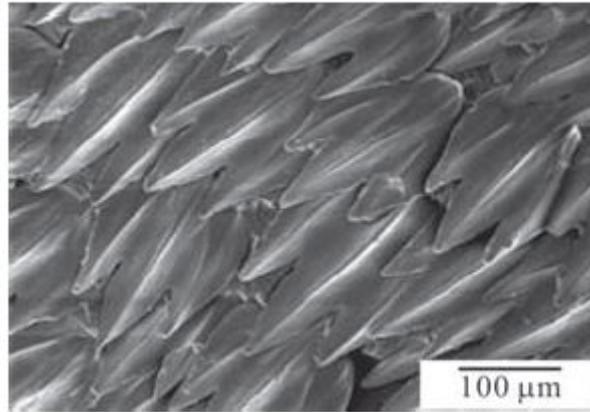


FIGURE 2 – Topographie de la peau de requin [10]



FIGURE 3 – Patte de Gecko (image de Ali Dhinojwala, University of Akron)

est actuellement difficile de reproduire à la fois la topographie et la chimie par les méthodes de fabrications actuelles. Par conséquent, le biomimétisme dans l'étude du mouillage est verrouillé par la technologie. Les surfaces n'étant pas parfaitement reproductibles, il convient d'ajouter des approches théoriques afin de modifier les surfaces et les rendre fabricables sans dégrader leurs fonctionnalités. Il n'y a pas de consensus au niveau des modèles théoriques du mouillage [17]. Il est souvent nécessaire de faire des études empiriques afin de trouver des propriétés de surface satisfaisantes.

Enfin, il est très complexe de déterminer les origines des propriétés de mouillabilité de surfaces naturelles car elles combinent des textures multi-échelles, multi-matériaux, non périodiques et anisotropes [9]. La solution pour étudier les propriétés des surfaces serait d'isoler chacun des paramètres et les étudier individuellement afin de déterminer l'implication de chacun. Ce travail n'est pas encore réalisable avec les technologies actuelles et nécessite beaucoup d'essais et d'investissements. Dans le cadre du travail de thèse qui est présenté dans ce manuscrit, la caractérisation de certains phénomènes observés va être présentée et étudiée par l'approche numérique afin d'apporter plus d'informations à des phénomènes difficilement décrits dans la littérature.

Les contraintes technologiques ne se limitent pas qu'à la fabrication des surfaces mais aussi à la caractérisation du mouillage [18]. En effet, il sera présenté plus tard que les méthodes de définition du mouillage ne sont pas représentatives des réelles propriétés de mouillabilité d'une surface. Les nombreuses contraintes liées aux prises de mesure, la compréhension des mécanismes du mouillage et la complexité des surfaces étudiées restreignent les champs des possibles pour des études expérimentales. La solution trouvée afin de palier à ces limitations serait d'utiliser un outil de simulation numérique pour simuler le mouillage. Ainsi, le travail qui va être présenté va pouvoir à la fois décrire le mouillage sur une surface mais aussi permettre d'étudier plus précisément l'influence de la texturation de surface sur le mouillage. Il faut néanmoins souligner que dans le cadre de ce travail, la simulation a pour objectif d'observer, d'apporter plus d'informations, à des phénomènes du mouillage. Les simulations présentées ne sont pas encore suffisamment performantes pour remplacer les études expérimentales mais proposent un autre regard sur les comportements des liquides sur des surfaces. La méthode numérique choisie est la méthode Lattice Boltzmann. Elle permet de décrire le comportement d'un fluide à l'échelle macroscopique à partir du déplacement microscopique des particules qui le composent. On parle donc de méthode mésoscopique, ce qui est bien adapté à l'étude de mouillage où on cherche à décrire le comportement d'une goutte de liquide qui interagit avec un solide texturé. Cette méthode est de plus en plus utilisée et présente une grande quantité de sources bibliographiques [19–24]. Néanmoins, au moment du choix de la méthode numérique pour simuler le mouillage, il n'y avait pas de logiciel permettant d'utiliser la méthode Lattice Boltzmann pour l'étude du mouillage. C'est à dire simuler un liquide entouré de gaz en contact avec un solide qui a des interactions spécifiques avec les fluides en fonction de la nature de la surface. Il a donc été décidé de programmer l'outil numérique. En programmant cette méthode numérique, il a été possible de maîtriser précisément les opérations de calcul et d'implémenter des modifications à certaines équations. De plus, cette méthode étant fortement parallélisable, c'est à dire que à chaque pas de temps, tout calcul ne dépend que de l'état précédent du système, il a été décidé de faire faire les calculs sur une carte graphique afin de minimiser les temps de calcul et cette option n'est que très rarement proposée dans les logiciels de simulation.

Ce travail de thèse fait partie d'un projet plus global au sein du LTDS, dans le groupe Surface, Friction, Vibration (SFV) et dans l'équipe animée par le Pr.VALETTE qui cherche à mieux maîtriser le mouillage afin de designer des surfaces fonctionnelles très performantes. L'utilisation de l'outil numérique est donc développé pour que dans le futur, la simulation puisse être utilisée lors de la conception d'une surface. Elle permet de vérifier la pertinence du choix de certains paramètres de texturation. La simulation numérique permet aussi d'étudier le fonctionnement de surfaces réelles afin d'identifier les paramètres pertinents qui caractérisent les propriétés de mouillabilité de la surface.

Dans un premier temps, ce manuscrit commencera par l'état de l'art qui va permettre de définir le mouillage, l'approche numérique et la méthode Lattice Boltzmann. Cet état de l'art permettra de définir les notions fondamentales et les différentes approches du mouillage dans la littérature. Ensuite, une étude de la littérature sur les méthodes numériques qui peuvent simuler le mouillage sera développée et permettra de mettre en avant la méthode retenue : la méthode Lattice Boltzmann (LBM). Enfin l'origine et l'application de la LBM au mouillage sera présentée. Une fois ce cadre posé, nous nous intéresserons à la mise en œuvre de la méthode LBM à travers un outil numérique développé pendant cette thèse. Enfin nous nous intéresserons à l'étude de mouillage sur des surfaces texturées par la simulation numérique et la LBM. Cette étude se scinde en deux parties principales, l'étude statique et l'étude dynamique. Dans ces deux parties, deux types de texturations seront utilisées : la texturation chimique et la texturation topographique.

Première partie

État de l'art

Chapitre 1

Mouillabilité

La thèse qui est présentée utilise une méthode numérique pour simuler le mouillage. On va donc commencer par une étude de la littérature portée sur la mouillabilité. Cette étude permet de définir et comprendre le mouillage. Cette première étude permettra aussi de définir les notions fondamentales qui doivent être prises en compte pour des simulations. Ensuite, on s'intéressera aux différentes études de la littérature qui utilisent des méthodes numériques pour simuler le mouillage. Après cette présentation, un choix de méthode sera proposé et expliqué. Pour finir l'étude de l'état de l'art, la méthode retenue sera explicitée en deux temps : son explication physique et son application dans le cadre de l'étude du mouillage.

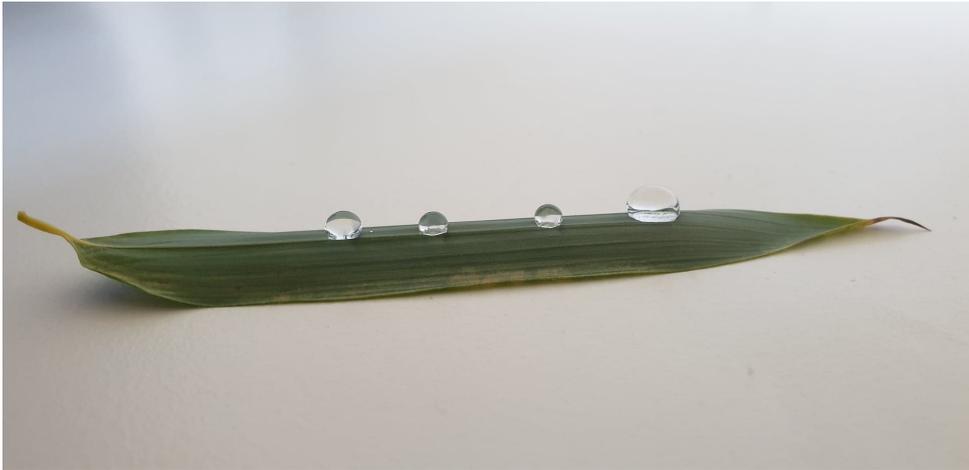


FIGURE 1.1 – Gouttes d'eau sur une feuille de bambou (photo de Q. Legrand LTDS).

Le mouillage est l'étude du comportement d'un liquide sur un substrat liquide ou solide (fig. 1.1). C'est un phénomène observable dans la vie quotidienne : goutte de pluie sur une vitre, film d'huile sur une poêle, buée sur des lunettes... C'est un phénomène qu'il est nécessaire de maîtriser car ses domaines d'applications sont très vastes : transport, énergie, textile, médical, électronique, revêtement,... [25–31]

Dans un premier temps, nous allons nous intéresser à la physique qui régit le mouillage. Dans un second temps, nous présenterons les méthodes actuelles qui permettent de caractériser le mouillage. Enfin, dans un troisième temps, nous terminerons par la présentation des approches théoriques qui cherchent à relier mouillabilité et propriété de surface.

1.1 Forces capillaires

La capillarité est l'étude des interfaces entre deux fluides non miscibles et une surface. Pour l'étude du mouillage, l'hypothèse est faite que les deux fluides du système étudié sont un liquide et l'air [32].

Les interfaces sont déformables et mobiles. Elles cherchent à optimiser leur forme et position afin de minimiser leur énergie. Les phénomènes "capillaires" sont l'étude macroscopique des déplacements et déformations microscopiques des interfaces.

Les études de mouillage cherchent à expliquer ces déplacements et déformations des interfaces. L'interface entre un liquide et un fluide peut être considérée comme une membrane tendue et caractérisée par une tension de surface qui s'oppose à ses déformations [32]. Ce qui permet de caractériser l'état idéal pour un liquide entouré d'un fluide : une boule/sphère parfaite.

On s'intéresse donc à la notion de tension de surface qui s'applique à l'interface entre deux fluides. On verra ensuite comment la courbure d'interface impacte le mouillage.



FIGURE 1.2 – Bulle de savon : sphère parfaite (photo libre de droits de Pixabay).

1.1.1 Tension de surface fluide-fluide

Il existe différentes approches pour définir la tension de surface. Une première approche physique définit la tension de surface comme une force qui tire le long d'une surface et la maintient en tension permanente. Une seconde approche thermodynamique définit la tension de surface à partir de l'énergie d'une interface qui cherche à s'optimiser. Enfin une dernière approche, plus récente, définit la tension de surface comme la résultante énergétique des forces d'attraction et de répulsion des molécules du liquide à son extrême surface.

– Approche physique

L'approche physique de la tension de surface la définit par une force appliquée à une unité de longueur. Dans la figure 1.3, elle correspond à la force qui s'oppose au déplacement (dx) de l'interface (rouge).

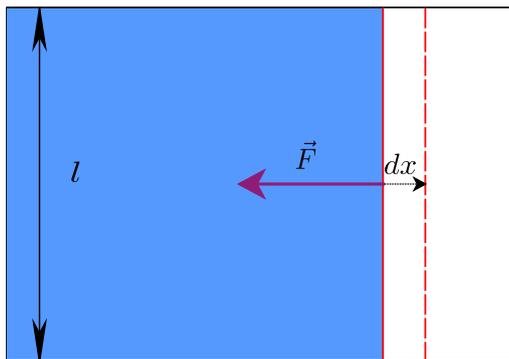


FIGURE 1.3 – Force de tension appliquée à l'interface.

La tension de surface γ est une force par unité de longueur, normale au contour de l'interface sur le système, elle est proportionnelle à la longueur du contour. Contrairement à la pression, c'est une force attractive [33].

Une membrane rectangulaire d'un mélange visqueux au repos en contact avec l'air sur ses deux faces (supérieure et inférieure) est définie (fig. 1.3). Avec la tige rouge de longueur l , cette membrane est étirée de dx .

Le travail nécessaire au déplacement dx de la tige de longueur l vaut :

$$\delta W = F dx = 2\gamma l dx \quad (1.1)$$

Ce qui permet d'écrire la tension de surface comme le rapport entre une force et une longueur (1.2).

$$\gamma = \frac{F}{2l} \quad (1.2)$$

La tension superficielle est une force par unité de longueur exprimé en N/m .

– Approche thermodynamique

La tension de surface définie par l'approche thermodynamique est interprétée de la façon suivante. Une molécule de liquide au voisinage de l'interface entre les deux fluides a un environnement différent d'une molécule qui se trouve au cœur du liquide. Une molécule qui se situe à l'interface a moins d'interactions car elle a moins de molécules qui l'entourent. Ainsi, il manque la moitié des liaisons moléculaires à la molécule qui se situe à l'interface par rapport à une molécule qui se situe au cœur du fluide (fig. 1.4). Ce manque engendre une augmentation de l'énergie libre proportionnelle à la surface de l'interface.

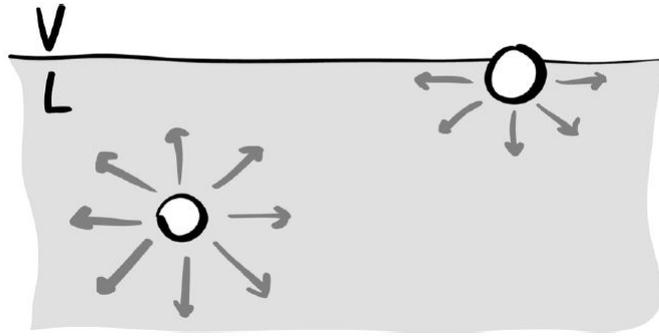


FIGURE 1.4 – Représentation du manque de liaisons pour une molécule en surface par rapport à une molécule dans le bulk [34].

La démonstration thermodynamique est la suivante. La présence d'une interface entre deux phases entraîne un excès d'énergie libre. Gibbs associe cet excédent d'énergie libre à la tension de surface [35]. Il propose de prendre un système fermé de volume constant V et de température constante T . Le système est composé de deux phases : le liquide (L) et sa vapeur (G). D'après le premier principe de la thermodynamique, si un travail élémentaire est appliqué au système, il provient des variations élémentaires des paramètres extensifs du système : V , A la surface de l'interface et n la quantité de matière totale.

Si la surface croît d'une unité, γ correspond à l'énergie associée à l'accroissement de la surface. D'après l'équation de la variation de l'énergie interne (dU), on a :

$$dU = TdS - pdV + \gamma dA + \mu dn \quad (1.3)$$

Avec S l'entropie du système, p sa pression et μ son potentiel chimique. Par la transformée de Legendre, la variation d'énergie libre peut être écrite (1.4)

$$dF = -SdT - pdV + \gamma dA + \mu dn \quad (1.4)$$

Par définition, la tension de surface s'écrit :

$$\gamma = \left(\frac{\partial F}{\partial A} \right)_{T,V,n} \quad (1.5)$$

La tension de surface correspond donc à la dérivée de l'énergie libre d'un système fermé par rapport à la surface de l'interface A pour une température T , un volume V et une quantité

de matière n maintenus constants.

– Approche par attraction-répulsion

Cette dernière approche de la tension de surface est proposée par A. Marchand *et al.*[36]. Ils cherchent à expliquer pourquoi la tension de surface est définie normale à l'interface. Pour ce faire, ils proposent de considérer à la fois les forces d'attraction mais aussi les forces de répulsion (fig. 1.5).

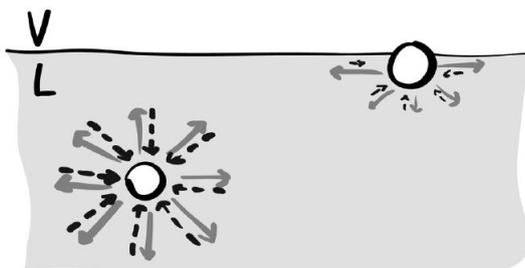


FIGURE 1.5 – Représentation des forces d'attraction (gris) et répulsion (pointillés) pour une molécule proche de l'interface et une molécule dans le bulk [34].

L'interface entre deux fluides est considérée comme diffuse, c'est à dire qu'il y a une épaisseur de quelques molécules dans laquelle est observée une transition entre les deux fluides (fig. 1.6).

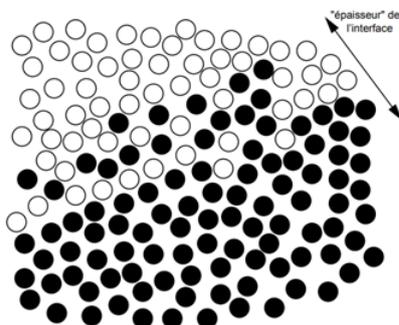


FIGURE 1.6 – Interface diffuse [34].

Marchand *et al.* proposent de découpler la force d'attraction et la force de répulsion moléculaire qui composent la force d'interaction moléculaire. La force de répulsion est considérée isotrope alors que la force d'attraction est anisotrope. L'isotropie de la force de contribution de la répulsion vient de sa courte portée. En effet, elle est la conséquence de la répulsion de nuages électroniques des molécules et peut donc être considérée comme une force de contact. Elle ne dépend que très peu de la structure de son environnement et même proche de la surface, elle possède une amplitude identique dans toutes les directions. Les forces attractives sont, au contraire, à plus grande portée. Cela les rend plus dépendantes de la structure moléculaire de leur environnement. C'est cette anisotropie des contraintes près de l'interface qui génère la force de tension de surface.

Pour imaginer l'explication précédente, Marchand *et al.* proposent de diviser le liquide en deux sous domaines comme dans la figure 1.7. Le système est en équilibre sur chaque couche donc les forces se compensent. L'amplitude de la force attractive augmente en fonction de la profondeur de la couche. Plus la molécule est loin de l'interface, plus sa composante d'attraction est grande et sature à sa valeur maximale lorsque la molécule

est assez loin de l'interface. La contrainte répulsive suit le même comportement par compensation, pour conserver l'équilibre des forces verticales.

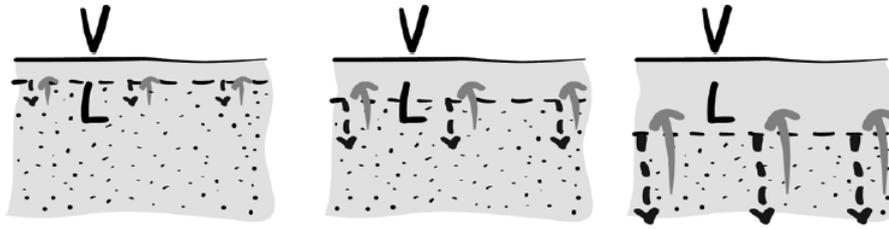


FIGURE 1.7 – Forces de répulsion (pointillés) et d'attraction (gris) verticales exercées dans un espace semi infini de liquide sur un sous-système donné (région grise tachetée) par le reste du liquide (région grise non tachetée).

Le liquide est ensuite découpé perpendiculairement à l'interface (fig. 1.8). Comme la répulsion est considérée isotrope, l'amplitude de la répulsion est connue et est fonction de la distance par rapport à l'interface. A l'opposé, l'amplitude de la force d'attraction horizontale, anisotrope, ne dépend pas de la distance par rapport à l'interface dans le plan horizontal.

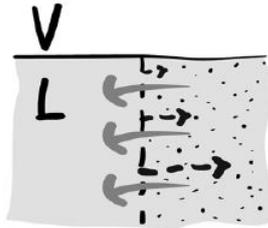


FIGURE 1.8 – Forces de répulsion (pointillés) et d'attraction (gris) horizontales exercées dans un espace semi infini de liquide sur un sous-système donné (région grise tachetée) par le reste du liquide (région grise non tachetée).

La résultante de la force d'attraction et la force de répulsion est une force attractive exercée par la gauche sur la droite et localisée sur quelques couches atomiques (fig. 1.9). L'intégrale de cette contrainte sur la hauteur du liquide donne γ par unité de profondeur.

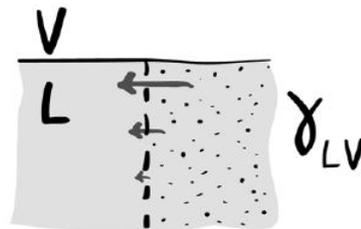


FIGURE 1.9 – Résultante de la force attractive et répulsive [34].

1.1.2 Interface courbe

On a précédemment vu que la tension de surface était un phénomène qui se produit à l'interface entre deux fluides non miscibles. Nous allons nous intéresser maintenant à l'effet de cette tension de surface sur le comportement des fluides et de l'interface.

Pression de Laplace

La tension de surface est à l'origine d'une surpression à l'intérieur de la goutte. En effet, en s'optimisant, une surface va prendre une forme courbe. La courbure de l'interface induit une différence de pression entre les deux fluides [37].

Pour commencer, on va s'intéresser au cas le plus simple, une goutte sphérique. Soit une goutte d'eau (L) de volume V_L dans l'air (G) de volume V_G , pour minimiser son énergie superficielle, la goutte est sphérique de rayon R (fig. 1.10).

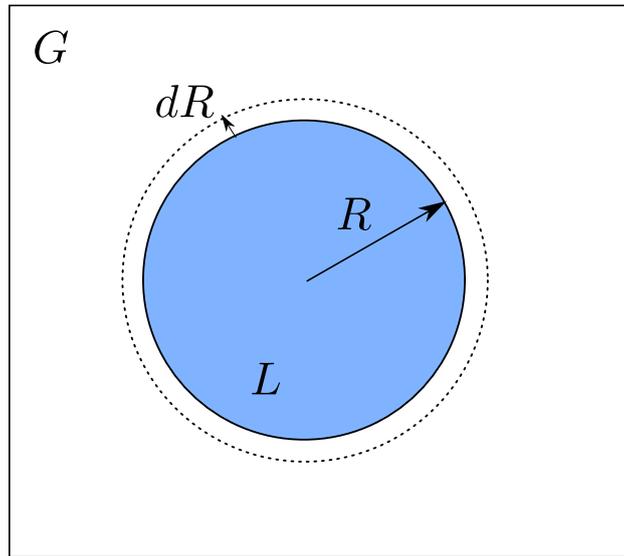


FIGURE 1.10 – Goutte sphérique de liquide (L) à l'équilibre et entouré de gaz (G).

En utilisant la méthode des déplacements virtuels. Si l'interface liquide-gaz se déplace de dR , le travail des forces de pression et capillaire s'écrit :

$$\begin{cases} \delta W_G = -P_G dV_G \\ \delta W_L = P_L dV_L \\ \delta W = \gamma dA \end{cases} \quad (1.6)$$

Or, $dV_G = -dV_L = 4\pi R^2 dR$ et $dA = 8\pi R dR$ ainsi que $\delta W = \delta W_L + \delta W_G$. Avec P_G et P_L respectivement la pression de l'air et la pression dans la goutte.

Ainsi :

$$\delta W = -P_G dV_G + P_L dV_L = \gamma dA \quad (1.7)$$

$$(P_L - P_G) (4\pi R^2) dR = \gamma 8\pi R dR \quad (1.8)$$

$$\Delta P = (P_L - P_G) = \gamma \frac{2}{R} \quad (1.9)$$

Le saut de pression entre les deux milieux vaut ΔP et dépend de la tension de surface entre les deux fluides et de la taille de la goutte.

Le cas d'une sphère ne peut pas être généralisé. On s'intéresse maintenant au cas plus général : les interfaces quelconques.

Il faut appliquer le théorème de Laplace [37] pour toute surface courbée avec R et R' les rayons de courbure principaux de la surface considérée.

$$\Delta P = \gamma \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{R'} \right) \quad (1.10)$$

Si $R = R'$, alors le liquide a une forme de sphère parfaite et on retrouve l'équation (1.9). De même que dans le cas d'une interface plane, $R \rightarrow \infty$ et $R' \rightarrow \infty$ montrent qu'il n'y a pas de saut de pression entre les deux fluides. Deux fluides qui n'ont pas d'interfaces courbes sont à même pression.

Montée capillaire

Il a été vu qu'en s'optimisant, l'interface fluide-fluide se déforme. Lorsqu'on rajoute un solide en contact avec l'interface fluide-fluide, elle peut se déplacer sur ce solide. Le nouveau domaine créé par le contact entre l'interface fluide-fluide et le solide est appelé ligne triple. En suivant le déplacement de la ligne triple sur le solide, on peut mesurer le déplacement de l'interface fluide-fluide par rapport au solide.

La montée capillaire consiste à déplacer une interface liquide-air dans un tube plongé dans le liquide (fig. 1.11). Cette étude a permis de mettre en place la Loi de Jurin qui lie la montée capillaire h , la tension de surface γ et le rayon du tube solide r .

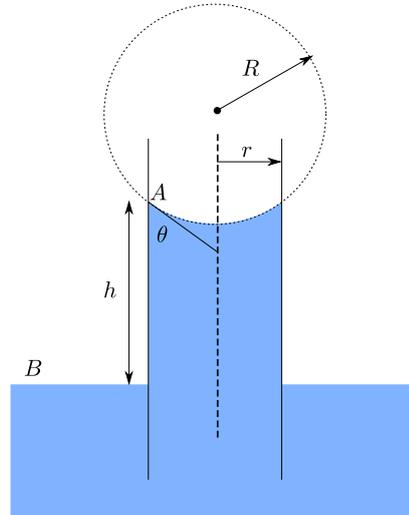


FIGURE 1.11 – Tube capillaire avec remontée capillaire du liquide.

Cette ascension s'oppose aux forces de gravité. Il faut appliquer la loi de Laplace [37] à l'interface du liquide dans le tube capillaire pour avoir l'équation de la pression à l'interface :

$$\Delta P = 2\gamma/R \quad (1.11)$$

Le ménisque est une portion de sphère de rayon R et avec un angle de contact avec la paroi du tube qui vaut θ . Ainsi $R = r/\cos\theta$. En se plaçant au niveau du ménisque au point A où la hauteur h est maximale, la pression P_A vaut :

$$P_A = P_0 - 2\gamma/R \quad (1.12)$$

Avec P_0 la pression atmosphérique.

Au point B où $h = 0$, la pression est la suivante :

$$P_B = P_0 = P_A + \rho_l g h \quad (1.13)$$

En introduisant (1.12) dans (1.13) l'équation de la pression devient :

$$P_0 = P_0 - \frac{2\gamma}{R} + \rho_l g h \quad (1.14)$$

$$\Leftrightarrow \frac{2\gamma}{R} = \rho_l g h \quad (1.15)$$

$$\Leftrightarrow h = \frac{2\gamma}{\rho_l g R} \quad (1.16)$$

L'équation (1.11) se trouve aussi en faisant un bilan des forces appliquées au ménisque.

$$F_t + P = 0 \quad (1.17)$$

$$P = -\rho_l g \pi r^2 h \quad (1.18)$$

$$F_t = (2\pi r)\gamma \cos \theta \quad (1.19)$$

$$\Leftrightarrow h = \frac{2\gamma}{\rho_l g R} \quad (1.20)$$

Avec F_t la force liée à la tension de surface appliquée à la ligne triple, cercle de périmètre $2\pi R$ et P la force exercée par la gravité sur le volume de liquide $\pi R^2 h$ (fig. 1.12).

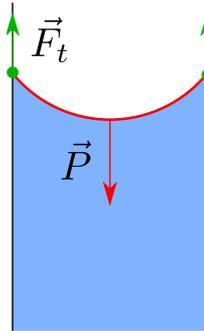


FIGURE 1.12 – Équilibre des forces dans le cas d'une ascension capillaire.

Les forces capillaires peuvent s'opposer aux forces de gravité. Ce constat amène ainsi à une notion fondamentale du mouillage : la longueur capillaire.

Longueur capillaire

On note la longueur capillaire l_c ou k^{-1} . C'est une longueur caractéristique d'un liquide qui permet de connaître la prédominance des forces capillaires sur les forces gravitationnelles. Tant que la longueur capillaire n'est pas dépassée, les effets de la gravité sont négligés par rapport aux effets capillaires. La longueur capillaire s'exprime en fonction de la tension de surface γ , de la masse volumique du liquide ρ et de la constante d'accélération de pesanteur g .

$$l_c = \sqrt{\frac{\gamma}{\rho g}} \quad (1.21)$$

Cette longueur capillaire permet de définir un volume de goutte maximal pour lequel la goutte n'est pas déformée par la gravité. Les études de mouillage doivent prendre en compte cette grandeur afin de choisir un volume de liquide tel que, en s'étalant, le rayon de la zone mouillée soit inférieur à la longueur capillaire. Pour information, pour de l'eau à 20° la longueur capillaire est de $2,7\text{mm}$.

1.2 Propriété de mouillabilité

Maintenant que les phénomènes physiques qui caractérisent le mouillage ont été présentés, on va s'intéresser à la caractérisation du mouillage.

1.2.1 Goutte sessile

Expérimentalement, pour définir les propriétés de mouillabilité d'une surface, un test de la goutte sessile peut être réalisé. Ce test consiste à déposer une goutte d'un faible volume ($1-10\mu L$), afin de garantir une longueur d'étalement inférieure à la longueur capillaire, sur une surface et à regarder son état d'équilibre. Le résultat obtenu est une goutte en vue de côté comme sur la figure 1.13. Sur l'image, il est possible de mesurer l'angle de contact θ , c'est à dire l'angle entre l'interface fluide-fluide et le plan du substrat. C'est cet angle de contact qui va définir le caractère hydrophile ou hydrophobe de la surface. On a une surface hydrophile pour $\theta < 90^\circ$ et hydrophobe pour $\theta > 90^\circ$.

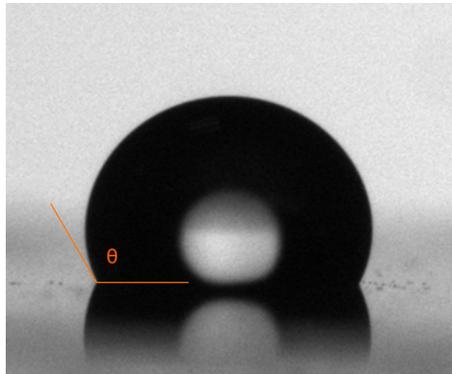


FIGURE 1.13 – Essai de mouillabilité par le test de la goutte sessile.

Il a été observé qu'il n'y a pas un unique angle de contact pour lequel une goutte est à l'équilibre macroscopique. L'angle de contact varie entre un angle minimal θ_r et un angle maximal θ_a . Le domaine de variation d'angle de contact se nomme hystérèse d'angle de contact.

1.2.2 Hystérèse d'angle de contact

L'hystérèse d'angle de contact (CAH) est un phénomène qui se caractérise en dynamique. Ainsi, pour une surface, deux angles critiques peuvent être caractérisés θ_a et θ_r . Ils correspondent aux deux angles qui bornent le domaine d'équilibre de la goutte (fig. 1.14). Ils vérifient toujours $\theta_e \in [\theta_r, \theta_a]$, avec θ_e l'angle à l'équilibre.

La valeur du domaine de l'hystérèse ΔH se calcule avec l'équation (1.22).

$$\Delta H = \theta_a - \theta_r \quad (1.22)$$

L'hystérèse est un phénomène qui a de nombreuses origines [38] :

- Rugosité de la surface
- Hétérogénéités chimiques
- Taille de la goutte
- Contamination [39]

Dans le cadre de cette thèse, l'hypothèse suivante est faite : l'origine de l'hystérèse est liée à des défauts non maîtrisés sur la surface, c'est à dire de l'hétérogénéité chimique et de la rugosité. Cette hypothèse s'inspire de l'hypothèse définie par de Gennes [40]. Pour caractériser l'hystérèse, il y a deux méthodes couramment utilisées :

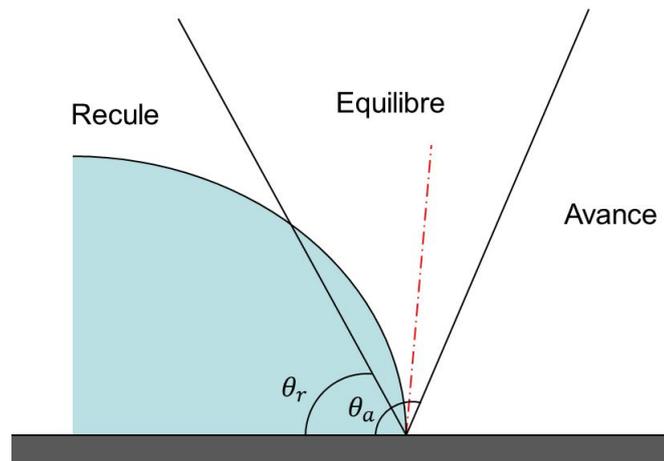


FIGURE 1.14 – Hystérèse d'angle de contact.

– *Variation de volume*

Méthode qui consiste à faire varier le volume de la goutte jusqu'à ce que la ligne triple se déplace (fig. 1.15). Ainsi θ_a et θ_r sont mesurés au moment du déplacement de la ligne triple.

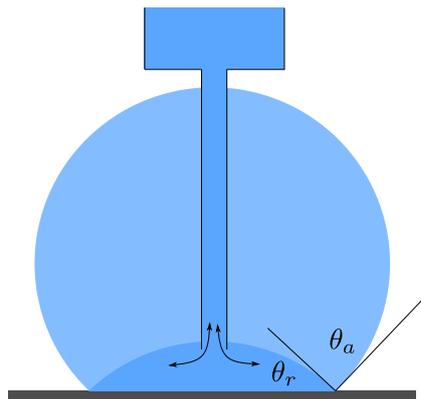


FIGURE 1.15 – Mesure de l'hystérèse par variation de volume.

– *Tiltage*

Méthode qui consiste à incliner la surface jusqu'à ce que la goutte décroche (fig. 1.16). Au moment du décrochage, θ_a et θ_r sont mesurés.

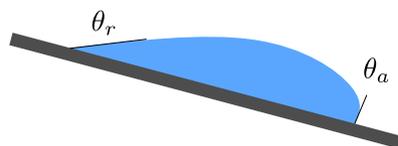


FIGURE 1.16 – Mesure de l'hystérèse par tiltage.

Il a été montré par Dubov [41] que ces deux méthodes de mesure ne donnent pas tout à fait les mêmes valeurs d'angle d'avancée et de reculée.

1.3 Mouillage statique

1.3.1 Goutte en équilibre

Young en 1805 propose de relier la tension de surface γ à l'angle d'équilibre mesuré θ [42]. Il propose la représentation (fig. 1.17) où la tension de surface liquide-gaz est γ_{LV} , la tension de surface solide-gaz est γ_{SV} et la tension de surface solide-liquide vaut γ_{SL} . Les trois forces liées à ces interfaces permettent de définir l'angle de contact de Young θ_Y .

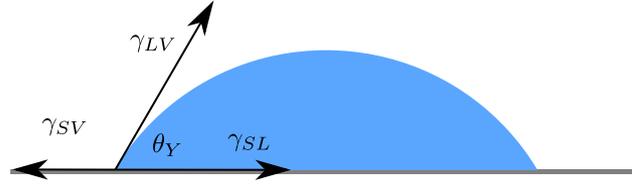


FIGURE 1.17 – Equilibre de Young.

A l'équilibre, Young propose l'écriture suivante :

$$\gamma_{SL} + \gamma_{LV} \cos \theta_Y - \gamma_{SV} = 0 \quad (1.23)$$

La loi de Young [42] permet de définir l'angle de contact θ_Y entre l'interface liquide-gaz et l'interface solide-liquide :

$$\cos \theta_Y = \frac{\gamma_{SV} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LV}} \quad (1.24)$$

Avec les indices V pour vapeur, L pour liquide et S pour solide. Le paramètre d'étalement S peut être exprimé en fonction de l'angle de Young :

$$S = \gamma_{LV}(\cos \theta_Y - 1) \quad (1.25)$$

Avec γ_{LV} la tension de surface entre les phases liquide et gaz.

- Si $S > 0$ le mouillage est total, c'est à dire que le solide abaisse son énergie en étant mouillé.
- Si $S < 0$ le mouillage est partiel, c'est à dire que la goutte ne s'étale pas, le solide a "intérêt" à rester sec.

C'est dans le cadre du mouillage partiel que l'étude de la mouillabilité s'applique.

De plus, cette équation de Young (1.24) permet d'écrire l'équation de l'adhésion d'un liquide sur la surface [43] qui est la loi de Young-Dupré.

$$W_{SL} = \gamma_{LV}(1 + \cos \theta_Y) \quad (1.26)$$

Cette approche de Young qui définit le mouillage à l'équilibre a été remise en question dès 1945. Pease [44] questionne l'équation du travail d'adhésion de Young-Dupré W_{SL} (1.26). En effet, il expose le fait qu'avec l'hystérèse d'angle de contact, pour une même surface, le travail d'adhésion de Dupré varie. θ évolue entre θ_r et θ_a .

Pease propose de prendre plutôt en compte localement l'adhésion de la ligne triple, car la ligne triple peut avoir des positions différentes et ces positions peuvent faire varier le travail moyen. Le travail d'adhésion est plus réaliste si on prend en compte la ligne triple et l'état du solide localement. La surface d'un substrat est une mosaïque de groupes polaires et apolaires arrangés de façon régulière sur un plan cristallin et avec une distribution statistique sur une surface solide amorphe. La ligne triple traverse donc ces différents domaines avec des

propriétés différentes et W_p est le travail d'adhésion d'un groupe polaire, W_{np} le travail d'adhésion non polaire et la longueur de ligne triple dans chacun des domaines L_n, L_{np} . L'expression du travail d'adhésion de Pease est :

$$W_{SLP} = W_p L_p + W_{np} L_{np} \quad (1.27)$$

Avec l'explication du mouillage faite par Young, où le mouillage se fait sur une surface plane et chimiquement homogène, de nouvelles études ont été réalisées afin d'inclure des modifications topographiques ou chimiques de surface. Historiquement, les premiers modèles de mouillage sur surfaces texturées ont été proposés en considérant que les aires des interfaces permettent de déterminer l'angle de contact. Depuis les années 2000, de plus en plus de publications proposent de considérer plutôt la ligne triple pour quantifier l'angle de contact [17].

1.3.2 Approche par aire de contact

Le principe de cette approche est d'exprimer l'angle de contact θ^* en fonction de l'aire de contact liquide-solide. La tension de surface liquide-gaz sera désormais appelée γ .

Pour commencer, Wenzel (1936) a travaillé sur un moyen d'améliorer le modèle de Young en prenant en compte la rugosité de surface. Wenzel met en lien angle de contact et facteur de rugosité r^W [45]. Ce facteur correspond au rapport d'aire réelle sur aire projetée et est supérieur ou égal à 1.

La variation d'énergie libre surfacique pour un déplacement d'interface dx (fig. 1.18)

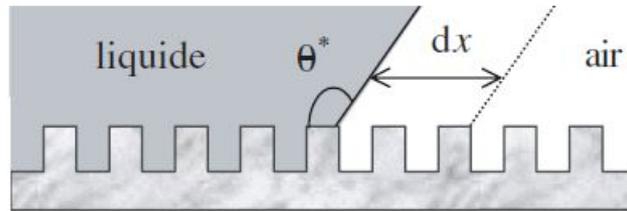


FIGURE 1.18 – Régime de Wenzel [46].

s'écrit :

$$dE = r(\gamma_{SL} - \gamma_{SG})dx + \gamma dx \cos \theta^* \quad (1.28)$$

Avec la tension de surface liquide gaz γ , γ_{SG} la tension de surface solide gaz et γ_{SL} la tension de surface solide liquide. A l'équilibre, E tend vers 0 et ainsi en résulte la relation de Wenzel :

$$\cos \theta^* = r \cos \theta_Y \quad (1.29)$$

Cassie et Baxter (1944) ont travaillé sur des surfaces poreuses et ont considéré le cas où il y a des poches d'air entre solide et liquide [47]. Ils définissent une fraction de solide mouillé ϕ_S pour définir l'angle de contact apparent : $\cos \theta^* = -1 + \phi_S(\cos \theta_Y + 1)$.

En 1948 Cassie exprime l'angle de contact en passant par la variation de l'énergie libre dE pour un déplacement de la ligne triple dx (fig. 1.19).

$$dE = \phi_S(\gamma_{SL} - \gamma_{SG})dx + (1 - \phi_S)\gamma dx + \gamma dx \cos \theta^* \quad (1.30)$$

En minimisant E , l'équation de Cassie s'écrit :

$$\cos \theta^* = -1 + \phi_S(\cos \theta_Y + 1) \quad (1.31)$$

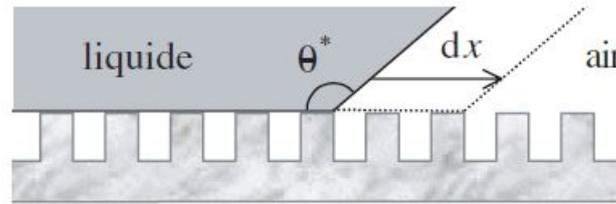


FIGURE 1.19 – Régime de Cassie-Baxter [46].

Ces deux premières études ont permis de définir deux états de mouillage d'une surface. En premier, avec l'étude de Wenzel, il a été proposé de considérer une goutte qui impregne les textures, c'est un état Wenzel. En second, Cassie et Baxter ont caractérisé un état où la goutte est portée par le dessus des textures, c'est l'état Cassie.

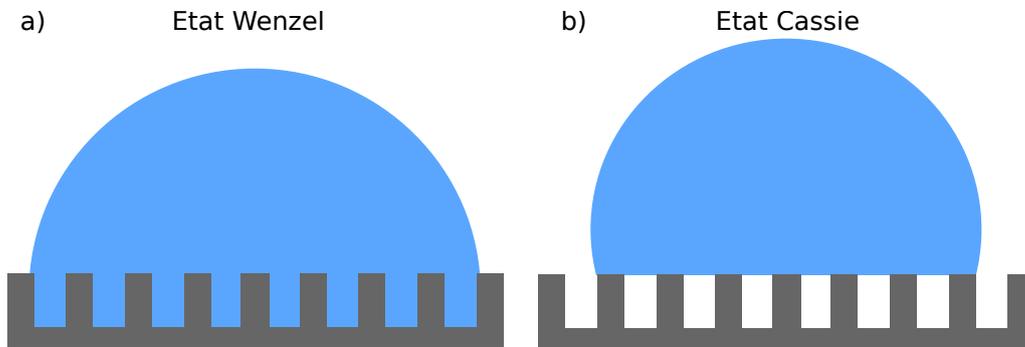


FIGURE 1.20 – Deux configurations : a) Etat Wenzel, b) Etat Cassie.

Marmur a ensuite cherché une expression plus générale qui peut à la fois définir l'état Cassie, l'état Wenzel et décrire un état intermédiaire, de transition (fig. 1.21)[48].

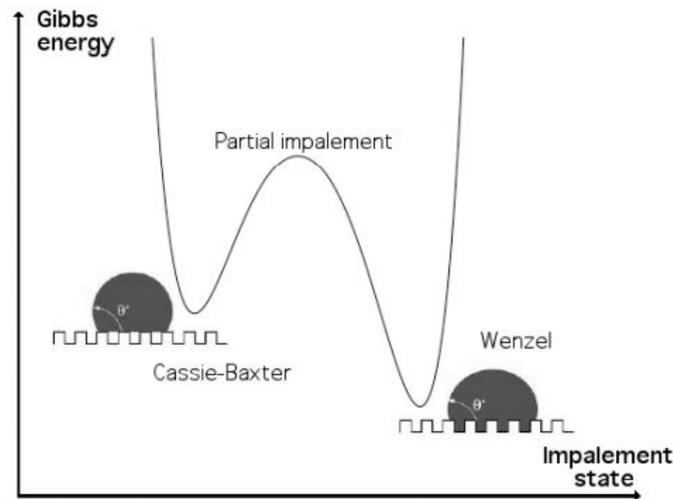


FIGURE 1.21 – Représentation des états de Cassie-Baxter et de Wenzel selon l'approche de Marmur faisant intervenir l'énergie libre de Gibbs des systèmes [49].

Il utilise l'énergie de Gibbs du système G et cherche à la minimiser pour un volume de liquide constant.

$$G = \gamma A_{LG} + \gamma_{SG} A_{SG} + \gamma_{SL} A_{SL} \quad (1.32)$$

Il y a les trois aires de contact A_{ij} avec S pour le solide, G le gaz et L le liquide. L'aire de contact liquide-gaz se décompose en deux parties : la partie extérieure et la partie piégée dans les textures.

$$A_{LG} = 2\pi R^2(1 - \cos \theta) + (1 - f)\pi R^2 \sin^2 \theta \quad (1.33)$$

Avec R le rayon de la goutte, f la fraction de solide mouillé et θ l'angle de contact apparent. L'aire solide-liquide est :

$$A_{SL} = f\pi R^2 r \sin^2 \theta \quad (1.34)$$

Marmur introduit un paramètre (r_f) qui correspond au facteur de rugosité mais pour la fraction de solide mouillé uniquement f .

$$r_f f + r_{1-f}(1 - f) = r \quad (1.35)$$

Enfin, il reste l'aire de contact solide-gaz composée de deux parties, l'aire hors de la zone mouillée et l'aire dans la texture:

$$A_{SG} = [A_{solide} - \pi R^2 r \sin^2 \theta] + \pi R^2 r_{1-f}(1 - f) \sin^2 \theta \quad (1.36)$$

Le rayon de la goutte en fonction du volume de liquide s'exprime de la façon suivante :

$$R^2 = \left(\frac{3V}{\pi}\right)^{2/3} (2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta)^{-2/3} \quad (1.37)$$

En réécrivant (1.32) sous forme adimensionnelle, il trouve :

$$G^* \equiv \frac{G}{\gamma \pi^{1/3} (3V)^{2/3}} = F^{-2/3}(\theta) [2 - 2 \cos \theta - \Phi(f) \sin^2 \theta] \quad (1.38)$$

Où

$$F(\theta) \equiv (2 - 3 \cos \theta + \cos^3 \theta) \quad (1.39)$$

Et

$$\Phi(f) = r_f f \cos \theta_Y + f - 1 \quad (1.40)$$

Ainsi, les deux cas extrêmes Wenzel et Cassie-Baxter sont modélisés et entre ces deux états une zone de transition, d'imprégnation incomplète est aussi calculée. Il va y avoir un angle critique θ_c pour passer du régime Cassie-Baxter au régime Wenzel (fig. 1.22).

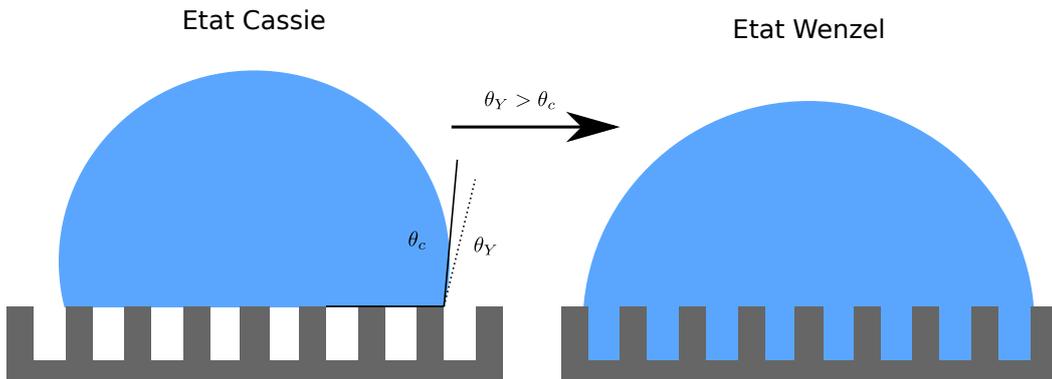


FIGURE 1.22 – Angle critique de transition Cassie vers Wenzel.

L'angle critique θ_c vaut :

$$\cos \theta_c = \frac{f - 1}{r - f} \quad (1.41)$$

On s'intéresse ensuite à l'approche par ligne triple.

1.3.3 Approche par ligne triple

L'approche par ligne triple considère des phénomènes locaux sur la ligne triple qui se répercutent sur le comportement global de la goutte.

Extrand a publié plusieurs articles dans lesquels il met en avant une autre façon de voir le mouillage, en considérant des interactions sur la ligne triple. En 2003 Extrand publie un article [50] pour réfuter le modèle de Cassie [47]. Expérimentalement, ce premier travail va être fortement critiqué mais par la suite Gao et McCarthy ont repris l'étude d'Extrand de façon plus fiable et ont montré des résultats similaires [51]. En 2002 [52], 2004 [53] puis 2006 [54], Extrand va proposer et améliorer un modèle de calcul d'angle de contact pour un substrat texturé topographiquement. Il se base sur l'hystérèse et les interactions avec le substrat uniquement au niveau de la ligne triple.

Le contre exemple d'Extrand qui remet en cause les modèles de Cassie-Baxter et Wenzel est le suivant : il texture chimiquement une portion de surface et dépose des gouttes sur la partie centrale. Il observe que pour des volumes de goutte suffisamment grands pour que la ligne triple soit hors textures, la goutte à un état d'équilibre proche de l'équilibre sans texture (fig. 1.23).

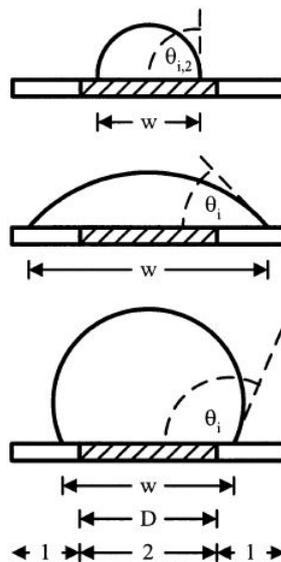


FIGURE 1.23 – Essais d'Extrand [50].

Surface	θ_a	θ_r	$\Delta\theta$
Wafer de SI	7 ± 3	< 2	< 7
PS	95 ± 2	87 ± 2	8 ± 4
PS sur Wafer de SI	6 ± 2	< 2	< 6
PFA	107 ± 2	84 ± 2	23 ± 4
PFA texturé	67 ± 3	12 ± 3	55 ± 6
PFA texturé sur PFA	109 ± 3	84 ± 2	26 ± 5

TABLE 1.1 – Résultats des essais d'Extrand pour de l'eau [50].

Extrand observe qu'avec ou sans texturation centrale, l'angle de contact reste sensiblement le même (Tab 1.1) alors que le modèle de Cassie annonce un angle différent. Il conclut en expliquant que la méthode qui consiste à moyenner l'angle de contact en fonction de l'aire de contact ne s'applique pas, l'angle de contact serait donc déterminé par les interactions au niveau de la ligne triple. Cette étude ayant suscité de nombreuses remises en question, Gao et McCarthy ont réalisé une étude semblable afin de vérifier le travail d'Extrand [51].

Dans cette étude, Gao et McCarthy travaillent sur des surfaces avec une texturation centrale (fig. 1.24). Deux textures sont testées : la texturation chimique et la texturation topographique.

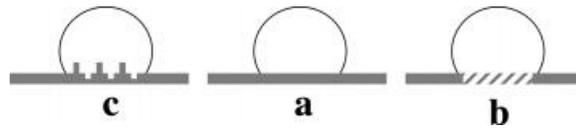


FIGURE 1.24 – Configurations étudiées : a) un seul matériau sans textures, b) texture chimique centrale, c) texture topographique centrale [51].

Les études chimiques et topographiques comparent les résultats mesurés et les résultats issus des équations de Cassie-Baxter et Wenzel. Les textures étudiées sont présentés dans la figure (fig. 1.25) avec d le diamètre de la zone texturée et D le diamètre de la goutte déposée.

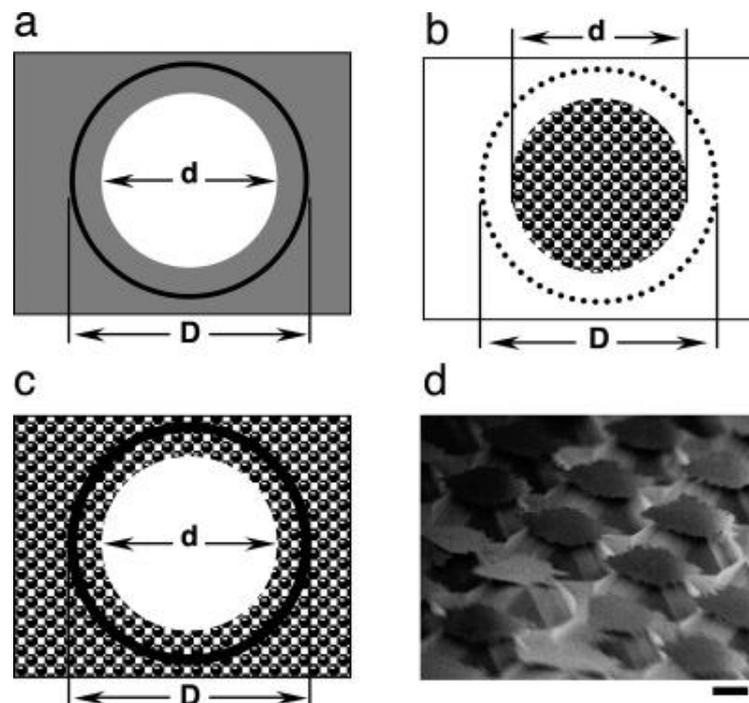


FIGURE 1.25 – Textures proposées par Gao et McCarthy [51], d est la diamètre de l'aire texturée et D est de diamètre de la goutte. La taille de la barre dans l'image d vaut $10 \mu\text{m}$.

Pour l'étude de la texturation chimique figure (fig. 1.25a), ils utilisent une surface hydrophobe ($\theta_a = 119^\circ$ et $\theta_r = 110^\circ$) sur laquelle un îlot central est hydrophile ($\theta_a = 35^\circ$ et $\theta_r = 10^\circ$). Les résultats de leur expérience sont présentés dans le tableau 1.2. Ils observent toujours deux cas, si $d > D$ l'équilibre a les propriétés de la surface hydrophile et si $d < D$, l'équilibre a les propriétés de la surface hydrophobe.

Texturation	$d(mm)$	$D(mm)$	f_1	f_2	$\theta_{a/r}(calc)$	$\theta_{a/r}(obs)$
Chimique (fig. 1.25a)	1	0.5	1.00	0.00		$33^\circ/11^\circ$
Chimique (fig. 1.25a)	1	1.5	0.44	0.56	$85^\circ/76^\circ$	$119^\circ/110^\circ$
Topographique (fig. 1.25b)	1	0.5	1.00	0.00		$168^\circ/132^\circ$
Topographique (fig. 1.25b)	1	1.2	0.69	0.31	$145^\circ/115^\circ$	$117^\circ/82^\circ$
Topographique (fig. 1.25c)	1	0.5	1.00	0.00		$117^\circ/82^\circ$
Topographique (fig. 1.25c)	1	1.2	0.69	0.31	$128^\circ/196^\circ$	$167^\circ/132^\circ$

TABLE 1.2 – Résultats des essais de Gao et McCarthy [51].

Pour l'étude de la texturation topographique, ils utilisent la texturation de la figure 1.25d. Les résultats de leur expérience sont présentés dans le tableau 1.2 pour le cas de la texturation figure 1.25b et figure 1.25c. Ils observent que les angles de contact sont les mêmes si la ligne triple est sur les textures quelque soit la configuration b ou c.

Goa et McCarthy concluent leur étude en prouvant que les résultats présentés par Extrand sont valides et questionnent l'utilisation des modèles de Cassie-Baxter et Wenzel car les résultats obtenus par ces modèles sont très différents des valeurs mesurées.

Extrand a ensuite cherché à développer une méthode pour calculer l'angle de contact en utilisant la position de la ligne triple. Il va définir l'hystérèse d'angle de contact pour un substrat plan, c'est ce qu'il appelle l'hystérèse "intrinsèque" d'une surface $\Delta\theta_0$ figure 1.26(a-b).

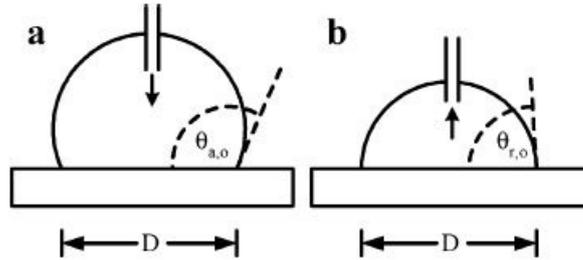


FIGURE 1.26 – Mesure des hystérèses intrinsèques [54].

$$\Delta\theta_0 = \theta_{a,0} - \theta_{r,0} \quad (1.42)$$

Avec $\theta_{a,0}$ et $\theta_{r,0}$ les angles de contact à l'avancée et reculée pour un substrat plan. Il va ensuite y avoir deux cas étudiés et modélisés par Extrand en 2002 [52]: une goutte suspendue et une goutte imprégnée.

Goutte en suspension

Extrand se place dans le cas d'une étude avec un substrat de plots rectangulaires (fig. 1.27).

L'angle de contact apparent θ_i peut s'exprimer en fonction des angles d'avancée dans l'air $\theta_{b,i}$ et sur le solide $\theta_{p,i}$.

$$\theta_i = \lambda_p \theta_{p,i} + \lambda_b \theta_{b,i} \quad (1.43)$$

Avec λ_p la fraction linéaire de la ligne triple sur le solide et λ_b la fraction linéaire de ligne triple entre les aspérités $\lambda_b + \lambda_p = 1$. Dans l'étude, $\theta_{air} = 180^\circ$. Extrand écrit alors :

$$\theta_{b,i} = \theta_{air} = 180^\circ \quad (1.44)$$

Extrand s'intéresse ensuite à l'angle $\theta_{p,i}$ qu'il étudie en avancée et reculée, respectivement $\theta_{a,i}$ et $\theta_{r,i}$.

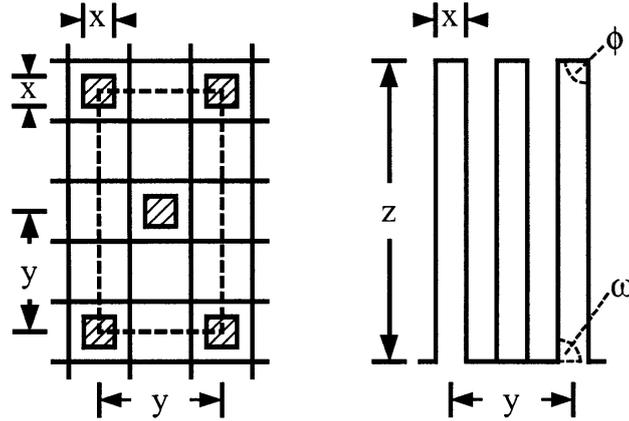


FIGURE 1.27 – Substrat proposé par Extrand en 2002 pour étudier l’hystérèse [52].

Dans la figure 1.28, l’angle d’avancée sur le bord d’une aspérité $\theta_{p,a}$ peut s’exprimer en

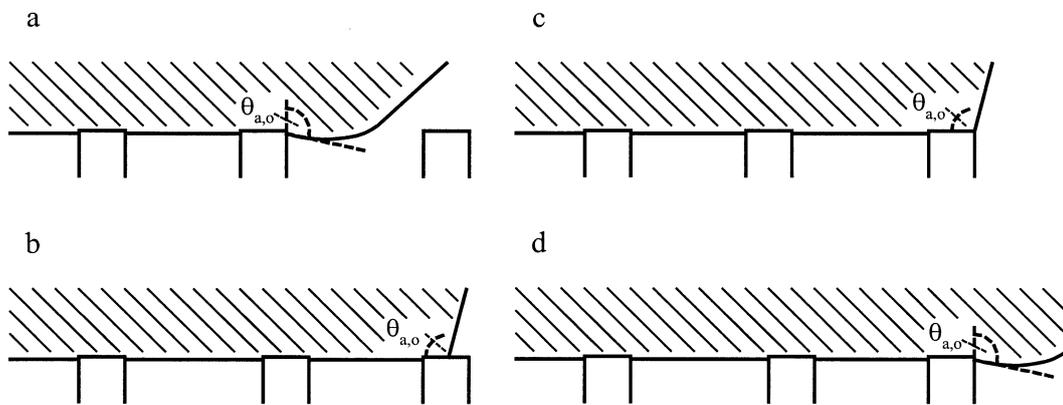


FIGURE 1.28 – Évolution de l’angle d’avancée [52].

fonction de $\theta_{a,0}$ et l’inclinaison des plans de contact ϕ (fig. 1.27).

$$\theta_{p,a} = \theta_{a,0} + (180^\circ - \phi) = \theta_{a,0} + \omega \quad (1.45)$$

L’angle d’avancée θ_a peut ainsi s’écrire à partir de (1.43), (1.44) et (1.45):

$$\theta_a = \lambda_p(\theta_{a,0} + \omega) + (1 - \lambda_p)\theta_{air} \quad (1.46)$$

Pour l’angle de reculée $\theta_{p,r}$ (fig. 1.29) :

$$\theta_{p,r} = \theta_{r,0} \quad (1.47)$$

L’angle de reculée apparent θ_r peut ainsi être écrit :

$$\theta_r = \lambda_p\theta_{r,0} + (1 - \lambda_p)\theta_{air} \quad (1.48)$$

L’hystérèse d’angle de contact va s’écrire en fonction de (1.42), (1.46) et (1.48):

$$\Delta\theta = \lambda_p(\Delta\theta_0 + \omega) \quad (1.49)$$

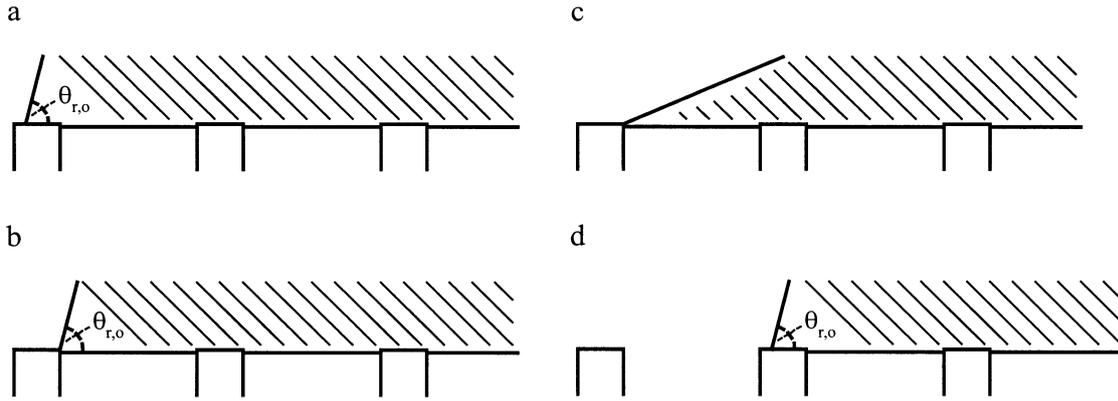


FIGURE 1.29 – Evolution de l'angle de reculée [52].

Goutte imprégnée

Pour l'état de goutte imprégnée, Extrand reprend le même principe que pour la goutte suspendue. Il va exprimer les deux angles possible en fonction de la position de la ligne triple. Sur le bord d'une aspérité, les angles d'avancée et reculée valent :

$$\theta_{p,a} = \theta_{a,0} + \omega \quad (1.50)$$

$$\theta_{p,r} = \theta_{r,0} - \omega \quad (1.51)$$

Et hors aspérités :

$$\theta_{b,a} = \theta_{a,0} \quad (1.52)$$

$$\theta_{b,r} = \theta_{r,0} \quad (1.53)$$

En recombinaison ces expressions :

$$\theta_a = \lambda_p(\theta_{a,0} + \omega) + (1 - \lambda_p)\theta_{a,0} \quad (1.54)$$

$$\theta_r = \lambda_p(\theta_{r,0} - \omega) + (1 - \lambda_p)\theta_{r,0} \quad (1.55)$$

Extrand exprime donc l'hystérèse d'angle de contact pour les gouttes imprégnées :

$$\Delta\theta = \Delta\theta_0 + 2\lambda_p\omega \quad (1.56)$$

Cette nouvelle approche d'estimation de l'angle de contact proposée par Extrand [52] est enfin testée pour des surfaces texturées et comparées avec l'approche par aire de contact (fig. 1.30).

surface feature	suspended or collapsed	measured			Cassie/Wenzel equation			linear equations		
		θ_a (deg)	θ_r (deg)	$\Delta\theta$ (deg)	θ_a (deg)	θ_r (deg)	$\Delta\theta$ (deg)	θ_a (deg)	θ_r (deg)	$\Delta\theta$ (deg)
stripes	suspended	165	132	33	150	143	8	180	160	20
circular posts	suspended	170	155	15	167	164	3	180	153	27
circular cavities	collapsed	138	75	63	129	117	12	133	81	52

FIGURE 1.30 – Résultats du premier modèle d'Extrand 2002 [52].

Extrand constate que la valeur de l'angle de contact trouvée est bien plus fidèle à la réalité qu'avec la méthode par aire de contact et c'est d'autant plus vrai pour l'hystérèse. Il y a quand même une erreur notable sur les valeurs trouvées (fig. 1.30). Le modèle proposé par Extrand pour calculer l'angle de contact n'est donc pas parfait bien qu'il donne des résultats plus proches des mesures expérimentales comparé aux modèles de Wenzel et Cassie-Baxter.

Les deux états d'équilibre étant définis, Extrand a déterminé les conditions pour changer d'état.

Extrand en 2002 va introduire un terme : la densité de ligne triple Λ qui s'exprime en fonction du périmètre de la ligne triple p et l'aire des aspérités δ . Ce terme va permettre de définir, en fonction de la géométrie du système, une valeur critique Λ_c pour laquelle une goutte va être imprégnée ou être en suspension.

$$\Lambda = p\delta \quad (1.57)$$

Extrand définit la transition d'une goutte suspendue à une goutte imprégnée lorsque les forces de masse de la goutte F égales les forces de surface f .

$$F = f(\Lambda) \quad (1.58)$$

$$F = \rho g V \quad (1.59)$$

$$f = -\Lambda A \gamma \cos \theta_s \quad (1.60)$$

Avec ρ la masse volumique, g l'accélération de pesanteur, V le volume de la goutte, A l'aire de contact apparente, γ la tension de surface et θ_s l'angle de contact sur les aspérités suivant l'axe vertical.

$$\theta_s = \theta_{a,0} + \omega - 90^\circ \quad (1.61)$$

Ainsi il y a deux domaines :

- $\Lambda > \Lambda_c$, la goutte est suspendue
- $\Lambda < \Lambda_c$ la goutte est imprégnée

Extrand conclut que le mouillage qui prenait en compte ρ , γ et $\theta_{a,0}$ devrait aussi prendre en considération $\Lambda_c(\omega, \theta_a, V)$.

Les scientifiques fidèles à l'approche par aire de contact ont proposé de considérer plutôt cette approche comme un moyen de définir des propriétés de surface indépendamment de la goutte [55]. Nosonovsky a montré que pour des texturations avec de fortes hétérogénéités, comme le cas de l'ilôt, les modèles de Cassie et Wenzel ne fonctionnent plus mais que dans des cas où la texturation ne subit pas de fortes variations locales, l'approche de Cassie-Baxter et Wenzel fonctionnent [56]. Marmur s'est aussi intéressé à cette notion de variation brusque de propriété de surface et a mis en avant le fait que dans les essais de Gao, les textures sont du même ordre de grandeur que la goutte, alors que pour des textures plus petites en dimension, l'angle de contact se rapproche des angles théoriques de Cassie ou Wenzel [57].

La littérature tend à montrer tout de même qu'en effet, la ligne triple est localement sollicitée pour définir l'état d'équilibre global d'une goutte. Les modèles de Cassie et Wenzel sont une première approche pour la texturation de surface. L'approche par ligne triple semble expliquer plus précisément l'origine de l'état d'équilibre mais il faut connaître la position exacte de la ligne triple à l'équilibre. Cette méthode telle que présentée dans la littérature n'est pas prédictive. Il y a néanmoins des études locales de déplacement de ligne triple qui ont été réalisées afin de déterminer si dans certaines conditions la goutte pouvait imprégner des textures en fonction des conditions d'équilibre locales [58].

Ces débats dans la littérature ont remis en question l'influence de la texturation sous la goutte à l'état final et pendant l'étalement. Néanmoins aucune solution n'a été trouvée pour avoir un modèle qui fonctionne dans tous les cas.

L'émergence d'une autre approche portée par E. Bormashenko [59] essaye de lier ces deux visions du mouillage, c'est l'approche mixte afin de pouvoir prendre en compte plus de comportements du mouillage.

1.3.4 Mouillage mixte

E. Bormashenko propose une étude de l'angle de contact à partir d'une équation d'équilibre de l'énergie libre [59] en considérant à la fois les aires de contact et aussi la ligne triple. La goutte est axialement symétrique de rayon a et est déposée sur une surface rugueuse. En exerçant un potentiel externe $U(h, x)$ on a son énergie libre de Gibbs G qui vaut :

$$\begin{aligned}
 G = \int_0^a & [\gamma 2\pi x \sqrt{1 + \left(\frac{dh}{dx}\right)^2} \\
 & + 2\pi x(\gamma_{SL} - \gamma_{SA})r\phi_s \\
 & + 2\pi x\gamma(1 - \phi_s) \\
 & + 2\pi\Gamma \\
 & + 2\pi x\Gamma\xi \\
 & + U(h, x)] dx
 \end{aligned} \tag{1.62}$$

Avec $h(x)$ la hauteur locale de la surface liquide par rapport au substrat. γ , γ_{SL} , γ_{SA} sont respectivement la tension de surface entre les phases liquide/air, solide/liquide et solide/air, Γ est la tension de la ligne triple, ϕ_s est la fraction de surface liquide/solide, r est le facteur de rugosité, ξ est le périmètre de la ligne triple par unité d'aire de substrat sous la goutte. Le rayon de la goutte a est largement supérieur à la taille caractéristique des rugosités. Les termes de l'équation de l'énergie libre (1.62) correspondent à :

1. $\int_0^a \gamma 2\pi x \sqrt{1 + \left(\frac{dh}{dx}\right)^2} dx$, l'énergie de la phase liquide
2. $\int_0^a 2\pi x(\gamma_{SL} - \gamma_{SA})r\phi_s dx$, l'énergie du solide mouillé
3. $\int_0^a 2\pi x\gamma(1 - \phi_s) dx$, l'énergie de l'interface liquide/air dans les poches
4. $\int_0^a 2\pi\Gamma dx$, l'énergie de la ligne triple externe (fig. 1.31.)
5. $\int_0^a 2\pi x\Gamma\xi dx$, l'énergie de la ligne triple interne (fig. 1.31.)

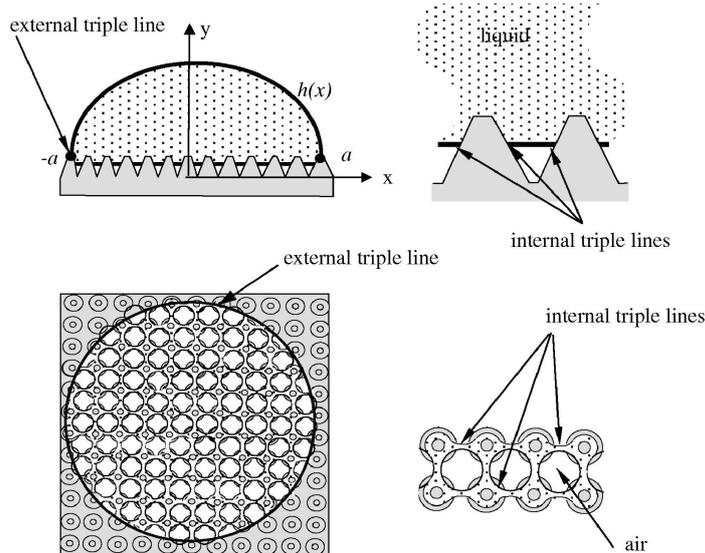


FIGURE 1.31 – Représentation de la ligne triple externe et interne de l'équation (1.62) [59].

Avec une condition de volume constant :

$$V = \int_0^a 2\pi h dx = const \tag{1.63}$$

Les équations (1.62) et (1.63) réduisent le problème en une fonction de l'énergie libre à minimiser :

$$G = \int_0^a \tilde{G}(h, h', x) dx \quad (1.64)$$

$$\tilde{G} = 2\pi\gamma x \sqrt{1 + h'^2} + 2\pi x \Pi + 2\pi\lambda x h + U(h, x) + 2\pi\Gamma \quad (1.65)$$

avec λ le multiplicateur de Lagrange déduit de l'équation (1.63), $\Pi = (\gamma_{SL} - \gamma_{SA})r\phi_s + \gamma(1 - \phi_s) + \Gamma\xi$.

Après développement, E. Bormashenko trouve l'expression de l'angle apparent θ^* :

$$\cos \theta^* = r\phi_s \cos \theta_Y + \phi_s - 1 - \frac{\Gamma}{\gamma} \left(\xi + \frac{1}{a} \right) \quad (1.66)$$

Cette équation de l'angle apparent (1.66) comprend les équations de Wenzel[45] et Cassie-Baxter[47].

En effet, pour un $r = 1$ et comme les effets de la ligne triple sont négligeables, on retrouve (1.31):

$$\cos \theta^* = \phi_s \cos \theta + \phi_s - 1 = -1 + \phi_s(\cos \theta + 1) \quad (1.67)$$

Si on a un $r \neq 1$ et que les effets de la ligne triple toujours négligeables, on a une équation de Cassie-Baxter modifiée, introduite par Marmur, Miwa *et al.* [48, 60].

$$\cos \theta^* = r\phi_s \cos \theta + \phi_s - 1 \quad (1.68)$$

Dans le cas où $r = 1$ et que les effets sur la ligne triple sont négligeables ($\xi \gg 1/a$), on a l'équation proposée par Hong et Ho [61]

$$\cos \theta^* = \phi_s \cos \theta + \phi_s - 1 - \frac{\Gamma\xi}{\gamma} \quad (1.69)$$

En supposant ($\xi \ll 1/a$), on obtient l'équation de Neumann-Boruvka [62] :

$$\cos \theta^* = r\phi_s \cos \theta + \phi_s - 1 - \frac{\Gamma}{\gamma a} \quad (1.70)$$

Dans le cas où $\phi_s = 1$ et les effets liés à la ligne de triple Γ sont négligeables, on obtient l'équation de Wenzel (1.29)[45] :

$$\cos \theta^* = r \cos \theta \quad (1.71)$$

1.4 Mouillage dynamique

Une autre approche du mouillage consiste à étudier l'étalement qui conduit à l'état final. C'est l'étude dynamique du mouillage. Plusieurs considérations et phénomènes sont étudiés. Pour commencer on va s'intéresser à l'approche énergétique qui était aussi utilisée pour l'étude statique. Dans le cadre de la dynamique, l'approche énergétique sert à déterminer l'effet de la texturation sur la possibilité d'étalement de la goutte. Ensuite, nous verrons comment l'évolution du comportement d'une goutte est étudiée à travers trois échelles (fig. 1.32). En effet, le mouillage est un phénomène multi-échelle, c'est-à-dire que le mouillage combine à la fois des interactions locales comme nous l'avons montré avec les études de ligne triple mais aussi des phénomènes plus globaux comme les effets de capillarité. Ainsi, les études dynamiques se font à différentes échelles et à chaque échelle sont associés certains phénomènes intrinsèques à l'échelle étudiée. Nous verrons donc le mouillage dynamique à l'échelle macroscopique, puis à l'échelle mésoscopique et enfin à l'échelle microscopique.

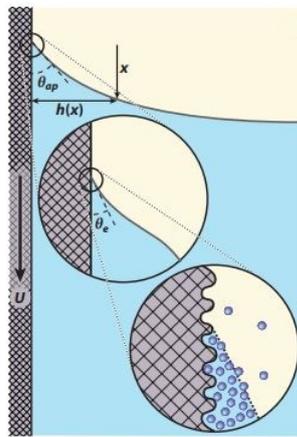


FIGURE 1.32 – Représentation du mouillage en fonctions des échelles d'étude : échelle macroscopique, mésoscopique et microscopique [63].

1.4.1 Approche énergétique

Une notion qui s'avère majeure dans le cas de l'étude du mouillage dynamique sur surface texturée est l'énergie de barrière. En effet, cette barrière correspond à l'énergie nécessaire pour que la goutte dépasse une hétérogénéité locale de surface.

Johnson et Dettre ont inclus l'hystérèse d'angle de contact à la méthode de l'énergie libre [64] avec des tests sur des surfaces texturées topographiquement et chimiquement [65][66]. Ils mettent en avant l'idée qu'il y a une barrière énergétique entre deux positions d'équilibre métastable (Fig. 1.33). Cette barrière énergétique s'applique en périphérie de la goutte. Pour changer d'état, la goutte doit dépasser cette barrière. Ils concluent que l'angle de contact observé dépend de la hauteur de l'énergie de barrière et de la capacité de la goutte à la dépasser [64].

Fang *et al.* ont travaillé sur le déplacement de goutte induit par la texturation de surface (Fig. 1.34) à partir de l'évolution de l'énergie libre de la goutte en fonction de son étalement [68]. Les hypothèses pour un système 2D sont :

- (1) Gravité, hétérogénéité chimique, interactions solide-liquide, interaction moléculaire dans le liquide sont négligées
- (2) Tension de ligne négligée

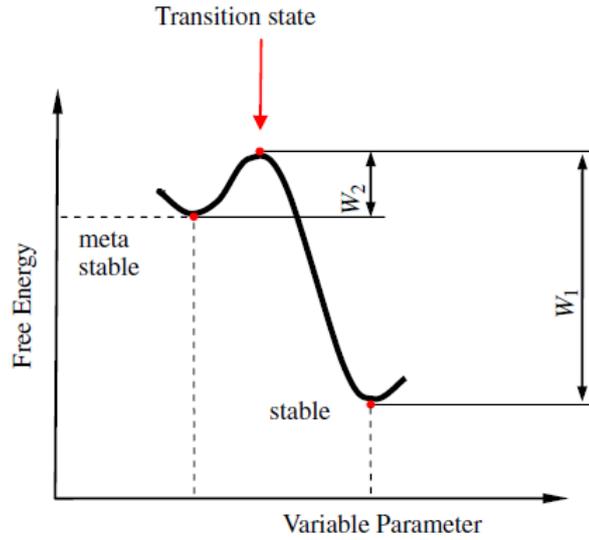
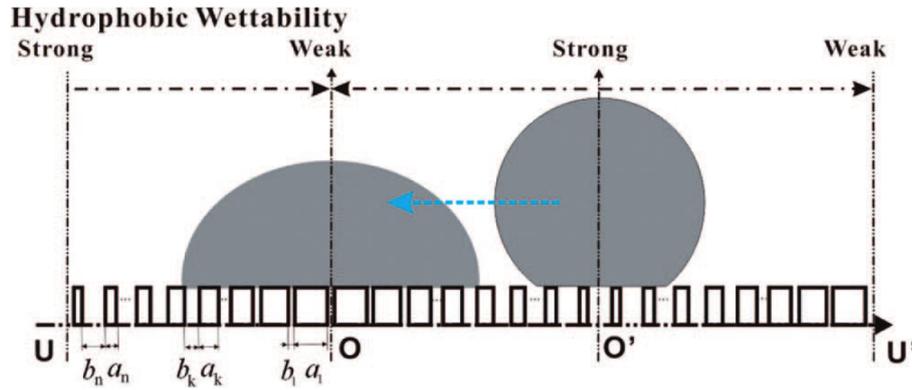

 FIGURE 1.33 – Barrières énergétiques W_1 et W_2 entre deux états stables [67].


FIGURE 1.34 – Goutte avec déplacement imposé par une texture [68].

La première hypothèse s'applique à l'hystérèse d'angle de contact.

Dans cette étude, la goutte a deux états. Un état initial avec une énergie libre F_O et un état arbitraire avec une énergie libre F_{ar} .

$$F_O = \gamma\pi R_O + \gamma_{SG}(L_{ar} + 2kh) + C \quad (1.72)$$

$$F_{ar} = \gamma \left(\theta_{ar} \frac{L_{ar}}{\sin \theta_{ar}} + \sum_{i=1}^k b_i \right) + \gamma_{SG} \left(\sum_{i=1}^k b_i + 2kh \right) + \gamma_{SL} \sum_{i=1}^k a_i + C \quad (1.73)$$

Avec C l'énergie libre inchangée du système, θ_{ar} l'angle arbitraire, L_{ar} la distance d'avancée de la ligne triple, γ la tension de surface liquide-gaz, γ_{SL} la tension de surface solide-liquide, γ_{SG} la tension de surface solide-gaz, b_i la longueur locale d'air, a_i la longueur locale de solide, R_O le rayon initial de la goutte, h la hauteur des plots et k le nombre de textures. Le système va donc faire varier son énergie libre initiale pour atteindre un état arbitraire :

$$\Delta F_{O \rightarrow ar} = \gamma \left(\theta_{ar} \frac{L_{ar}}{\sin \theta_{ar}} + \sum_{i=1}^k b_i - \pi R_O \right) + \sum_{i=1}^k a_i (\gamma_{SL} - \gamma_{SG}) \quad (1.74)$$

Fang *et al.* étudient ensuite l'énergie libre d'un système dans deux configurations, forte

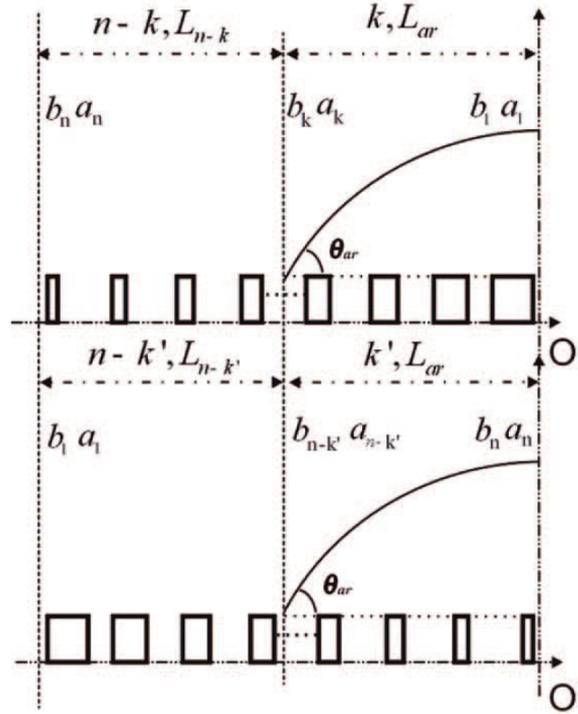


FIGURE 1.35 – Deux configuration O et O' [68].

hydrophobie O et faible hydrophilie O' 1.35. L'équation (1.73) est écrite pour les deux configurations :

$$F_O^{ar} = \gamma \left(\theta_{ar} \frac{L_{ar}}{\sin \theta_{ar}} + \sum_{i=1}^k b_i \right) + \gamma_{SG} \left(\sum_{i=1}^n b_i + \sum_{i=1}^n a_i + 2nh \right) + \gamma_{SL} \sum_{i=1}^k a_i + C \quad (1.75)$$

$$F_{O'}^{ar} = \gamma \left(\theta_{ar} \frac{L_{ar}}{\sin \theta_{ar}} + \sum_{i=n-k'}^n b_i \right) + \gamma_{SG} \left(\sum_{i=1}^n b_i + \sum_{i=1}^{n-k'} a_i + 2nh \right) + \gamma_{SL} \sum_{i=n-k'}^k a_i + C \quad (1.76)$$

Et l'évolution de l'énergie libre entre deux états du système peut être écrite :

$$\begin{aligned} \Delta F_{O \rightarrow O'}^{ar} = & \gamma \left(\sum_{i=n-k'}^n b_i - \sum_{i=1}^k b_i \right) \\ & + \gamma_{SG} \left(\sum_{i=1}^{n-k'} a_i - \sum_{i=k}^n a_i \right) \\ & + \gamma_{SL} \left(\sum_{i=n-k'}^n a_i - \sum_{i=1}^k a_i \right) \end{aligned} \quad (1.77)$$

Fang *et al.* arrivent ainsi à quantifier l'énergie relative nécessaire pour que la goutte change d'état à partir de l'équation (1.77). En fonction du signe de l'énergie relative. La transition de l'état O vers l'état O' sera donc favorisée ou défavorisée.

Une autre approche énergétique est proposée par Dubov *et al.*[69]. Ils considèrent de l'élasticité au niveau de la ligne triple. Deux situations sont étudiées : l'avancée de ligne triple et la reculée de ligne triple.

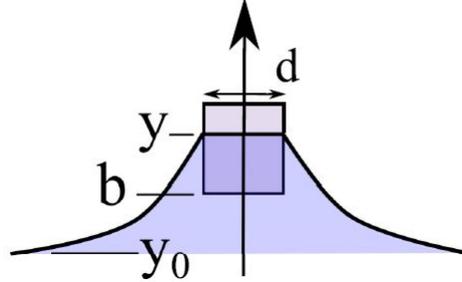


FIGURE 1.36 – Schéma de l'étude de Dubov *et al.* [69].

Pour une ligne triple qui recule, l'énergie par texture, avec w le travail d'adhésion, s'écrit :

$$\varepsilon_w = -wd(y - b) \quad (1.78)$$

Et l'énergie élastique s'écrit :

$$\varepsilon_{el} = \frac{1}{2}k(y - y_0)^2 \quad (1.79)$$

k est la raideur de la ligne triple caractérisée par l'énergie de déformation à la distorsion.

$$k = \frac{\kappa}{\ln\left(1 + \frac{l}{d}\right)} \quad (1.80)$$

κ est une fraction de la tension de surface :

$$\kappa = \frac{1}{2}\pi\gamma\theta_s^2 \quad (1.81)$$

θ_s est l'angle de contact sur l'aspérité, ici θ_s est inconnu.

L'équilibre instable est écrit :

$$k(y - y_0) = wd \quad (1.82)$$

Lors de la rupture de la ligne triple, l'énergie de la déformation est :

$$\varepsilon_{el} = \frac{1}{2} \frac{(wd)^2}{k} \quad (1.83)$$

Pour étendre la ligne triple, cette énergie élastique de barrière doit être dépassée. Le travail effectif d'adhésion pour un angle de reculée vaut :

$$\gamma(1 + \cos\theta_{rec}) = \frac{1}{2}n \frac{(wd)^2}{k} \quad (1.84)$$

Avec n la densité de piliers [40].

Pour une ligne triple qui avance, il y a une déformation critique pour laquelle la ligne triple se déplace.

$$\varepsilon_w = \frac{1}{2}k(y_c - y_0)^2 \quad (1.85)$$

Et en utilisant le travail d'adhésion :

$$\gamma(1 + \cos \theta_{adv}) = \frac{1}{2}nk(\lambda l)^2 \quad (1.86)$$

Dubov normalise ensuite la rigidité de la ligne par la tension de surface $\tilde{k} = \frac{k}{\gamma}$.

$$1 + \cos \theta_{rec} = \frac{1}{2} \frac{(w/\gamma)^2}{\tilde{k}(1 + l/d)^2} \quad (1.87)$$

$$1 + \cos \theta_{adv} = \frac{1}{2} \tilde{k} \frac{(\lambda l)^2}{(1 + l/d)^2} \quad (1.88)$$

Les résultats obtenus montrent que le comportement à l'avancée et à la reculée peuvent être modélisés par l'énergie élastique 1.37.

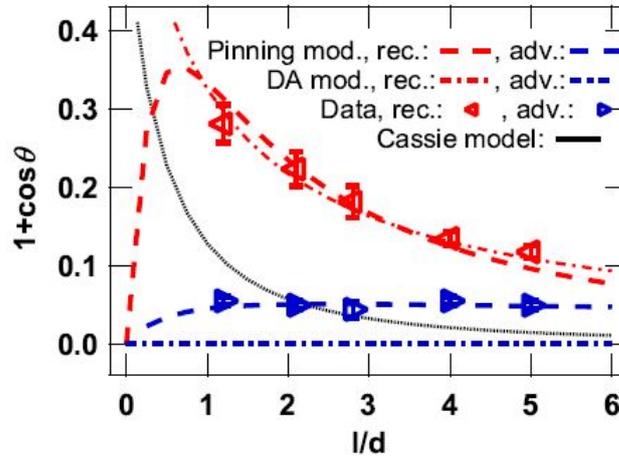


FIGURE 1.37 – Comparaison des résultats avec la méthode de Dubov [69]

Ces deux études de la dynamique de l'étalement ne montrent pas les mêmes comportements de ligne triple. Dans l'étude proposée par Fang *et al.*, le calcul énergétique permet de déterminer quel déplacement de ligne triple est le plus favorable à l'étalement. Dans l'étude proposée par Dubov *et al.* l'étude montre plutôt la caractérisation de la barrière énergétique lorsque la ligne triple doit se détacher d'une texture.

1.4.2 Echelle Macroscopique

A l'échelle macroscopique, l'angle de contact macroscopique dépend du nombre capillaire Ca [63] ($Ca = v\mu/\gamma$, avec v la vitesse et μ la viscosité dynamique du fluide). Cet angle macroscopique est l'angle observé dans l'étude de la goutte sessile et cet angle est aussi appelé angle apparent θ_{app} (Fig. 1.38).

Plus le nombre capillaire est faible, plus l'angle apparent définit la dynamique. Il y a de l'avancée si $\theta_{app} > \theta_e$ et de la reculée pour $\theta_{app} < \theta_e$.

Une étude de 1962 proposée par Furmidge introduit la notion de force de déplacement de ligne triple [70]. Cette étude de Furmidge a ensuite été réutilisée et réécrite sous la forme suivante [71] :

$$F_d = \gamma (\cos \theta_e - \cos \theta_d) \quad (1.89)$$

Avec θ_e l'angle à l'équilibre (équivalent à θ_{Young}), θ_d l'angle de contact apparent dynamique et F_d la force d'avancée de ligne triple.

Cette fonction permet d'exprimer la force qui déplace la ligne triple en fonction d'un terme

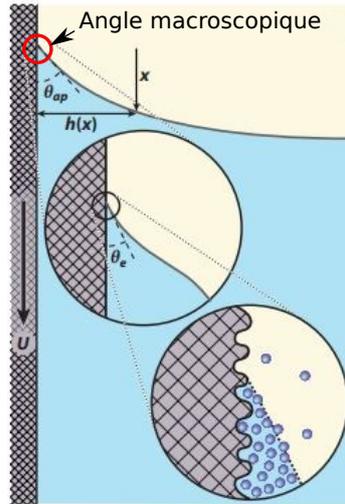


FIGURE 1.38 – Angle macroscopique [63].

d'équilibre ($\cos \theta_e$) et d'un terme dynamique ($\cos \theta_d$). Ainsi, la force de déplacement de la ligne triple exprimée par Furmidge a la forme présentée dans la figure 1.39.

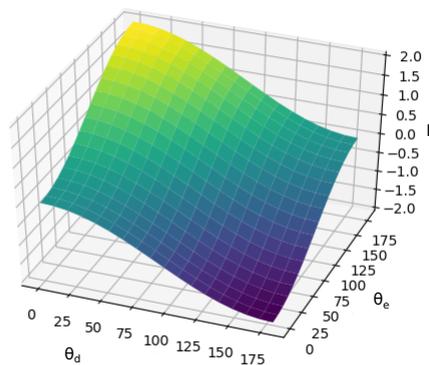


FIGURE 1.39 – Allure de la force de déplacement de la ligne triple en fonction de l'angle d'équilibre θ_e et de l'angle dynamique θ_d .

Quand cette force est positive, la ligne triple avance, quand cette force est négative, la ligne triple recule. La goutte est à l'équilibre quand la force est nulle.

1.4.3 Echelle mésoscopique

L'échelle mésoscopique propose d'étudier un angle plus "local" : θ_e (Fig. 1.40)

A l'échelle mésoscopique, la balance visco-capillaire et la tension de surface sont plus simples à définir. Voinov propose [72] de les exprimer avec l'écriture suivante :

$$\theta(x) \simeq [9Ca \ln(x/c)]^{1/3} \quad (1.90)$$

Avec c la longueur caractéristique microscopique. Et en faisant le lien avec le macroscopique, on obtient la loi de Cox-Voinov :

$$\theta_{app}^3 = \theta_e^3 + 9\sigma Ca \ln\left(\frac{\alpha l_0}{l_i}\right) \quad (1.91)$$

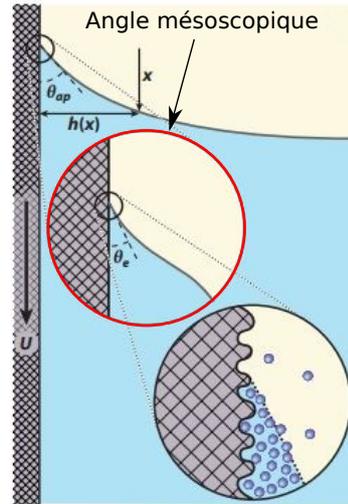


FIGURE 1.40 – Angle mésoscopique [63].

Avec $\sigma \pm 1$ en fonction de l'avancée ou de la reculée, l_0 la longueur caractéristique macroscopique et l_i la longueur microscopique caractéristique. α est une constante qui dépend des conditions aux bords [73].

1.4.4 Echelle microscopique

Pour l'échelle microscopique, la goutte est localement considérée comme un amas de particules de liquide qui est très fortement impacté par l'hétérogénéité locale de la surface (Fig. 1.41).

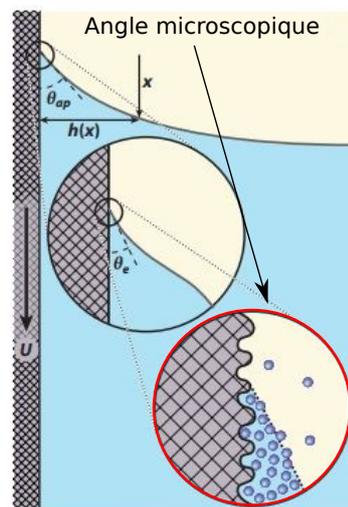


FIGURE 1.41 – Angle microscopique [63].

A l'échelle microscopique, l'approche par activation thermique est utilisée. Blake et Haynes en 1969 [74] s'intéressent à la vitesse de déplacement de la ligne triple. Leur approche utilise la Molecular Kinetic Theory (MKT).

La MKT permet une description phénoménologique du déplacement de la ligne triple par un mode simple de propagation caractérisé par une échelle de grandeur/ longueur d'activation λ et une énergie de barrière pour l'activation E^* [75]. Un liquide a toujours un déplacement de molécules lié à l'agitation thermique, cette vitesse V s'exprime en fonction

d'une longueur caractéristique λ et d'une fréquence κ (fig. 1.42).

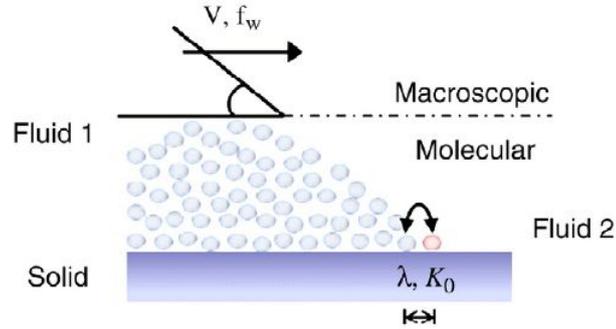


FIGURE 1.42 – Représentation de la MKT.

A l'équilibre et dans le bulk, le champ des vitesses est isotrope. Hors équilibre, au niveau de la ligne triple, le champ des vitesses est anisotrope. Il y a un déséquilibre entre la fréquence d'avancée κ^+ et la fréquence de reculée κ^- . La vitesse est donc :

$$V = \lambda (\kappa^+ - \kappa^-) \quad (1.92)$$

Et à vitesse nulle pour l'équilibre :

$$\kappa^+ = \kappa^- = \kappa_0 \quad (1.93)$$

Dans le cas d'une surface "parfaite", en appliquant la théorie du taux de réaction à l'activation thermique [76], la fréquence à laquelle la barrière est dépassée est :

$$\kappa = \kappa_0 \exp\left(-\frac{E^*}{k_B T}\right) \quad (1.94)$$

κ_0 est la fréquence qui, dans le cas moléculaire, est la fréquence thermique. Elle est relié à l'énergie d'activation molaire par l'équation :

$$\kappa_0 = \left(\frac{k_B T}{h}\right) \exp\left(\frac{-E^*}{N_A k_B T}\right) \quad (1.95)$$

Avec k_B la constante de Boltzmann, h la constante de Plank et N_A le nombre d'Avogadro. La MKT permet d'écrire la vitesse de la ligne triple à partir de l'équation de la force de déplacement de la ligne triple F_d 1.89 et d'un coefficient de friction ξ [77]:

$$V = \frac{F_d}{\xi} \quad (1.96)$$

Le coefficient de friction vaut :

$$\xi = \frac{\mu_L v_L}{\lambda^3} \exp\left(\frac{\gamma \lambda^2 (1 + \cos\theta_e)}{k_B T}\right) \quad (1.97)$$

Avec μ_L la viscosité dynamique du liquide, v_L la volume du liquide et λ la longueur caractéristique d'un saut. Le coefficient de friction est ainsi réécrit :

$$\xi = \frac{\mu_L v_L}{\lambda^3} \exp\left(\frac{\gamma \lambda^2 (1 + \cos\theta_e)}{k_B T}\right) \quad (1.98)$$

1.5 Conclusion

De nombreuses études et principes du mouillage ont été présentés. Le mouillage est l'étude d'un système avec trois éléments : un liquide, un gaz et un solide. Les principales difficultés dans l'étude du mouillage sont la compréhension de la déformation et du déplacement des interfaces entre ces trois éléments. De plus, la texturation rajoute des phénomènes locaux qui perturbent l'évolution du système.

Le substrat est un solide, il est considéré indéformable. Ainsi, il est plus facile de suivre l'évolution des interfaces entre le solide et les fluides. L'interface liquide-gaz cherche à s'optimiser pour minimiser son énergie. Enfin, au niveau de la ligne triple, des forces sont appliquées en fonction des interfaces solide-fluides.

En ajoutant de la texturation de surface, on vient perturber l'évolution des interfaces en générant des variations des forces appliquées par les interfaces du solide.

D'après cette étude du mouillage, on sait que la simulation numérique devra permettre de considérer des forces aux interfaces et les perturbations que l'hétérogénéité de surface entraîne sur l'interface fluide-fluide. On peut aussi déjà considérer des tests de validation de l'outil numérique à partir de cette étude bibliographique. En effet, on a par exemple appris que si l'interface liquide-gaz n'est pas en contact avec un solide, elle devrait avoir une forme de sphère parfaite à l'équilibre. De plus, on a défini un angle de Young, ou un angle intrinsèque qui ne dépend que de la nature de la surface. Cet angle correspond à l'angle réel de la surface dans le cas où cette surface est parfaitement plane et homogène chimiquement. Une simulation sur surface plane et homogène chimiquement doit donc donner une goutte en forme de calotte sphérique avec un angle de contact constant qui vaut l'angle intrinsèque de la surface.

On va maintenant pouvoir s'intéresser aux études de simulations numériques du mouillage présentes dans la littérature en considérant les différentes contraintes mises en avant pendant l'étude de la mouillabilité.

Chapitre 2

Simulation numérique du mouillage

Sommaire

1.1	Forces capillaires	8
1.1.1	Tension de surface fluide-fluide	9
1.1.2	Interface courbe	13
1.2	Propriété de mouillabilité	16
1.2.1	Goutte sessile	16
1.2.2	Hystérèse d'angle de contact	16
1.3	Mouillage statique	18
1.3.1	Goutte en équilibre	18
1.3.2	Approche par aire de contact	19
1.3.3	Approche par ligne triple	22
1.3.4	Mouillage mixte	28
1.4	Mouillage dynamique	30
1.4.1	Approche énergétique	30
1.4.2	Echelle Macroscopique	34
1.4.3	Echelle mésoscopique	35
1.4.4	Echelle microscopique	36
1.5	Conclusion	38

La thèse qui est présentée utilise une méthode numérique pour simuler le mouillage. On va donc commencer par une étude de la littérature portée sur la mouillabilité. Cette étude permet de définir et comprendre le mouillage. Cette première étude permettra aussi de définir les notions fondamentales qui doivent être prises en compte pour des simulations. Ensuite, on s'intéressera aux différentes études de la littérature qui utilisent des méthodes numériques pour simuler le mouillage. Après cette présentation, un choix de méthode sera proposé et expliqué. Pour finir l'étude de l'état de l'art, la méthode retenue sera explicitée en deux temps : son explication physique et son application dans le cadre de l'étude du mouillage.

Pour simuler numériquement le mouillage, il faut simuler le déplacement d'un fluide : le liquide. Pour ce faire, trois approches pour simuler les équations de transport du fluide sont principalement présentes dans la littérature : l'approche continue à l'échelle macroscopique, l'approche discrète à l'échelle microscopique et l'approche intermédiaire à l'échelle mésoscopique. Ces trois approches sont représentées dans la figure 2.1

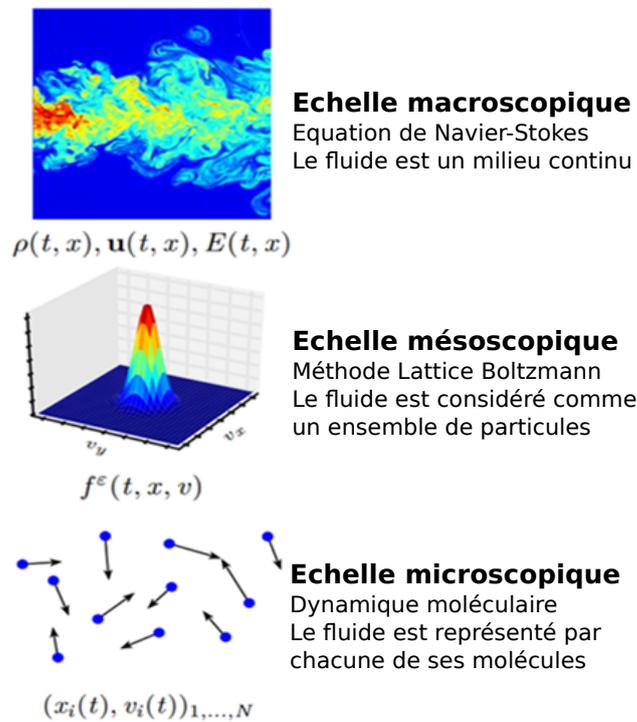


FIGURE 2.1 – Approches pour simuler les équations de transport des fluides en fonction de l'échelle considérée.

Pour l'approche continue, des équations différentielles sont créées en considérant les conservations de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour un élément de volume infinitésimal. La résolution de ces équations différentielles peut s'avérer très complexe à cause de non linéarité, conditions aux bords complexes, ... Des méthodes d'éléments finis, volumes finis, différences finies sont utilisées afin de transformer les équations différentielles en équations algébriques pour des conditions initiales et conditions aux bords précises. Ces équations sont ensuite résolues de façon itérative jusqu'à leur convergence.

Il faut aussi discrétiser le domaine afin de pouvoir y appliquer les équations. La discrétisation peut être en mailles, en volumes ou en éléments.

Ces équations s'appliquent à une échelle macroscopique. Les grandeurs physiques étudiées comme la température, la pression, la vitesse, sont appliquées en fonction de la discrétisation, à un point du domaine ou moyennées dans un élément de volume.

L'approche discrète considère le fluide comme un ensemble de particules (atomes, molécules) et ces molécules se déplacent et se collisionnent entre elles. Cette méthode est microscopique. Il faut définir des forces d'interactions intermoléculaires et résoudre les équations différentielles de la loi de conservation de la quantité de mouvement (seconde Loi de Newton). A chaque pas de temps, il faut déterminer la position, la vitesse et la direction de chacune des particules qui compose le fluide. Cette méthode est appelée la dynamique moléculaire (MD).

Enfin, il existe une méthode intermédiaire, qui se situe à l'échelle mésoscopique : la méthode Lattice Boltzmann (LBM). La LBM reprend les principes de l'approche discrète mais sur un ensemble de particules. Ainsi, cette méthode est dite "mésoscopique" car elle est à une échelle supérieure à la MD. La LBM permet de contrôler assez précisément les interactions entre particules via un opérateur de collision. Cette méthode permet aussi d'avoir différentes informations à l'échelle macroscopique et mésoscopique. Il est possible de connaître à la fois la vitesse d'un ensemble de particules et la vitesse du fluide dans un élément de l'espace.

L'utilisation de la MD est très peu présente pour les études du mouillage. Elle est généralement couplée à la méthode continue afin d'avoir des informations précises sur des phénomènes locaux au niveau de la ligne triple [78]. De plus, l'étude du mouillage a pour objectif de déterminer l'évolution macroscopique des interfaces. Il est difficile d'étudier une goutte de quelques microlitres avec la MD car le nombre de molécules à simuler est beaucoup trop grand pour les outils de calculs disponibles.

2.1 Simulation du mouillage par l'approche macroscopique

Dans l'application de l'approche continue au mouillage, il y a deux méthodes à coupler : le suivi d'interface et le calcul du champs des vitesses du fluide. En effet, pour l'étude du mouillage, il faut avoir des informations sur l'interface fluide-fluide via le suivi d'interface et déplacer cette interface via le calcul des vitesses ou des forces à l'interface.

Il existe de nombreuses méthodes qui permettent déterminer la position de l'interface, on va commencer par expliquer simplement le fonctionnement des méthodes les plus présentes dans la littérature puis nous nous intéresserons aux études du mouillage via simulation numérique dans le cadre de l'approche macroscopique.

2.1.1 Comment suivre une interface ?

L'interface est la frontière entre deux milieux physiques. La simulation numérique cherche à modéliser l'évolution de la frontière entre le liquide et le gaz. L'interface peut être considérée de deux manières :

- Interface d'épaisseur nulle. Elle introduit une discontinuité des grandeurs caractéristiques du milieu physique (masse volumique ou viscosité). Cette méthode est appelée interface ponctuelle.
- Interface d'épaisseur définie. Elle permet une transition rapide mais continue entre les deux phases. Cette méthode est nommée interface diffuse.

En fonction des considérations, il y a donc différents moyens de définir l'interface. Trois méthodes sont très présentes dans la littérature : la Front Tracking méthode (FT), la méthode du Volume Of Fluid (VOF) et la méthode du Level-Set (LS).

- Front Tracking Method

La Méthode du Front Tracking est une méthode de suivi explicite ou "interface tracking", c'est à dire que des marqueurs ou traceurs sont placés sur l'interface (fig. 2.2). Pour déplacer l'interface, il faut déplacer les traceurs [79].

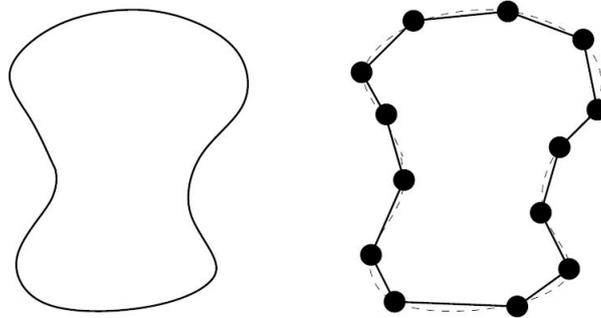


FIGURE 2.2 – Traceurs sur l'interface.

Cette méthode est très intuitive et simple à mettre en place. Elle convient bien à des problèmes aux interfaces simples sans perturbations singulières. En effet, la précision de la méthode correspond à l'écart entre les traceurs. Or dans le cas du mouillage, l'aire de l'interface augmente. Pour contrer ce problème, il faut placer de nouveaux marqueurs pour conserver la précision [80] ce qui rajoute des étapes dans la simulation.

- Volume Of Fluid

La méthode du VOF est un suivi implicite de l'interface ou "interface capturing". C'est une méthode d'approche eulérienne à capture discontinue. Dans le cas du VOF, le milieu est découpé en cases. Une fraction volumique ϵ correspond à la fraction de volume du liquide dans la case. Trois cas sont distingués (fig. 2.3):

- $\epsilon = 1$, case de fluide A.
- $\epsilon = 0$, case de fluide B.
- $0 < \epsilon < 1$, l'interface est dans cette case.

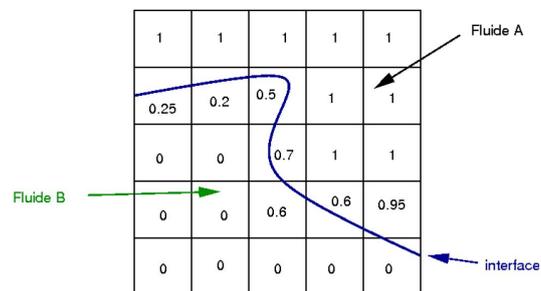


FIGURE 2.3 – Maillage VOF [81].

Les différentes variantes de la méthode VOF se font à la reconstruction de l'interface. En effet, il y a une fraction de volume attribuée à chaque cases mais la position exacte de l'interface n'est pas définie.

Pour reconstruire cette interface, Noh et Woodward [82] proposent la méthode SLIC (Simple Line Interface Calculation) (fig. 2.4 seconde image). Une autre méthode PLIC

(Piecewise Linear Interface Calculation) [83] consiste à trouver la normale à l'interface via le gradient de ϵ et ainsi orienter le segment de l'interface (fig. 2.4 troisième image).

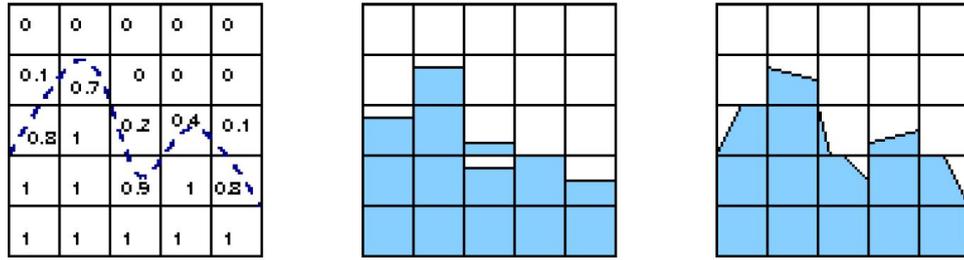


FIGURE 2.4 – Méthodes de reconstruction [81].

La méthode du PLIC est couramment utilisée et il y a de nombreuses améliorations qui ont été apportées comme un lissage de l'interface pour éviter des variations brusques entre cases [78], l'utilisation de l'angle de contact dynamique θ_d pour connaître le segment de la case en contact avec le substrat [78, 84]. Des améliorations sont aussi faites au niveau du transport des segments en considérant par exemple un glissement partiel dans la région de la ligne triple [85].

La méthode VOF permet une excellente conservation du volume déplacé mais devient fastidieuse à mettre en œuvre en 3D à cause de l'interface à reconstruire.

- Level-Set

La méthode du Level-Set consiste à définir une fonction ϕ telle que :

$$\begin{cases} \phi(x, t) < 0 & \text{pour } x \in \Omega_1 \\ \phi(x, t) > 0 & \text{pour } x \in \Omega_2 \\ \phi(x, t) = 0 & \text{pour } x \in \Gamma(t) = \partial\Omega_1 \end{cases} \quad (2.1)$$

Avec Γ l'interface et Ω_1 le milieu 1.

Le déplacement de l'interface est obtenu en déterminant l'évolution en temps de la fonction Level-Set. Avec cette méthode, ce ne sont plus des déplacements de points qui sont suivis mais c'est l'évolution de ϕ . L'interface $\Gamma(t)$ est donc déterminée quand $\phi = 0$.

Cette méthode est particulièrement efficace pour des changements topologiques car il n'y a pas besoin de recalculer des nœuds ou de reconstruire l'interface en cas de fusion ou découpage [86].

L'interface se meut via la vitesse par l'équation de transport canonique : $\phi_t + v \cdot \nabla \phi = 0$, avec v le champ de vitesses.

La méthode Level-Set permet aussi de récupérer directement la normale à l'interface et la courbure de l'interface. Cette méthode est utilisée régulièrement pour modéliser des interfaces en mouillage où l'interface entre deux fluides a un rapport de masse volumique très grand. Il y a néanmoins un problème de perte de masse liée à cette méthode [87–92]. Pour y remédier, il y a la méthode de la "Particle Level Set Method" [93].

On va s'intéresser à différents travaux de la littérature qui permettent de simuler le mouillage en utilisant l'approche continue macroscopique et les méthodes de suivi d'interface présentées précédemment.

2.1.2 Etude avec éléments finis et level-set avec une approche variationnelle

Dans cette étude de J. Bruchon *et al.*, une combinaison d'éléments finis, level-set et formulation variationnelle sont proposés afin de simuler l'évolution d'une interface fluide-fluide sur un solide [94]. Le milieu est discrétisé par la méthode des éléments finis puis l'interface fluide-fluide est capturée par la méthode du level-set. La formulation variationnelle permet de définir l'évolution de l'interface fluide-fluide. Un aspect intéressant de cette étude est le fait que Bruchon *et al.* aient choisit de ne pas utiliser directement l'angle de contact pour définir l'interaction fluide-solide.

Cette stratégie de simulation choisie permet à Bruchon *et al.* de faire de l'étalement sur une surface plane (fig. 2.5) mais aussi de la montée capillaire (fig. 2.6). De plus il est possible grâce à l'utilisation de la méthode Level-set de faire de la coalescence de gouttes (fig. 2.7).

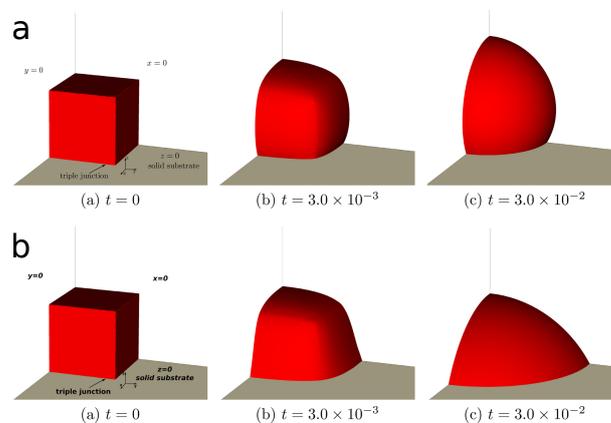


FIGURE 2.5 – Simulations sur surfaces planes. a) surface hydrophobe, b) surface hydrophile [94].

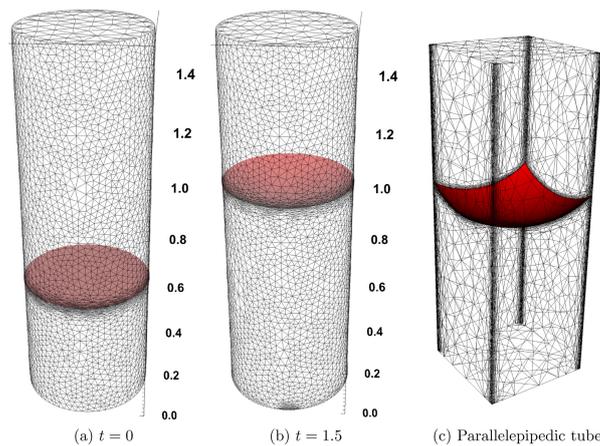


FIGURE 2.6 – Simulation de montée capillaire [94].

Ces choix pour simuler le mouillage sont intéressants et montrent qu'il est possible de simuler une goutte qui s'étale. Cette étude semble tout de même complexe à mettre en œuvre car elle nécessite une bonne maîtrise des éléments finis pour pouvoir définir correctement l'interaction fluide-solide pour des surfaces à géométrie quelconque. Il y a aussi une étape de remaillage à faire. De plus, il faut aussi maîtriser la méthode Level-Set pour pouvoir suivre l'évolution de l'interface fluide-fluide qui, en fonction de la texture, peut grandement se déformer. Toutes ces étapes sont aussi coûteuses en temps.

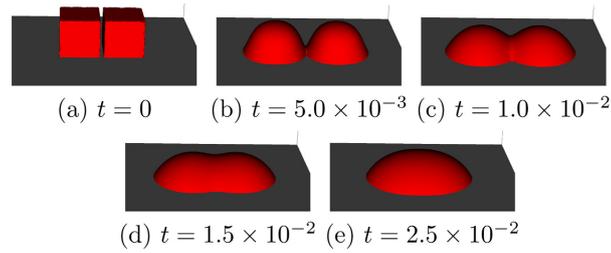


FIGURE 2.7 – Simulation de coalescence de gouttes [94].

2.1.3 Combinaison de l'approche macroscopique avec la VOF et de l'approche microscopique avec la MD

Cette étude présentée par Zhang *et al.* proposent une approche multi-échelle en combinant la VOF et la MD (fig. 2.8)[78].

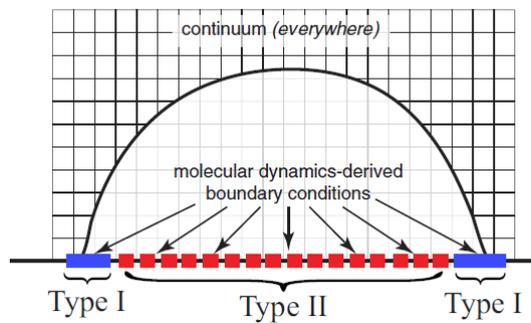


FIGURE 2.8 – Approche multi-échelle, les frontières de type I et II sont présimulées avec la dynamique moléculaire. La méthode VOF est appliquée à tout le système [78].

De plus, au niveau de la ligne triple, la MKT est utilisée afin de faire la transition entre la MD et la VOF. Pour commencer, une pré simulation avec la MD est faite et ensuite la simulation complète en VOF est réalisée avec des contraintes de vitesse d'étalement et d'angle de contact dynamique calculées avec la MD et répercutées sur la VOF grâce à la MKT (fig. 2.9).

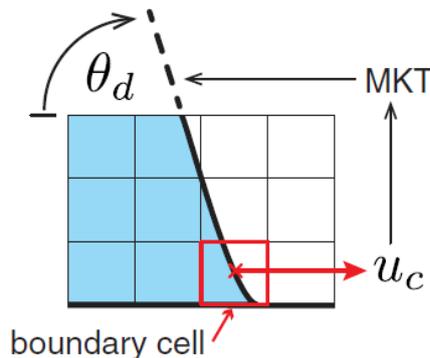


FIGURE 2.9 – Calcul de l'angle dynamique avec la MKT [78].

L'angle dynamique est déterminé par la MKT avec l'équation :

$$\cos \theta_d = \cos \theta_e - \frac{2nk_B T}{\gamma} \sinh^{-1} \left(\frac{V}{2\kappa_w^0 \lambda} \right) \quad (2.2)$$

Avec $V = u_c$ (fig. 2.9), θ_d l'angle de contact dynamique, θ_e l'angle de contact intrinsèque de la surface, λ est la distance de saut déterminée par la MD, κ_w^0 est la fréquence de déplacement moléculaires, n est le nombre de sites d'absorption de la surface déterminés aussi par la MD, γ la tension de surface, k_B la constante de Boltzmann et T la température. Les auteurs proposent ensuite de valider leur approche en comparant la simulation multi-échelle à la simulation MD pour toute la goutte (fig. 2.10).

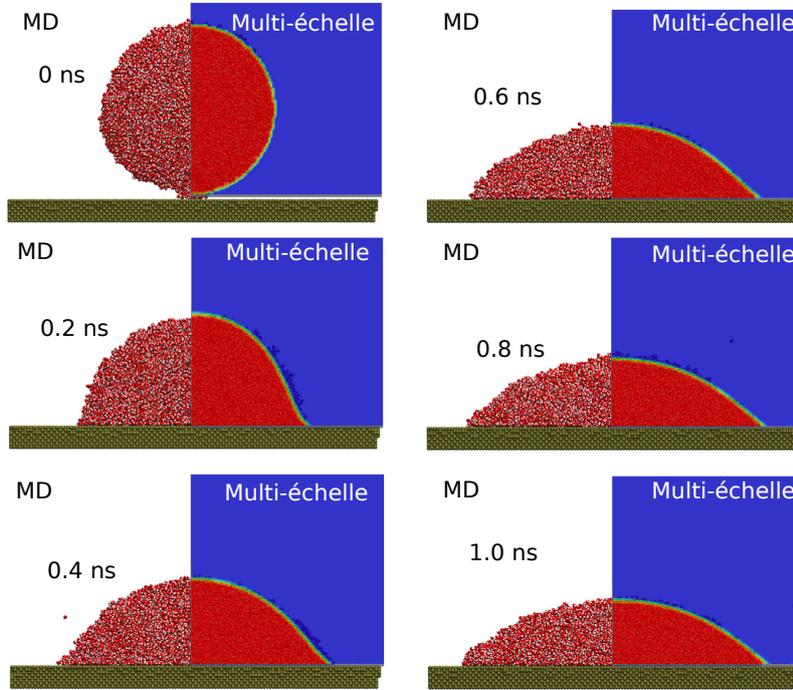


FIGURE 2.10 – Comparaison des simulations MD et approche multi-échelle [78].

De ce travail, les auteurs proposent une autre approche numérique qui combine plusieurs méthodes et qui permet d'aborder le mouillage comme un phénomène multi-échelle. Cette étude met en avant l'importance de maîtriser les phénomènes locaux sur la ligne triple.

2.1.4 Etude de la dynamique de l'étalement d'une goutte sur surface plane avec ou sans vitesse initiale par Front Tracking et Navier-Stokes

Manservigi et Scardovelli proposent d'étudier la dynamique de l'étalement d'une goutte sur surface plane avec la méthode du Front Tracking [80]. L'équation de Navier-Stokes pour un fluide incompressible est résolue en chaque noeud du maillage. A l'équilibre, ils obtiennent des gouttes en forme de calotte sphérique (fig. 2.11).

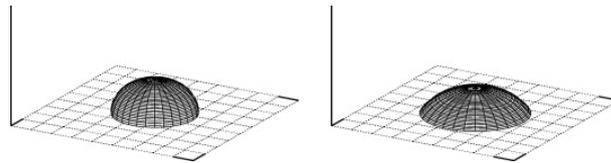


FIGURE 2.11 – Etats d'équilibre à 60° et 90° [80].

Ensuite, les auteurs étudient l'étalement d'une goutte sur une surface plane (fig. 2.12). Cette étude montre une forte déformation de l'interface fluide-fluide et les auteurs simulent même de l'impact de goutte où la déformation est encore plus importante ce qui implique d'améliorer le modèle de calcul de l'angle dynamique d'étalement.

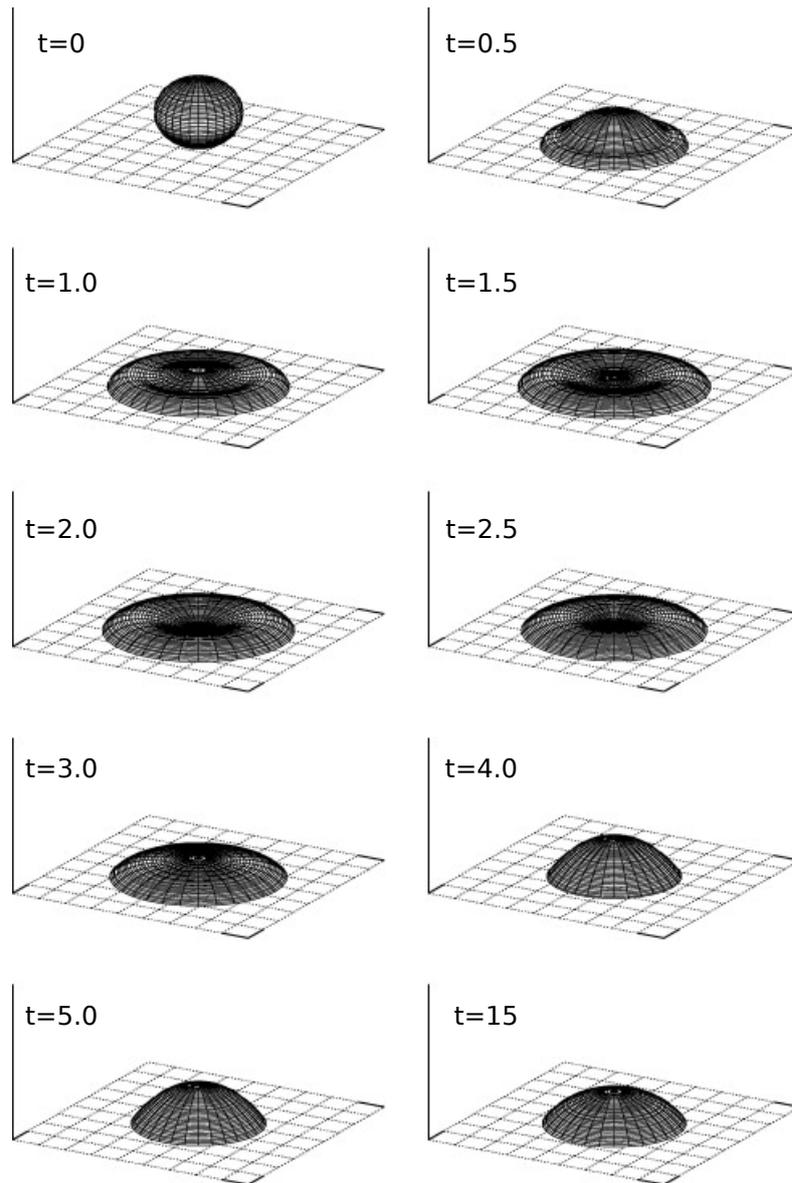


FIGURE 2.12 – Etude dynamique de Manservigi et Scardovelli sur l'étalement d'une goutte [80].

Les auteurs se questionnent aussi sur la condition de glissement ou non glissement avec le solide. En effet, ils ont observé des comportements singuliers pendant l'étalement et ils proposent donc d'introduire un terme dissipatif à l'interface pour régulariser le comportement du liquide. Ce choix d'introduire un terme dissipatif est commun aux études précédemment présentées [78, 94].

2.2 Simulation du mouillage par l'approche mésoscopique

On s'intéresse maintenant aux études de la littérature qui utilisent la méthode LBM pour simuler le mouillage.

2.2.1 Etude de la transition entre l'état Cassie et l'état Wenzel

Gong *et al.* ont proposé d'étudier la transition d'un état Cassie : non imprégné, vers un état Wenzel : imprégné, à l'aide de la simulation numérique et plus précisément de la méthode lattice Boltzmann [95].

Ils proposent d'étudier cette transition sur des surfaces texturées topographiquement avec des plots carrés (fig. 2.13) et de dépasser numériquement l'angle critique (1.41) en appliquant une vitesse initiale à la goutte.

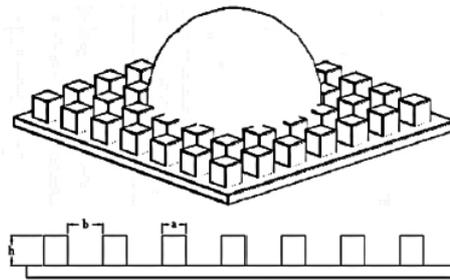


FIGURE 2.13 – Schéma de l'étude de Gong *et al.*[96].

Pour la simulation numérique, ils utilisent la méthode de l'énergie libre [97, 98] couplée à la LBM.

L'approche est validée par un test de la goutte sessile sur une surface plane (fig. 2.14). Ce test consiste à vérifier qu'à partir du paramétrage initial, la goutte à l'équilibre sur un plan parfait a un angle de contact de Young qui correspond au paramétrage de l'étude. Les angles testés sont de 105° et 130° .

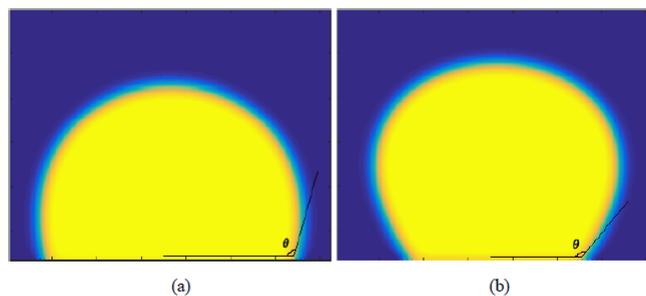


FIGURE 2.14 – Résultats de la validation sur plan a) angle de 105° et b) angle de 130° .

L'état d'équilibre des gouttes est aussi validé en déposant la goutte sans vitesse initiale sur la surface texturée (fig. 2.15).

Une fois les états d'équilibre et l'angle de contact statique vérifiés, Gong *et al.* procèdent à deux simulations. La première simulation montre la transition d'un état Wenzel vers un état Cassie (fig. 2.16). La seconde simulation montre une transition d'un état Cassie vers un état Wenzel.

Les auteurs expliquent que pour la simulation de la transition d'un état Wenzel vers un état

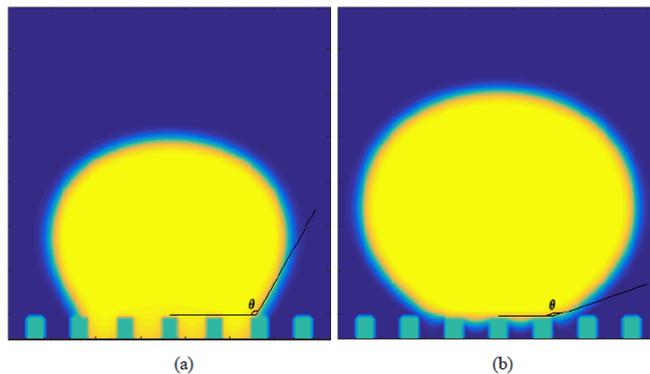


FIGURE 2.15 – Résultats de la validation de l'état d'équilibre : a) Etat de Wenzel pour $\theta_Y = 105^\circ$ et b) Etat de Cassie pour $\theta_Y = 130^\circ$.

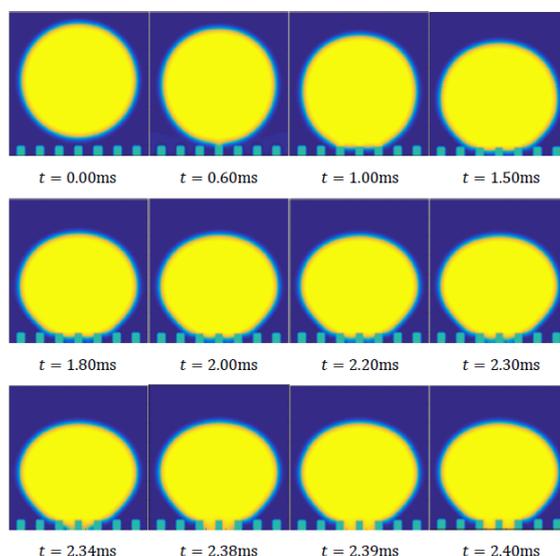


FIGURE 2.16 – Transition d'un état Wenzel vers un état Cassie.

Cassie, ils imposent une vitesse initiale à la goutte afin qu'elle dépasse l'angle critique et imprègne les textures. Pour le cas de la transition Cassie vers Wenzel, les auteurs expliquent qu'il est impossible de reproduire cette étude expérimentalement car l'état initial est un cas impossible.

Gong *et al.* montrent à travers cet article qu'il est possible d'utiliser la méthode lattice Boltzmann pour simuler le mouillage sur des surfaces texturées. De plus, ils proposent des simulations impossibles à reproduire expérimentalement mais qui permettent d'observer des comportements de goutte pertinents à étudier pour comprendre certains mécanismes de l'étalement.

2.2.2 Etude de la texturation chimique

H. Kusumaatmaja *et al.* ont étudié le comportement d'une goutte de liquide sur une surface plane texturée chimiquement [99]. La méthode utilisée pour la simulation est la LBM couplée avec la méthode de l'énergie libre pour simuler le mouillage [100].

Les hétérogénéités chimiques de la surface sont des bandes de largeur variable et plusieurs tailles sont testées. De plus, les deux chimies de surfaces ont les angles de contact suivants $\theta_1 = 60^\circ$ et $\theta_2 = 110^\circ$.

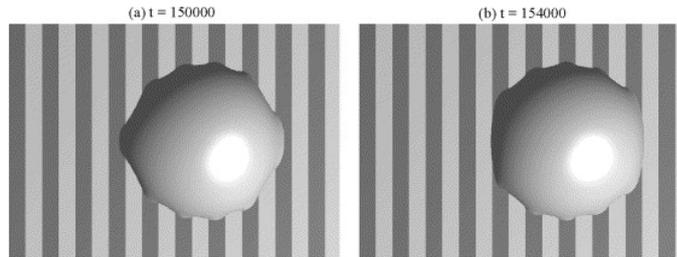


FIGURE 2.17 – Images de la forme de la goutte pour des bandes de taille $\delta_1/R = \delta_2/R = 7/25$.

Les auteurs montrent que la goutte a une forme cannelée (fig. 2.17) induite par l'alternance entre les propriétés hydrophiles où la goutte veut s'étaler et hydrophobes où la goutte veut se retirer.

H. Kusumaatmaja *et al.* observent que plus les bandes sont fines, plus la goutte a une forme sphérique. Les auteurs expliquent ce phénomène par une diminution de la force capillaire effective à chaque frontière. Le travail de H. Kusumaatmaja *et al.* montre qu'il est possible de simuler le mouillage sur des surfaces texturées chimiquement avec la méthode Lattice Boltzmann.

2.2.3 Etude dynamique

Pravinraj *et al.* proposent d'étudier le déplacement et la déformation d'une goutte avec la méthode LBM [101]. Contrairement aux deux études présentées précédemment, les auteurs ont choisi de coupler la méthode LBM avec une méthode avec pseudo-potentiel [102, 103] afin de contrôler les interfaces fluide-fluide et fluide-solide pour simuler le mouillage.

Un paramètre de mouillage η_{wet} est appliqué aux surfaces afin de contrôler la mouillabilité en fonction de la chimie, telle que :

$$\rho_{wall} = \eta_{wet} \cdot (\rho_L - \rho_G) + \rho_G \quad (2.3)$$

Avec ρ_L et ρ_G respectivement la masse volumique de liquide et du gaz. ρ_{wall} est la masse volumique qui est appliquée à la surface texturée afin d'avoir l'angle de contact souhaité en fonction de la texturation chimique (fig. 2.18).

En se référant aux valeurs du graphique (fig. 2.18), les auteurs réalisent des simulations similaires au travail de H. Kusumaatmaja *et al.* [99] présenté précédemment. Pravinraj *et al.* concluent sur cette première partie que leur approche par pseudo-potentiel donne des résultats semblables à d'autres approches de la littérature pour les études du mouillage sur surfaces texturées chimiquement.

Les auteurs proposent une seconde étude, sur des surfaces texturées topographiquement. Ils proposent de créer des surfaces à gradient topographique et d'observer le comportement d'une goutte sur ces surfaces (fig. 2.20).

Ils étudient la position de la ligne triple à l'avant (Edge C) et à l'arrière (Edge D) de la

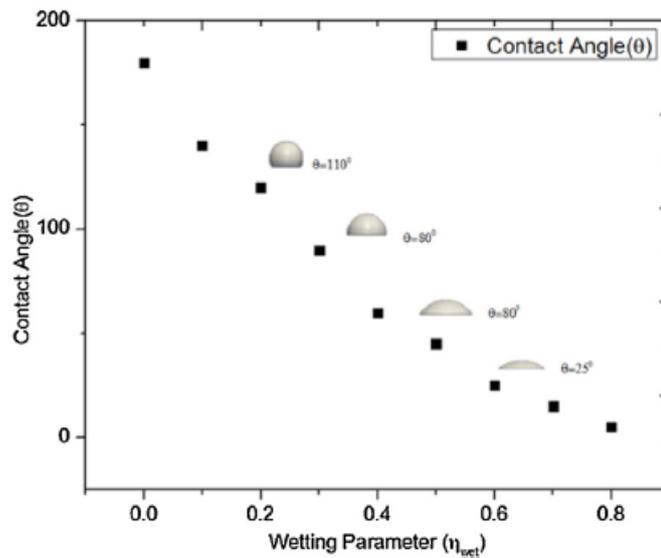


FIGURE 2.18 – Angle de contact obtenus par simulation en fonction de paramètre de mouillage η_{wet} imposé.

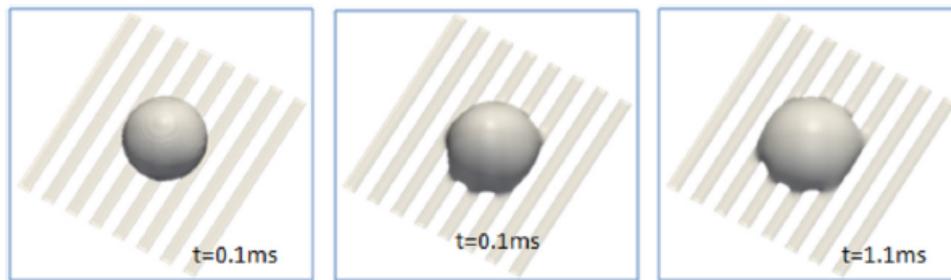


FIGURE 2.19 – Etalement d'une goutte sur une surface à bande hydrophile et hydrophobes.

goutte.

Pour commencer, Pravinraj *et al.* observent le "spreading" : l'aire couverte par la goutte augmente et les bords C et D s'éloignent du centre de la goutte. Ensuite, c'est le "recoiling" : le bord proche des plus grandes textures avance alors que le bord arrière est piégé dans la plus petites textures ce qu'ils appellent le "pinning" de l'arrière. Enfin, le bord arrière se libère. L'avant et l'arrière se déplacent dans la même direction ce qui fait translater la goutte et son centre.

Les auteurs concluent leur papier en soulignant le fait que l'utilisation d'une méthode pseudo-potentiel a très bien fonctionné dans le cadre de leurs études, à la fois pour la texturation chimique et pour la texturation topographique. Cette méthode de pseudo-potentiel sera présentée par la suite.

2.2.4 Etude sur surface réelle

K.J. Kubiak *et al.* proposent d'utiliser la méthode LBM sur des surfaces réelles afin de simuler le comportement de la ligne triple pour des surfaces texturées par abrasion [104]. K.J. Kubiak *et al.* proposent de simuler le dépôt d'une goutte de liquide qui aurait un angle de contact de 45° sur cette même surface plane. Pour réaliser cette simulation, ils utilisent la méthode LBM couplée avec la méthode pseudo-potentiel de Shan-Chen [102] et Martys-Chen [103]. Une autre étude a été réalisée par K.J. Kubiak *et al.* [105] sur des

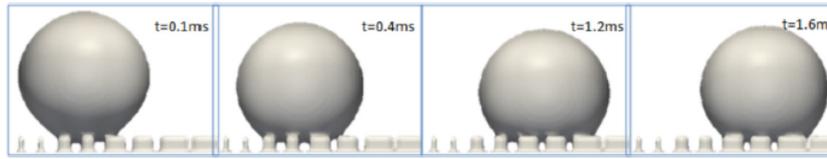


FIGURE 2.20 – Vue de profil du déplacement d’une goutte induit par un gradient topographique.

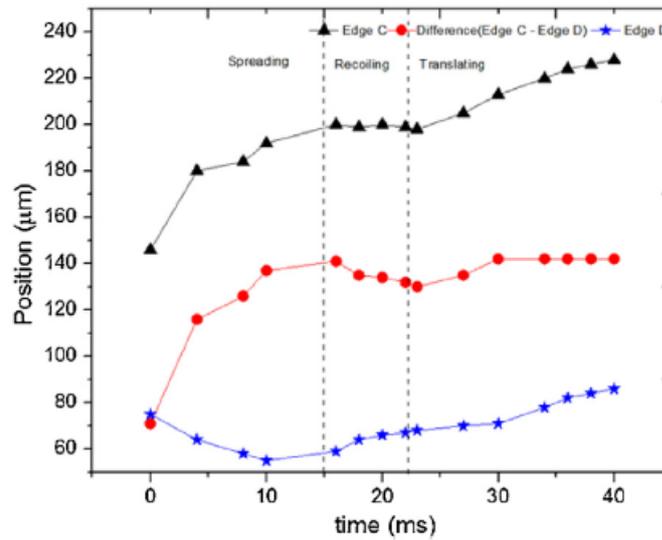


FIGURE 2.21 – Evolution de la ligne triple avant (Edge C) et arrière (Edge D) en fonction du temps.

surfaces rayées. Cette étude a pour objectif d’étudier la forme des gouttes sur des surfaces rayées afin de connaître les conditions pour avoir une transition d’un état Wenzel vers un état Cassie (fig. 2.23).

Ces deux études réalisées par Kubiak *et al.* montrent qu’il est possible de simuler le mouillage sur des surfaces réelles et théoriques texturées topographiquement avec la méthode Lattice Boltzmann couplée à la méthode pseudo-potentiel de Shan-Chen [102] Marty-Chen[103].

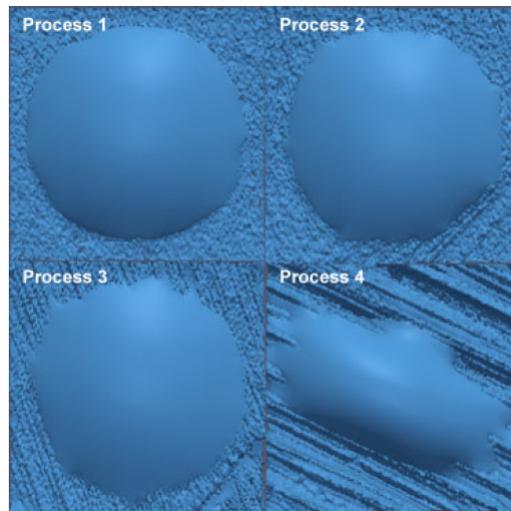


FIGURE 2.22 – Simulation par la méthode Lattice Boltzmann d'une goutte sur les surfaces produites par abrasion [104].

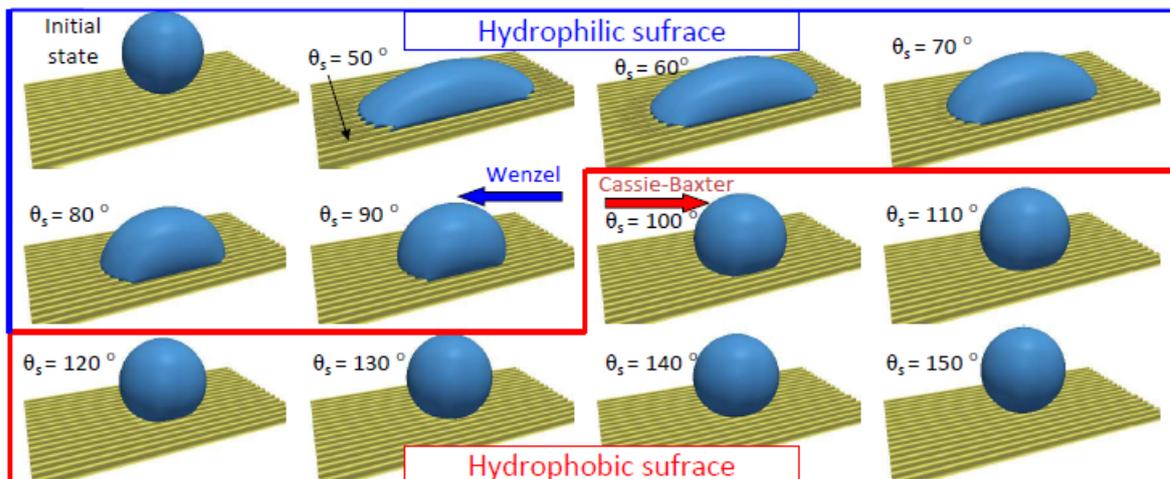


FIGURE 2.23 – Simulation de mouillage anisotrope sur des surfaces en alliage de titane rayées avec un angle de contact de 50° à 150° [105].

2.3 Choix de la méthode

La rapidité de calcul de la LBM est un avantage de la méthode. La LBM s'adapte aussi très bien à des surfaces quelconques sans avoir besoin de redéfinir les conditions aux limites. Il n'y a pas besoin de résoudre des équations différentielles et les calculs sont explicites. L'aspect multi-échelle de la méthode semble aussi adapté pour la simulation du mouillage. Enfin, la LBM est parallélisable, c'est à dire que chaque étape de calcul pour chaque élément du système peut être faite en même temps pour tout élément du système au même pas de temps. Cela rend la méthode très rapide. Pour ces différents raisons, nous avons choisi d'utiliser la LBM pour simuler le mouillage. La LBM est, par contre, peu présente dans les logiciels de simulation de fluides. En 2017, il n'y avait pas de possibilité d'utiliser un logiciel payant ou en libre accès qui permettait de faire de la simulation du mouillage avec la LBM. Il faut donc programmer la méthode Lattice Boltzmann couplée aux méthodes de définition d'interfaces pour simuler le mouillage.

Dans une perspective d'évolution de la méthode ou en prenant en compte de nouveaux éléments dans la littérature, il est assez simple d'agir sur le comportement des fluides entre eux ou avec le solide via l'utilisation de la méthode pseudo-potentiels couplée à la LBM. Ce choix implique de programmer la méthode, ce qui nous permet de mieux maîtriser les calculs qui sont réalisés et aussi d'optimiser certains calculs en utilisant le parallélisme de la méthode.

La méthode LBM est elle aussi utilisée pour la simulation du mouillage [95, 101, 105, 106]. L'intérêt majeur de cette méthode est l'utilisation de l'échelle mésoscopique qui permet à la fois d'avoir un comportement global de la goutte mais aussi de pouvoir paramétrer précisément les interactions entre les particules et le solide. De plus, la LBM est une méthode parallélisable, c'est à dire que certains calculs peuvent être réalisés indépendamment les uns des autres ce qui permet de réduire grandement les temps de calcul [107–110].

Nous allons donc maintenant nous intéresser à la LBM et comprendre son origine et son fonctionnement.

Chapitre 3

Présentation de la Méthode Lattice Boltzmann

Sommaire

2.1	Simulation du mouillage par l'approche macroscopique	41
2.1.1	Comment suivre une interface?	41
2.1.2	Etude avec éléments finis et level-set avec une approche variationnelle	44
2.1.3	Combinaison de l'approche macroscopique avec la VOF et de l'ap- proche microscopique avec la MD	45
2.1.4	Etude de la dynamique de l'étalement d'une goutte sur surface plane avec ou sans vitesse initiale par Front Tracking et Navier- Stokes	46
2.2	Simulation du mouillage par l'approche mésoscopique	48
2.2.1	Etude de la transition entre l'état Cassie et l'état Wenzel	48
2.2.2	Etude de la texturation chimique	50
2.2.3	Etude dynamique	50
2.2.4	Etude sur surface réelle	51
2.3	Choix de la méthode	54

La thèse qui est présentée utilise une méthode numérique pour simuler le mouillage. On va donc commencer par une étude de la littérature portée sur la mouillabilité. Cette étude permet de définir et comprendre le mouillage. Cette première étude permettra aussi de définir les notions fondamentales qui doivent être prises en compte pour des simulations. Ensuite, on s'intéressera aux différentes études de la littérature qui utilisent des méthodes numériques pour simuler le mouillage. Après cette présentation, un choix de méthode sera proposé et expliqué. Pour finir l'étude de l'état de l'art, la méthode retenue sera explicitée en deux temps : son explication physique et son application dans le cadre de l'étude du mouillage.

3.1 Origine physique de la méthode

Afin de comprendre les principes de la LBM, il est important de se familiariser avec les concepts de la "Kinetic Theory" ou théorie cinétique.

Les principaux éléments constitutifs de tous les matériaux présents dans la nature sont les molécules et sous-molécules. Ces molécules peuvent être visualisées sous forme de sphères solides se déplaçant "au hasard" de manière conservative dans un espace libre. Le mouvement satisfait la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Ainsi, la deuxième loi de Newton (conservation de la quantité de mouvement) peut être appliquée. Elle stipule que le taux de changement de la quantité de mouvement linéaire est égal à la force appliquée.

$$F = m \frac{dc}{dt} = ma \tag{3.1}$$

Avec F qui représente les forces intermoléculaires et les forces externes, m la masse de la particule qui est considérée constante (conservation de la masse), c le vecteur vitesse de la particule, t le temps et a le vecteur accélération de la particule.

La position de la particule peut être déterminée par la définition de la vitesse :

$$c = \frac{dr}{dt} \tag{3.2}$$

Où r est le vecteur position de la particule dans le repère global comme dans la figure (fig. 3.1).

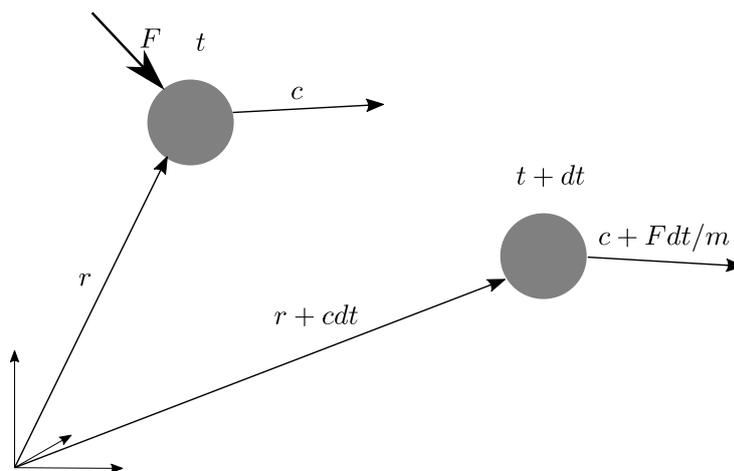


FIGURE 3.1 – Evolution de la position et du vecteur vitesse d'une particule

Si une force extérieure F est appliquée à une particule de masse m qui est à la position r et qui a une vitesse c , sa position devient $r + cdt$ et sa vitesse $c + Fdt/m$ (fig. 3.1). En

l'absence de force extérieure, la particule se déplace librement d'une position à une autre sans changer de vitesse ou de direction tant qu'il n'y a aucune collision.

La norme de la vitesse des particules et les interactions entre particules varient en fonction de l'énergie interne du fluide. Par exemple, l'augmentation de température du fluide entraîne une augmentation des vitesses de particules et augmente les collisions. L'augmentation de l'énergie cinétique des molécules est corrélée à l'augmentation de la température à l'échelle macroscopique.

Les particules (molécules) collisionnent continuellement les parois du solide. Ces interactions exercent une force par unité de surface qui correspond à la pression mesurée macroscopiquement.

Par cette explication, on peut constater qu'il existe un lien entre température et pression. Cela signifie que l'augmentation de température qui augmente l'énergie cinétique des particules augmente le taux de collisions avec les parois et donc augmente la pression du fluide. On considère que la particule se déplace à une vitesse c_x dans la direction x dans un tube de longueur L et collisionne continuellement les extrémités du tube (fig. 3.2) [111].

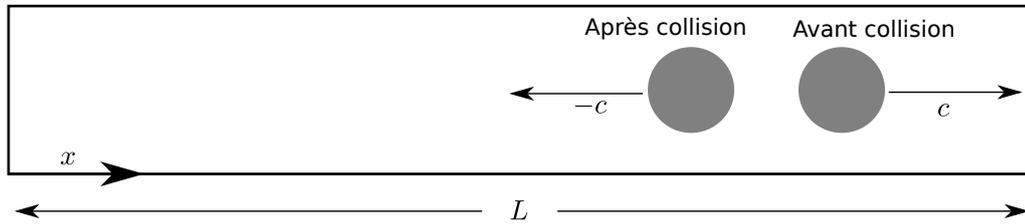


FIGURE 3.2 – Représentation d'une particule qui se déplace librement dans un tube en suivant la direction x .

Si on considère que la particule est une sphère dure et que la collision est uniquement élastique (aucune dissipation d'énergie), la force exercée par la particule sur une extrémité est égale au taux de changement de vitesse de la particule (3.3).

$$F\Delta t = mc_x - (-mc_x) = 2mc_x \quad (3.3)$$

Avec Δt le temps entre deux chocs. Le temps entre deux chocs est égal à $2L/c_x$, ce temps correspond au temps nécessaire pour que la particule fasse un cycle complet. C'est-à-dire que la particule traverse d'une paroi à l'autre puis retourne à sa position initiale. Ainsi, $2LF/c_x = 2mc_x$ ce qui signifie que :

$$F = mc_x^2/L \quad (3.4)$$

On peut ensuite généraliser pour N particules. La force totale exercée par les N particules est proportionnelle à Nmc^2/L . En général, $c^2 = c_x^2 + c_y^2 + c_z^2$ où c_x , c_y et c_z sont les composantes de la vitesse dans les directions x , y et z . Comme les particules se déplacent librement, on fait l'hypothèse que $c^2 = 3c_x^2$. Ainsi, la force totale peut être écrite :

$$F = \frac{Nmc^2}{3L} \quad (3.5)$$

La pression P est définie par une force par unité d'aire (A), normale à la surface, $P = F/A$. La pression exercée par N particules sur une extrémité du tube s'écrit donc :

$$P = \frac{Nmc^2}{3LA} = \frac{Nmc^2}{3V} \quad (3.6)$$

Avec V le volume qui vaut LA .

Cette représentation du déplacement des molécules est reliée à la pression macroscopique par l'énergie cinétique des molécules (KE).

$$P = \frac{mc^2}{2} \frac{2N}{3V} = \frac{2}{3}nKE \quad (3.7)$$

Où n est le nombre de molécules par unité de volume.

Dans cette première approche de modélisation de gaz parfait, on a négligé l'effet de l'interaction entre molécules et l'effet de la taille des molécules. Dans un cas réel, les molécules ont un volume et se collisionnent entre elles.

Expérimentalement, l'équation d'état des gaz parfaits peut être écrite :

$$PV = nRT \quad (3.8)$$

Où $n = N/N_A$ est le nombre de moles, N_A est le nombre d'Avogadro et R est la constante des gaz parfaits.

En couplant les équations (3.6) et (3.8), on obtient :

$$(N/N_A)RT = \frac{mc^2}{2} \frac{2}{3}N \quad (3.9)$$

En introduisant la constante de Boltzmann $k_B = R/N_A = 1.38 \cdot 10^{-23} J/K$, on peut exprimer l'énergie cinétique KE d'un gaz :

$$KE = \frac{mc^2}{2} = \frac{3}{2}k_B T \quad (3.10)$$

On peut constater que la pression et la température macroscopique sont une représentation macroscopique de l'énergie cinétique des molécules microscopiques.

En 1859, Maxwell explique que gérer un grand nombre de molécules devient très complexe. Il considère que connaître la vitesse et la position de toutes les molécules qui composent un système n'est pas important. La fonction de distribution de ces particules est le plus important pour caractériser le comportement des molécules. Cette fonction de distribution correspond au pourcentage de molécules dans le système à une certaine position, à une certaine vitesse, à un temps donné. Les molécules d'un gaz ont un grand domaine de vitesses de collision. Les molécules rapides transfèrent leur vitesse aux molécules les moins rapides. Les moments sont conservés avec la collision. Pour un gaz en équilibre thermique, la fonction de distribution n'est pas dépendante du temps.

Pour un gaz de N particules, le nombre de particules qui ont une vitesse dans la direction x entre c_x et $c_x + dc_x$ est $Nf(c_x)dc_x$. La fonction $f(c_x)$ correspond à la fraction de particules qui ont une vitesse dans la direction x entre c_x et $c_x + dc_x$. Les probabilités de la fonction de distribution dans les autres directions peuvent être définies de la même façon. Ainsi, la probabilité pour que les vitesses soient comprises entre c_x et $c_x + dc_x$, c_y et $c_y + dc_y$ et c_z et $c_z + dc_z$ vaut :

$$Nf(c_x)f(c_y)f(c_z)dc_xdc_ydc_z \quad (3.11)$$

La somme de toutes les valeurs des vitesses appliquées à l'équation (3.11) vaut le nombre total des particules N .

$$\int \int \int f(c_x)f(c_y)f(c_z)dc_xdc_ydc_z = N \quad (3.12)$$

Comme toute direction peut être x , ou y ou z , la fonction de distribution ne doit pas dépendre de la direction, mais seulement de la vitesse des particules. Par conséquent,

$$f(c_x)f(c_y)f(c_z) = \Phi(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) \quad (3.13)$$

Avec Φ une autre fonction inconnue qui doit être déterminée. La forme de cette fonction de distribution est la suivante :

$$f(c_x) = A \exp^{-Bc_x^2} \quad (3.14)$$

Avec A et B des constantes. En faisant l'hypothèse que $A_x = A_y = A_z$ et que $B_x = B_y = B_z$, les propriétés de la fonction exponentielle permettent d'écrire la somme des fonctions de distribution :

$$f(c) = A_x e^{-Bc_x^2} A_y e^{-Bc_y^2} A_z e^{-Bc_z^2} = A^3 e^{-Bc^2} \quad (3.15)$$

Cette écriture permet de définir la fonction de distribution des particules de vitesse c . Elle correspond au nombre de particules qui ont une vitesse comprise entre c et $c + dc$.

La distribution des particules de vitesse c a trois dimensions c_x , c_y et c_z où chaque particule est représentée par un point qui a des coordonnées qui correspondent à la vitesse de la particule. Ainsi, tous les points sur une surface sphérique centrée à l'origine correspondent à la même vitesse. Par conséquent, le nombre de particules qui ont une vitesse comprise entre c et $c + dc$ correspond à la somme des points compris entre deux sphères de rayon c et $c + dc$ (fig. 3.3).

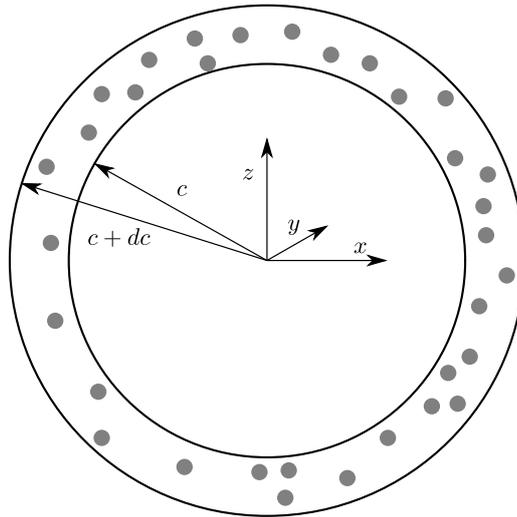


FIGURE 3.3 – Représentation des points compris entre deux sphères centrées de rayon c et $c + dc$ qui correspondent aux particules de vitesse comprise entre c et $c + dc$.

La volume entre les deux sphère vaut $4\pi c^2 dc$. Ainsi, la fonction de distribution dans la calotte sphérique peut être écrite en fonction de la vitesse :

$$f(c)dc = 4\pi c^2 A^3 e^{-Bc^2} dc \quad (3.16)$$

Les constantes A et B peuvent être déterminées en intégrant la distribution de probabilité sur toutes les vitesses possibles pour trouver le nombre total de particules N , et leur énergie totale E .

Comme une particule se déplaçant à la vitesse c a une énergie cinétique $\frac{1}{2}mc^2$, nous pouvons utiliser la fonction de distribution des probabilités pour trouver l'énergie cinétique moyenne par particule :

$$\frac{1}{2}mc^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2}mc^2 f(c)dc}{\int_0^{+\infty} f(c)dc} \quad (3.17)$$

Le numérateur est l'énergie totale, le dénominateur est le nombre total de particules. Notez que la constante inconnue A s'annule entre le numérateur et le dénominateur. En substituant la valeur de $f(c)$ dans les intégrales, on obtient :

$$\frac{1}{2}mc^2 = \frac{3m}{4B} \quad (3.18)$$

En exprimant la valeur de l'énergie cinétique moyenne en fonction de la température et de la pression (3.10), on obtient :

$$\frac{1}{2}mc^2 = \frac{3}{2}k_B T \quad (3.19)$$

Ainsi, $B = \frac{m}{2k_B T}$ et :

$$f(c) \propto c^2 e^{-\frac{mc^2}{2k_B T}} \quad (3.20)$$

La constante de proportionnalité est donnée en intégrant sur toutes les vitesses et en fixant le résultat comme unitaire.

On obtient la distribution de Maxwell-Boltzmann (3.21)

$$f(c) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} c^2 e^{-\frac{mc^2}{2k_B T}} \quad (3.21)$$

La probabilité de trouver une particule qui a une vitesse spécifique est nulle, car la vitesse des particules change continuellement sur une large gamme. La question pertinente est de trouver la probabilité d'une ou plusieurs particules dans une plage de vitesses plutôt qu'à une vitesse spécifique. Par conséquent, l'équation (3.21) doit être intégrée dans cette plage de vitesses.

Boltzmann a généralisé la distribution de Maxwell (3.21) pour les grands systèmes arbitraires [111]. Il a été le premier à mettre en avant le lien entre le concept thermodynamique de l'entropie et l'analyse statistique des états possibles d'un grand système. Boltzmann explique que l'augmentation avec le temps de l'entropie d'un système est un changement des variables macroscopiques vers les valeurs correspondant au plus grand nombre possible d'arrangements microscopiques. Boltzmann a montré que le nombre d'états microscopiques disponibles pour une énergie donnée est bien plus important pour les valeurs macroscopiques correspondant à l'équilibre thermique. Par exemple, pour une énergie donnée, il y a beaucoup plus d'arrangements microscopiques possibles de molécules de gaz dans lesquels le gaz est essentiellement distribué uniformément dans une boîte que celui de toutes les molécules de gaz se trouvant dans la moitié gauche de la boîte.

Boltzmann a prouvé que l'entropie thermodynamique S , d'un système (à une énergie E donnée) est liée au nombre W . W est le nombre d'états microscopiques dont elle dispose par $S = k_B \log(W)$; k_B étant la constante de Boltzmann.

Boltzmann a alors pu établir que pour tout système, grand ou petit, en l'équilibre thermique à la température T , la probabilité d'être dans un état particulier à l'énergie E est proportionnelle à $e^{-E/k_B T}$; c'est-à-dire :

$$f(E) = A e^{-E/k_B T} \quad (3.22)$$

Cette équation est nommée la distribution de Boltzmann.

En considérant l'énergie cinétique des molécules dans la direction x , alors :

$$E = \frac{1}{2}mc_x^2 \quad (3.23)$$

Pour une fonction de probabilité normalisée, la fonction de probabilité intégrée pour toutes les valeurs de la vitesse (de moins l'infini à plus l'infini) doit être égale à un. Ainsi,

$$\int_{-\infty}^{\infty} A e^{-\frac{mc_x^2}{2k_B T}} dc = 1 \quad (3.24)$$

Par conséquent

$$A = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \quad (3.25)$$

La probabilité de trouver la vitesse c_x est :

$$f(c_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{mc_x^2}{2k_B T}} \quad (3.26)$$

On s'intéresse alors à la probabilité de la vitesse tri-dimensionnelle c où :

$$c^2 = c_x^2 + c_y^2 + c_z^2 \quad (3.27)$$

La probabilité de c est le produit des probabilités de chaque fonctions :

$$f(c) = f(c_x)f(c_y)f(c_z) \quad (3.28)$$

Ce qui amène à l'expression :

$$f(c) = \left[\sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \right]^3 e^{-\frac{m}{2k_B T}(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)} \quad (3.29)$$

ou

$$f(c) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{mc^2}{2k_B T}} \quad (3.30)$$

Un gaz idéal a une fonction de distribution spécifique à l'équilibre (distribution de Maxwell). Mais Maxwell n'a pas mentionné comment l'équilibre est atteint. C'était l'une des contributions révolutionnaires de Boltzmann, qui est à la base de la LBM.

Une description statistique d'un système peut être expliquée par la fonction de distribution $f(r, c, t)$; où $f(r, c, t)$ est le nombre de molécules à l'instant t positionnées entre r et $r + dr$ qui ont des vitesses entre c et $c + dc$. Si des collisions ont lieu entre les molécules, il y aura une différence nette entre les nombres de molécules dans l'intervalle $drdc$. Le taux de changement entre l'état final et l'état initial de la fonction de distribution est appelé opérateur de collision, Ω . Ainsi, l'équation de l'évolution du nombre de molécules peut donc s'écrire pour $dt \rightarrow 0$:

$$\frac{df}{dt} = \Omega(f) \quad (3.31)$$

L'équation ci-dessus indique que le taux total de changement de la fonction de distribution est égal au taux de collision. Puisque f est une fonction de r , c et t , alors le taux de variation total peut être élargi à :

$$df = \frac{\partial f}{\partial r} dr + \frac{\partial f}{\partial c} dc + \frac{\partial f}{\partial t} dt \quad (3.32)$$

Et en divisant par dt ,

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{dr}{dt} + \frac{\partial f}{\partial c} \frac{dc}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (3.33)$$

Le vecteur r peut être exprimé dans le système de coordonnées cartésiennes 3D tel que $r = xi + yj + zk$, où i, j et k sont des vecteur unitaires suivant les directions x, y et z .
L'équation 3.1 peut être écrite :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial r} c + \frac{\partial f}{\partial c} a + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (3.34)$$

Où a est l'accélération égale à dc/dt et peut être reliée à la force F par la seconde loi de Newton : $a = F/m$.

Par conséquent, l'équation de transport de Boltzmann (3.31) peut être écrite telle que :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial r} \cdot c + \frac{F}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial c} = \Omega \quad (3.35)$$

L'opérateur de collision Ω est une fonction de f et doit être déterminé pour résoudre l'équation de Boltzmann.

Pour un système sans forces extérieures, l'équation de Boltzmann peut être écrite telle que :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \cdot \nabla f = \Omega \quad (3.36)$$

L'équation (3.36) est une équation d'advection avec un terme source (Ω), ou d'advection avec un terme de réaction. Le problème est que Ω est une fonction de f et que l'équation (3.36) est une équation integro-différentielle, qui est difficile à résoudre.

Les relations entre l'équation (3.36) et des quantités macroscopiques telles que la masse volumique du fluide, ρ ; le vecteur vitesse du fluide u , et l'énergie interne e , sont les suivantes :

$$\rho(r, t) = \int m f(r, c, t) dc \quad (3.37)$$

$$\rho(r, t) u(r, t) = \int m c f(r, c, t) dc \quad (3.38)$$

$$\rho(r, t) e(r, t) = \frac{1}{2} \int m u_a^2 f(r, c, t) dc \quad (3.39)$$

Avec m la masse moléculaire et u_a la vitesse relative d'une particule par rapport à la vitesse du fluide $u_a = c - u$. Ces équations sont les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

A partir de la théorie de la cinétique, l'énergie interne peut être définie telle que :

$$e = \frac{3}{2m} k_B T \quad (3.40)$$

On a précédemment expliqué qu'il était compliqué de résoudre l'équation de Boltzmann à cause de l'opérateur de collision. En 1954, Bhatnagar, Gross et Krook (BGK) ont introduit un modèle simplifié pour les opérateurs de collision [112]. L'opérateur de collision est remplacé par :

$$\Omega = \omega(f^{eq} - f) = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f) \quad (3.41)$$

Où $\omega = 1/\tau$.

Le coefficient ω est appelé fréquence de collision et τ est appelé facteur de relaxation. La fonction de distribution à l'équilibre local est désignée par f^{eq} ; qui est la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann (3.21).

En considérant le modèle d'interaction BGK, l'équation (3.36) peut être réécrite :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \cdot \nabla f = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f) \quad (3.42)$$

Dans la méthode de Lattice Boltzmann, l'équation ci-dessus est discrétisée et supposée valide selon des directions spécifiques. Ainsi, l'équation de Boltzmann discrète peut être écrite le long d'une direction spécifiée telle que :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + c_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq} - f_i) \quad (3.43)$$

Cette équation :

1. est une équation aux dérivées partielles
2. ressemble à une équation d'advection avec un terme source
3. a le côté gauche qui représente l'advection (streaming)
4. a le côté droit qui représente le processus de collision (terme source)

3.2 Discretisation de l'équation de transport de Boltzmann pour la LBM

On va s'intéresser plus précisément à la forme discrète de l'équation de transport de Boltzmann (3.43). En effet, cette équation discrète est à la base de la LBM. C'est à partir de cette équation que les nouvelles fonctions de distributions sont calculées à chaque pas de temps et que le comportement du fluide est simulé.

3.2.1 Restriction de l'espace des vitesses

L'équation de Boltzmann résolue dans un espace à trois dimensions correspond à résoudre une équation à 7 dimensions (3 dimensions d'espaces, 3 dimensions des vitesses, 1 dimension de temps), ce qui est très coûteux. Une solution pour palier à ce problème est de réduire l'espace des vitesses à un ensemble restreint. Seulement quelques vitesses sont utilisées pour caractériser un comportement dynamique d'écoulement. En 1992 Qian *et al.* [113] proposent de normaliser le choix des vitesses. Chacun des schémas a des grandeurs numériques caractéristiques comme la vitesse du son dans le lattice c_s , les poids de discrétisation ω_α et les vitesses microscopiques e_α . La vitesse du son c_s est utilisée car pour des gaz parfaits isothermes et pour $c_s \gg ||\vec{v}||$, $c_s = \sqrt{RT}$, avec R la constante des gaz parfaits, T la température du gaz et \vec{v} la vitesse du fluide.

La dénomination des schémas se fait de la façon suivante : "D2" correspond à un système à deux dimensions et "Q9" signifie que les huit voisins les plus proches interagissent avec le noeud du lattice ($\alpha \in [1; 8]$), le neuvième étant lui même ($\alpha = 0$). Plus il y a de voisins pris en compte, plus la précision est importante mais plus le temps de calcul croît.

Pour les deux choix de discrétisation présentés dans la figure 3.4 la vitesse du son dans le lattice vaut :

$$c_s = \sqrt{1/3} \quad (3.44)$$

Il y a aussi les poids de discretisation qui valent :
pour le D2Q9,

$$\alpha = 0, \quad 4/9, \quad (3.45)$$

$$\alpha \in [1, 4], \quad 1/9,$$

$$\alpha \in [5, 8], \quad 1/36.$$

$$(3.46)$$

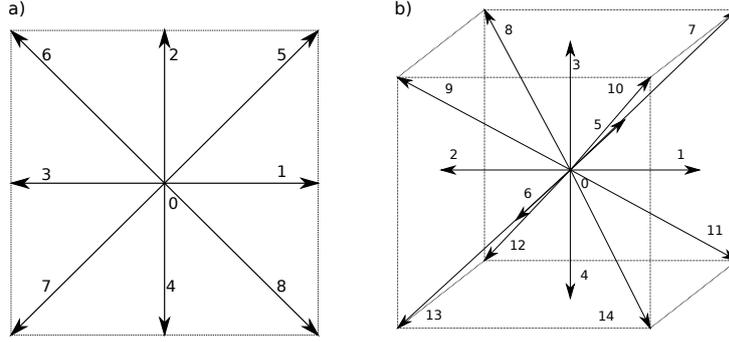


FIGURE 3.4 – Schéma a)D2Q9 et b)D3Q15.

pour le D3Q15,

$$\alpha = 0, \quad 2/9, \quad (3.47)$$

$$\alpha \in [1, 6], \quad 1/9,$$

$$\alpha \in [7, 14], \quad 1/72.$$

(3.48)

Enfin les vitesses microscopiques :

pour le D2Q9,

$$\vec{e}_\alpha = c \begin{cases} (0, 0), & \alpha = 0 \\ (\pm 1, 0), (0, \pm 1), & \alpha \in [1, 4] \quad 1 \\ (\pm 1, \pm 1), & \alpha \in [5, 8] \end{cases}$$

pour le D3Q15,

$$\vec{e}_\alpha = c \begin{cases} (0, 0, 0), & \alpha = 0 \\ (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1), & \alpha \in [1, 6] \\ (\pm 1, \pm 1, \pm 1), & \alpha \in [7, 14] \end{cases} \quad (3.49)$$

Pour les deux schémas c la vitesse microscopique du lattice est fixée à 1 telle que :

$$c = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\Delta y}{\Delta t} = \frac{\Delta z}{\Delta t} = 1 \quad (3.50)$$

3.2.2 La fonction de distribution discrète des particules

La fonction de distribution des particules est au coeur de la LBM. L'équation (3.35) est discrétisée en espace et en vitesse dans un lattice régulier (fig. 3.4). Il en résulte la fonction de distribution des particules discrète dans le lattice régulier g .

L'évolution de la fonction discrète g dans un élément de l'espace \mathbf{x} avec une vitesse discrète e_α à un instant t s'exprime à partir de l'équation discrète de Boltzmann:

$$g_\alpha(\mathbf{x} + e_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = g_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (g_\alpha(\mathbf{x}, t) - g_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)) + F(\mathbf{x}, t) \quad (3.51)$$

Le terme $F(\mathbf{x}, t)$ correspond aux force extérieures telles que la gravité.

Cette fonction $g(\alpha, \mathbf{x}, t)$ représente la densité de particules avec une vitesse $\alpha = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ à une position \mathbf{x} à un instant t et a pour unité :

$$[g] = \frac{kg \cdot s^3}{m^6} \quad (3.52)$$

3.2.3 Loi de conservation

La forme discrète de la LBM permet de retrouver les Lois de conservation de la masse (3.53), quantité de mouvement (3.54) et énergie (3.55). Qui avaient été présentées en forme continue (3.37), (3.38) et (3.39)

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=0}^n g_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (3.53)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)u(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=0}^n e_{\alpha}g_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (3.54)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)E(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=0}^n |e_{\alpha}|^2 g_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (3.55)$$

Avec n le nombre de voisins considérés.

3.2.4 Equilibre local

Lorsqu'un gaz est laissé libre dans un espace fermé, il est à l'équilibre. Ce que signifie que sa fonction de distribution de particules f vaut f^{eq} la fonction de distribution des particules à l'équilibre. Cette distribution est caractérisée par la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$f^{eq} = \rho \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{D/2} \exp \left(-\frac{m}{2k_B T} (e - u)^2 \right) \quad (3.56)$$

Avec la constante de Boltzmann k_B , la température T , le nombre de degrés de liberté du fluide D , la masse m du fluide, sa vitesse macroscopique u et e sa vitesse microscopique. En faisant un développement de Taylor à l'ordre 2 et en faisant l'hypothèse du faible nombre de Mach, la fonction de distribution à l'équilibre peut être réécrite, en négligeant les termes supérieurs à u^2 , de la façon suivante:

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \cdot \exp \left(-\frac{e^2}{2RT} \right) \cdot \left(1 + \frac{e \cdot u}{RT} + \frac{(e \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT} \right) \quad (3.57)$$

Avec R la constante des gaz parfaits.

La forme discrète de la fonction de distribution à l'équilibre s'écrit:

$$g_{\alpha}^{eq} = \rho \omega_{\alpha} \left(1 + \frac{e_{\alpha} \cdot u}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{e_{\alpha} \cdot u}{c_s^2} \right)^2 - \frac{u^2}{2c_s^2} \right) \quad (3.58)$$

C'est cette expression de g_{α}^{eq} qui est utilisée dans l'équation (3.51).

3.2.5 Opérateur de collision

L'expression la plus courante de l'opérateur de collision est l'approximation Bhatnagar-Gross-Krool (BGK) [112] où la nouvelle distribution est exprimée en fonction d'une fonction de déséquilibre. Cette fonction de non-équilibre est déterminée par la fonction de distribution à l'équilibre f^{eq} en chaque point de l'espace pour une température donnée et qui se produit à la fréquence τ^{-1} reliée à la viscosité du fluide(3.59).

$$\Omega(f, f_{eq}) = \frac{\Delta t}{\tau} (f_{eq} - f) \quad (3.59)$$

3.2.6 Conditions aux bords

Le lattice est carré ou cubique. Il y a des bords et donc des contraintes numériques à gérer au niveau des bords. Etant donné le fonctionnement de la méthode, il y a deux types d'inconnues aux bords : les fonctions de distribution qui devraient rentrer dans le système et les fonctions de distribution qui devraient sortir du système. Ces contraintes sont représentées dans la figure 3.5.

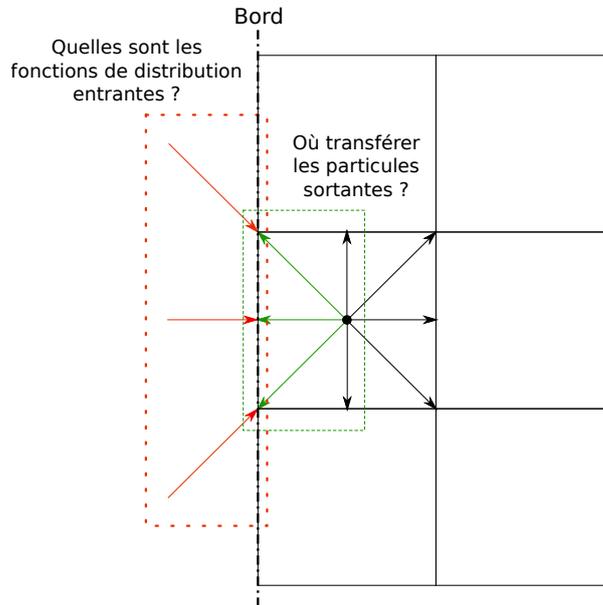


FIGURE 3.5 – Inconnues aux bords

Il existe différentes méthodes qui permettent de contrôler le déplacement des particules sur un bord du domaine ou en contact avec un solide.

Pour commencer, on va s'intéresser aux conditions périodiques, puis nous verrons les conditions de rebond, ensuite, nous verrons une méthode de réflexion diffuse. Enfin nous terminerons par une méthode qui permet d'imposer une vitesse de glissement à l'interface.

– Conditions aux limites périodiques

Les conditions aux limites périodiques permettent de ne pas borner le domaine d'étude. En effet les frontières deviennent communicantes. Les conditions périodiques consistent à transférer les particules sortantes en entrée du bord opposé comme montré dans la figure 3.6. Les particules sortantes sont réintroduites dans le système et la masse est conservée. Les particules sont introduites au bord opposé afin d'avoir des distributions entrantes aux bords. Les bords étant liés, si la goutte sort par le côté droit, elle rentre du côté gauche.

– Conditions aux limites de rebond

Pour les conditions de non glissement, on peut utiliser des conditions aux limites de type "rebond". Ces conditions sont utilisées pour simuler des solides immobiles. Lorsqu'une particule entre en contact avec ce solide, elle rebondit et repart dans le sens opposé suivant sa direction d'arrivée. Il existe plusieurs méthodes de rebond. On va s'intéresser à la plus performante, le « half-way bounce-back »(fig. 3.7).

En un pas de temps, les particules traversent la frontière avec le solide mais comme le solide est imperméable, les particules sont donc renvoyées vers leur position d'origine.

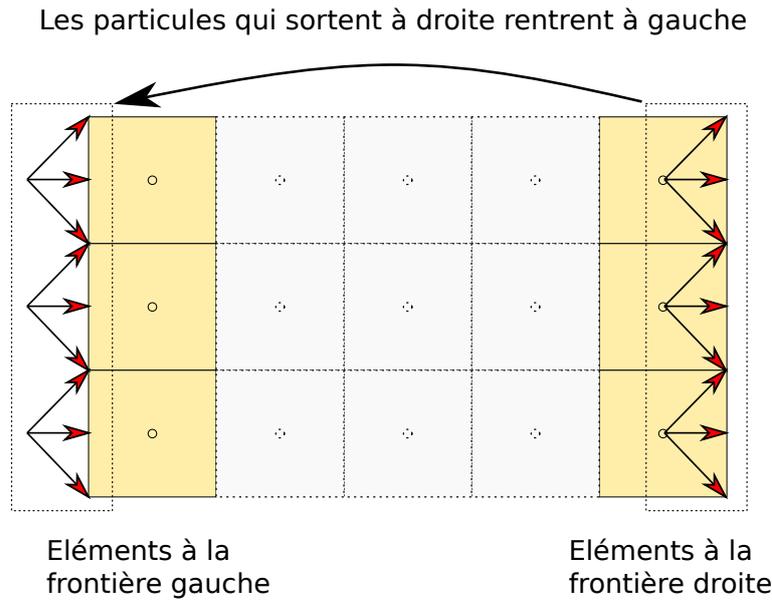


FIGURE 3.6 – Conditions périodiques pour la frontière gauche.

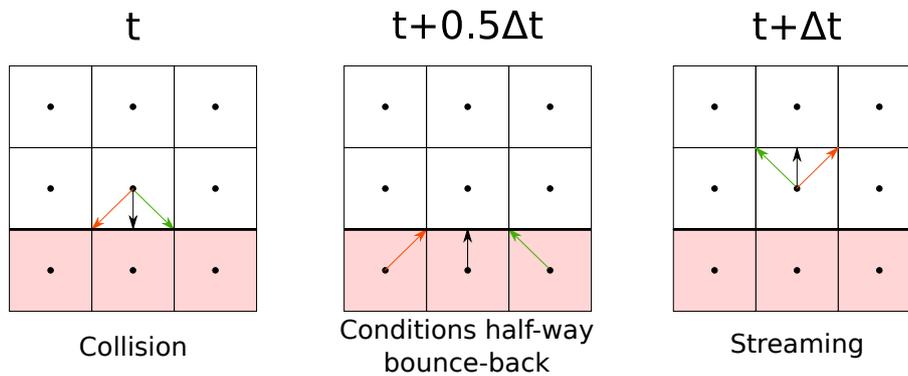


FIGURE 3.7 – Condition de non-glissement, half-way bounce-back.

Avec cette méthode, les particules rebondissent sur la surface sans la traverser et le changement de direction permet d'avoir une vitesse nulle au bord et ainsi avoir la condition de non glissement.

– Conditions aux limites de réflexion diffuse

En 1995 Inamuro *et al.* proposent une autre approche des conditions de non glissement [114]. Ils considèrent que les particules qui rentrent en contact avec le solide repartent avec une vitesse qui se calcule à partir de l'état d'équilibre Maxwellien avec la vitesse et la température du solide. Inamuro *et al.* se basent sur l'idée que les distributions inconnues (en contact avec le solide) sont calculées avec la fonction de distribution à l'équilibre en utilisant une masse volumique p^* et une vitesse u^* telles que la vitesse obtenue soit égale à celle du solide.

On définit $u^* = u + s$ La composante normale au solide s est nulle. La composante tangentielle de s n'est pas nulle. Le système est le suivant :

$$\rho_s = \sum_i f_i^{eq}(\rho^*, u^*) \quad (3.60)$$

$$\rho_s u_s = \sum_i e_i f_i^{eq}(\rho^*, u^*) \quad (3.61)$$

$$(3.62)$$

A partir de ce système, il est possible de déterminer les distributions inconnues.

– Conditions aux limites de glissement imposé

En 1997 Zou et He [115] proposent une méthode pour calculer les distributions en bordure de domaine. Ils cherchent à imposer une vitesse ou une pression au fluide au contact avec un solide.

On se place dans un cas où on souhaite imposer une vitesse $u^*(solide) = (u, v)$ au liquide à la frontière avec le solide. On se place dans le cas de la figure 3.8 où après la collision, on ne connaît pas la valeur des fonctions de distribution f_1, f_5 et f_8 .

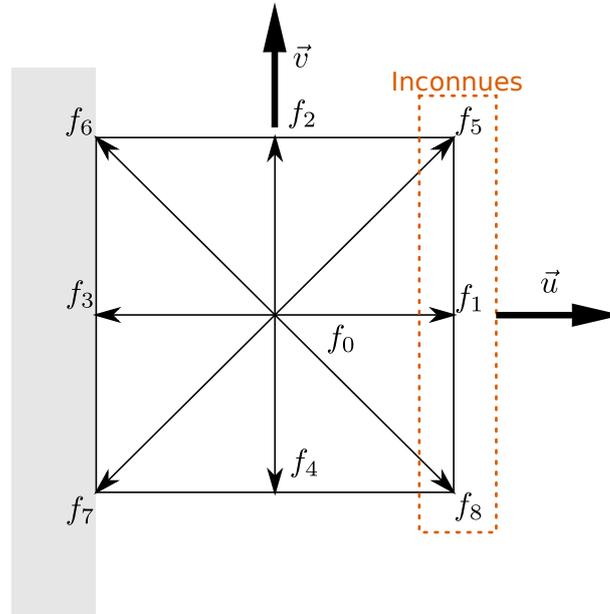


FIGURE 3.8 – Schéma du cas Zou He [115].

On peut tout de même écrire les équations suivantes à partir de (3.53) et (3.54).

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho - (f_0 + f_2 + f_4 + f_3 + f_6 + f_7) \quad (3.63)$$

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho u + (f_3 + f_6 + f_7) \quad (3.64)$$

$$f_5 - f_8 = \rho v - f_2 + f_4 - f_6 + f_7 \quad (3.65)$$

$$(3.66)$$

C'est un système à trois équations et quatre inconnues car on ne connaît pas ρ . On peut néanmoins déterminer ρ à partir des premières équations :

$$\rho = \frac{1}{1-u} [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)] \quad (3.67)$$

Zou et He considèrent que la règle du rebond des particules reste valable même hors équilibre pour une distribution normale à la bordure. Ainsi, il est possible d'écrire :

$$f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq} \quad (3.68)$$

Zou et He ont alors le système suivant à résoudre :

$$f_1 = f_3 + f_1^{eq} - f_3^{eq} \quad (3.69)$$

$$f_5 = f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{2}(f_3 - f_1) + \frac{1}{2}(\rho u + \rho v) \quad (3.70)$$

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{2}(f_3 - f_1) + \frac{1}{2}(\rho u - \rho v) \quad (3.71)$$

Cette approche fonctionne très bien en 3D aussi. Elle rencontre des limites pour des surfaces à géométrie complexe.

3.2.7 Algorithme

L'algorithme LBM est assez simple, il y a peu d'étapes (fig. 3.9). Dans un premier temps, les grandeurs physiques ((3.53), (3.54)) sont calculées en chaque élément du lattice. Puis il y a la collision ((3.51) partie de droite) qui permet de déterminer à partir des particules entrantes la nouvelle distribution des particules dans chaque élément du lattice. Enfin il y a l'advection qui consiste à redistribuer les nouvelles fonctions g aux voisins en suivant le schéma de discrétisation ((3.51) partie gauche) tout en prenant en compte les conditions aux bords.

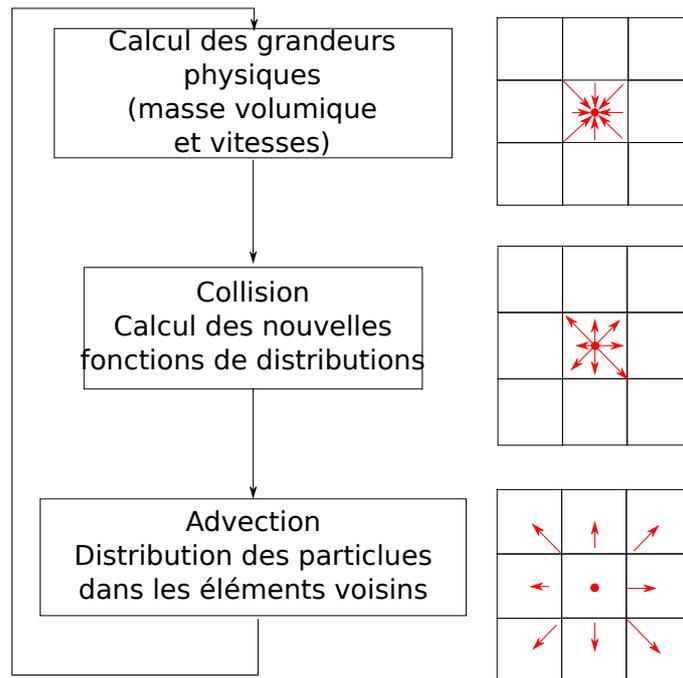


FIGURE 3.9 – Algorithme LBM.

3.3 LBM appliquée au mouillage

Il a précédemment été montré qu'il fallait prendre en compte les interfaces entre fluides et avec le solide afin de simuler le mouillage. Plusieurs auteurs de la littérature ont proposé des approches afin de pouvoir simuler des interfaces fluide-fluide. On va s'intéresser aux trois principales : la méthode du gradient de couleurs, la méthode multi-phase multi-composants et la méthode de l'énergie libre.

3.3.1 Modèle du gradient de couleur

Rothman et Keller en 1988 utilisent un modèle développé par Frish *et al.* (FHP [116]) en 1986 et l'adaptent à des fluides non miscibles [117]. Puis en 1991 Gunstensen *et al.* adaptent la méthode à la LBM [118]. Chaque fluide a des particules de couleur différente (rouge ou bleu). Il y a deux fonctions de distributions, une par fluide : f_i^b pour le fluide bleu et f_i^r pour le fluide rouge.

La masse volumique globale du fluide est calculée :

$$\rho = \sum_{k=\{r,b\}} \sum_i f_i^k \quad (3.72)$$

La tension de surface est ajoutée en rajoutant une force externe à l'opérateur de collision. Cette tension de surface permet de séparer les phases. L'équation discrète de Boltzmann pour chaque fluide devient :

$$f_i^k(\mathbf{x} + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^k(\mathbf{x}, t) + \Omega_i^k(\mathbf{x}, t) \quad (3.73)$$

Avec :

$$\Omega_i^k = (\Omega_i^k)^1 + (\Omega_i^k)^2 \quad (3.74)$$

Où :

$$(\Omega_i^k)^1 = -\Delta t \frac{f_i^k - f_i^{k,eq}}{\tau_k} \quad (3.75)$$

$$(\Omega_i^k)^2 = \frac{A_k}{2} |F| \left[\frac{(e_i \cdot F)^2}{|F|^2} - \frac{1}{2} \right] \quad (3.76)$$

$$F(\mathbf{x}) = \sum_i e_i (\rho_r(\mathbf{x} + e_i \Delta t) - \rho_b(\mathbf{x} + e_i \Delta t)) \quad (3.77)$$

$$(3.78)$$

τ_k est le temps de relaxation du fluide k . e_i est la vitesse microscopique et Δt le pas de temps. A_k est un paramètre lié à la tension de surface entre les deux fluides et F est le gradient de couleur local. L'interface entre les deux fluides est calculée à chaque pas de temps. L'interface calculée est fine mais très coûteuse numériquement (temps et mémoire). Ce modèle est instable pour des ratios de densité trop importants à cause de la différence de vitesse entre les deux phases. Le calcul de l'interface entraîne de l'anisotropie dans la tension de surface ce qui génère des tourbillons non physiques près de l'interface.

Des améliorations ont été proposées afin de pouvoir simuler des écarts de viscosité et masse volumique entre les deux fluides [119]. Puis la méthode a été optimisée afin de réduire le coût numérique [120, 121]. Enfin, la méthode est améliorée pour réduire les effets des tourbillons à l'interface [122].

3.3.2 Modèle Multi-phase Multi-composants

La méthode Shan-Chen est une méthode dite MCMP c'est à dire multi-composant et multi-phasique. Cette méthode utilise un pseudo-potentiel pour caractériser l'interface entre les deux fluides. La méthode est couplée avec la méthode Martys-Chen qui est aussi une méthode qui utilise un pseudo potentiel afin de pouvoir contrôler la mouillabilité d'une surface. De nouveaux termes sont introduits dans l'expression de la fonction de distribution de particules (3.51). Dans cette équation, il y a le terme F qui correspond à des forces extérieures. C'est dans ce terme que les forces d'interactions sont ajoutées. Ce terme se décompose ainsi en une somme des termes d'interactions :

$$F = F_{F \leftrightarrow F} + F_{S \leftrightarrow F} \quad (3.79)$$

Avec $F_{F \leftrightarrow F}$ qui correspond à la force d'interaction fluide-fluide présentée dans la section suivante et $F_{S \leftrightarrow F}$ qui correspond à la force d'interaction solide-fluides qui est présentée ensuite.

Ces nouveaux termes imposent de nouveaux calculs dans l'algorithme LBM, ainsi, l'algorithme présenté dans la figure 3.9 est modifié et devient l'algorithme de la figure 3.10. On commence par calculer les grandeurs physiques, ensuite on calcul les interactions fluide-fluide et fluides-solide, ensuite il y a la collision des particules et enfin il y a l'advection des particules.

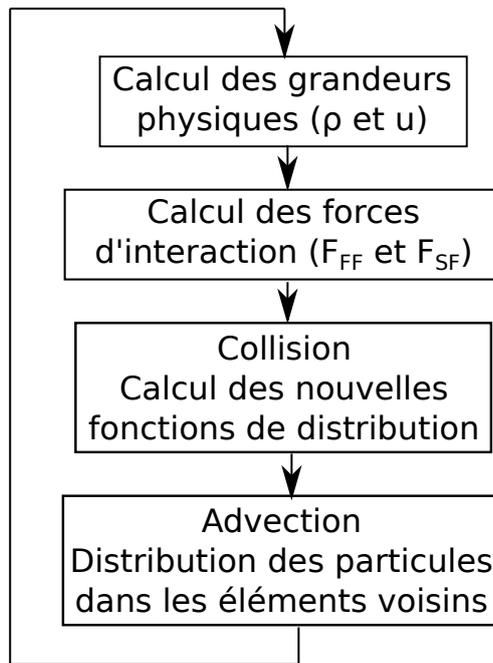


FIGURE 3.10 – Nouvel algorithme LBM pour le mouillage intégrant l'étape de calcul des forces d'interactions suivant le modèle Shan-Chen.

Il est possible de considérer à la fois des fluides de nature différente mais aussi de phase différente. Pour ce faire, il faut commencer par définir une fonction de distribution à chaque fluide σ . L'équation (3.51) peut se réécrire :

$$g_{\alpha}^{\sigma}(\mathbf{x} + c_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - g_{\alpha}^{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_{\sigma}} \left[g_{\alpha}^{\sigma}(\mathbf{x}, t) - g_{\alpha}^{\sigma, (eq)}(\mathbf{x}, t) \right] \quad (3.80)$$

Pour le fluide σ et la viscosité de fluide vaut $\mu_{\sigma} = c_s^2 \left(\tau_{\sigma} - \frac{1}{2} \right)$.

L'équation (3.79) doit être appliquée en chaque fluide :

$$F^{\sigma} = F_{F \leftrightarrow F}^{\sigma} + F_{S \leftrightarrow F}^{\sigma} \quad (3.81)$$

La force d'interaction fluide-fluide peut ainsi être réécrite sous la forme :

$$F_{F \leftrightarrow F}^\sigma = F^{\sigma\bar{\sigma}} \quad (3.82)$$

Le fait de considérer deux fluides, le liquide et le gaz, implique d'utiliser deux fois l'algorithme LBM (fig. 3.10), un par fluide, à chaque pas de temps, ce qui donne l'algorithme (fig. 3.11). En faisant l'hypothèse que la grandeur de la force d'interaction entre les particules

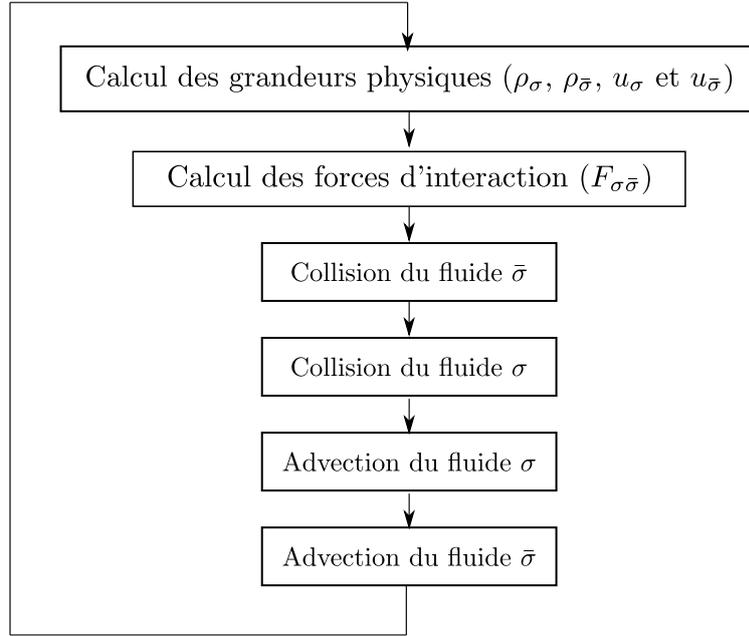


FIGURE 3.11 – Algorithme LBM avec méthode Shan-Chen et deux fluides

est proportionnelle à $\psi(\mathbf{x})\psi(\tilde{\mathbf{x}})$ avec ψ la masse effective du fluide que Shan et Chen définissent égale à ρ et \mathbf{x} , $\tilde{\mathbf{x}}$ deux éléments du système. ψ est le pseudo-potentiel. L'hypothèse est faite que la distance $\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}$ a une forte influence. Ces considérations sont regroupées dans la fonction de Green $G(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}})$ et la force d'interaction de Shan-Chen F^{SC} s'écrit :

$$F^{SC}(\mathbf{x}) = - \int (\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) G(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\tilde{\mathbf{x}}) d^3 \tilde{\mathbf{x}} \quad (3.83)$$

Cette fonction continue doit ensuite être adaptée au lattice et au schéma choisi. Ainsi :

$$G(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}) = \begin{cases} \omega_\alpha G & \text{pour } \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + c_\alpha \Delta t \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases} \quad (3.84)$$

La forme discrète de la force d'interaction fluide-fluide est :

$$F^{SC} = -\psi(\mathbf{x}) G \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \psi(\mathbf{x} + c_{\alpha} \Delta t) c_{\alpha} \Delta t \quad (3.85)$$

Pour appliquer l'équation (3.85) à un système de deux fluides, le potentiel d'interaction G vaut $G_{\sigma\bar{\sigma}} = G_{\bar{\sigma}\sigma}$. Ainsi, la force d'interaction fluide-fluide peut être écrite :

$$F^{\sigma\bar{\sigma}} = -\psi_{\sigma} G_{\sigma\bar{\sigma}} \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \psi_{\bar{\sigma}}(\bar{\mathbf{x}} + c_{\alpha} \Delta t) c_{\alpha} \Delta t \quad (3.86)$$

Il reste enfin à déterminer le potentiel $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. Pour ce faire, il faut passer par l'équation d'état du système où le terme est présent [123–125].

$$p_b(\rho) = c_s^2 \rho + \frac{c_s^2 \Delta t^2 G}{2} \psi^2 \quad (3.87)$$

Avec p_b la pression du bulk du fluide.

Il est important de noter que la valeur de G influe sur l'épaisseur de l'interface, plus G est grand, plus l'interface est fine mais plus on observe la création de courant parasites à l'interface entre les fluides.

Dans les études [124, 125], différentes modifications sont proposées afin de pouvoir simuler des fluides à grand ratio de densité et viscosité. Ces modifications se font au niveau de l'équation d'état (3.87) où la masse effective est modifiée et par conséquent le potentiel d'interaction $G_{\sigma,\bar{\sigma}}$ devient un paramètre à définir pour contrôler l'épaisseur d'interface et les courants parasites.

Un modèle proche du modèle pseudo-potentiel de Shan-Chen est utilisé pour contrôler les interactions fluide-solide. C'est le modèle proposé par Martys-Chen en 1996 [103] où la force d'interaction $F_{S\leftrightarrow F}^\sigma$, qui sera appelé $F_{ads,\sigma}$, est définie de la façon suivante :

$$F_{ads,\sigma}(\mathbf{x}) = -G_{ads,\sigma}\psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^m \omega_\alpha s(\mathbf{x} + e_\alpha) e_\alpha \quad (3.88)$$

Le potentiel d'interaction fluide-solide est le terme $G_{ads,\sigma}$ et $s(\mathbf{x} + e_\alpha)$ est un paramètre géométrique tel que :

$$s(\mathbf{x} + e_\alpha) = \begin{cases} 1, & \text{si } \mathbf{x} + e_\alpha \text{ est un noeud solide} \\ 0, & \text{si } \mathbf{x} + e_\alpha \text{ est un noeud fluide} \end{cases} \quad (3.89)$$

Cette méthode permet d'appliquer une force d'interaction G_{ads} au fluide σ si le noeud du fluide se situe à l'interface grâce au terme $s(\mathbf{x} + e_\alpha)$.

Afin de pouvoir relier cette formule et des interactions observées, Sukop *et al.*, en 2010, ont proposé de relier cette formule (3.88) et la formule de Young (1.24) [126]. Ainsi, ils ont réussi à exprimer la valeur du potentiel d'interaction fluide-solide à partir de l'angle de contact macroscopique d'une goutte sur une surface plane.

$$G_{ads,\sigma} = \frac{G_{\sigma,\bar{\sigma}}}{2} \cos \theta_e \quad (3.90)$$

Avec $G_{\sigma,\bar{\sigma}}$ le potentiel l'interaction fluide-fluide et θ_e l'angle de contact à l'équilibre.

Cette formulation est très pratique pour l'étude du mouillage car elle permet de définir un potentiel d'interaction fluide-solide pour tout type de solide avec comme seule information l'angle de contact du liquide sur surface plane.

Il y a néanmoins une limite à l'utilisation du modèle de Martys-Chen (MC) repris par Sukop *et al.* En effet, pour des cas de surfaces planes mixtes, c'est à dire avec plusieurs matériaux, il n'est pas possible d'utiliser l'équation (3.88) car le $G_{ads,\sigma}$ est une constante. Les modèles de pseudo-potentiel sont très intéressants car il sont simples à mettre en œuvre dans la LBM et sont peu coûteux en temps de calcul. On a aussi vu qu'il y a de nombreuses sources bibliographiques pour ces modèles.

3.3.3 Modèle avec l'énergie libre

En 1995, Swift *et al.* proposent d'utiliser l'énergie libre couplée à la LBM pour simuler des fluides multi-phasiques [100]. Ils modifient la fonction d'équilibre telle que :

$$f_i^{eq'} = f_i^{eq} + G_{\alpha\beta} e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (3.91)$$

La conservation de l'énergie totale (énergies cinétique, interne et de surface) est ainsi satisfaite [127]. Les coefficients de f_i^{eq} et $G_{\alpha\beta}$ sont modifiés pour garantir la conservation

de la masse et la conservation de la quantité de mouvement. On obtient le tenseur des contraintes :

$$\sum_i f_i^{eq'} e_{i\alpha} e_{i\beta} = P_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta \quad (3.92)$$

Avec

$$P_{\alpha\beta} = p\delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{d\rho}{dx_\alpha} \frac{d\rho}{dx_\beta} \quad (3.93)$$

Où κ est lié à la tension de surface. Le tenseur des pressions $p(r)$ est exprimé en fonction de l'énergie libre Ψ .

$$p(r) = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial n} - \Psi(r) \quad (3.94)$$

Avec

$$\Psi(r) = \int \left[\frac{\kappa}{2} |\nabla \rho(r)|^2 + \psi(\rho(r)) \right] dr \quad (3.95)$$

Le premier terme correspond aux contributions loin du gradient de masse volumique et le second terme décrit l'énergie libre du bulk.

Ce modèle peut gérer des écarts de masse volumique ou des écarts de viscosité importants. Il a néanmoins un problème majeur, le temps de calcul car le modèle de l'énergie libre ne peut pas être parallélisable. La LBM couplée à cette méthode perd de son intérêt.

3.3.4 Conclusion

On a vu qu'il y a différents moyens de définir l'interface entre deux fluides présents dans la littérature. Il y a la méthode du gradient de couleur [128], la méthode Shan-chen qui définit les interactions entre les particules de deux fluides par un pseudo-potentiel [102] et la méthode de l'énergie libre [100]. La méthode du pseudo-potentiel de Shan-Chen semble la plus intéressante à utiliser pour l'étude du mouillage. En effet, cette méthode s'implémente très bien à la LBM et permet d'avoir une approche physique des interactions ce qui correspond plus à la démarche suivie pour la méthode Lattice Boltzmann. De plus, elle permet de conserver l'aspect parallélisable de la LBM et ainsi grandement réduire le temps de calcul, contrairement à la méthode de l'énergie libre par exemple.

Deuxième partie

Méthode numérique et résultats

Chapitre 4

Modélisation numérique du mouillage par la LBM

Sommaire

3.1	Origine physique de la méthode	56
3.2	Discretisation de l'équation de transport de Boltzmann pour la LBM	63
3.2.1	Restriction de l'espace des vitesses	63
3.2.2	La fonction de distribution discrète des particules	64
3.2.3	Loi de conservation	65
3.2.4	Equilibre local	65
3.2.5	Opérateur de collision	65
3.2.6	Conditions aux bords	66
3.2.7	Algorithme	69
3.3	LBM appliquée au mouillage	70
3.3.1	Modèle du gradient de couleur	70
3.3.2	Modèle Multi-phase Multi-composants	71
3.3.3	Modèle avec l'énergie libre	73
3.3.4	Conclusion	74

4.1 LBM appliquée au mouillage

4.1.1 Choix des modèles numériques pour simuler le mouillage avec la Méthode Lattice Boltzmann

Dans le cadre de cette thèse, la LBM a été programmée entièrement. Le programme consiste à appliquer l'algorithme (fig. 3.11). Il a été choisi d'utiliser la méthode des pseudo-potentiels pour contrôler l'interaction fluide-fluide [102] et l'interaction fluide-solide [103, 126]. Ce choix s'est fait pour plusieurs raisons. L'approche par pseudo-potentiels permet d'agir directement sur les interactions entre les particules via un potentiel, ce qui rend cette approche réaliste et accessible. De plus, le temps de calcul n'est pas fortement impacté par les calculs nécessaires à la mise en œuvre de cette méthode. Beaucoup d'études dans la littérature proposent d'utiliser cette approche et proposent aussi des améliorations pour prendre en compte des fluides avec un rapport de masse volumique de plus de 1000 et un grand écart de viscosité. Il est aussi intéressant d'utiliser l'approche par pseudo-potential pour l'interaction fluide-solide. En effet, avec l'amélioration de Sukop, il est possible de prendre en compte un angle de contact et ainsi paramétrer le mouillage à partir des propriétés intrinsèques du solide.

Les fluides qui seront simulés sont tous deux des fluides parfaits avec un rapport de viscosité et de masse volumique égal à 1.

Le système présenté a pour conditions aux bords (fig. 4.1):

- Périodique sur tous les bords
- Non-glissement sur les solides

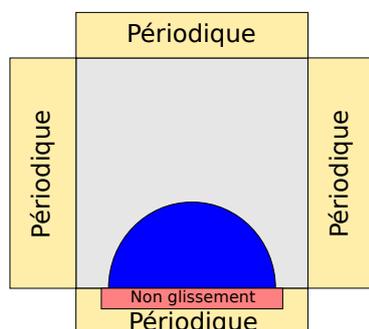


FIGURE 4.1 – Schéma des conditions aux bords des études en mouillage.

La condition de non glissement appliquée est le "half-way bounce-back" (HWBB).

L'état initial est une goutte parfaitement ronde ou sphérique posée tangente à la surface. Chacun des fluides est à l'équilibre. Seules les interactions fluides-solide ne sont pas à l'équilibre.

On va donc avoir les conditions de simulation présentées dans la figure 4.2.

Dans le cas d'une interaction avec un solide, c'est le modèle de Martys-Chen (MC) [103] amélioré par Sukop [126] qui est choisi. Cependant, dans l'article de Pravinraj et al. [101] l'hétérogénéité chimique est produite par une masse volumique virtuelle sur la surface. La surface est pré-mouillée et plus la surface est hydrophile, plus la concentration en liquide est importante.

Cette approche qui consiste à considérer initialement du liquide sur la surface est discutable et on va montrer qu'il est possible de modifier l'équation de Martys-Chen pour s'en affranchir.

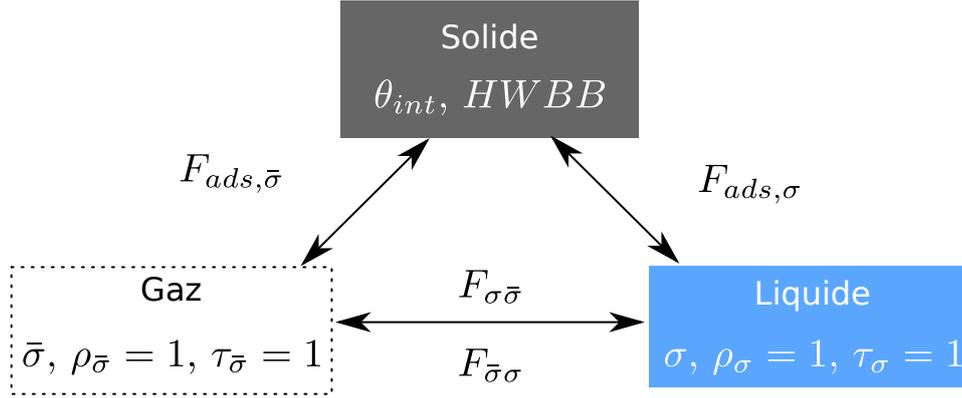


FIGURE 4.2 – Conditions de simulation.

4.1.2 Modification du modèle d'interaction fluide solide

La fonction de Martys-Chen améliorée par Sukop permet de simuler le mouillage sur une surface avec seulement une chimie de surface. Il n'est pas possible de prendre en compte l'hétérogénéité chimique.

Il a été décidé de modifier la fonction initiale de Martys-Chen [103] (3.88) en une fonction où le potentiel d'interaction fluide-solide est exprimé localement et en gardant la possibilité d'utiliser l'équation de Sukop (3.90) afin de pouvoir se servir de l'angle de contact intrinsèque des matériaux. Ainsi nous proposons l'écriture suivante :

$$F_{ads,\sigma}(\mathbf{x}) = -\psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^m \omega_{\alpha} \lambda_{\sigma,i}(\mathbf{x} + e_{\alpha}) e_{\alpha} \quad (4.1)$$

Avec le terme $\lambda_{\sigma,i}$ qui correspond à l'interaction locale fluide-solide :

$$\lambda_{\sigma,i}(\mathbf{x} + e_{\alpha}) = s(\mathbf{x} + e_{\alpha}) G_{ads,\sigma,i}(\mathbf{x} + e_{\alpha}) \quad (4.2)$$

Avec σ le fluide et i le matériau. De plus, l'équation de Sukop (3.90) peut être réécrite pour chaque matériau i tels que :

$$G_{ads,\sigma,i} = \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}}{2} \cos \theta_{int,i} \quad (4.3)$$

Avec $\theta_{int,i}$ l'angle de contact intrinsèque du matériau i .

Pour expliquer le fonctionnement de cette nouvelle expression, on se place dans le cas suivant (fig. 4.3).



FIGURE 4.3 – Schéma de l'étude du potentiel d'interaction modifié.

Dans la figure 4.3, le substrat est composé de deux matériaux qui ont un angle de contact

intrinsèque différent, respectivement θ_1 et θ_2 . On va calculer la force d'interaction en chacun des quatre points A, B, C et D. Ces points correspondent aux quatre possibilités d'interaction fluide-solide. Le point A correspond à un fluide en contact avec le solide 1. Le point B est au dessus du solide 1 mais en contact avec le solide 2. Le point C est au dessus du solide 2 et en contact avec le solide 1. Enfin, le point D est uniquement en contact avec le solide 2.

On va donc calculer la force $F_{ads,\sigma}$ pour le cas présenté dans la figure 4.3.

Pour commencer, on s'intéresse au terme $\lambda_{\sigma,i}$ (4.2). Ce terme est composé du produit de deux termes : $G_{ads,\sigma,i}$ qui est le potentiel d'interaction qui dépend du fluide σ et du solide i et s qui est un terme d'activation qui vaut 0 ou 1 en fonction de la nature du lattice voisin. Dans le cas étudié, le substrat est un solide qui est plan de normale \vec{y} . Ainsi, la fonction s à la forme suivante (4.1.2) en fonction de f_α .

$$s(\mathbf{x} + e_\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha = 4, 7, 8 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.4)$$

Et le terme $G_{ads,\sigma,i}$:

$$G_{ads,\sigma}(i) = \begin{cases} G_{ads,\sigma,1} & \text{si } i = 1 \\ G_{ads,\sigma,2} & \text{si } i = 2 \end{cases} \quad (4.5)$$

On peut donc écrire la force d'interaction (4.1) en chaque point de la figure 4.3 :

$$F_{ads,\sigma}(\mathbf{x} = A) = \psi_\sigma(\mathbf{x} = A) \cdot G_{ads,\sigma,1} \cdot (\omega_4 e_4 + \omega_7 e_7 + \omega_8 e_8) \quad (4.6)$$

$$F_{ads,\sigma}(\mathbf{x} = B) = \psi_\sigma(\mathbf{x} = B) \cdot [G_{ads,\sigma,1} \cdot (\omega_4 e_4 + \omega_7 e_7) + G_{ads,\sigma,2} \cdot (\omega_8 e_8)] \quad (4.7)$$

$$F_{ads,\sigma}(\mathbf{x} = C) = \psi_\sigma(\mathbf{x} = C) \cdot [G_{ads,\sigma,1} \cdot (\omega_7 e_7) + G_{ads,\sigma,2} \cdot (\omega_4 e_4 + \omega_8 e_8)] \quad (4.8)$$

$$F_{ads,\sigma}(\mathbf{x} = D) = \psi_\sigma(\mathbf{x} = D) \cdot G_{ads,\sigma,2} \cdot (\omega_4 e_4 + \omega_7 e_7 + \omega_8 e_8) \quad (4.9)$$

Si on trace ces fonctions avec $\theta_{int,1} = 120^\circ$ et $\theta_{int,2} = 110^\circ$, on obtient la représentation figure 4.4.

On a F_x qui correspond à la force tangente au solide et F_y qui correspond à la force

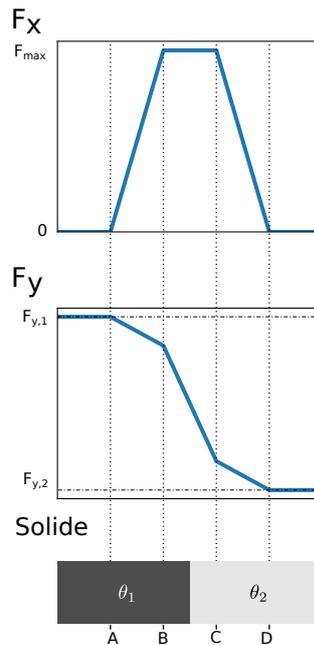


FIGURE 4.4 – Evolution de la fonction $F_{ads,\sigma}$ en fonction du solide.

normale. On constate que quand les interactions ne sont qu'avec un solide, jusqu'au point

A et après le point D, la force tangentielle est nulle et la force normale est constante. Lors du changement de texture, les forces normales et tangentielles varient. La force normale transite entre ses deux forces constantes. La force tangentielle devient non nulle et extrême à la texture.

L'expression de la force d'interaction retrouve la même équation que Sukop aux points A et D qui côtoient un seul solide (3.90).

4.2 Présentation de l'outil de simulation

L'outil de simulation a été développé pendant cette thèse. Le programme est programmé en Python et CUDA.

4.2.1 Caractéristiques techniques

Les calculs des simulations sont effectués sur une carte graphique ce qui permet de profiter de la parallélisation de la méthode Lattice Boltzmann. Cette carte graphique est une Nvidia Quadro P5000 qui possède 16 Go de mémoire. Ces 16 Go de mémoire sont limitant pour les simulations, c'est à dire qu'il est impossible de simuler des systèmes qui vont nécessiter plus de 16Go de mémoire.

Schema	D2Q9	D3Q15	D3Q19	D3Q27
Taille du côté du lattice (lu)	6593	300	281	254

TABLE 4.1 – Table de valeur maximale des systèmes simulables en fonction du schéma de discrétisation choisi

Il existe des méthodes de gestion de certaines constantes qui permettent de réduire la quantité de mémoire utilisée. Celles qui ne nécessitent pas de calculs supplémentaires sont déjà présentes dans le programme.

Les simulations qui ont été produites pendant la thèse sont principalement avec les schémas D2Q9 et D3Q15. Les temps caractéristiques de ces simulations sont :

Schema	D2Q9	D3Q15
Taille du côté du lattice (lu)	500	250
Itérations	15000	20000
Temps de simulation	1min	3min

TABLE 4.2 – Table des temps caractéristiques des simulations

Les temps de simulation sont très courts. En fonction de la texturation, il faut parfois attendre 35000 itérations en D2Q9 pour atteindre l'état final. De plus, pour les études en dynamique, les données sont régulièrement sauvegardées ce qui rallonge beaucoup le temps de simulation. En effet, l'intérêt d'utiliser une carte graphique est la vitesse de calcul mais le transfert d'informations entre ordinateur et carte graphique est très long proportionnellement au temps de calcul. Il faut un équivalent de 200 itérations pour transférer la sauvegarde d'une simulation D2Q9 avec un lattice de 500 lu de côté. Généralement, pour des études 2D en dynamique, le temps de simulation est multiplié par 3 et pour la 3D multiplié par 5.

Il n'y a pas d'arrêt automatique des simulations quand l'état final est atteint. Le nombre d'itérations est défini avant de lancer la simulation. Le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre l'équilibre dépend de la dimension (2D ou 3D), de la taille du système et de la texturation de surface.

4.2.2 Paramétrage des simulations

Le paramétrage des simulations se fait dans un fichier qui est ensuite lu par le programme et sauvegardé dans le dossier des résultats. Ainsi, il est possible d’avoir tous les paramètres d’une simulation lors du post-traitement. Il est aussi possible de reprendre une simulation plus tard sans avoir perdu d’informations. Dans le fichier d’entrée se retrouvent les paramètres suivants (fig. 4.5).

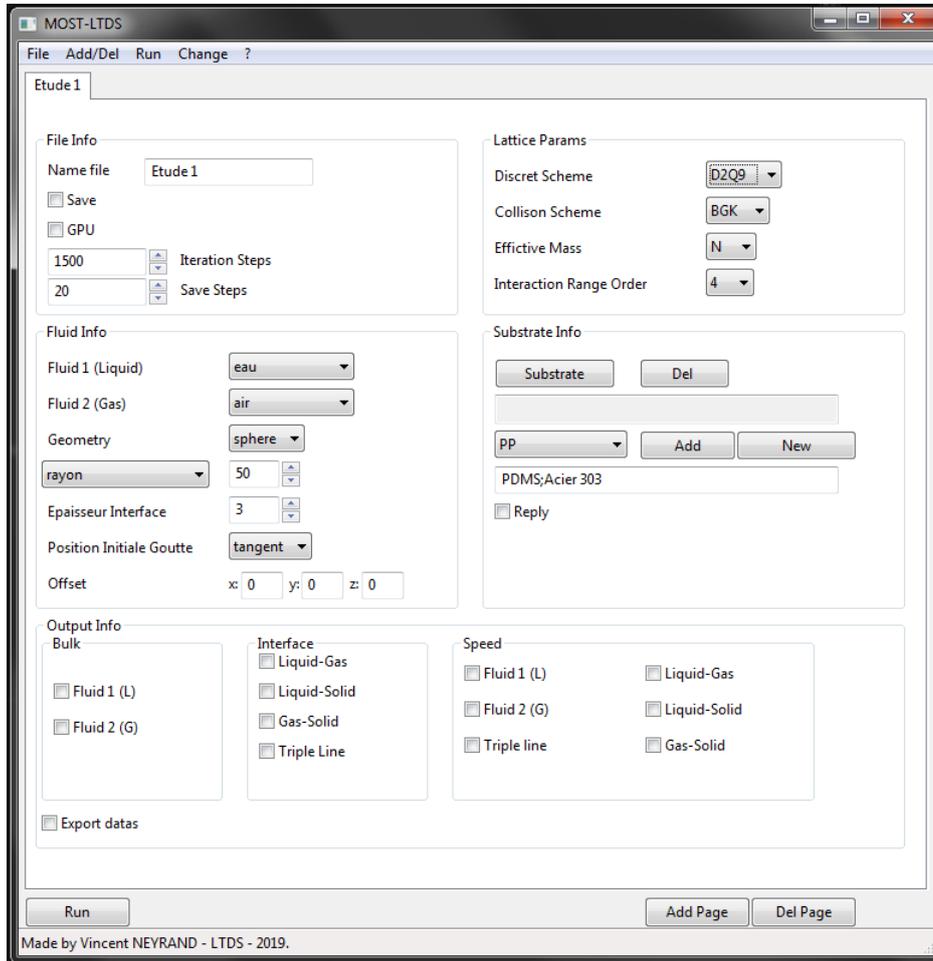


FIGURE 4.5 – Paramétrage d’une simulation.

Il est aussi possible de lancer automatiquement plusieurs simulations à la suite de façon à pouvoir faire un grand nombre de simulations consécutives.

Dans le fichier d’entrée, il faut renseigner le nom du fluide qui fait référence à une base de données des propriétés des fluides dans laquelle le programme récupère la masse volumique et la viscosité. Il y a aussi des informations sur l’état initial. La géométrie initiale de la goutte peut être un carré/rectangle ou un disque en 2D ou cube/pave et boule en 3D. La position du fluide peut aussi être définie, par défaut le fluide est tangent à la surface mais on peut régler un offset afin de décaler la goutte. La goutte peut aussi être placée au centre du système, en ignorant le substrat, c’est par exemple cette configuration qui va être choisie pour tester l’interface fluide-fluide sans substrat.

Le schéma de discrétisation et d’autres paramètres qui actuellement ne sont pas implémentés sont présents (le modèle de collision, la formule du calcul de la masse effective et l’ordre des interactions). Par la suite, ils pourraient permettre de simuler des fluides avec un grand écart de masse volumique ou considérer que l’interaction avec le substrat est à

plus grande distance.

Il y a aussi des informations sur le substrat. Il y a besoin d'avoir une géométrie et un/des matériaux. Ainsi, la géométrie est utilisée pour les conditions aux limites et le matériau est utilisé pour le calcul du $G_{ads,\sigma,i}$. De plus, il est possible d'importer des fichiers de surfaces réelles (.STL) ce qui permet de simuler sur des surfaces réelles, c'est-à-dire issues de procédés expérimentaux de caractérisation topographique (AFM, interféromètre, microscope confocal...). Il est aussi possible de répliquer un pattern de surface, si le substrat est un ensemble de plots, seulement un plot et son nombre de répétition en x et y sont nécessaires pour avoir la surface.

Les dimensions du système sont calculées automatiquement en fonction de la taille du substrat à partir de sa longueur ou largeur la plus courte pour réduire la taille de l'étude et gagner en temps de calcul. Les simulations 2D sont donc toujours des carrés car seule la longueur du substrat est prise en compte.

Pour finir, les informations à sauvegarder pendant la simulation sont à choisir. Il est possible de sauvegarder les vitesses et/ou la/les masses volumiques à tous les pas de temps souhaités.

4.3 Validation de l'outil

Nous allons dans un premier temps vérifier le modèle d'interaction fluide-fluide puis dans un second temps s'intéresser au modèle d'interaction fluide-solide pour des substrats mono-matériau. Dans un troisième temps faire une vérification des modifications effectuées pour des matériaux mixtes.

Toutes les validations vont être réalisées deux fois, en 2D et en 3D en suivant les schémas D2Q9 et D3Q15.

4.3.1 Interface fluide-fluide

Pour commencer, on veut vérifier la valeur de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ que l'on retrouve dans le terme d'interaction fluide-solide (4.3). Pour valider l'utilisation du modèle de Shan-Chen, on va simuler un système cubique ou carré composé uniquement de deux fluides.

Les deux fluides sont le liquide et le gaz. Comme expliqué précédemment, on considère leur propriétés intrinsèques identiques, c'est à dire qu'ils ont la même masse volumique et la même viscosité ce qui permet d'avoir un ratio de masse volumique égal à 1 et un temps de relaxation identique $\tau_1 = \tau_2$ [112].

Pour l'étude 3D, le système est un cube de 200 lu de côté avec pour état initial le liquide en son centre qui a une forme cubique de 100 lu de côté. Pour l'étude 2D, c'est un carré de 200 lu de côté et le liquide est à l'état initial un carré de 100 lu de côté centré dans le système. On lance les simulations jusqu'à obtenir l'équilibre du système et on regarde la géométrie finale. Les états initiaux et finaux pour les simulations 2D et 3D sont présentés dans la figure 4.6.

Pour la valeur de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$, on prend 3 qui est une valeur moyenne courante dans la littérature [104, 105, 124, 125].

Suite à ces résultats, on s'intéresse au rayon quadratique moyen de l'état final du liquide, en effet, d'après la loi de Laplace, on doit obtenir un liquide de forme sphérique en état final.

$$\Delta R_{rms} = \sqrt{\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \Delta R_i^2 d\theta} \quad (4.10)$$

Le R_i est la différence entre le rayon local en θ et le rayon moyen : $R_{mean} - R_{local}$. Utiliser le R_{rms} permet de valider la circularité de la figure géométrique obtenue. Les résultats pour la 2D et la 3D sont affichés dans la figure 4.7.

De plus, on s'intéresse aussi à la conservation du volume du liquide car l'interface étant diffuse, il est possible qu'une partie du liquide la traverse et devienne vapeur, ces résultats sont aussi présentés dans la figure 4.7.

Ainsi, la perte de masse et la circularité de l'état final sont étudiés. On va définir des critères de validation pour ces paramètres. On va arbitrairement définir que la perte de masse ϵ_{mass} doit être inférieure à 5% et que le ΔR_{rms} doit être inférieur à 0.1 à l'état d'équilibre.

On constate que pour le cas 2D, la mesure du ΔR_{rms} vaut 0.08 et la perte de masse est de 2% ce qui est très faible et suffisant pour que l'on considère qu'en 2D le modèle d'interface fluide-fluide pour des fluides de masse volumique identique et de viscosité identique avec une valeur de $G_{\sigma,\bar{\sigma}}$ de 3 soit validé. Pour l'étude 3D, le ΔR_{rms} vaut 0.05 et la perte de volume est de 4% ce qui valide aussi la simulation en 3D avec le modèle présenté précédemment.

On a ainsi validé la simulation d'après nos critères de validité $\Delta R_{rms} < 0.1$ et $\epsilon_{mass} < 0.05$. Pour les prochaines simulations, on devrait garder les paramètres qui ont été vérifiés, c'est à dire : masse volumique des fluides, temps de relaxation et potentiel d'interaction fluide-fluide.

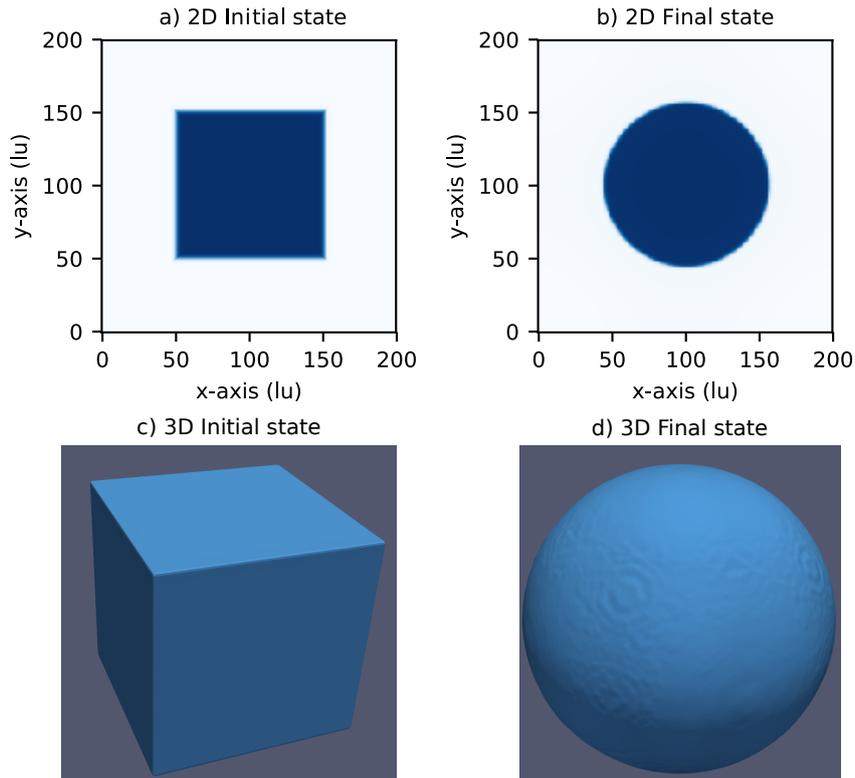


FIGURE 4.6 – Etude de l'interface fluide-fluide, a-b) États initial et final de la simulation 2D, c-d) États initial et final de la simulation 3D.

4.3.2 Interface solide-fluide

On vérifie ensuite que le modèle d'interaction fluide-solide proposé (4.3) fonctionne. Pour commencer, on a décidé de tester certaines chimies de surface présentes dans la base de données de l'équipe, c'est à dire des métaux, des polymères et des céramiques présentés dans le tableau 4.3. L'objectif est aussi de relier l'outil numérique à une base de données implémentable qui peut être mise à jour à chaque étude du mouillage sur un nouveau matériau.

Matériaux	Angle de contact intrinsèque (°)
PA6.6	67
X8CrNiS189	70
PET	76
X40Cr14Az	80
ABS	84
X2CrNi1911	84
1050A	88
PP	90
PMMA	100
PDMS	112

TABLE 4.3 – Table des matériaux de référence avec leur angle de contact intrinsèque

Le substrat est un plan parfaitement lisse et chimiquement homogène. Les simulations sont réalisées pour chacun des matériaux (tab. 4.3). Pour valider ce test, il faut que le R^2 de la courbe des angles mesurés par rapport à la courbe théorique des angles souhaités soit

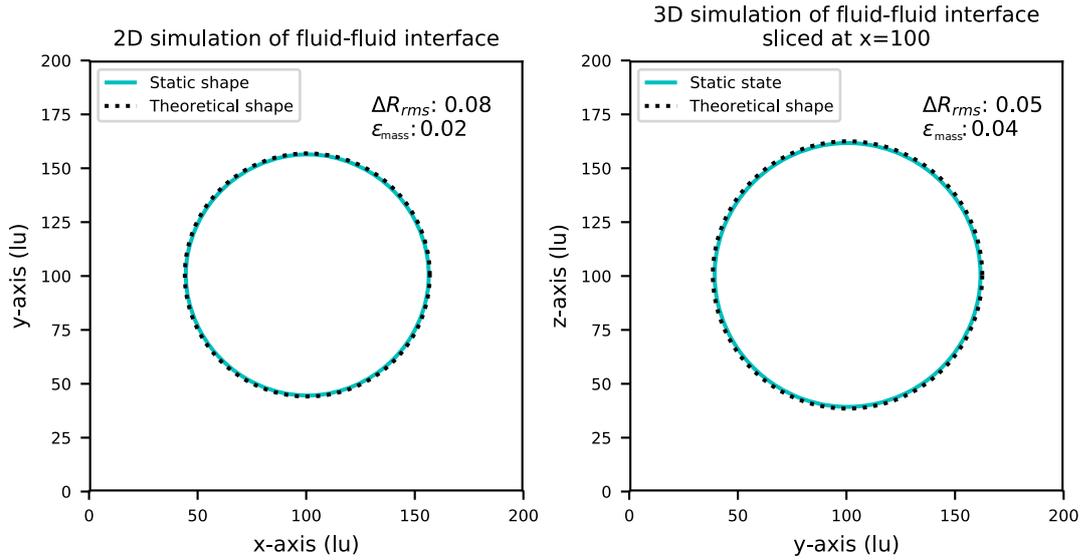


FIGURE 4.7 – Circularité et perte de masse du liquide pour l'étude de l'interface fluide-fluide.

supérieur à 0.95.

Ici encore, les essais 2D et 3D sont réalisés. Pour le cas 2D, le système est un carré de 500 lu de côté et une goutte circulaire à l'équilibre de rayon 100 lu à l'état initial. Pour le cas 3D, la goutte est une boule à l'équilibre de rayon 50 lu dans un système carré de côté 250 lu. Pour les deux cas, la goutte est initialement enfoncée de quelques lattices afin d'avoir un contact liquide solide non ponctuel mais un disque de très petit diamètre.

Ce choix permet d'amorcer très légèrement l'étalement et de garantir un contact liquide-solide à l'état initial. En effet, l'interface fluide-fluide se fait pour 50% de liquide et 50% de gaz or on ne veut pas 50% de gaz quand la goutte est tangente au solide. C'est pourquoi, il a été décidé d'enfoncer la goutte de quelques lattices dans le solide afin de garantir presque 100% de liquide au contact avec le solide comme montré dans la figure 4.8 a et b.

Le coefficient de détermination R^2 se calcule de la façon suivante:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(\theta_i - \hat{\theta})^2}{\sum(\theta_i - \bar{\theta})^2} \quad (4.11)$$

Avec θ_i l'angle de contact mesuré sur la simulation, $\hat{\theta}$ l'angle de contact intrinsèque de la surface et $\bar{\theta}$ l'angle de contact moyen.

Dans la figure 4.9, une incidence de l'angle intrinsèque de la surface sur l'étalement est observée. Les résultats de l'angle de contact à l'état final sont affichés par rapport à l'angle de contact intrinsèque de leur surface respectives dans le tableau 4.3.

Le R^2 est bien supérieur à la valeur seuil de 0.95 et vaut 0.97 en 2D et en 3D, le test est donc validé.

4.3.3 Conclusion

Il a été montré que l'outil de simulation fonctionne en 2D et 3D. Il est possible de simuler l'interaction entre deux fluides et l'interaction entre les fluides et le solide. Pour la suite des études, le paramètre $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 3$ est conservé.

On a aussi choisi de simuler un essai de goutte sessile numériquement avec une goutte en

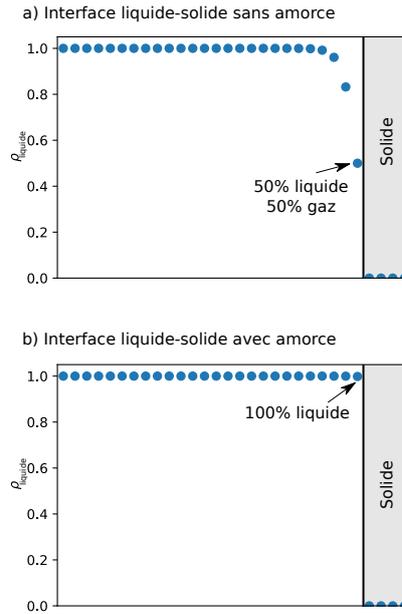


FIGURE 4.8 – Interface liquide-solide, a) sans amorce (50% liquide en contact) et b) avec amorce (100% de liquide en contact avec le solide).

forme de boule sans vitesse initiale et légèrement enfoncée dans le solide pour garantir une interface liquide-solide avec 100% de liquide sous la goutte. Cette configuration est conservée car elle nous a permis de valider les simulations de l'étalement d'une goutte sur surface plane.

Les simulations en 3D sont très restreintes en terme de taille de lattice. De plus, le temps de calcul est très faible en 2D. Il convient donc de favoriser les études 2D qui vont à la fois permettre d'avoir des systèmes plus grands mais en plus d'avoir un temps de calcul très faible. De plus, on a vu dans l'étude de la littérature que des effets locaux au niveau de la ligne triple pouvaient avoir un impact sur le comportement de la goutte. Si on travaille en 3D, la ligne triple a deux dimensions (ligne) alors qu'en 2D elle n'en a qu'une (point) ce qui la rend beaucoup plus facile à étudier.

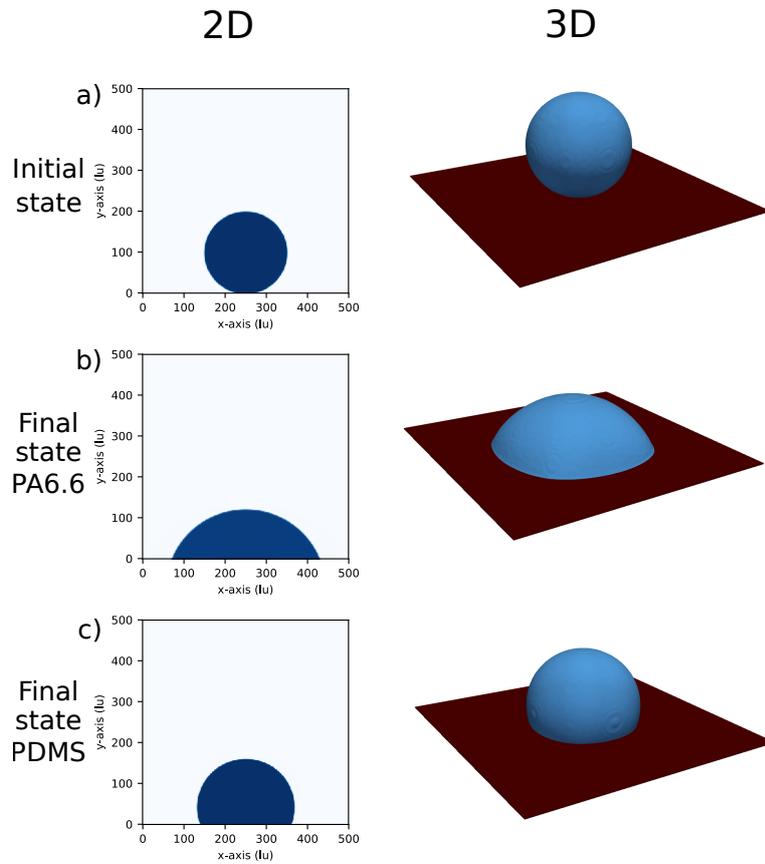


FIGURE 4.9 – États initiaux et finaux pour des gouttes en 2D et 3D sur des substrats plans.

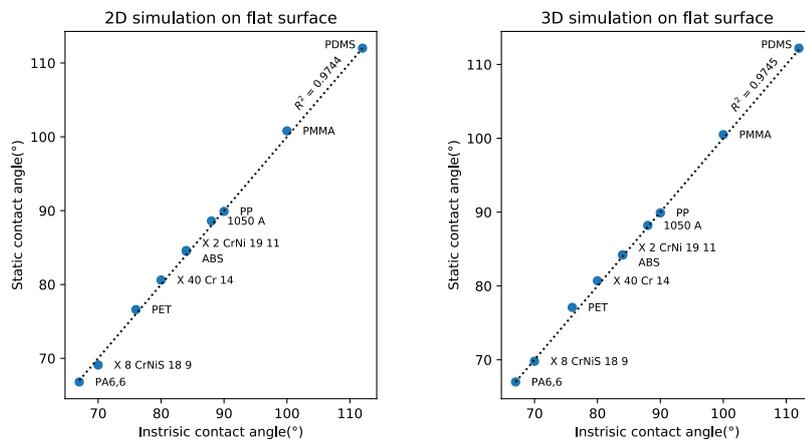


FIGURE 4.10 – Résultats des tests de validation de l'interface liquide-solide.

Chapitre 5

Etude du mouillage statique sur des surfaces de référence

Sommaire

4.1	LBM appliquée au mouillage	78
4.1.1	Choix des modèles numériques pour simuler le mouillage avec la Méthode Lattice Boltzmann	78
4.1.2	Modification du modèle d'interaction fluide solide	79
4.2	Présentation de l'outil de simulation	81
4.2.1	Caractéristiques techniques	81
4.2.2	Paramétrage des simulations	82
4.3	Validation de l'outil	84
4.3.1	Interface fluide-fluide	84
4.3.2	Interface solide-fluide	85
4.3.3	Conclusion	86

5.1 Présentation de l'étude

5.1.1 Principe

Dans la littérature, il a été montré que la LBM pouvait être utilisée pour étudier des transitions d'un état Cassie à Wenzel et inversement, pour étudier l'étalement sur des surfaces texturées chimiquement ou encore pour caractériser le déplacement d'une goutte sur des surfaces à gradients topographiques.

L'outil développé a été validé par des simulations vérifiant la qualité de l'interface fluide-fluide et l'interface fluide-solide. Il est donc possible d'utiliser l'outil numérique pour faire des études de mouillage.

Pour commencer, on s'intéresse à l'état statique d'une goutte. L'état statique étant très présent dans la littérature et sujet à de nombreux débats, il serait intéressant de regarder le mouillage statique au travers de la simulation numérique.

Il est proposé de reprendre les surfaces proposées par Extrand [50] où la texture est centrale. Sur ces surfaces, on va simuler l'étalement d'une goutte.

Deux comportements de goutte avaient été observés dans la littérature [50, 51, 129]:

- La goutte reste dans la zone centrale
- La goutte s'étale hors de la zone centrale

Cette approche va être modifiée. Il a été montré dans la littérature qu'un changement topographique ou chimique sur la surface génère une "énergie de barrière" qui contraint la goutte. La notion clef de l'étude d'Extrand serait donc la frontière entre les deux domaines. On s'intéresse donc à l'étude de la position de la frontière qui entraîne un changement topographique ou chimique.

L'étude va donc se faire en deux temps. Pour commencer, nous allons nous intéresser à l'étude de l'effet des variations chimiques. Pour finir, nous étudierons l'effet des variations topographiques.

Dans le cas d'une texturation chimique, une variation de chimie correspond à un changement de matériaux, donc à un changement d'angle de contact intrinsèque de la surface. Cela signifie qu'il faut simuler des surfaces composées de deux matériaux. Deux configurations sont envisagées : une texturation hydrophile - hydrophobe ($Hi \rightarrow Ho$) et une texturation hydrophobe - hydrophile ($Ho \rightarrow Hi$) comme représenté dans la figure 5.1. Ici, il est choisi de prendre un matériau hydrophile et un matériau hydrophobe afin d'avoir un écart d'angle de contact intrinsèque important et ainsi d'accentuer l'effet de la frontière.



FIGURE 5.1 – Configurations pour l'étude de la texturation chimique.

Pour l'étude de l'effet de la texturation topographique, il faut un équivalent à l'étude chimique. C'est-à-dire de disposer d'une surface avec deux topographies et une frontière entre ces deux topographies. La solution est de considérer la texturation topographique comme un changement brusque de plan d'étalement et chaque plan correspond à une topographie. Ainsi, deux cas sont étudiés : une texturation entrante et une texturation sortante.

La texturation chimique est considérée comme un changement brusque, elle correspond à un changement de matériaux sans transition/mélange entre les deux domaines. Pour la

texturation topographique, il a été proposé de considérer un changement de plan d'étalement ce qui correspond aussi à un changement brusque. Si l'angle entre les deux plans est très faible, comme pour des surfaces courbes, la texturation topographique ne peut plus être considérée comme brusque, on va la considérer continue. Une dernière étude est ainsi proposée afin d'étudier l'effet de la variation topographique continue. Les texturations topographiques brusques et continues sont représentées dans la figure 5.2.

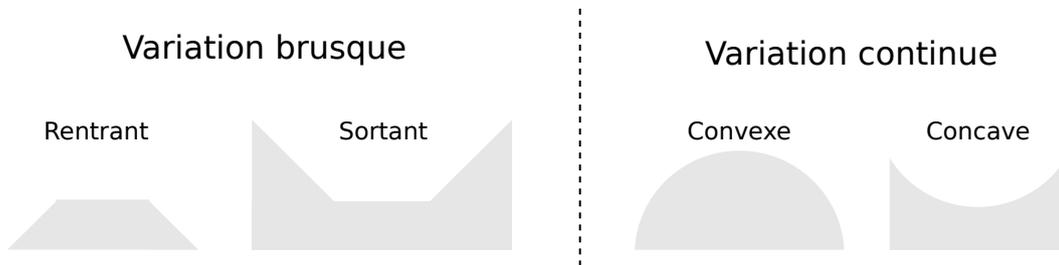


FIGURE 5.2 – Configurations pour l'étude de la texturation topographique.

5.1.2 Paramétrage numérique pour l'étude de l'effet de la texturation chimique

On s'intéresse à l'influence de la frontière entre deux matériaux sur l'étalement d'une goutte. Deux types de frontières sont étudiées :

- lorsque la ligne triple traverse la frontière d'un matériau hydrophile pour aller vers un matériau hydrophobe ($H_i \rightarrow H_o$)
- lorsque la ligne triple traverse la frontière d'un matériau hydrophobe pour aller vers un matériau hydrophile ($H_o \rightarrow H_i$)

De plus, on peut aussi s'intéresser aux conditions d'étalement de la goutte. En effet, une goutte qui "s'étale" ne signifie pas forcément que sa ligne triple avance, il arrive aussi que la ligne triple recule pendant étalement. On va donc aussi s'intéresser à la reculée de ligne triple. Il est assez simple de mettre en place une simulation de reculée de ligne triple comme l'ont proposé Gong et al. dans leur article [95]. Ainsi, nous allons tester différentes configurations de substrats pour deux comportements de ligne triple : l'avancée et la reculée.

Toutes les simulations qui vont être présentées ont été réalisées en 2D et en 3D. Il a été observé que les résultats 2D et 3D étaient identiques donc seulement les résultats 2D vont être présentés afin de ne pas avoir de doublons entre les résultats 2D et 3D.

Nous allons voir dans un premier temps quelles texturations nous allons étudier puis dans un second temps comment le système sera configuré à l'état initial.

Design des surfaces

Il faut déterminer une géométrie de surface pertinente qui permet de mettre en avant les effets d'un changement brusque de propriété de mouillabilité lié à une chimie. Le plus simple est de faire des surfaces mixtes composées de deux matériaux, l'un hydrophile (H_i) et l'autre hydrophobe (H_o). Pour les angles intrinsèques, il a été arbitrairement choisi de donner 60° à la surface hydrophile et 120° à la surface hydrophobe. Cela permet d'avoir un écart de 60° entre les deux surfaces.

Pour ce qui est de la topographique du substrat, il a été décidé de faire un substrat plan et axis-symétrique. Ce substrat correspond à un carré avec en son centre un disque à rayon

variable r d'un autre matériau. Ainsi la goutte étant placée au centre, en s'étalant, la ligne triple arrive à la frontière entre les deux matériaux en tous points au même moment. L'effet de la transition s'opère donc sur l'intégralité de la ligne triple au même instant ce qui permet de conserver la symétrie des contraintes. Comme expliqué dans l'introduction de cette partie, des tests 2D et 3D ont été réalisés mais seulement le 2D va être présenté. Le design 2D des surfaces est le suivant (fig. 5.3).

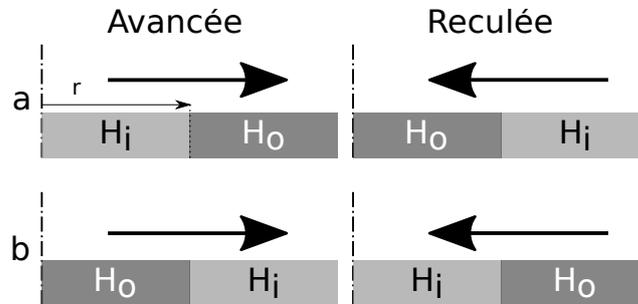


FIGURE 5.3 – Côté droit de la texturation symétrique de la surface, et le rayon de domaine central r .

Le principe de texturation est le suivant :

1. Si, dans la direction du déplacement de la ligne triple, il y a une transition $H_i \rightarrow H_o$ alors on est dans le cas présenté dans la figure (fig. 5.3a).
2. Si, dans la direction du déplacement de la ligne triple, il y a une transition $H_o \rightarrow H_i$ alors on est dans le cas présenté dans la figure (fig. 5.3b).

La taille du domaine central varie entre chaque simulation pour que la frontière entre les deux matériaux rencontre la ligne triple à des moment différents.

Etats initiaux

Il faut ensuite définir les états initiaux. Dans le cadre de cette étude, on veut qu'à l'état initial, la goutte n'ait aucune vitesse pour que ce soit seulement les interactions avec le substrat qui agissent sur la ligne triple comme une force motrice. De cette manière, on se rapproche aussi des études de la littérature qui proposent la notion de "driving force" qui serait à l'origine du déplacement de la goutte [70].

La configuration initiale de la goutte dans le cas de l'avancée de ligne triple est proche du test de la goutte sessile. C'est à dire que la goutte est un disque parfait et disposée tangentiellement au substrat. On impose aussi une vitesse nulle dans le liquide. Cet état correspond à la figure 5.4a. Pour la configuration en reculée de ligne triple, on ne peut pas reproduire un essai expérimentalement, comme le test de la goutte sessile, car on a besoin d'un état de sur-étalement.

Le sur-étalement peut être expérimentalement produit par la projection d'une goutte sur une surface mais cela implique une vitesse initiale et une goutte écrasée, déformée, sur la surface. Il n'est plus possible d'isoler l'influence du changement de matériau comme seul paramètre dans l'essai si la goutte est déformée. Il a donc été choisi de créer un état initial "impossible", c'est à dire que la goutte a une forme de portion de disque parfait avec une vitesse nulle. Cette configuration est présentée dans la figure 5.4b.

De plus, afin de pouvoir aussi comparer les deux états initiaux entre eux, il a été décidé de donner le même volume de liquide aux deux états initiaux. Ainsi, pour les deux

5.1. Présentation de l'étude

configurations initiales, le liquide a un volume de $30\,000\text{ lu}^2$ et le système simulé est un lattice carré de 500 lu .

Les angles de contact initiaux dans le cas de l'avancée sont de 175° et dans le cas de la reculée 50° . La raison pour laquelle l'angle initial de l'étude de l'avancée est de 175° et non 180° est que, comme expliqué pour les essais de validation du modèle numérique, il faut garantir une aire de contact liquide-solide avec 100% de liquide (fig. 4.8).

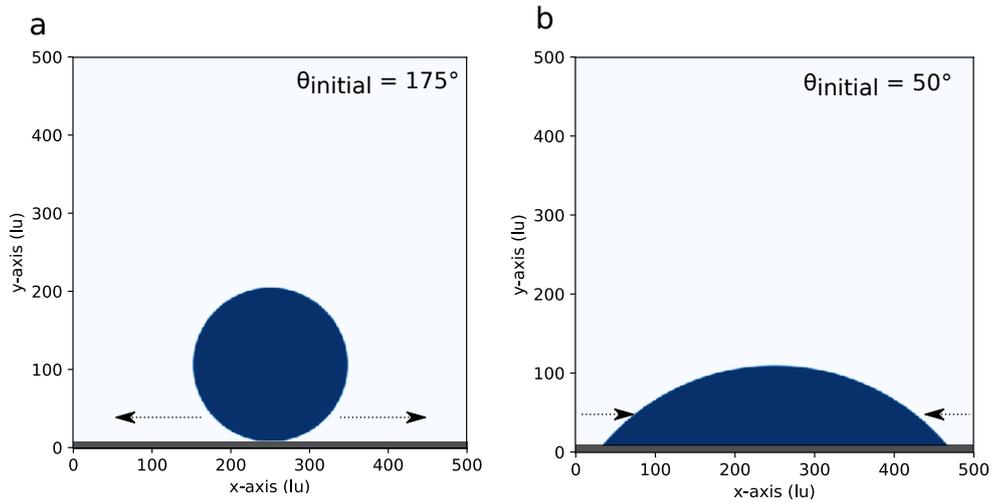


FIGURE 5.4 – États initiaux pour l'étude chimique d'une goutte statique

Les quatre états initiaux sont présentés dans la figure 5.5.

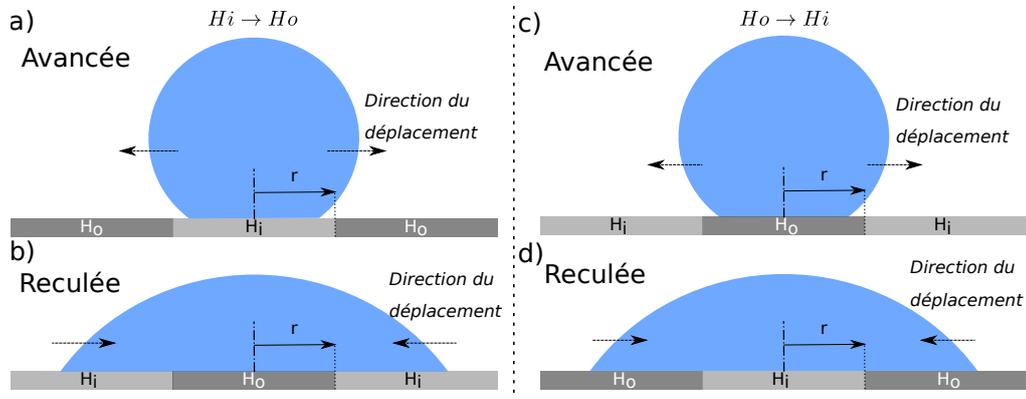


FIGURE 5.5 – Configurations initiales pour l'étude statique de l'effet de la texturation chimique.

5.1.3 Paramétrage numérique pour l'étude de l'effet de la texturation topographique

On s'intéresse à l'influence de la texturation topographique sur l'étalement d'une goutte. Cette étude se décompose en deux types de textures :

- Textures brusques
- Textures continues

Nous allons voir dans un premier temps quelles textures nous allons étudier puis dans un second temps comment le système sera configuré à l'état initial.

Design des surfaces

Pour l'étude des textures brusques, il faut définir un angle d'ouverture de surface. On considère que dans le cas d'une surface plane, l'angle d'ouverture est de 180° . Ainsi, les surfaces entrantes et sortantes peuvent être représentées suivant la figure 5.6. Il y a une symétrie axiale telle que en s'étalant, la ligne triple atteint la texture localement au même moment en tout ces points. Des valeurs arbitraires d'inclinaisons de plans sont choisies. Ainsi dans le cas des surfaces entrantes, il va falloir un angle ψ de 45° , 90° et 135° . Dans le cas des surfaces sortantes ψ vaut 225° ou 270° .

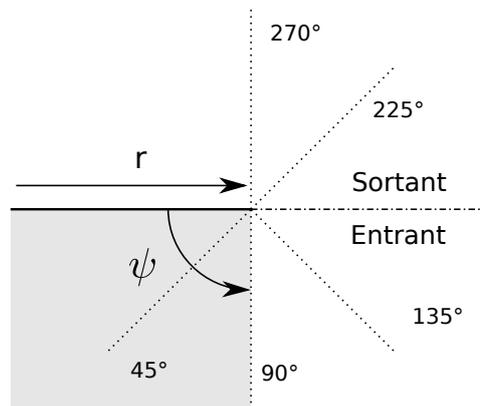


FIGURE 5.6 – Design des surfaces avec une texture brusques.

Le cas où $\psi = 315^\circ$ n'est pas traité car il y a une impossibilité géométrique entre l'état initial et la géométrie du substrat (fig. 5.7). Le solide traverse la goutte à l'état initial. Dans la figure, on peut voir que le liquide est traversé par la texture et qu'il y a 5 plans d'étalement. Les conditions d'étalement sont trop différentes pour que l'on puisse comparer la simulation à 315° et les autres simulations.

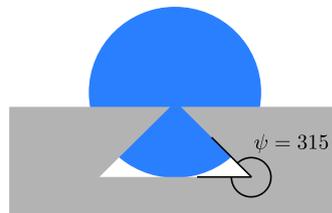


FIGURE 5.7 – Cas impossible pour $\psi = 315^\circ$.

Pour reprendre les mêmes principes que dans l'étude de la chimie, la position du changement de plan r est différente entre chaque essais. De plus, trois chimies de surfaces sont testées $\theta_{int} = 60^\circ, 90^\circ$ ou 120° .

Il est aussi possible de regarder le lien entre angle intrinsèque de la surface et angle d'inclinaison du plan.

Pour l'étude des textures continues, les surfaces sont courbées avec un rayon de courbure nommé R . Les cas concaves et convexes sont testés pour différentes valeurs de R et différents angles intrinsèques (fig. 5.8). La démarche est la même que pour l'étude des variations brusques.

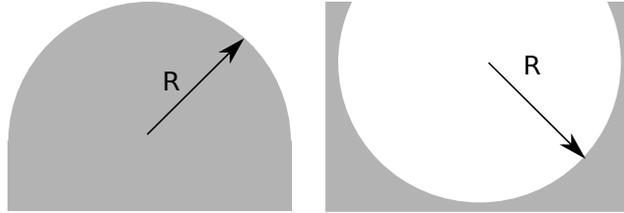


FIGURE 5.8 – Substrats pour l'étude topographique continue.

Etats initiaux

Pour l'étude de la topographie, seulement l'avancée est étudiée. Comme pour l'étude chimique à l'avancée, on va reproduire un essai de la goutte sessile numériquement. La goutte est placée tangente à la surface et légèrement enfoncée sans vitesse initiale. Les simulations se font dans un système 2D de $500 lu$ de côté. Le liquide a un volume de $30\,000 lu^2$. L'état initial est présenté figure 5.9.

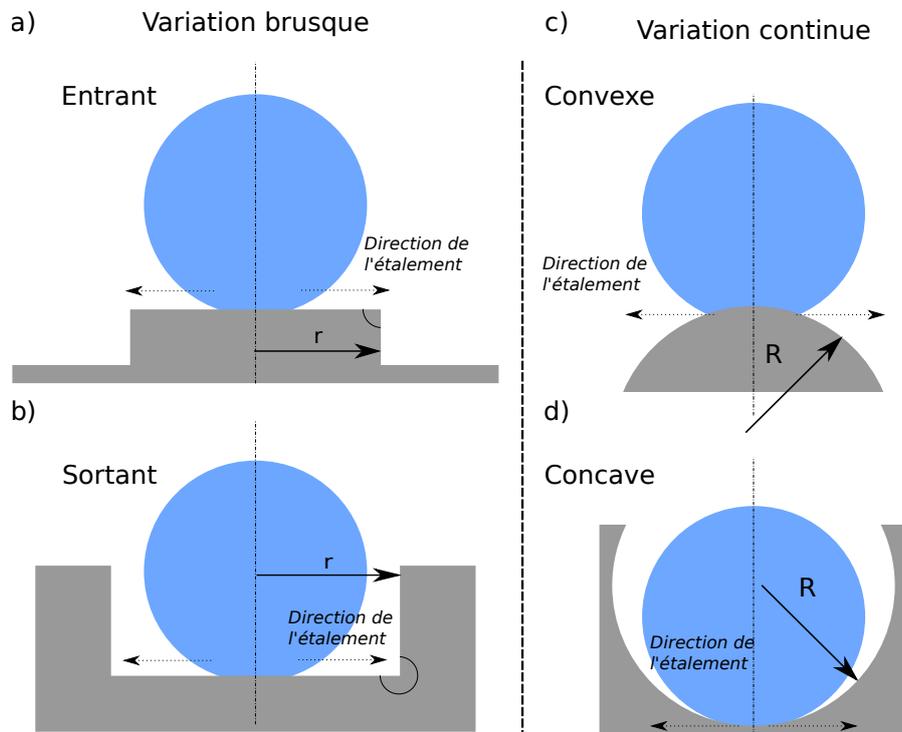


FIGURE 5.9 – Configurations initiales pour l'étude statique de l'effet de la texturation topographique brusque et continue.

5.1.4 Données caractéristiques

En plus des configurations initiales et de la construction des surfaces, il est intéressant de regarder le comportement d'un liquide sur les différents matériaux qui sont utilisés pour les simulations. En effet, avec les matériaux purs, il est possible d'observer le comportement à l'avancée et à la reculée de la goutte sans aucun effet de texturation. Ces simulations se font dans les mêmes conditions que les simulations avec substrats texturés, c'est à dire un lattice carré de $500 lu$ de côté et un volume de fluide de $30\,000 lu^2$.

Les simulations montrent un état d'équilibre identique à l'avancée et à la reculée (fig. 5.10).

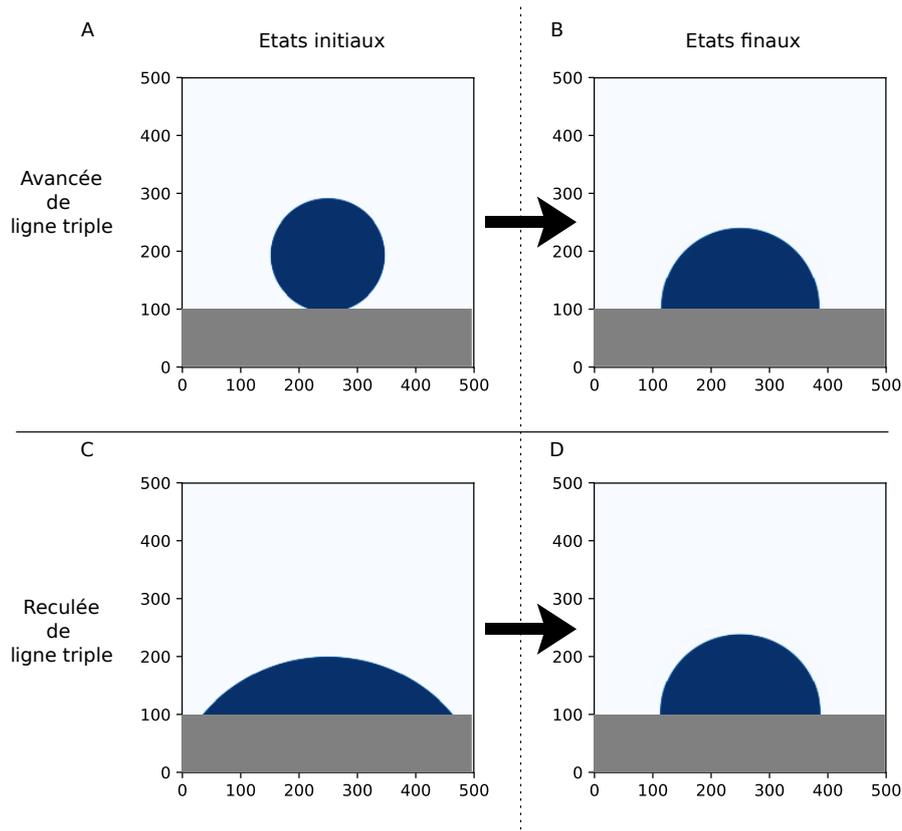


FIGURE 5.10 – États initiaux (A, C) et finaux (B, D) pour la simulation à l'avancée et reculée de ligne triple. États finaux B et D identiques.

Ensuite, on mesure des grandeurs caractéristiques de l'état final pour chaque substrat (fig. 5.11). Les paramètres caractéristiques sont les angles finaux θ_e , respectivement appelés θ_{Hi} sur le substrat hydrophile, θ_{Ho} sur le substrat hydrophobe et θ_N sur le substrat neutre. On note aussi les rayons mouillés r_w , c'est à dire le rayon de l'aire de contact liquide-solide, r_{Hi} , r_{Ho} et r_N .

Ces grandeurs sont présentées dans le tableau 5.1.

Simulations de référence	Hydrophile	Neutre	Hydrophobe
θ_e	$\theta_{Hi} = 60^\circ$	$\theta_N = 90^\circ$	$\theta_{Ho} = 120^\circ$
r_w (lu)	$r_{Hi} = 196lu$	$r_N = 141lu$	$r_{Ho} = 97lu$

TABLE 5.1 – Table des valeurs de référence déterminées par simulation

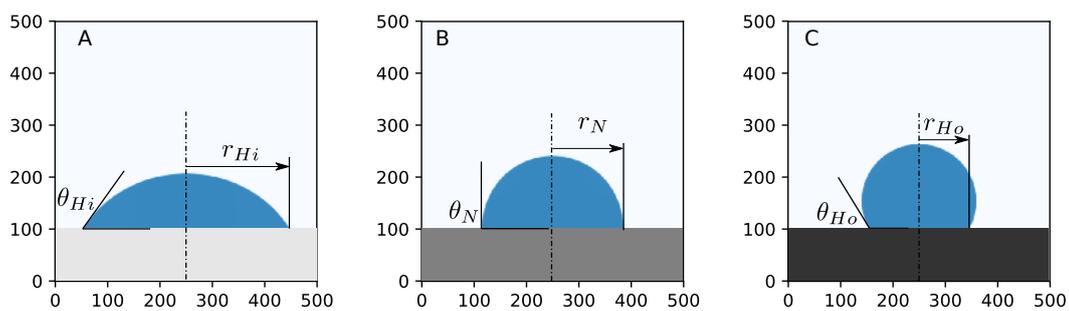


FIGURE 5.11 – Simulations de référence A) substrat hydrophile, B) substrat neutre et C) substrat hydrophobe.

5.2 Résultats pour l'étude de la texturation chimique

L'étude de l'effet de la texturation chimique sur l'état statique d'une goutte va se faire en deux étapes. Pour commencer, on va réaliser une étude numérique avec la méthode Lattice Boltzmann et ensuite on fera une étude théorique avec la force de déplacement de ligne triple.

5.2.1 Résultats de l'étude numérique

Pour rappel, deux états initiaux et deux transitions vont être étudiés. Les états initiaux correspondants sont présentés dans la figure 5.5 et les textures sont proposées dans la figure 5.3.

Transition $Hi \rightarrow Ho$

Les différents angles de contact à l'équilibre et les différents rayons mouillés sont mesurés pour chaque taille de rayon du domaine central r . Pour les simulations avec une ligne triple qui avance, les résultats sont affichés dans la figure 5.12. Pour le cas d'une ligne triple qui recule, les résultats sont présentés dans la figure 5.13. Les grandeurs caractéristiques des surfaces de référence sont aussi affichées dans ces deux figures.

Pour commencer, on va s'intéresser aux simulations pour une ligne triple qui avance (Fig. 5.12).

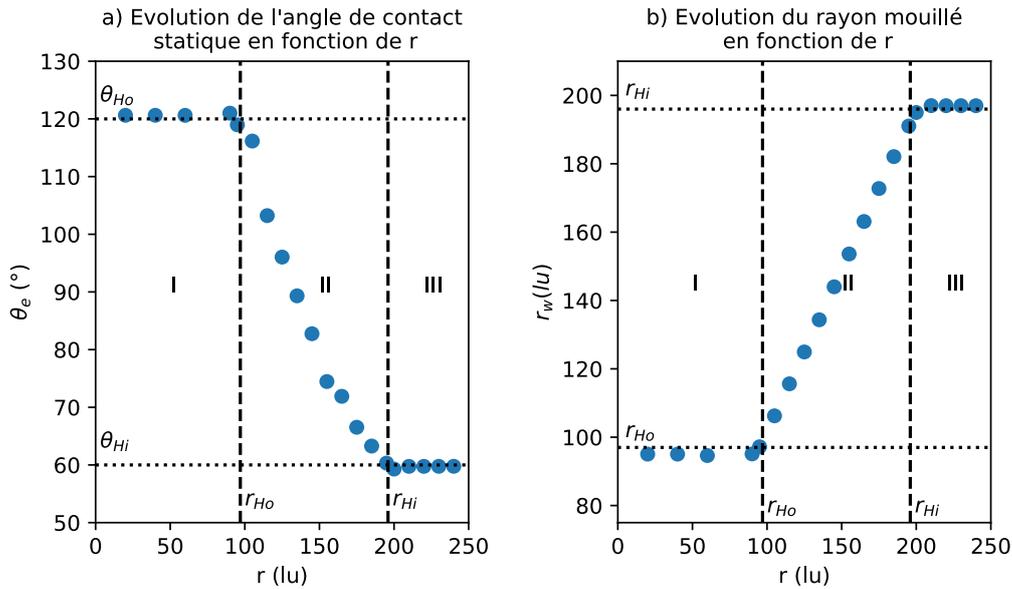


FIGURE 5.12 – Angle d'équilibre et rayon mouillé en fonction de la position de la frontière r pour une transition $Hi \rightarrow Ho$ avec une ligne triple qui avance : a) angle statique et b) rayon mouillé.

Trois comportements distincts sont observables ce qui donne trois domaines de variation des courbes. Deux domaines sont constants et le domaine central fait la transition entre les deux autres domaines. On remarque que le domaine central est borné par les valeurs de référence. Dans le domaine I, le rayon de la goutte et son angle de contact sont constants. Puis pour une longueur de domaine central $r > r_{Ho}$ on observe une diminution de l'angle de contact et en même temps une augmentation du rayon mouillé, c'est le domaine II. Enfin, quand le rayon atteint la valeur r_{Hi} , ils redevient constant pour tout $r > r_{Hi}$ et l'angle de contact à l'équilibre vaut l'angle de contact sur le matériau hydrophile θ_{Hi} . Dans tout le domaine II, on observe que le rayon mouillé r_w suit la position de la frontière r .

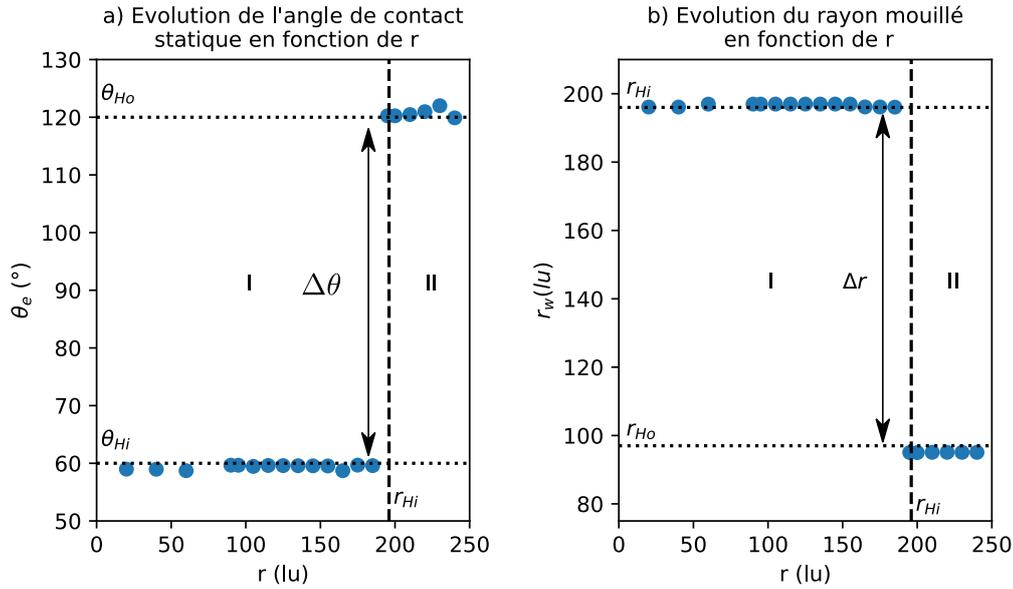


FIGURE 5.13 – Angle d'équilibre et rayon mouillé en fonction de la position de la frontière r pour une transition $Hi \rightarrow Ho$ avec une ligne triple qui recule : a) angle statique et b) rayon mouillé.

Dans le cas de la reculée de la ligne triple, le comportement du liquide est très différent de l'avancée. En effet, on observe seulement deux domaines d'évolution. Ces deux domaines sont constants. Il n'y a pas de domaine intermédiaire qui fait la transition comme pour l'avancée. Pour les grandeurs caractéristiques, là aussi on observe une différence, c'est r_{Hi} , le rayon de la goutte à l'équilibre sur la surface hydrophile, qui marque le changement de domaine. Dans le domaine I, l'angle de contact θ_e et le rayon mouillé r_w sont constants et valent respectivement θ_{Hi} et r_{Hi} puis, lorsque $r > r_{Hi}$, θ_e et r_w valent θ_{Ho} et r_{Ho} . La transition brusque entre les deux domaines entraîne une variation du rayon mouillé qui vaut $\Delta r = r_{Hi} - r_{Ho}$. Et une variation de l'angle de contact qui vaut $\Delta\theta = \theta_{Hi} - \theta_{Ho}$.

On observe deux courbes à l'allure très différentes mais qui sont toutes les deux dépendantes des caractéristiques des surfaces hydrophiles et hydrophobes.

Il est clairement visible dans la figure 5.12 (cas d'une ligne triple qui avance et une transition $Hi \rightarrow Ho$) que dans le domaine II, le rayon mouillé suit l'évolution de la frontière entre les deux matériaux. On observe aussi une variation de l'angle de contact mais cette variation est une conséquence de la position de la ligne triple. Ce phénomène où la ligne triple suit la texture est appelé collage de ligne triple. Le collage se produit pour une frontière $r \in [r_{Ho}; r_{Hi}]$. Hors de ce domaine, la goutte a toujours le même état d'équilibre, soit l'équilibre sur le domaine hydrophobe qui correspond au domaine I où l'angle de contact et le rayon mouillé valent respectivement θ_{Ho} et r_{Ho} , soit sur le domaine hydrophile, la goutte se comporte comme si le substrat était uniquement composé du matériau hydrophile et son angle de contact vaut θ_{Hi} et son rayon mouillé vaut r_{Hi} .

On peut écrire la variation du rayon mouillé r_w et de l'angle à l'équilibre θ_e en fonction de r et des rayons caractéristiques r_{Hi} et r_{Ho} .

$$r_w = \begin{cases} r_{Ho} & , \forall r < r_{Ho} \\ r & , \forall r \in [r_{Ho}; r_{Hi}] \\ r_{Hi} & , \forall r > r_{Hi} \end{cases}, \quad \theta_e = \begin{cases} \theta_{Ho} & , \forall r < r_{Ho} \\ [\theta_{Ho}; \theta_{Hi}] & , \forall r \in [r_{Ho}; r_{Hi}] \\ \theta_{Hi} & , \forall r > r_{Hi} \end{cases} \quad (5.1)$$

Pour le cas de la reculée (fig. 5.13), le phénomène ne s'apparente pas à des phénomènes décrits dans la littérature, on se rapproche du phénomène de "démouillage" où la goutte "saute" sur les textures. Ici, le phénomène de saut est induit par le changement brusque d'état d'équilibre entre les deux matériaux. Il est intéressant de noter que dans le cas de la reculée, c'est le rayon r_{Hi} qui marque la transition, le rayon r_{Ho} n'a aucun effet. Cela s'explique car la ligne triple est initialement sur le matériau hydrophile et en reculant elle sort des conditions d'équilibre du matériau hydrophile pour satisfaire les conditions d'équilibre sur le matériau hydrophobe. C'est le matériau initial qui définit la valeur seuil pour laquelle le changement d'état opère. Il est aussi intéressant de constater que la valeur du saut entre les deux états d'équilibre Δr dépend de la différence entre les rayons mouillés caractéristiques des deux matériaux $\Delta r = r_{Hi} - r_{Ho}$. Dans ce cas, on peut aussi écrire une équation qui décrit le comportement du fluide à partir des simulations :

$$r_w = \begin{cases} r_{Hi}, \forall r < r_{Hi} \\ r_{Ho}, \forall r \geq r_{Hi} \end{cases}, \quad \theta_e = \begin{cases} \theta_{Hi}, \forall r < r_{Hi} \\ \theta_{Ho}, \forall r \geq r_{Hi} \end{cases} \quad (5.2)$$

Transition $Ho \rightarrow Hi$

Les différents angles de contact à l'équilibre et les différents rayons mouillés sont mesurés pour chaque taille de rayon du domaine central r . Pour les simulations avec une ligne triple qui avance, les résultats sont affichés dans la figure 5.14. Pour le cas d'une ligne triple qui recule, les résultats sont présentés dans la figure 5.15. Les grandeurs caractéristiques des surfaces de référence sont aussi affichées dans ces deux figures.

Pour commencer, on va s'intéresser aux simulations pour une ligne triple qui avance figure 5.14.

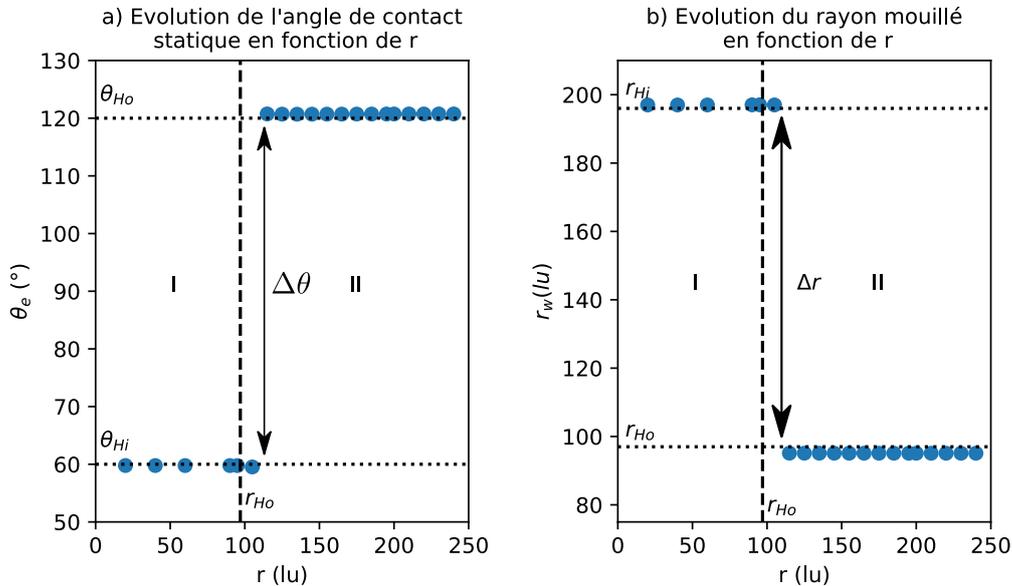


FIGURE 5.14 – Angle d'équilibre et rayon mouillé en fonction de la position de la frontière r pour une transition $Ho \rightarrow Hi$ avec une ligne triple qui avance: a) angle statique et b) rayon mouillé.

On observe deux états d'équilibre avec une valeur seuil pour $r = r_{Ho}$. Les deux domaines d'équilibre sont, pour le domaine I le cas où la goutte a pour rayon $r_w = r_{Hi}$ et pour angle

d'équilibre $\theta_e = \theta_{Hi}$. Le second domaine quant à lui correspond à un angle de θ_{Ho} et un rayon mouillé de r_{Ho} . Ces deux états d'équilibre correspondent aux deux états d'équilibre sur surface de référence pour le matériau hydrophile (domaine I) et le matériau hydrophobe (domaine II).

On remarque aussi un léger décalage entre la valeur seuil r_{Ho} et la réelle valeur seuil pour laquelle il y a un changement de domaine d'étalement.

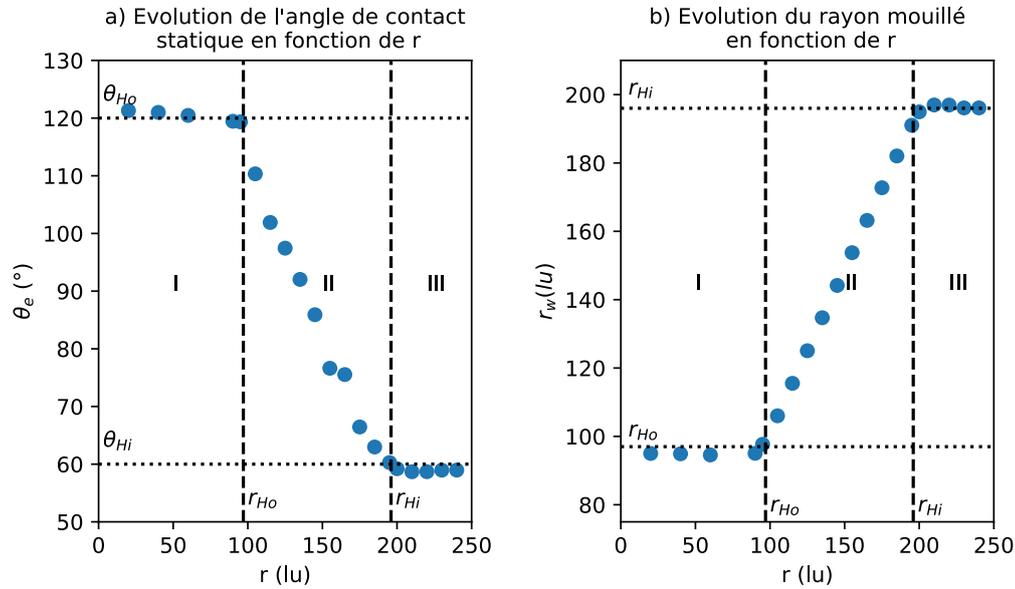


FIGURE 5.15 – Angle d'équilibre et rayon mouillé en fonction de la position de la frontière r pour une transition $Ho \rightarrow Hi$ avec une ligne triple qui recule: a) angle statique et b) rayon mouillé.

Pour l'étude à la reculée (fig. 5.15), on observe trois domaines distincts. Le premier, domaine I, est constant avec un angle de θ_{Ho} et un rayon mouillé de r_{Ho} . Dès que la frontière dépasse r_{Ho} , il y a une transition, c'est le domaine II. Cette transition prend fin pour un r supérieur à r_{Hi} , dans le domaine III. Il y a un état stable avec $r_w = r_{Hi}$ et $\theta_e = \theta_{Hi}$. Dans ce cas aussi, les domaines I et III correspondent respectivement à l'état d'équilibre de référence sur la surface hydrophobe et hydrophile.

Ces résultats montrent encore un phénomène de relâche qui cette fois-ci s'applique à une ligne triple qui avance. On peut écrire l'équation suivante :

$$r_w = \begin{cases} r_{Hi}, \forall r \leq r_{Ho} \\ r_{Ho}, \forall r > r_{Ho} \end{cases}, \quad \theta_e = \begin{cases} \theta_{Hi}, \forall r \leq r_{Ho} \\ \theta_{Ho}, \forall r > r_{Ho} \end{cases} \quad (5.3)$$

La reculée quant à elle est identique à l'avancée du cas de la transition $Hi \rightarrow Ho$. On observe trois domaines, deux domaines stables avec un troisième domaine qui fait la transition entre les deux autres domaines. Dans le domaine de transition, la ligne triple est collée à la frontière entre les deux matériaux. On peut alors écrire :

$$r_w = \begin{cases} r_{Ho} & , \forall r < r_{Ho} \\ r & , \forall r \in [r_{Ho}; r_{Hi}] \\ r_{Hi} & , \forall r > r_{Hi} \end{cases}, \quad \theta_e = \begin{cases} \theta_{Ho} & , \forall r < r_{Ho} \\ [\theta_{Ho}; \theta_{Hi}] & , \forall r \in [r_{Ho}; r_{Hi}] \\ \theta_{Hi} & , \forall r > r_{Hi} \end{cases} \quad (5.4)$$

Avec ces études de l'influence de la texturation chimique sur le mouillage statique, nous

avons observé deux phénomènes : le collage et la relâche. Ces deux phénomènes sont en opposition, le collage bloque la ligne triple entre deux textures alors que la relâche chasse la ligne triple hors de la frontière entre les textures. Nous allons chercher à mieux caractériser leur fonctionnement et leurs effets sur le mouillage dans les prochaines études.

5.2.2 Résultats de l'étude théorique de la force de déplacement de ligne triple

Une étude théorique est proposée afin d'étudier l'effet de la texturation chimique sur la force de déplacement de ligne triple [70]. L'expression de la force de déplacement de la ligne triple est la suivante :

$$F_d = \gamma(\cos \theta_e - \cos \theta_d) \quad (5.5)$$

Avec θ_e l'angle à l'équilibre, θ_d l'angle de contact dynamique et γ la tension de surface du liquide.

On a remarqué que les phénomènes observés dans l'étude numérique sont regroupables en deux types : collage et relâche. Pour l'étude théorique de la force de déplacement, on choisit d'étudier l'avancée avec une transition $Hi \rightarrow Ho$ pour avoir du collage et l'avancée avec une transition $Ho \rightarrow Hi$ pour avoir la relâche.

Etude de la force de déplacement de ligne triple pour l'avancée et une transition $Hi \rightarrow Ho$

L'évolution de la force de déplacement de la ligne triple pendant l'étalement est présentée dans la figure 5.16. Pour reproduire le même schéma d'étalement que dans les simulations de l'étude numérique, on commence par avoir un angle de 180° qui décroît jusqu'à l'équilibre. Les trois cas observés sont affichés. Pour commencer, en A, le cas où $r > r_{Hi}$ puis en B le cas où $r < r_{Ho}$ et enfin en C le cas du collage.

On remarque bien que dans le cas A, si il n'y a aucun changement de substrat, la courbe suit la courbe du cas où $\theta_e = \theta_{Hi} = 60^\circ$. Par contre, lorsqu'un changement de matériau est introduit en $\theta_d = 160^\circ$ pour le cas B, on obtient un équilibre pour $\theta_e = \theta_{Ho} = 120^\circ$. Pour le cas C, la frontière apparaît pour $\theta_d = 90^\circ$, dans ce cas, on voit que la force chute jusqu'à devenir nulle et laisse l'angle d'équilibre égale à l'angle dynamique au moment du contact avec la frontière.

On observe une chute dans la force de déplacement qui est liée à la modification de la surface induite par le changement de matériau. Cette perte de force est liée à l'écart d'angle de contact $\Delta\theta = \theta_{Hi} - \theta_{Ho}$ comme on peut le voir dans le cas B.

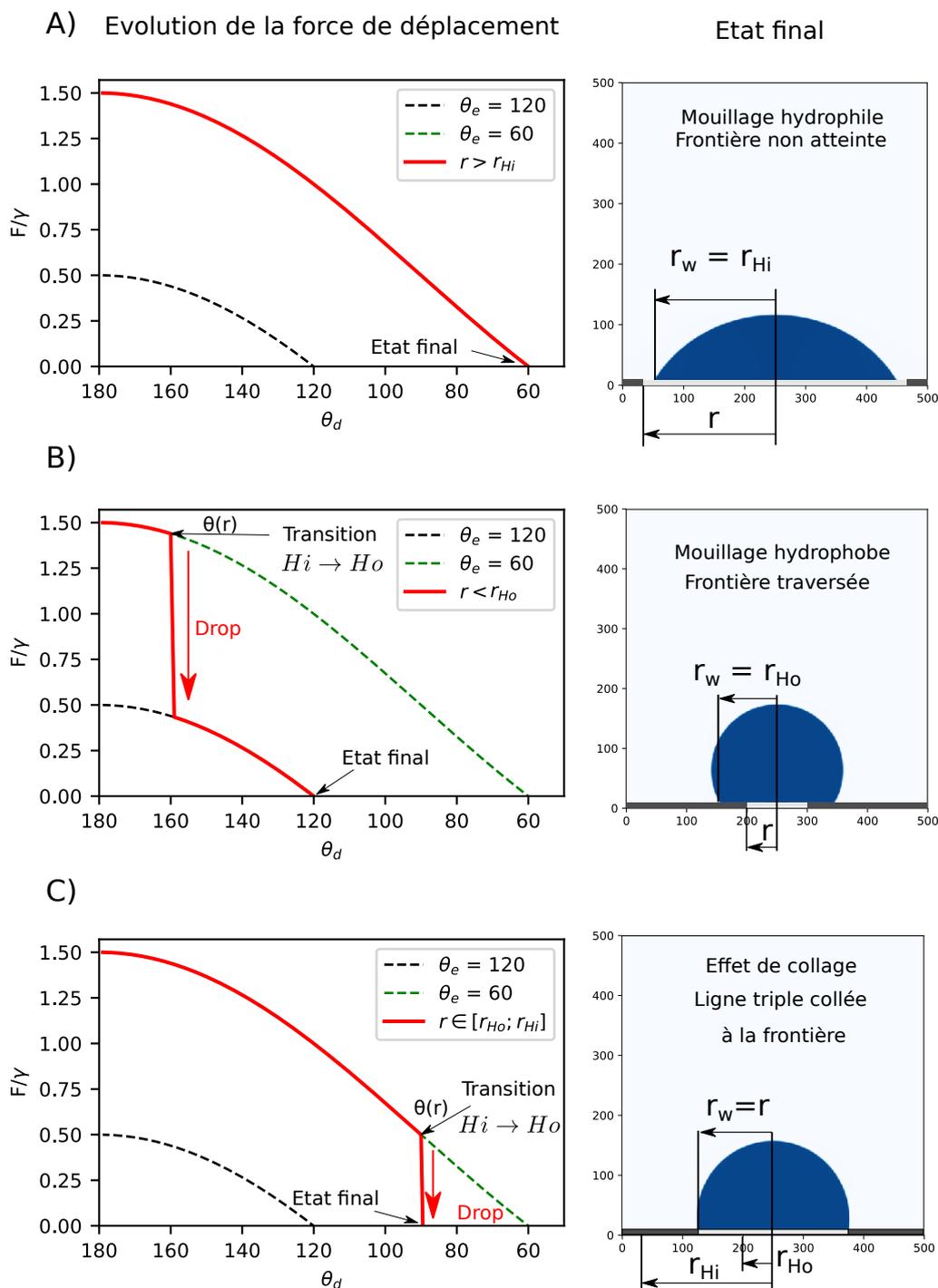


FIGURE 5.16 – Évolution de la force de déplacement de ligne triple avec un phénomène de collage induit par une texturation chimique.

Étude de la force de déplacement de ligne triple pour l'avancée et une transition $H_o \rightarrow H_i$

Dans le cas d'une ligne triple qui avance, c'est à dire que θ_d vaut 180° puis décroît jusqu'à l'équilibre, la force de déplacement de ligne triple est tracée dans la figure 5.17.

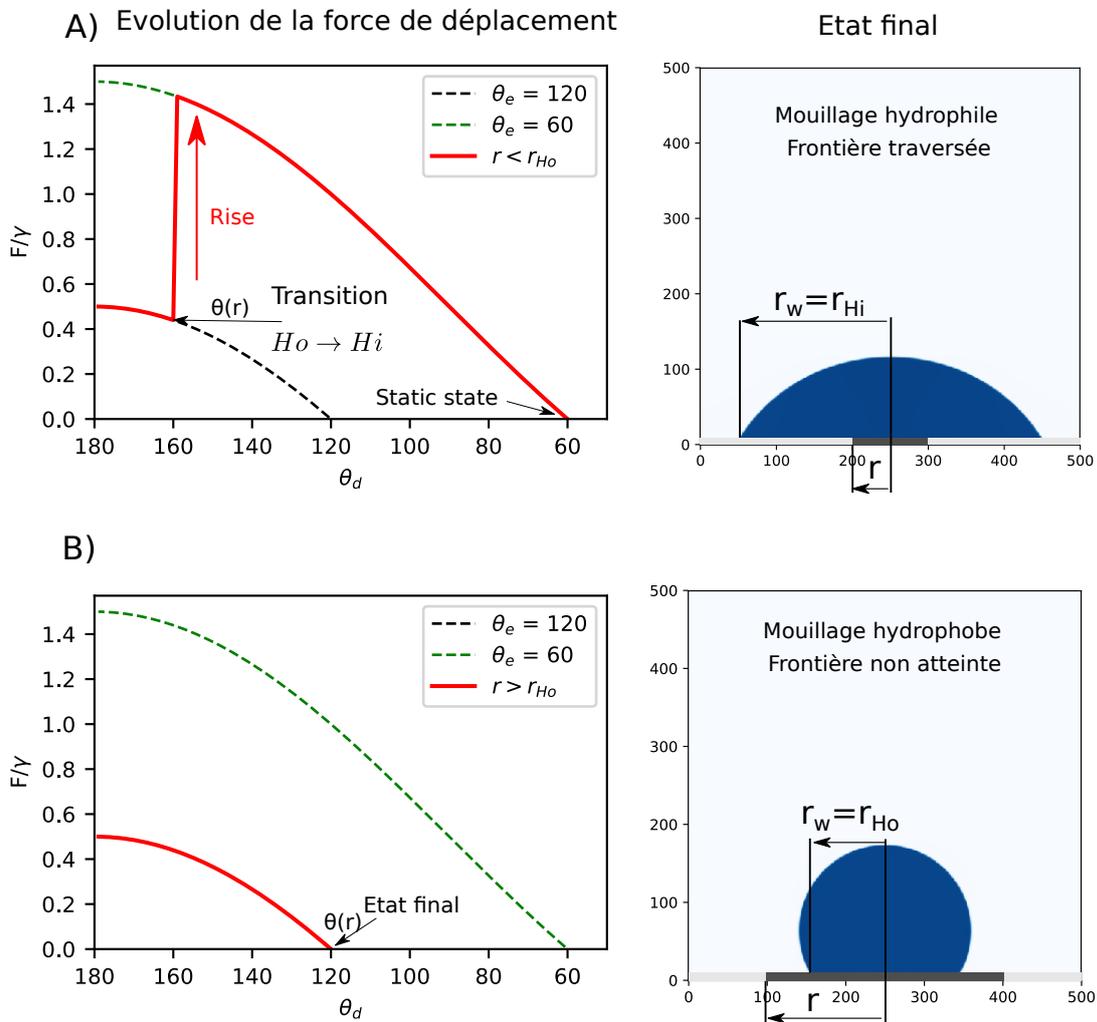


FIGURE 5.17 – Evolution de la force de déplacement de ligne triple avec un phénomène de relâche induit par une texturation chimique.

On constate que dans la figure 5.17, il n'y a que deux configurations. Soit le changement de substrat a lieu avant que la force s'annule, le cas A. Soit il n'y a pas de changement de matériau, le cas B.

On observe que le changement de chimie de surface, θ_{Ho} vers θ_{Hi} , entraîne une augmentation de la force d'avancée jusqu'à atteindre la force pour $\theta_e = \theta_{Hi}$. Cette fois-ci on a $\Delta F \propto -\Delta\theta$ avec $\Delta\theta$ la différence entre les angles θ_{Hi} et θ_{Ho} . Cette augmentation de la force se traduit par une augmentation du domaine d'étalement.

Interprétation du phénomène de collage et du phénomène de relâche par l'étude de la force de déplacement de ligne triple pour des texturations chimiques

L'étude de la force de déplacement a mis en évidence des effets similaires à ceux observés par l'étude par la simulation numérique. Les effets de collage et relâche sont reliés à une notion de variation de force liée à la variation d'angles intrinsèques entre les deux domaines.

On propose ainsi une autre écriture de la force de déplacement de ligne triple en prenant en compte cette notion de variation d'angle intrinsèque :

$$F_d = \gamma[\cos(\theta_{int,i} + \Delta\theta_{chimie}) - \cos\theta_d] \quad (5.6)$$

$$\Delta\theta_{chimie} = \theta_{int,i+1} - \theta_{int,i} \quad (5.7)$$

Avec $\Delta\theta_{chimie}$ la différence d'angle intrinsèque entre le domaine juste avant la ligne triple (i) et le domaine juste après la ligne triple ($i+1$) et $\theta_{int,i}$ l'angle de contact intrinsèque de la surface avant la ligne triple. Le schéma 5.18 explique la configuration proposée.

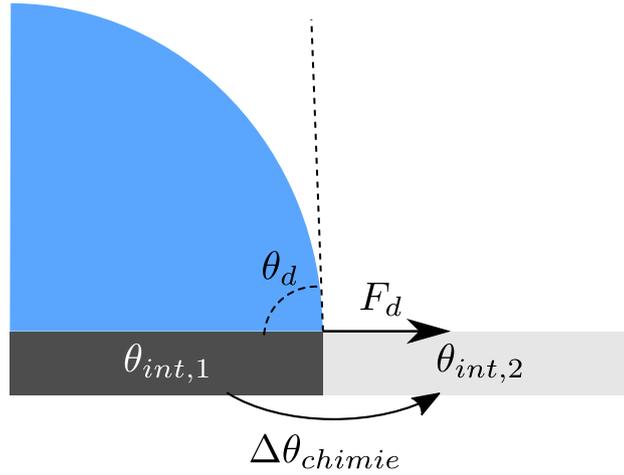


FIGURE 5.18 – Représentation du système pour calculer la force d'avancée de ligne triple en prenant en compte l'hétérogénéité chimique de la surface.

Lorsque $\Delta\theta_{chimie}$ est négatif et que la ligne triple avance, il y a une transition $Hi \rightarrow Ho$. La force F_d augmente car $\cos(\theta_{int,i} + \Delta\theta_{chimie}) > \cos\theta_{int,i}$. Cette augmentation de la force de déplacement contraint la ligne triple et génère un phénomène de collage de la ligne triple. Lorsque $\Delta\theta_{chimie}$ est positif et que la ligne triple avance, il y a une transition $Ho \rightarrow Hi$. La force F_d diminue car $\cos(\theta_{int,i} + \Delta\theta_{chimie}) < \cos\theta_{int,i}$. Cette diminution de la force de déplacement repousse la ligne triple et génère un phénomène de relâche de la ligne triple.

5.2.3 Conclusion

Cette étude du comportement d'une goutte sur une surface texturée chimiquement a permis de caractériser deux comportements de goutte en fonction de la traversée de la texturation. Ces comportements ont été caractérisés en fonction des états d'équilibre caractéristiques des gouttes sur des surfaces hydrophile et hydrophobe planes et homogènes chimiquement (fig. 5.19).

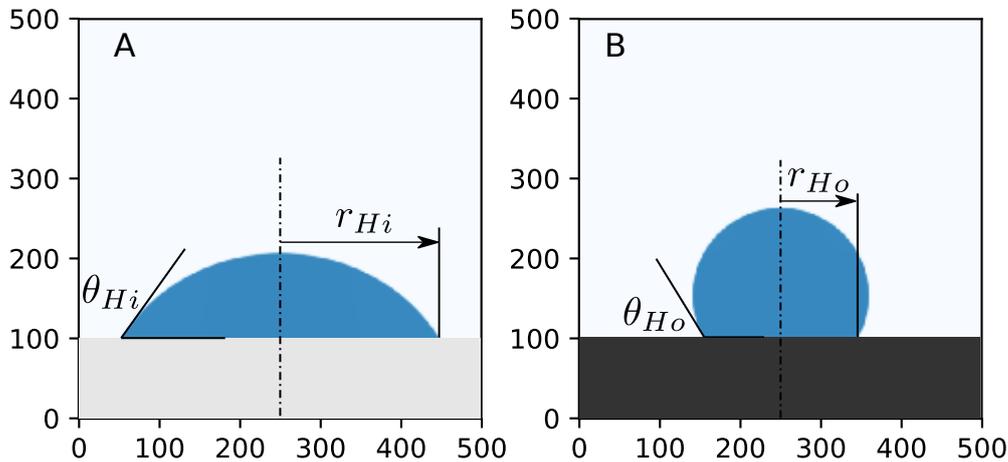


FIGURE 5.19 – Représentation des états d'équilibre pour des surfaces hydrophiles et hydrophobes planes et homogènes.

Dans le premier cas la goutte va avoir sa ligne triple bloquée à la texture et avoir un angle de contact compris entre deux extremums. Ce cas est appelé collage. En effet, la ligne triple se retrouve collée à la texture et tant que la texture reste dans un certain domaine, la ligne triple restera collée à la texture. Pour que ce phénomène soit visible, il faut tout d'abord que la ligne triple avance et traverse une frontière $Hi \rightarrow Ho$ ou que la ligne triple recule et traverse une frontière $Ho \rightarrow Hi$. Ensuite, la position de la frontière est importante, elle doit être comprise entre les deux rayons caractéristiques des chimies de surface. On a appelé r_{Hi} le rayon de l'aire liquide-solide de la goutte à l'équilibre sur la surface la plus hydrophile au niveau de la texture. r_{Ho} correspond au rayon de l'aire de contact liquide-solide sur la surface la plus hydrophobe. Tant que la texture se situe entre r_{Hi} et r_{Ho} , la goutte colle à la texture et son angle de contact peut varier de θ_{Hi} à θ_{Ho} , les angles de contact des surface hydrophiles et hydrophobes. Une représentation du collage et ses conditions est proposé figure 5.20.

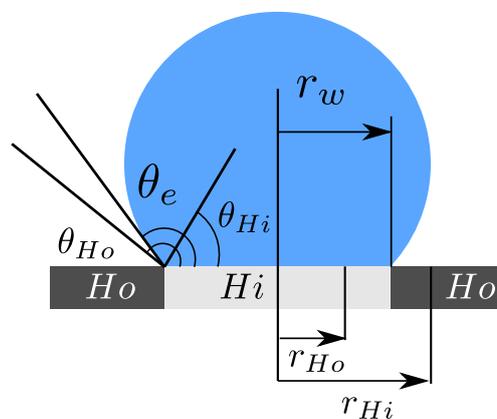


FIGURE 5.20 – Représentation de l'effet de collage et ses conditions sur une surface texturée chimiquement.

Dans le second cas la goutte n'a que deux états possibles, les deux extrémums. Soit la goutte est étalée au maximum et a un angle de contact minimal, soit la goutte est étalée au minimum et a son angle un contact maximal. Ces deux états correspondent à l'état d'équilibre sur la surface hydrophile et hydrophobe. Il est donc plus compliqué d'observer le phénomène de relâche avec une étude statique car la ligne triple n'est pas en contact avec la texture à l'équilibre et l'angle de contact a les mêmes valeurs que sur les surfaces sans texture. On a tout de même observé que le phénomène de relâche apparaissait pour une ligne triple qui avance et une transition $Ho \rightarrow Hi$ ou une ligne triple que recule et une transition $Hi \rightarrow Ho$. Dans les deux cas, c'est au moment où la ligne triple dépasse le rayon caractéristique du domaine initial (r_{Ho} dans le premier cas et r_{Hi} dans le second cas) que le phénomène de relâche se produit. La valeur seuil de transition dépend de la chimie initiale de la goutte. Une représentation de la relâche et ses conditions est proposé figure 5.21.

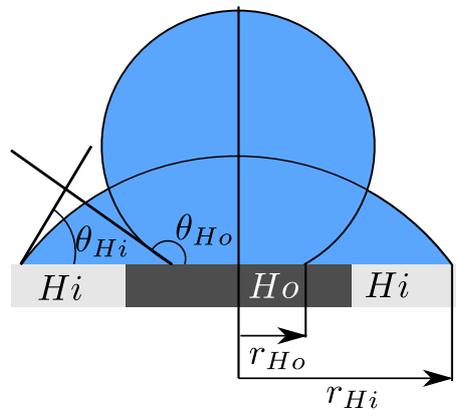


FIGURE 5.21 – Représentation de l'effet de relâche et ses conditions.

En regroupant les résultats des études précédentes, on obtient les tableaux 5.2 et 5.3.

Transition $Hi \rightarrow Ho$	Avance	Recule
Phénomène	Collage	Relâche
Condition caractéristique	$r \in [r_{Ho}; r_{Hi}]$	$r = r_{Hi}$
Comportement de la ligne triple	Collée à la frontière	Saute d'un état d'équilibre à l'autre
Signe de $\Delta\theta_{chimie}$	Positif	Négatif
Evolution de la force de déplacement de la ligne triple	Diminution	Augmentation

 TABLE 5.2 – Résultats de la transition $Hi \rightarrow Ho$

Nous avons mis en évidence deux comportements spécifiques que peut avoir la ligne triple au moment de traverser la frontière entre deux domaines de chimie différente pour une frontière placée à une distance critique :

- Soit la ligne triple reste collée à la frontière dans un état intermédiaire, la goutte n'est ni en équilibre sur le domaine intérieur, ni en équilibre sur le domaine extérieur. C'est le phénomène de collage. De plus, cet état est métastable car la ligne triple est repoussée par chacun des domaines.
- Soit la ligne triple traverse la frontière pour s'étaler hors de son domaine initiale, c'est le phénomène de relâche.

Transition $Ho \rightarrow Hi$	Avance	Reculé
Phénomène	Relâche	Collage
Condition caractéristique	$r \in [r_{Ho}; r_{Hi}]$	$r = r_{Hi}$
Comportement de la ligne triple	Collée à la frontière	Saute d'un état d'équilibre à l'autre
Signe de $\Delta\theta_{chimie}$	Négatif	Positif
Evolution de la force de déplacement de la ligne triple	Augmentation de la force	Diminution de la force

TABLE 5.3 – Résultats de la transition $Ho \rightarrow Hi$

Une nouvelle écriture de la force de déplacement de ligne triple est proposée :

$$F_d = \gamma[\cos(\theta_{int,i} + \Delta\theta_{chimie}) - \cos\theta_d] \quad (5.8)$$

Cette force s'exprime en fonction de l'angle intrinsèque de la surface avant la ligne triple $\theta_{int,i}$ et en fonction de la variation d'angle de contact intrinsèque des chimies de surface à la texture $\Delta\theta_{chimie}$. On remarque que c'est le terme d'équilibre de l'équation qui est impacté par la texturation chimique.

5.3 Résultats pour l'étude de la texturation topographique

L'étude va se faire en deux temps, pour commencer une étude numérique par la méthode LBM et ensuite une étude théorique avec la force de déplacement de la ligne triple.

5.3.1 Résultats de l'étude numérique

Les configurations initiales des simulations pour l'étude de l'influence de la topographie sont présentées dans la figure 5.9.

Substrat à variation topographique brute

Pour rappel, les surfaces texturées topographiquement avec des variations topographiques brusques sont schématisées dans la figure 5.6. L'étude va se faire en deux temps. Dans un premier temps les texturations entrantes, c'est-à-dire que l'angle ψ est inférieur à 180° , vont être étudiées. Dans un second ce sont les textures sortantes, ψ supérieur à 180° , qui seront étudiées.

– Surfaces entrantes

Des simulations ont été réalisées avec les substrats entrants (fig. 5.22).

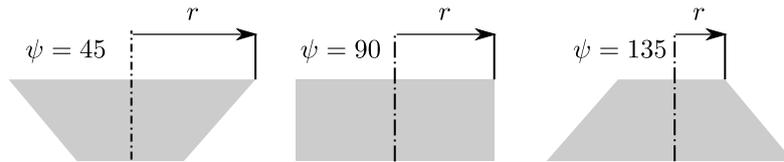


FIGURE 5.22 – Schéma des surfaces entrantes simulées

Les résultats de ces simulations sont affichés dans la figure 5.23 où les angles de contact et les rayons mouillés pour les trois chimies de surface sont affichés en fonction de la position du changement de plan r .

Le cas qui nous donne le plus d'informations est le substrat hydrophile, on va donc se focaliser sur l'étude des courbes de la figure 5.23 A et B qui sont retracées dans la figure 5.24

On observe des plateaux pour différentes valeurs de θ_e dans la figure 5.24. Il y a un premier plateau pour des r grands. Ce plateau correspond à la valeur d'angle de contact intrinsèque du matériau et cela indépendamment de la valeur de l'inclinaison du second plan, dans le cas du substrat hydrophile, $\theta_{Hi} = 60^\circ$. On observe un second plateau pour le cas où $\psi = 135^\circ$. De plus, il y a un domaine de transition entre ces deux plateaux. Pour les autres valeurs de ψ , on n'observe pas de plateaux pour des angles θ_e supérieurs à θ_{int} et pour les valeurs de r simulées. On constate néanmoins que les transitions apparaissent pour des valeurs de r inférieures aux rayons caractéristiques de chacune des surfaces présentées dans le tableau 5.1.

Pour l'étude de la variation du rayon mouillé (fig. 5.24 B), on constate que le rayon mouillé est constant pour des r grands. On peut relier cette observation à celle de l'étude de l'angle et on remarque que, comme dans la figure 5.25a, la ligne triple n'est pas encore en contact avec la texture. Il y a ensuite une diminution du rayon mouillé qui s'explique par le fait que la ligne triple reste collée à la texture comme montré dans la figure 5.25b. Enfin il y a d'autres variations de r_w , cela correspond au deuxième plateau de l'étude de l'angle. Ce cas correspond à la ligne triple qui a traversé la variation brusque de surface (Fig. 5.25c). On se place dans le cas où il y a le plus d'informations : $\theta_{int} = 60^\circ$ et $\psi = 135^\circ$. On

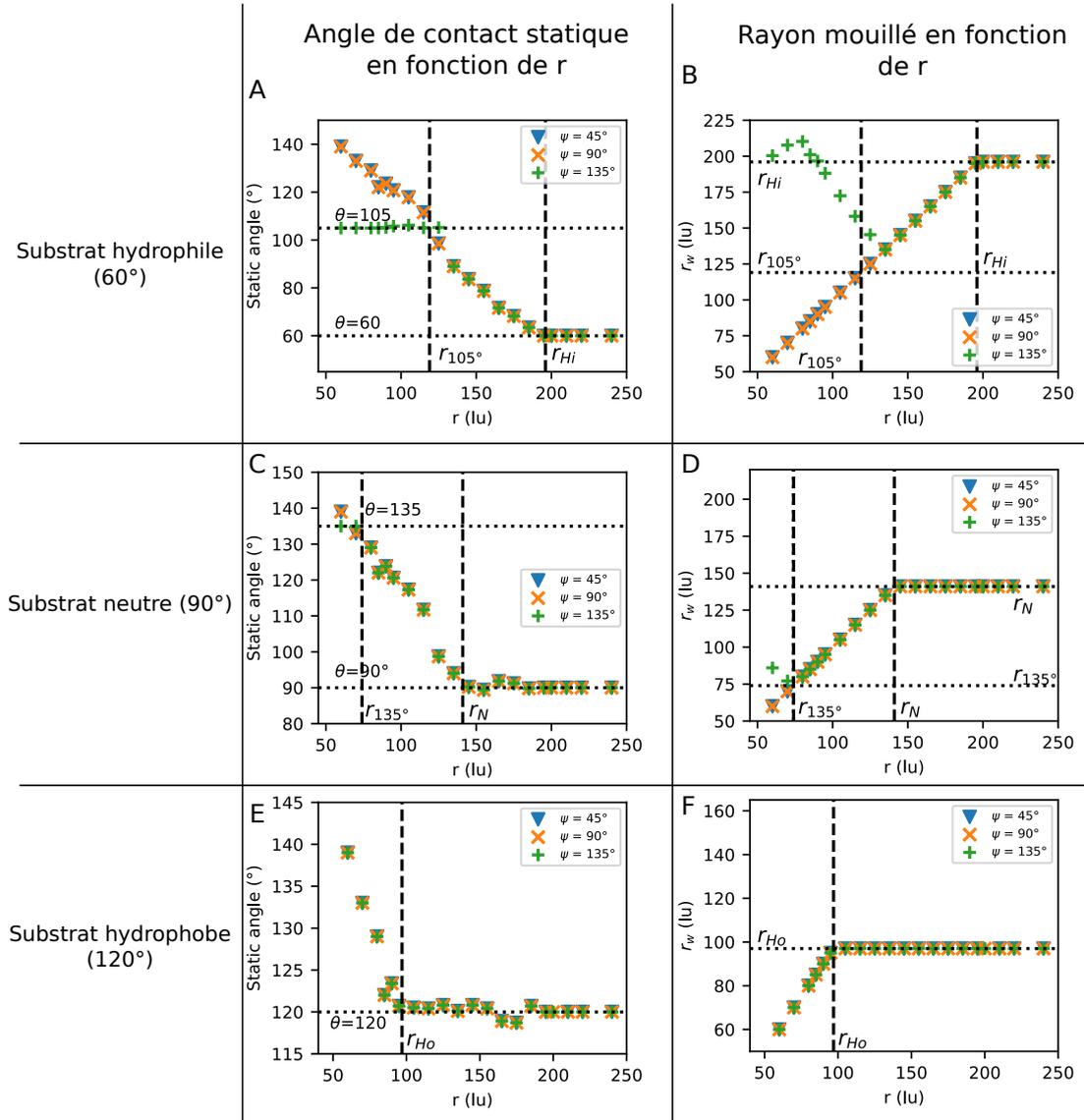


FIGURE 5.23 – Évolution de l'angle de contact statique et du rayon mouillé en fonction de la position du changement de plan r pour les substrats hydrophile, neutre et hydrophobe avec une texture entrante.

s'intéresse, pour commencer, à la valeur du second plateau. La valeur du plateau correspond à l'équation (5.9). On constate que la valeur du plateau dépend de l'angle de contact intrinsèque du substrat et de la valeur $\Delta\theta_{topo}$ qui correspond à l'angle d'ouverture du substrat.

$$\theta_e = \theta_{int} + (\pi - \psi) = \theta_{int} + \Delta\theta_{topo} \quad (5.9)$$

On définit l'écart d'angles tel que :

$$\Delta\theta_{topo} = \pi - \psi \quad (5.10)$$

Le second plateau correspond au décrochage de la ligne triple qui implique un étalement sur le plan incliné.

En 2004, Extrand a proposé une équation pour définir l'angle d'avancée sur une texture d'angle ϕ [53]. Les paramètres topographiques utilisés pour le calcul sont présentés dans la figure 5.26.

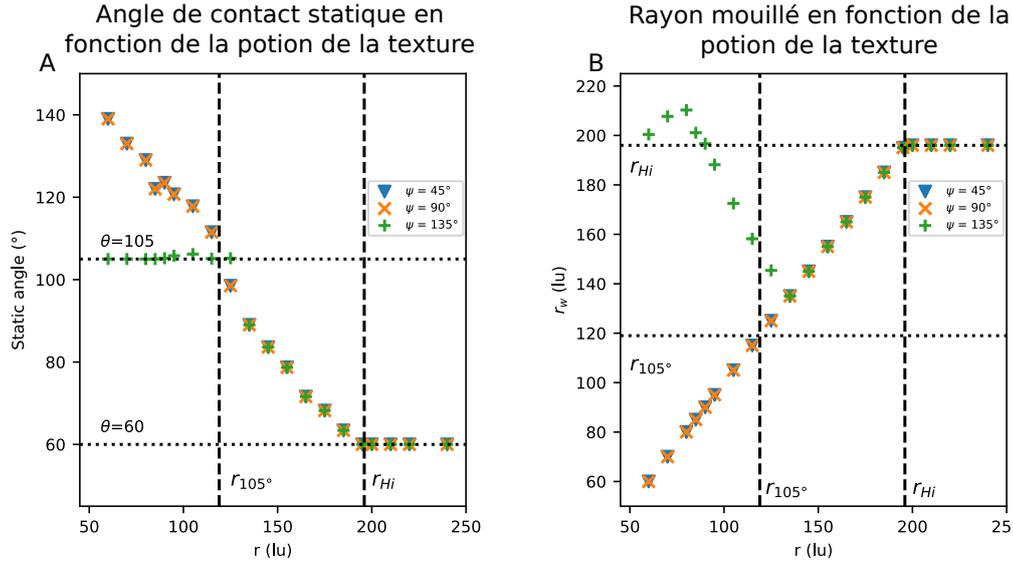


FIGURE 5.24 – Etude de l'angle statique et du rayon mouillé en fonction de la position de la texture r pour un substrat hydrophile et des textures sortantes.

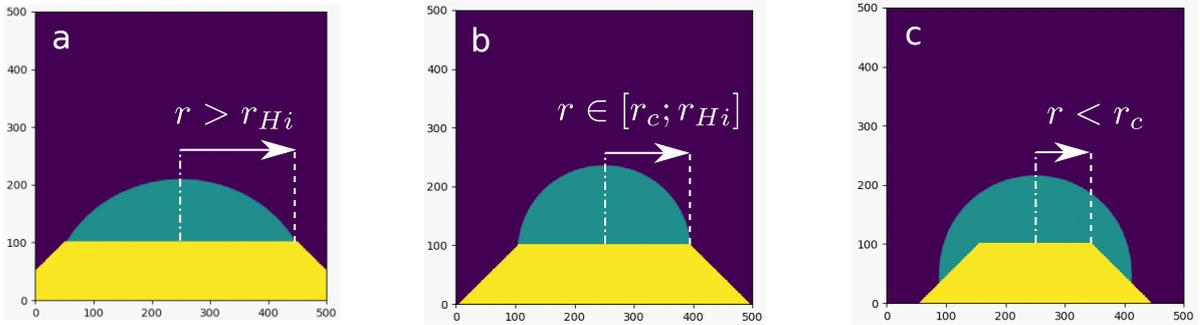


FIGURE 5.25 – Trois états caractéristiques pour $\theta_{int} = 60^\circ$ et $\psi = 135^\circ$ avec a) $r > r_{Hi}$, b) $r \in [r_c; r_{Hi}]$ et c) $r < r_c$.

L'équation proposée par Extrand est la suivante [53] :

$$\theta_{p,a} = \theta_{a,0} + (180 - \phi) \quad (5.11)$$

L'angle maximal d'avancée est $\theta_{p,a}$, $\theta_{a,0}$ est l'angle d'avancée intrinsèque de la surface et ϕ est l'angle de la texture. On constate que l'équation d'Extrand (5.11) et l'équation (5.9) déterminée à partir des simulations sont identiques si on fait l'hypothèse que $\theta_{a,0} = \theta_{int}$. Or avec les simulations, on considère que les surfaces sont parfaitement planes et homogènes chimiquement, il ne devrait donc pas y avoir d'hystérèse d'angle de contact et $\theta_{a,0}$ devient égal à θ_{int} .

La raison pour laquelle on ne voit qu'un seul plateau pour $\theta = 60^\circ$ est que pour un ψ de 90° il faudrait avoir un r suffisamment petit pour que $\theta_e = 60 + 90 = 150^\circ$. Pour avoir un angle de 150° , il faut un r inférieur à $51lu$. Pour vérifier cette hypothèse, une simulation avec $\theta_{int} = 60^\circ$, $\psi = 90^\circ$ et $r = 50lu$ a été réalisée et est présentée dans la figure 5.27. Cette figure valide l'équation (5.9).

La goutte a une forme de portion de sphère donc il est impossible que son angle de contact par rapport au plan horizontal soit supérieur à 180° . Ainsi, pour certaines valeurs de ψ l'angle de décrochage est supérieur à 180° ce qui rend la transition impossible géométriquement. Par exemple pour un substrat de 60° et un ψ de 45° l'angle de décrochage est de

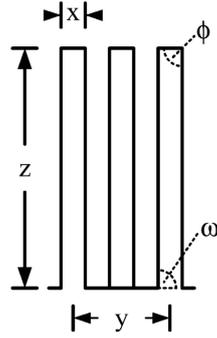


FIGURE 5.26 – Schéma de la texture topographique utilisée par Extrand pour le calcul de l'angle maximal d'avancée [53].

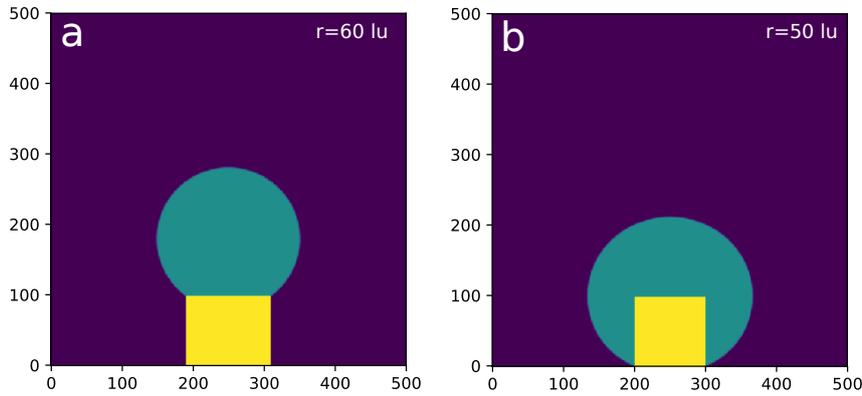


FIGURE 5.27 – Nouvelles simulations avec $\theta_{int} = 60^\circ$, $\psi = 90^\circ$ qui vérifie le dépassement de texture avec $r < 51lu$: a) $r = 60lu$, b) $r = 50lu$.

195° , ce qui est géométriquement impossible avec les conditions de dépôt choisies pour les simulations. Il serait possible de dépasser 180° si la goutte avait une vitesse initiale comme l'ont fait Gong et al. dans leur étude [96].

Deux plateaux ont été présentés et expliqués. On s'intéresse maintenant aux conditions de transition. Il s'avère que les conditions sont $r_w < r_c$ et $\theta_e > \theta_{int} + \Delta\theta_{topo}$. Il y a à la fois une condition sur le rayon mouillé mais aussi une condition sur l'angle de contact.

Le phénomène observé dans l'étude des surfaces entrantes est le collage. Ce phénomène avait aussi été observé dans l'étude chimique. En effet, on retrouve les mêmes principes : deux états stables avec un domaine de transition qui correspond au collage. Les conditions de collage dans l'étude topographique sont :

$$\begin{cases} r_w < r_c \\ \theta_e > \theta_{int} \end{cases} \quad (5.12)$$

Cet état est métastable, c'est à dire que sur le premier plan, le liquide est incité à aller vers le second plan alors que pour le second plan, la goutte est incitée à retourner vers le premier plan. Dans cette configuration, la goutte n'est à l'équilibre sur aucun des plans et se retrouve piégée à la frontière entre ces deux derniers (fig. 5.28).

Dans la figure 5.28, on a représenté deux forces. $F_{t,1}$ correspond à la force sur le plan horizontal. Sur ce plan, la condition $\theta_e > \theta_{int}$ impose à la goutte de s'étaler à droite sur le plan. $F_{t,2}$ correspond à la force sur le plan vertical. Sur le plan vertical, la condition $\theta_e < \theta_{int} + (\pi - \psi)$ impose une force tangente, $F_{t,2}$, négative et force la goutte à reculer sur le plan 2. On se retrouve dans dans un système où la goutte est dans un état métastable

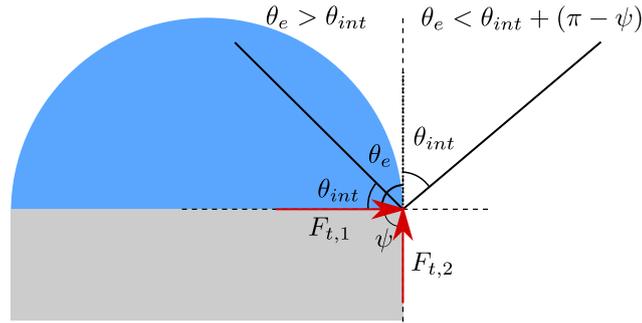


FIGURE 5.28 – Représentation du collage métastable et ses conditions sur une surface texturée topographiquement.

où de chaque côté de la ligne triple, il y a une condition d'équilibre non respectée.

– Surfaces sortantes

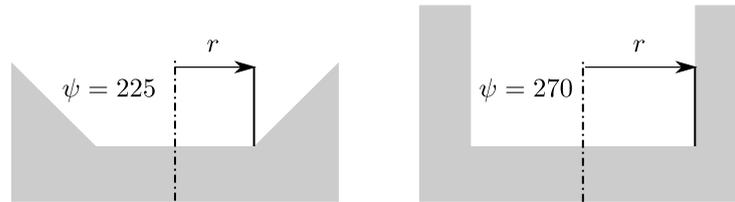


FIGURE 5.29 – Schéma des surfaces sortantes simulées.

Des simulations ont été réalisées avec les substrats sortants (fig.5.29). Les résultats de ces simulations sont affichés dans la figure 5.30 où les angles de contact et les rayon mouillés pour les trois chimies de surface sont affichés en fonction de la position du changement de plan r .

Pour les trois chimies, on a la même allure de courbe dans la figure 5.30, c'est à dire deux états stables avec un changement brusque entre ces deux états.

On va regarder plus en détail l'évolution de l'angle de contact et du rayon mouillé en fonction de la position de la texture r pour le substrat hydrophile (fig. 5.31).

Le premier plateau observé pour des r grands vaut $\theta_e = \theta_{Hi}$. Le second plateau quant à lui a des valeurs différentes en fonction de ψ . Par exemple, pour un $\theta_{int} = 60^\circ$, le second plateau vaut 15° pour un ψ de 225° et -30° pour un ψ de 270° . Si on applique l'équation (5.9) proposée précédemment, on retrouve bien les valeurs des plateaux simulés. On a donc une concordance entre les états d'équilibre et la texturation topographique. On note néanmoins que $\Delta\theta_{topo}$ est négatif pour des textures sortantes, à l'opposé des textures entrantes pour lesquelles $\Delta\theta_{topo}$ est positif.

La transition brusque s'observe pour une valeur seuil $r < r_c$. Le r_c correspond au rayon mouillé de la goutte sur la surface plane. Cela signifie que si la texture est atteinte, elle est forcément traversée car $r \geq r_c$.

On remarque tout de même un décalage entre r_c et le rayon de transition r pour les cas de $\psi = 225^\circ$ pour la courbe à 90° . Ce décalage signifie que la ligne triple traverse la texture bien que la texture soit plus loin que le rayon mouillé à l'équilibre. On peut donc se demander si par des effets dynamiques d'étalement, il n'y aurait pas un effet de sur-étalement puis un recul de la ligne triple jusqu'à l'équilibre. Dans le cas $\psi = 225^\circ$, le sur-étalement

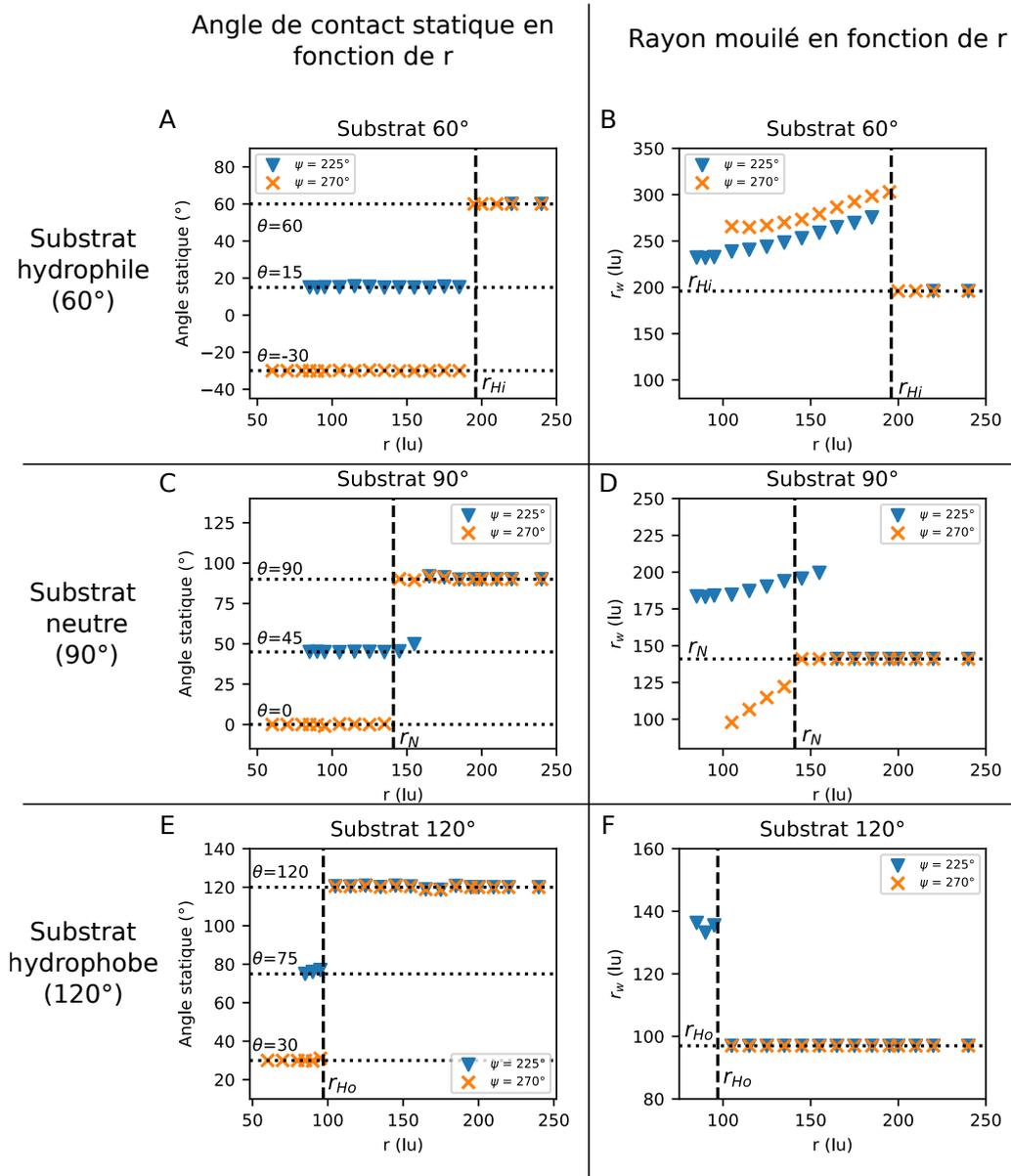


FIGURE 5.30 – Évolution de l’angle de contact statique et du rayon mouillé en fonction de la position du changement de plan r pour les substrats hydrophile, neutre et hydrophobe avec une texture entrante.

pourrait être suffisant pour atteindre la texture. On propose la représentation suivante (fig. 5.32) où les états successifs de l’interface liquide-gaz sont tracés.

Les valeurs des différents plateaux et valeurs seuil de la figure 5.30A, C et E sont présentées dans le tableau 5.4.

L’étude du rayon mouillé montre aussi clairement deux comportements de rayon mouillé à la variation brusque entre les deux topographies (fig. 5.30). Pour des valeurs de r grandes, le rayon reste constant, c’est le cas de figure 5.33a où la ligne triple n’a pas encore été en contact avec la texture. Pour des r plus petits, le rayon varie, cela correspond à l’étalement sur le second plan figure 5.33b.

Le phénomène ici observé est le phénomène de relâche qui avait été défini dans l’étude

5.3. Résultats pour l'étude de la texturation topographique

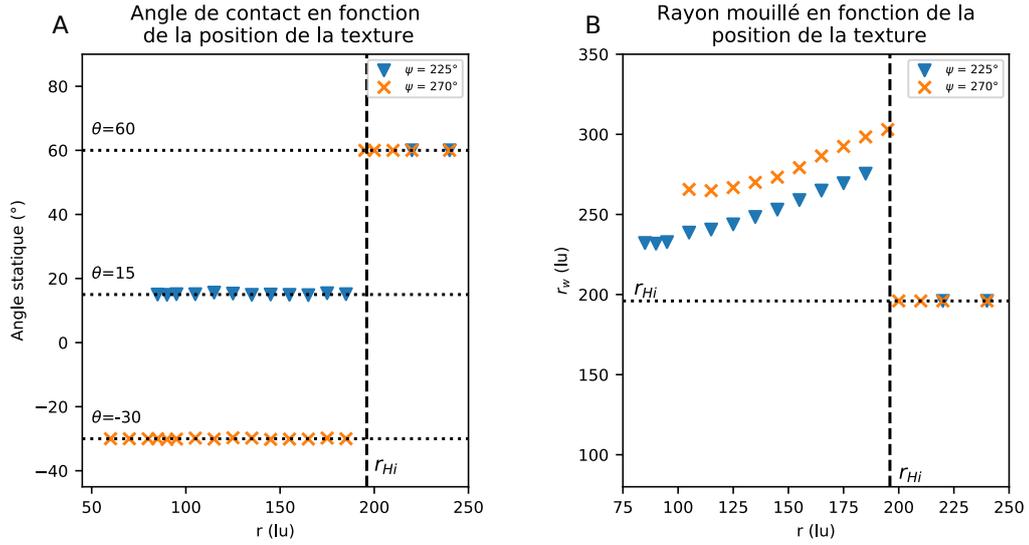


FIGURE 5.31 – Étude de l'angle statique et du rayon mouillé en fonction de la position de la texture r pour un substrat hydrophile ($\theta_{int} = 60^\circ$) et des textures sortantes.

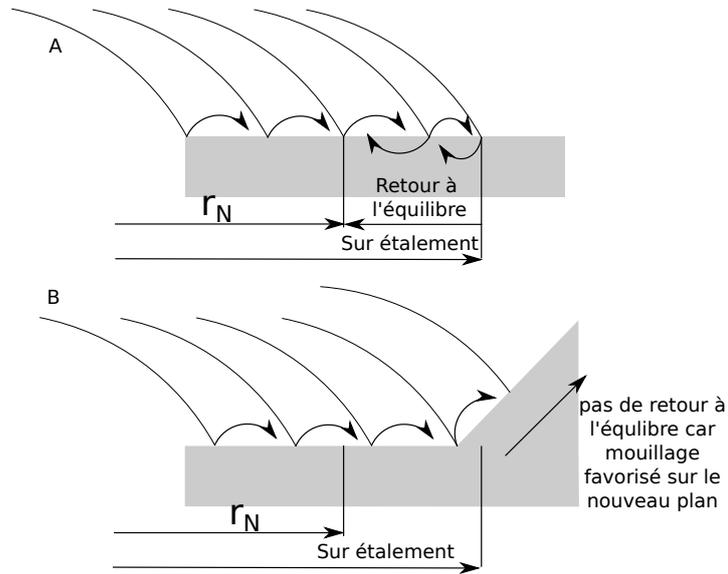


FIGURE 5.32 – Hypothèse d'un sur-étalement dynamique qui permet à la ligne triple de toucher une texture au-delà de son domaine d'équilibre théorique.

$\theta_{int} (^\circ)$	$psi (^\circ)$	r petit	r grand	r_c
60	225	15	60	r_{Hi}
60	270	-30	60	r_{Hi}
90	225	55	90	r_N
90	270	0	90	r_N
120	225	75	120	r_{Ho}
120	270	30	120	r_{Ho}

TABLE 5.4 – Valeur des angles de contact et du seuil simulés (fig. 5.30) pour des textures topographiques brusques.

chimique. On retrouve les deux états stables et la transition brute caractéristiques du phénomène de relâche.

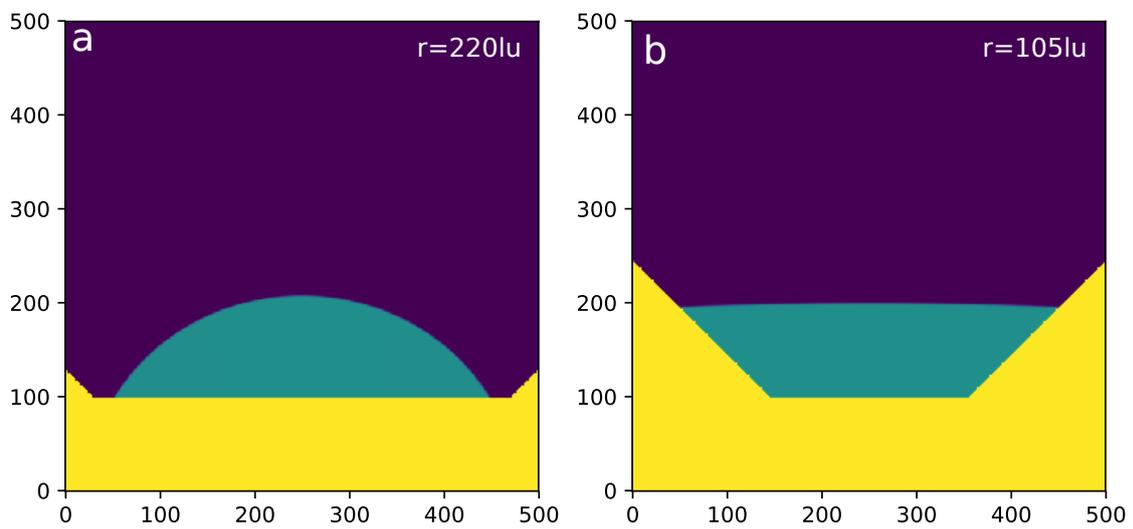


FIGURE 5.33 – Deux états caractéristiques pour $\theta_{int} = 60^\circ$ et $\psi = 225^\circ$ avec a) $r > r_{Hi}$, on observe que $\theta_e = 60^\circ$ et b) $r < r_{Hi}$, on observe que $\theta_e = 15^\circ$.

Substrat à variation topographique continue

On a précédemment étudié les surfaces à texturation topographique brusque. On va dans cette partie, s'intéresser aux variations topographiques continues. Ces topographies sont réparties en deux catégories, les surfaces convexes et les surfaces concaves (fig. 5.34).

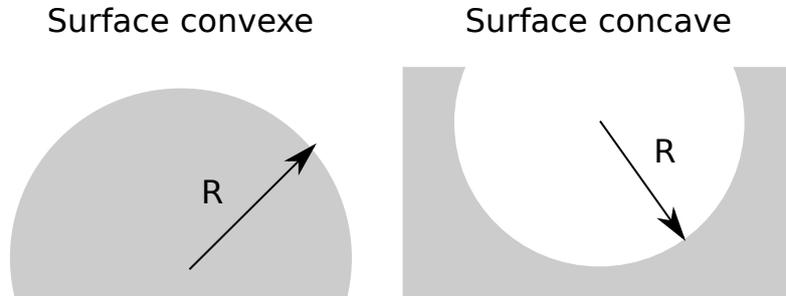


FIGURE 5.34 – Schéma des surfaces convexes et concaves.

- Surfaces convexes

Les simulations sont réalisées avec les substrats convexes présentés dans la figure 5.34. Le paramètre qui varie est R le rayon de courbure du solide.

L'évolution du rayon mouillé en fonction de la taille de la texture est tracé dans la figure 5.35 pour les trois chimies de surface (60° , 90° et 120°).

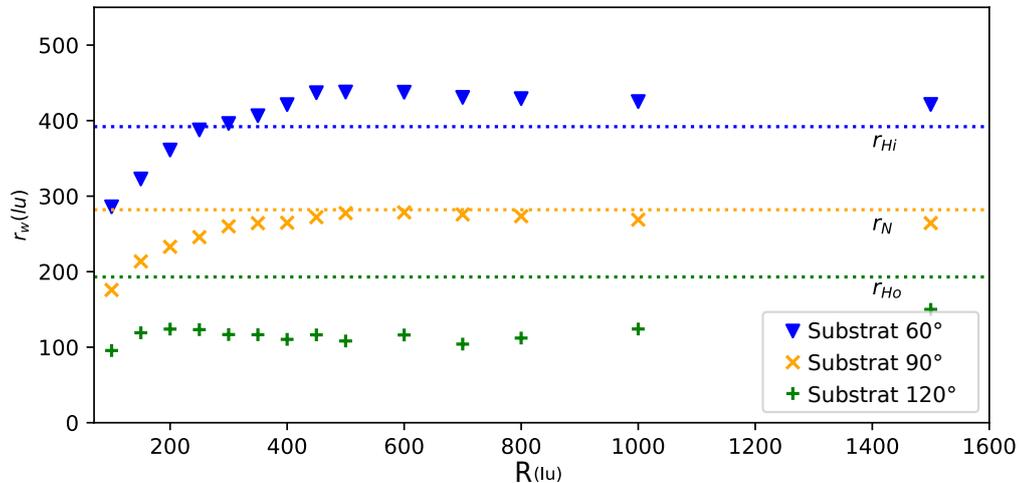


FIGURE 5.35 – Evolution du rayon mouillé en fonction du rayon de courbure d'une surface convexe.

Contrairement à l'étude avec des variations brusques de topographie, les courbes sont continues. On observe que quelque soit le matériau, les courbes ont une asymptote horizontale. L'asymptote tracée dans la figure 5.35 indique que plus le rayon de courbure r est grand, plus le rayon mouillé tend vers le rayon mouillé caractéristique de la chimie plane. Ce résultat confirme bien qu'une surface avec un r infini correspond à un plan. Pour des valeurs de rayon de courbure faible, le rayon mouillé diminue.

On peut mettre en lien la texturation continue et brusque à partir de ces résultats. En effet, les surfaces courbes peuvent être approximées comme une succession de segments de taille infinitésimale inclinés les uns par rapport aux autres. En considérant une succession de segments, on peut faire apparaître $\Delta\theta_{topo}$ dans la texturation continue (fig. 5.36).

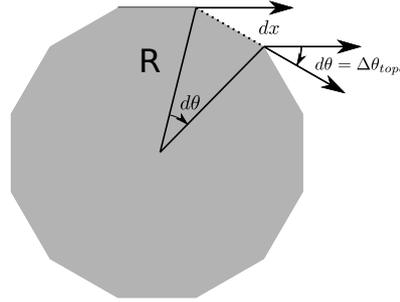


FIGURE 5.36 – Représentation d’une surface convexe segmentée et la variation d’angle résultant de la longueur de discrétisation dx .

Soit la longueur d’un segment dx et la variation d’angle $d\theta$ associée. Avec un rayon de courbure R , on a l’égalité suivante :

$$dx = R \cdot d\theta \quad (5.13)$$

Dans le cas des surfaces convexes présentées, le rayon de courbure des surfaces est constant sur la surface. Ainsi, grâce à l’équation (5.13), on sait que si R est grand, $d\theta$ devient petit et inversement. De plus, dans le cas d’une surface convexe, $\Delta\theta$ est positif, c’est donc le phénomène de collage qui s’applique à la texture. Par conséquent, pour un dx constant, plus le rayon de courbure R est petit, plus l’effet de collage a de l’effet sur la goutte.

On peut conclure de cette étude que les surfaces convexes vont réduire l’étalement d’une goutte à cause d’un effet de collage plus important et proportionnel au rayon de courbure. De plus, il a été montré dans la littérature que l’aire de contact influence l’adhésion. Plus l’aire liquide-solide est grand, plus l’adhésion est grande. Les surfaces convexes sont donc intéressantes pour du décollage car l’aire de contact liquide-solide est petite et l’adhésion est donc faible.

- Surfaces concaves

Les simulations sont réalisées avec les substrats présentés dans la figure 5.2. L’évolution du rayon mouillé en fonction de la taille de la texture est tracé dans la figure 5.37 pour les trois chimies de surface.

Les courbes ont une asymptote horizontale. Quand r tend vers l’infini, le rayon mouillé r_w tend vers le rayon caractéristique de la chimie de la surface sur substrat plan. Pour des valeurs de r faibles, le rayon mouillé augmente.

On peut aussi mettre en lien la texturation continue et brusque à partir de ces résultats. On reprend le même raisonnement que pour les surfaces convexes. Une surface courbe peut être discrétisée en une succession de segments de longueur dx inclinés les uns par rapport aux autres d’un angle $d\theta$ 5.38.

Soit la longueur d’un segment dx et la variation d’angle $d\theta$ associée. Avec un rayon de courbure R :

$$dx = R \cdot d\theta \quad (5.14)$$

Dans le cas des surfaces concaves présentées, le rayon de courbure des surfaces est constant sur la surface. Ainsi, grâce à l’équation (5.14), on sait que si R est grand, $d\theta$ devient petit et inversement. De plus, dans le cas d’une surface concave, $\Delta\theta_{topo}$ est négatif, c’est donc le phénomène de relâche qui s’applique à la texture. Par conséquent, pour un dx constant,

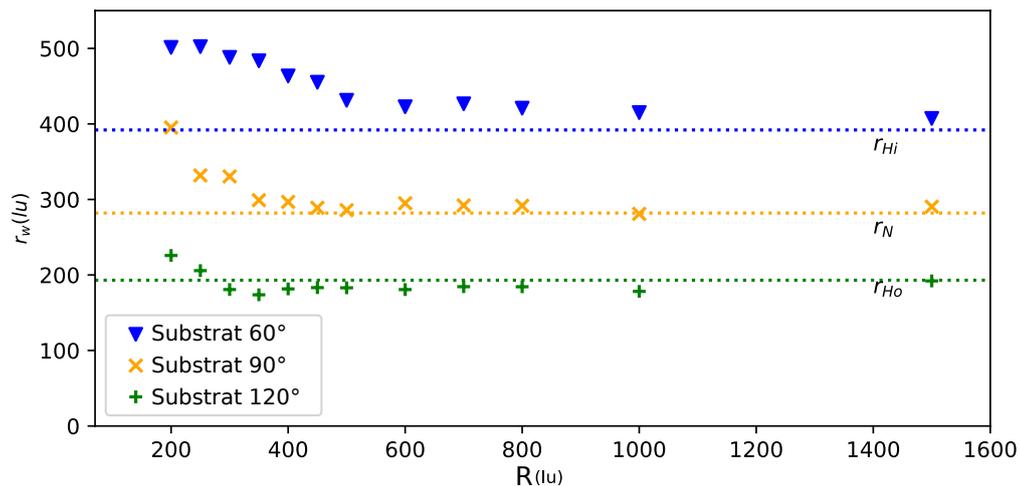


FIGURE 5.37 – Evolution du rayon mouillé en fonction du rayon de courbure d'une surface concave.

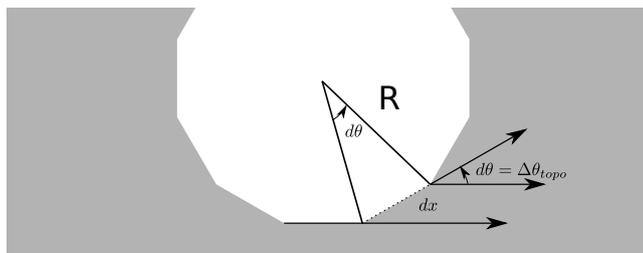


FIGURE 5.38 – Représentation d'une surface convexe segmentée et la variation d'angle résultant de la longueur de discrétisation dx .

plus le rayon de courbure R est petit, plus l'effet de relâche a de l'effet sur la goutte.

On peut conclure de cette étude que les surfaces concaves vont augmenter l'étalement d'une goutte à cause d'un effet de relâche plus important et proportionnel au rayon de courbure. Plus l'aire liquide-solide est grande, plus l'adhésion est grande. Les surfaces concaves sont donc intéressantes pour du collage car l'aire de contact liquide-solide est grande et l'adhésion est donc forte.

5.3.2 Résultats de l'étude théorique de la force de déplacement de ligne triple

Une étude théorique est proposée afin d'étudier l'effet de la texturation topographique sur la force de déplacement de ligne triple [70].

On a remarqué que l'intensité de variation de texturation influence l'étalement. Dans le cas d'une forte variation de topographie, les simulations ont montré des effets similaires au collage/relâche observés en texturation chimique. Dans le cas d'une texturation continue, la ligne triple ne se bloque pas ou ne fait pas un saut, elle avance plus ou moins.

On va commencer par s'intéresser à la variation brusque afin de pouvoir la comparer avec la texturation chimique car les phénomènes observés semblent similaires.

Une surface texturée topographiquement avec une variation brusque de topographie est composée d'un plan avant texture (plan 1) et d'un second plan après texture (plan 2). La force d'avancée est exprimée pour le plan 1 puis pour le plan 2. Les deux courbes suivent la même courbe maîtresse. On place une hétérogénéité de surface pour $\theta_{d,1} = 120^\circ$. L'angle dynamique correspondant sur le plan 2 est $\theta_{d,2}$. La configuration proposée est représentée dans la figure 5.39 La force suivant le plan 1 vaut (5.15) alors que la force sur le plan 2 dépend aussi de l'écart d'angle de contact $\Delta\theta_{topo}$ (5.16).

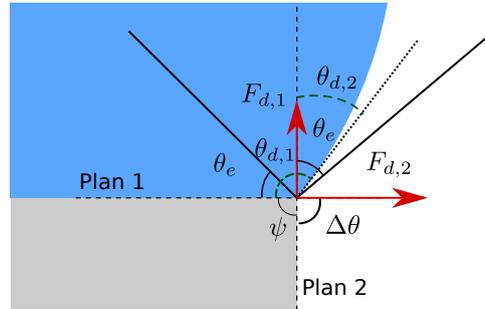


FIGURE 5.39 – Représentation des forces de déplacement de ligne triple en fonction des plans de texture pour une texturation topographique brute entrante.

$$F_{d,1}/\gamma = \cos \theta_e - \cos \theta_{d,1} \quad (5.15)$$

$$F_{d,2}/\gamma = \cos \theta_e - \cos \theta_{d,2} = \cos \theta_e - \cos(\theta_{d,1} - \Delta\theta_{topo}) \quad (5.16)$$

Il y a ensuite deux scénarios, soit $\Delta\theta_{topo}$ est positif (surface entrante) et ainsi, on est dans le cas du collage. Soit le cas opposé où $\Delta\theta_{topo}$ est négatif (surface sortante) et le phénomène de relâche est observé.

Surfaces entrantes

Pour les surfaces entrantes $\Delta\theta_{topo}$ est positif. Trois cas sont présentés dans la figure 5.40 où les forces tangentielles aux plan 1 et 2 ($F_{t,plan1}$ et $F_{t,plan2}$) sont tracées en fonction de l'angle dynamique. Dans le premier cas (fig.5.40A) la texture n'est pas atteinte par la ligne triple. La goutte se comporte comme si elle s'étalait sur un plan horizontal. Dans le second cas (fig. 5.40B), la ligne triple dépasse la texture et avance sur le plan 2. On observe une chute de la force d'avancée entraînée par le changement de l'angle dynamique, $\theta_{d,2} = \theta_{d,1} - \Delta\theta_{topo}$. Enfin, dans le troisième cas (fig. 5.40C), la ligne triple reste collée à la texture. La force chute et s'annule. L'angle dynamique devient l'angle statique : $\theta_e = \theta_d$.

Cette chute de force induite par l'effet de collage concorde avec le fait qu'une goutte s'étale peu sur une surface convexe. En effet, on a défini les surfaces convexes comme des surfaces sur lesquelles un effet de collage constant est appliqué. Comme le collage réduit la force

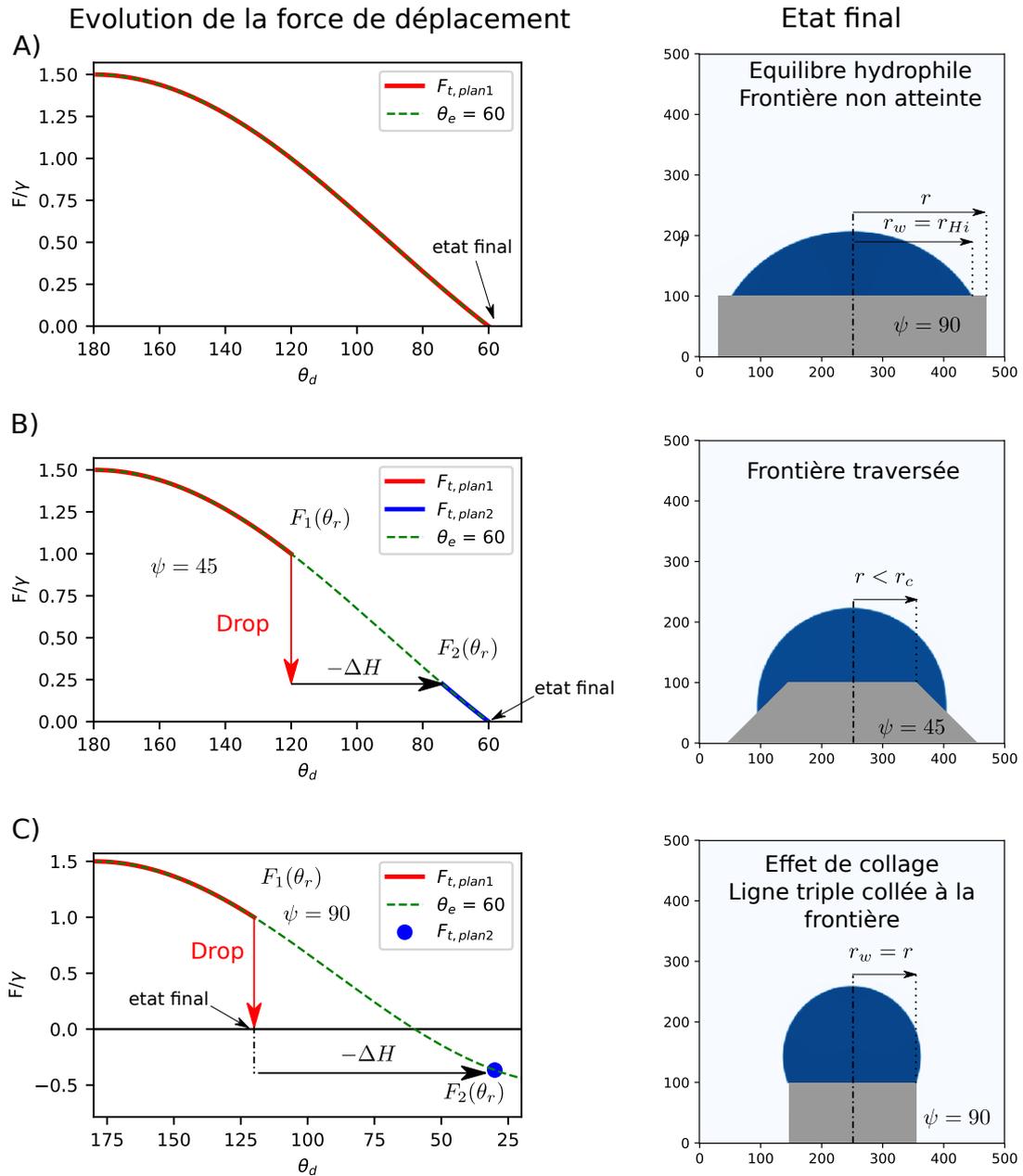


FIGURE 5.40 – Forces de déplacement dans le cas de la texture entrante en $\theta = 120^\circ$.

d'avancée, la ligne triple avance moins. L'aire de contact liquide solide est donc réduite, ce qui a été observé en simulation (fig. 5.35).

Surfaces sortantes

Le cas des surfaces sortantes, est aussi traité. En suivant le même processus que pour les surfaces entrantes, les deux représentations des forces de déplacement sont affichées (fig. 5.41).

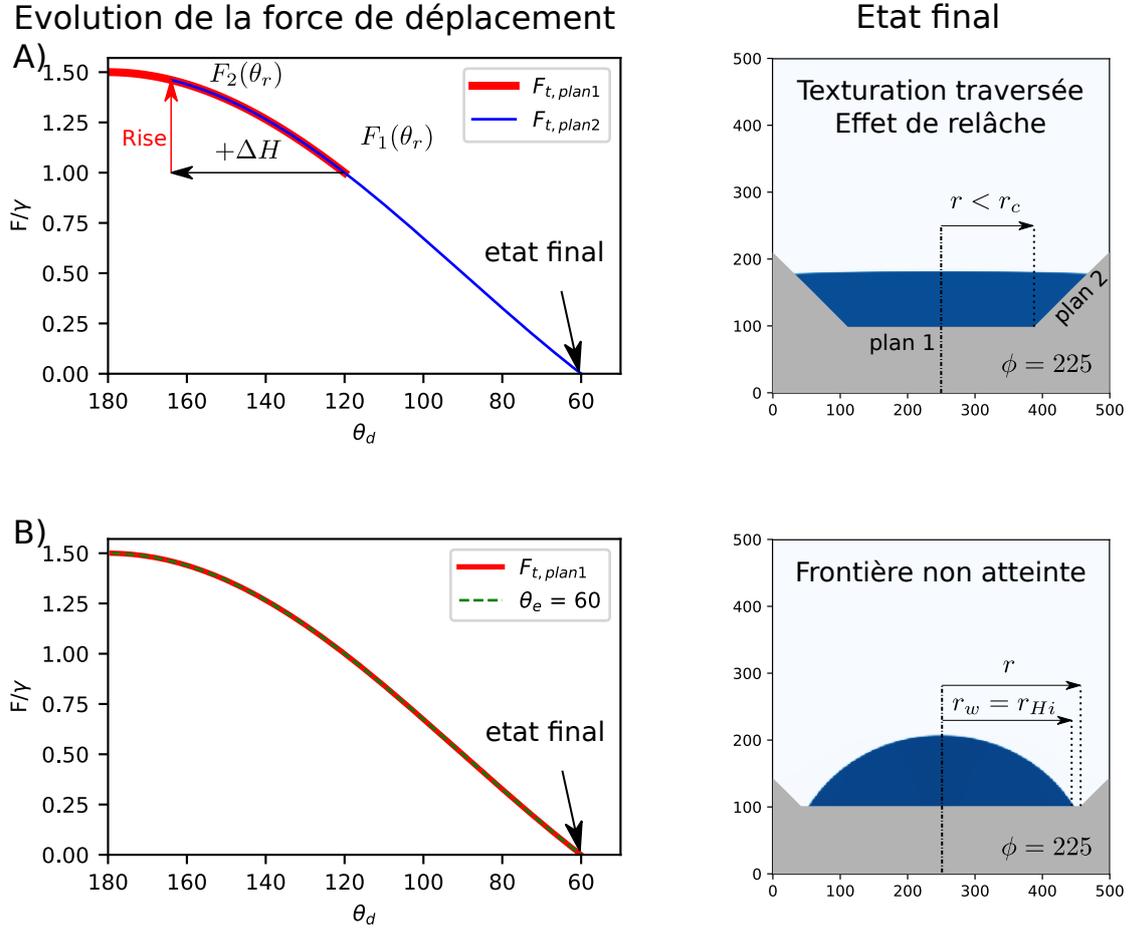


FIGURE 5.41 – Force de déplacement pour le cas d'une texture sortante.

Dans le premier cas (fig. 5.41A), la goutte a traversé la texture et s'est étalée sur le plan 2. On constate une augmentation de la force d'avancée due à l'augmentation de l'angle dynamique sur le plan 2 $\theta_{d,2} = \theta_{d,1} - \Delta\theta_{topo}$. Par définition une texture rentrante se définit par $\theta_{topo} < 0$, on a donc $\theta_{d,1} < \theta_{d,2}$. Dans le second cas (fig. 5.41B), la goutte n'atteint pas la texture et ne s'étale donc que sur le plan 1.

L'augmentation de la force induite par l'effet de relâche concorde avec le fait qu'une goutte s'étale plus sur une surface concave. En effet, on a défini les surfaces concaves comme des surfaces sur lesquelles un effet de relâche constant est appliqué. Comme la relâche augmente la force d'avancée, la ligne triple avance plus. L'aire de contact liquide solide est donc augmentée, ce qui a été observé en simulation (fig. 5.37).

5.3.3 Conclusion

L'étude du comportement d'une goutte sur une surface texturée topographiquement a permis de caractériser deux comportements d'étalement de goutte à la traversée d'une texture : le collage et la relâche.

Soit la ligne triple reste collée à la frontière dans un état intermédiaire, la goutte n'est ni en équilibre sur le premier plan, ni en équilibre sur le second plan. La condition d'équilibre de l'angle statique sur le plan 1, $\theta_{e,1} = \theta_{int}$ n'est pas respectée car $\theta_{e,1} > \theta_{int}$. La condition d'équilibre de l'angle statique sur le plan 2, $\theta_{e,2} = \theta_{int}$, n'est pas respectée car $\theta_{e,2} < \theta_{int}$. La ligne triple sur retrouve piégée à la frontière entre les deux plans car sur le plan 1, elle doit avancer et sur le plan 2, elle doit reculer (fig. 5.42).

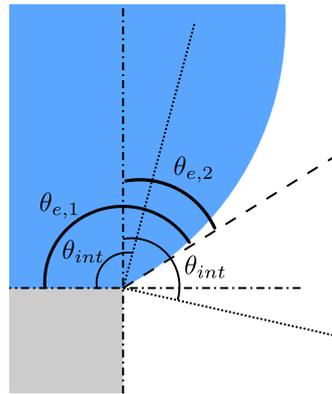


FIGURE 5.42 – Représentation de l'effet de collage sur une texture topographique abrupte.

Le phénomène de relâche correspond à une ligne triple qui s'étale, atteint la frontière puis s'étale sur le plan 2. Sur le plan 1, la goutte est forcée de s'étaler car la condition d'équilibre $\theta_{e,1} = \theta_{int}$ n'est pas respectée car $\theta_{e,1} > \theta_{int}$.

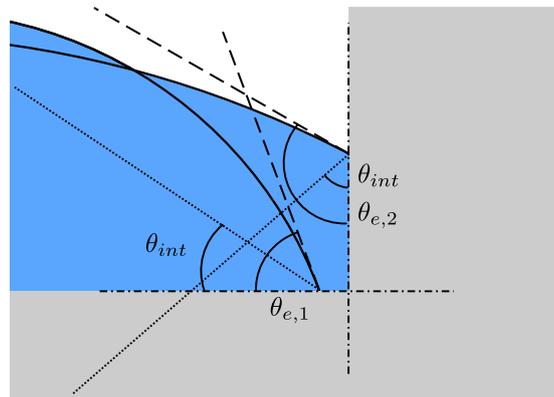


FIGURE 5.43 – Représentation de l'effet de relâche sur une texture topographique abrupte.

La caractérisation de l'effet de collage et de relâche est présentée dans le tableau 5.5.

L'application locale des effets de collage et relâche avec les surfaces continues a aussi été étudiée. Les textures convexes subissent un effet de collage continu sur la surface, c'est à dire que la texture impose une force opposée au déplacement tout au long de l'étalement. Cette force est fonction inverse du rayon de courbure de la texture. A l'état d'équilibre, la goutte est donc moins étalée.

Le phénomène de relâche a le fonctionnement opposé. La texture ajoute une force à la

Type de texturation	Entrante	Sortante
Transition brute	$+\Delta\theta_{topo}$	$-\Delta\theta_{topo}$
Phénomène	Collage	Relâche
Condition caractéristique	$r \in [r_{\theta_{int}+\Delta H}; r_{\theta_{int}}]$	$r = r_{\theta_{int}}$
Comportement de la ligne triple	Collée à la frontière	Saute d'un état d'équilibre à l'autre
Effet sur l'angle dynamique	Diminution	Augmentation
Évolution de la force de déplacement de la ligne triple	Diminution	Augmentation

TABLE 5.5 – Résultats de la transition brute

force de déplacement continue qui lui permet de mieux s'étaler. Ces observations sont présentées dans le tableau 5.6.

Transition continue	Convexe	Concave
Variation d'angle	$+\Delta\theta_{topo}$	$-\Delta\theta_{topo}$
Effet	Sous-étalement	Sur-étalement
Évolution de la force de déplacement de la ligne triple	Diminution	Augmentation

TABLE 5.6 – Résultats de la transition continue

Ces observations permettent d'écrire la force de déplacement de ligne triple sous une nouvelle forme, qui prend en compte la variation locale de l'angle dynamique en fonction de la texturation de surface :

$$F_d = \gamma(\cos\theta_e - \cos(\theta_{d,i} - \Delta\theta_{topo})) \quad (5.17)$$

Avec $\theta_{d,i}$ l'angle de contact dynamique de la goutte sur le plan 1 et $\Delta\theta_{topo}$ l'angle d'ouverture de la surface. On remarque que c'est le terme dynamique, de déséquilibre, qui est impacté par la texturation topographique. Pendant l'étalement, à la fois $\theta_{d,i}$ et $\Delta\theta_{topo}$ varient.

5.4 Conclusion

Les études du mouillage statique sur surface texturée chimiquement ou topographiquement ont permis d'identifier et caractériser deux phénomènes. Le collage de ligne triple et la relâche de ligne triple. Le phénomène de collage bloque l'évolution de la ligne triple sur la texture alors qu'à l'opposé, le phénomène de relâche la force à s'étaler.

L'étude par simulation numérique a montré que ces deux phénomènes ont une intensité variable qui dépend de la texture. Pour une texture chimique, on a défini le terme $\Delta\theta_{chimie}$ qui correspond à la différence locale entre l'angle intrinsèque de la surface avant et après la ligne triple. Pour la texturation topographique, c'est le terme $\Delta\theta_{topo}$ qui a été défini. Ce terme correspond à l'angle d'ouverture de la surface, pour une surface entrante, l'angle est positif, pour une surface sortante, l'angle est négatif. Les données caractérisées par la simulation sont regroupées dans les tableaux 5.2, 5.3, 5.5 et 5.6.

Ces effets ont aussi été caractérisés avec l'étude de l'évolution de la force de déplacement de la ligne triple. On a remarqué que le collage correspondait à une diminution de la force d'avancée, ce qui avait été supposé suite à l'étude par simulation numérique. Le phénomène de relâche à l'effet inverse et augmente la force de déplacement.

Une nouvelle écriture est proposée pour définir la force de déplacement en fonction de la texturation chimique (5.8). Une second expression est proposée afin de définir la force tangentielle au plan d'étalement en prenant en compte la texturation topographique de la surface (5.16). En combinant les équations (5.8) et (5.3.3), on propose une nouvelle écriture de la force de déplacement de la ligne triple en prenant en compte la texturation chimique ($\Delta\theta_{chimie}$) et en prenant en compte la texturation topographique ($\Delta\theta_{topo}$). Cette équation s'écrit en fonction de l'angle de contact intrinsèque de la surface θ_{int} et de l'angle dynamique θ_d .

$$F_d = \gamma [\cos(\theta_{int,i} + \Delta\theta_{chimie}) - \cos(\theta_{d,i} - \Delta\theta_{topo})] \quad (5.18)$$

L'étude des surfaces continues nous a permis de mettre en avant l'effet de l'intensité de la texturation. Dans le cas de surfaces continues, les effets de collage ou relâche sont appliqués en chaque portion de la surface et plus la surface est courbée, plus l'effet de collage ou relâche a une incidence sur l'état statique de la goutte.

Chapitre 6

Caractérisation phénoménologique et limites du mouillage statique

Sommaire

5.1	Présentation de l'étude	90
5.1.1	Principe	90
5.1.2	Paramétrage numérique pour l'étude de l'effet de la texturation chimique	91
5.1.3	Paramétrage numérique pour l'étude de l'effet de la texturation topographique	94
5.1.4	Données caractéristiques	96
5.2	Résultats pour l'étude de la texturation chimique	98
5.2.1	Résultats de l'étude numérique	98
5.2.2	Résultats de l'étude théorique de la force de déplacement de ligne triple	102
5.2.3	Conclusion	106
5.3	Résultats pour l'étude de la texturation topographique	109
5.3.1	Résultats de l'étude numérique	109
5.3.2	Résultats de l'étude théorique de la force de déplacement de ligne triple	120
5.3.3	Conclusion	123
5.4	Conclusion	125

6.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, deux comportements caractéristiques de l'effet de la texturation sur l'étalement d'une goutte ont été observés pour l'étude de la texturation chimique et l'étude de la texturation topographique.

Il a été montré que la texture fait varier la force de déplacement de ligne triple.

Dans ce chapitre, les phénomènes de collage et relâche vont être mieux définis et les limites des études du chapitre 5 vont être discutées.

6.2 Comportements caractéristiques identifiés

6.2.1 Collage

Il a été montré que le collage pouvait empêcher un étalement, ou plutôt bloquer un étalement en collant la ligne triple à une frontière entre deux états de surface différents. Pour mieux imaginer le fonctionnement de ce blocage et ses limites, les simulations à l'avancée pour une transition $H_i \rightarrow H_o$ sont regroupées pour former la figure 6.1.

Avec cette représentation (fig. 6.1) on distingue que les deux angles θ_{Hi} et θ_{Ho} sont les

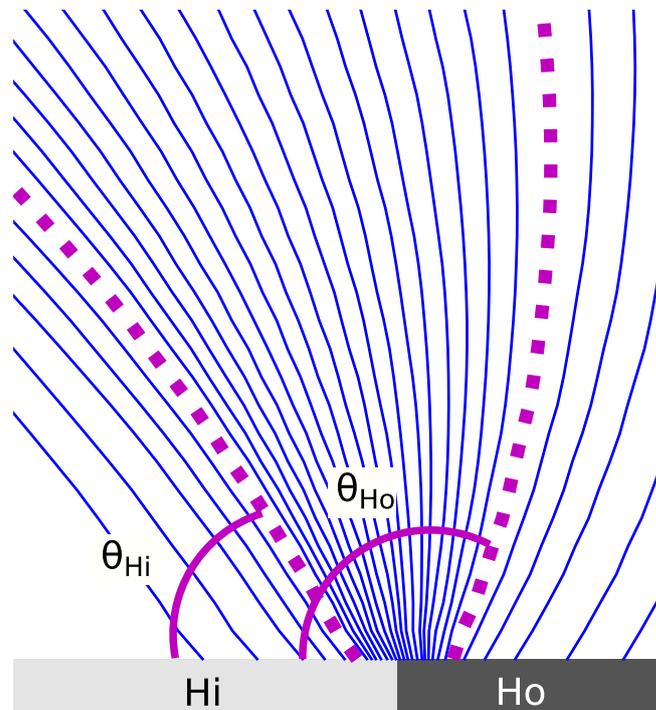


FIGURE 6.1 – Représentation des interfaces liquide-gaz statiques des simulations pour une texturation chimique.

deux valeurs extrêmes que le liquide peut avoir sur la surface. Proche de la frontière on voit bien la transition entre les deux matériaux à travers la succession d'angles que prend l'interface.

Cette caractérisation du phénomène définit ce qu'on avait présenté dans la bibliographie comme le phénomène d'hystérèse d'angle de contact [38][130]. Seulement dans ce cas d'étude, l'hystérèse est à une échelle macroscopique.

Dans la littérature, l'une des causes de l'hystérèse est l'hétérogénéité chimique, ce qui correspond au changement de matériau dans la simulation. Il est intéressant de faire une analogie entre hystérèse et collage comme dans l'expression (6.1) car le phénomène observé

est métastable et a deux états stables qu'il ne peut pas atteindre. On peut faire l'analogie suivante dans le cas d'une texturation chimique:

$$\theta_{Ho} = \theta_{Hi} + \Delta\theta_{chimie} \Leftrightarrow \theta_a = \theta_r + \Delta H \quad (6.1)$$

Avec ΔH l'hystérèse d'angle de contact.

On peut donc représenter le collage sur surface texturée chimiquement et l'hystérèse de la même façon (fig. 6.2).

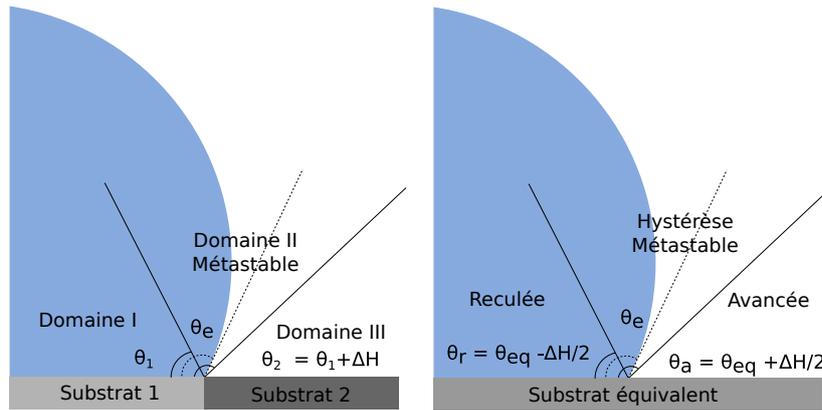


FIGURE 6.2 – Phénomène de collage par texturation chimique et phénomène d'hystérèse pour une hétérogénéité chimique.

Dans le cas d'une texturation topographique brusque, le collage a aussi été observé pour des textures entrantes. L'hétérogénéité topographique est aussi une origine de l'hystérèse d'angle de contact. On peut comparer collage sur textures topographiques et hystérèse induites par hétérogénéité topographique (fig. 6.3). Il est aussi possible de relier hystérèse microscopique et texturation macroscopique :

$$\theta_{e,2} = \theta_{e,1} + \Delta\theta_{topo} \Leftrightarrow \theta_a = \theta_r + \Delta H \quad (6.2)$$

Avec $\theta_{e,1}$ l'angle de contact intrinsèque du plan 1, $\theta_{e,2}$ l'angle de contact intrinsèque du plan 2 projeté sur le plan 1 et ΔH l'hystérèse d'angle de contact.

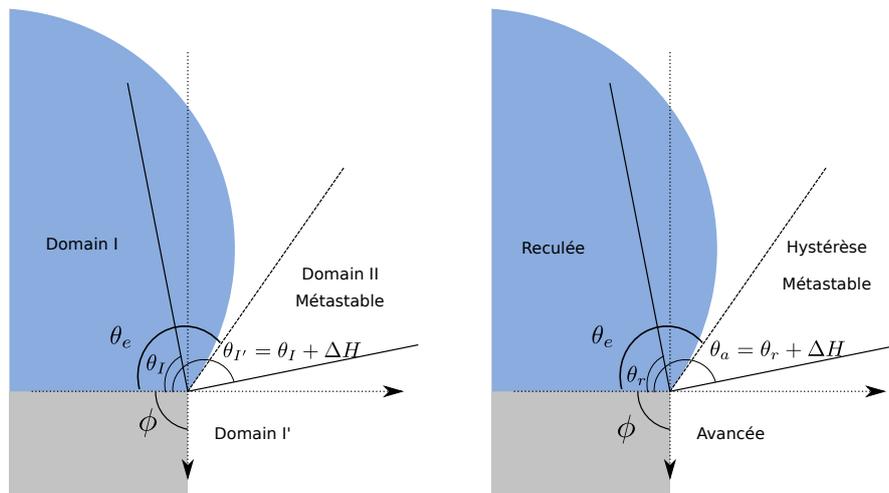


FIGURE 6.3 – Phénomène de collage par texturation topographique et phénomène d'hystérèse pour une hétérogénéité topographique.

On constate qu'il est possible de relier l'hystérèse d'angle de contact et le collage. Il y a

tout de même deux hystérèses distinguées : l’hystérèse liée à une hétérogénéité chimique que l’on nomme ΔH_{chimie} et l’hystérèse liée à une hétérogénéité topographique nommée ΔH_{topo} . On peut réécrire l’équation de la force de déplacement de ligne triple proposée dans le chapitre 5 en introduisant la notion d’hystérèse d’angle de contact :

$$F_d = \gamma [\cos(\theta_{int,i} + \Delta H_{chimie}) - \cos(\theta_{d,i} - \Delta H_{topo})] \quad (6.3)$$

La caractérisation du phénomène de collage nous permet donc de relier hystérèse, texturation et collage. On constate que texturer chimiquement ou topographiquement une surface a pour effet de modifier le comportement de la ligne triple pendant l’étalement. Cette modification entraîne un phénomène de collage de ligne triple. Ce collage s’observe par un phénomène d’hystérèse d’angle de contact. Texturer une surface revient donc à modifier l’hystérèse d’angle de contact localement sur la texture.

Il a aussi été montré que le collage a pour effet de réduire la force de déplacement appliquée à la ligne triple. Et dans le cas de surfaces continues, ce principe a pour effet de diminuer la longueur d’étalement d’une goutte. Le phénomène de collage n’est plus ponctuellement appliqué à la ligne triple mais devient continuellement appliqué à la ligne triple avec une intensité qui est dépend du rayon de courbure de la surface.

6.2.2 Relâche

Nous n’avons pas trouvé d’études qui caractérisent explicitement l’effet de relâche dans la littérature. Le phénomène de saut généré par le phénomène de relâche est à différentier de l’élasticité de ligne triple proposée dans la littérature[69]. En effet, le phénomène décrit par Dubov et al. correspond à une ligne triple qui, en reculant sur des textures, s’accroche puis se libère brusquement. C’est donc le phénomène de collage pour une ligne triple qui recule qui est étudié par Dubov et al.

La raison pour laquelle ce phénomène n’est pas présent dans la littérature est que le phénomène de relâche n’est pas visible directement par l’étude statique du mouillage. Contrairement au phénomène de collage, l’effet ne s’observe pas à travers une variation d’angle de contact mais par un état d’équilibre stable éloigné de la texture.

Afin de mieux imaginer ce phénomène, les interfaces liquides-gaz à l’équilibre simulées dans l’étude de l’avancée sur surface texturée chimiquement sont tracées dans le même graphe (fig. 6.4). Dans cette figure, on peut bien identifier deux états d’équilibre et un domaine intermédiaire dans lequel la ligne triple ne peut pas s’arrêter car elle est entraînée par la seconde surface.

Il y a une valeur seuil à partir de laquelle le phénomène ne peut plus avoir lieu. Cette valeur correspond à l’étalement critique sur le domaine d’initial. En effet, si la goutte est à l’équilibre avant d’atteindre la frontière, elle s’arrête sans faire de transition. Dans le cas d’un substrat texturé chimiquement à l’avancée, c’est pour $r = r_{Ho}$ et pour la reculée, c’est pour $r = r_{Hi}$. Pour un substrat texturé topographiquement, c’est pour $r < r_{int}$ avec r_{int} le rayon caractéristique de l’étalement d’une goutte sur une surface plane d’angle intrinsèque θ_{int} .

Les cas d’une texture chimique avec relâche et d’une texture topographique avec relâche sont schématisés dans la figure 6.5.

Ce phénomène se caractérise par la création, avec la texture, d’un domaine commun aux textures dans lequel la ligne triple n’a pas d’état d’équilibre. Ce phénomène ne correspond pas à l’hystérèse microscopique.

A l’opposé du collage, le domaine commun entre les deux domaines d’étalement au niveau de la texture rend la ligne triple instable. Elle fuit cette région. On a supposé que ce domaine avait une forte dépendance dynamique car la relâche arrive parfois avant que le seuil

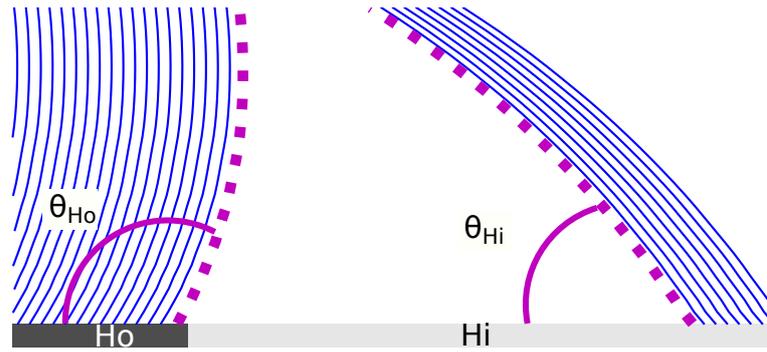


FIGURE 6.4 – Représentation des interfaces liquide-gaz statiques des simulations pour une texturation chimique.

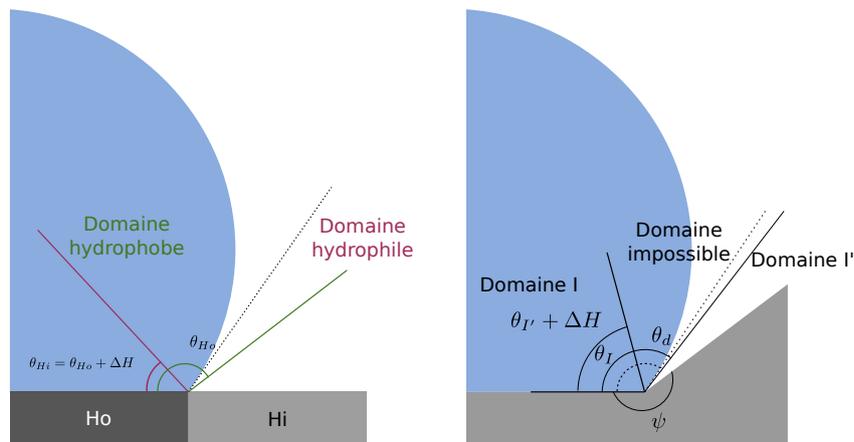


FIGURE 6.5 – Représentation du phénomène de relâche sur une surface texturée chimiquement et une surface texturée topographiquement.

soit atteint. Cette hypothèse du lien entre dynamique et relâche a été observée pour des textures topographiques. Or on a vu que ΔH_{topo} modifie le terme dynamique de l'équation de la force de déplacement de ligne triple. Cette réflexion soutient l'idée de la forte influence de l'effet de relâche sur la dynamique de l'étalement.

Il a aussi été montré que le phénomène de relâche a pour effet d'augmenter la force de déplacement appliquée à la ligne triple. Pour des surfaces continues, la relâche a pour effet d'augmenter l'étalement de la goutte.

6.3 Limites des études statiques

6.3.1 L'infinité de points triples

Les études précédentes consistaient à regarder l'état d'équilibre d'une goutte sur une surface texturée. Dans le cas des études 2D, la ligne qui forme l'interface fluide-fluide correspondant à un arc de cercle parfait. On va regarder ce qu'il se passe s'il y a deux interfaces fluide-fluide. Typiquement, le cas d'une goutte sur une rayure.

Le système est une goutte de rayon $100 lu$ tangente à un substrat hydrophobe $\theta_{int} = 120^\circ$ dans un lattice carré de $500 lu$ de côté. Le résultat de la simulation montre qu'il y a deux interfaces fluide-fluide distinctes et chacune a la forme d'un arc de cercle parfait.

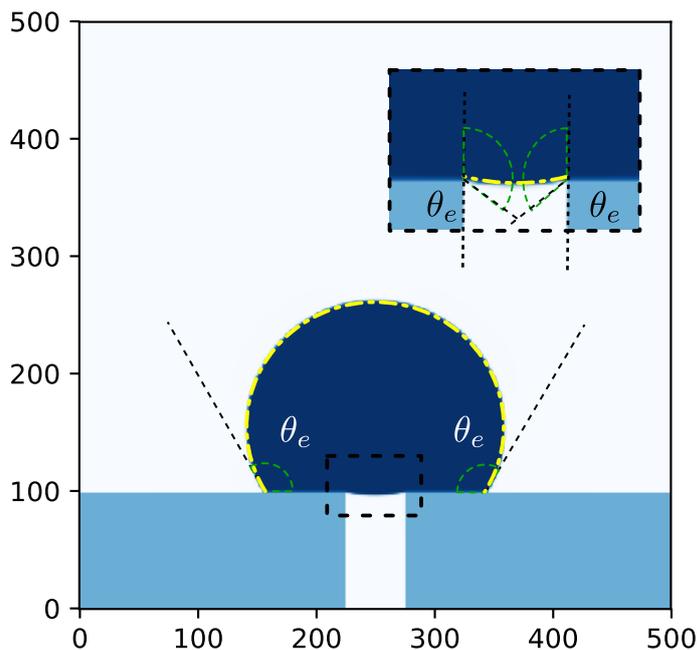


FIGURE 6.6 – Simulation 2D avec deux interfaces fluide-fluide.

Il y a ainsi quatre points triples et chacun peut dépasser la condition de collage ou de relâche pendant l'étalement.

Le caractère métastable du collage est assez problématique car en cas de déformations trop importantes de la ligne triple, il peut y avoir une transition non souhaitée. Typiquement dans le cas de la super hydrophobie où la goutte doit être sur le dessus des textures et avec un grand angle de contact macroscopique, si la vitesse initiale de dépôt est trop importante ou qu'une vibration décroche la goutte, elle peut changer d'état d'équilibre et imprégner les textures.

Ces principes sont utilisés dans la littérature pour, par exemple, forcer une transition d'un état Cassie vers un état Wenzel [96].

Il est donc nécessaire d'avoir une goutte avec un grand domaine de collage ($\Delta H \gg$) ou avec peu d'effets dynamiques pendant son étalement si on veut avoir une surface avec du collage de ligne triple. Il serait donc judicieux de combiner études statiques mais aussi dynamiques afin de caractériser une surface. Actuellement, les études dynamiques expérimentales se font par mesure de l'hystérèse. Les méthodes de mesures ont été présentées dans la littérature. Il y a néanmoins un manque pour ces caractérisations dynamiques car il a été montré que le phénomène de relâche n'est pas mesurable par hystérèse. Seulement une partie des propriétés dynamiques d'une surface sont caractérisables par mesure de l'hystérèse.

6.3.2 Texturation périodique

On a précédemment dit que le phénomène de relâche n'était pas visible à l'équilibre car ce phénomène ne bloque pas la ligne triple. Le phénomène de collage, à l'opposé, va contraindre la ligne triple et sera observable par une étude statique.

On propose de simuler le cas où une surface est texturée par des bandes hydrophiles $\theta_{int} = 67^\circ$ (gris clair) et hydrophobes $\theta_{int} = 112^\circ$ (gris foncé) de largeur c variables (10, 20, 40 et 100 lu). Il a été choisi d'utiliser un angle de 67° qui correspond à l'angle de contact intrinsèque du PA6.6 et un angle de 112° qui correspond à l'angle de contact intrinsèque du PDMS. Cette texturation périodique propose une alternance de transitions $Hi \rightarrow Ho$ et $Ho \rightarrow Hi$. Et par conséquent des effets successifs de collage et relâche.

Les simulations sont faites dans un système carré de $300lu$ de côté et une goutte de rayon initiale de $75lu$. Les résultats pour des bandes de 10, 20, 40 et 100 lu sont présentés dans la figure 6.7.

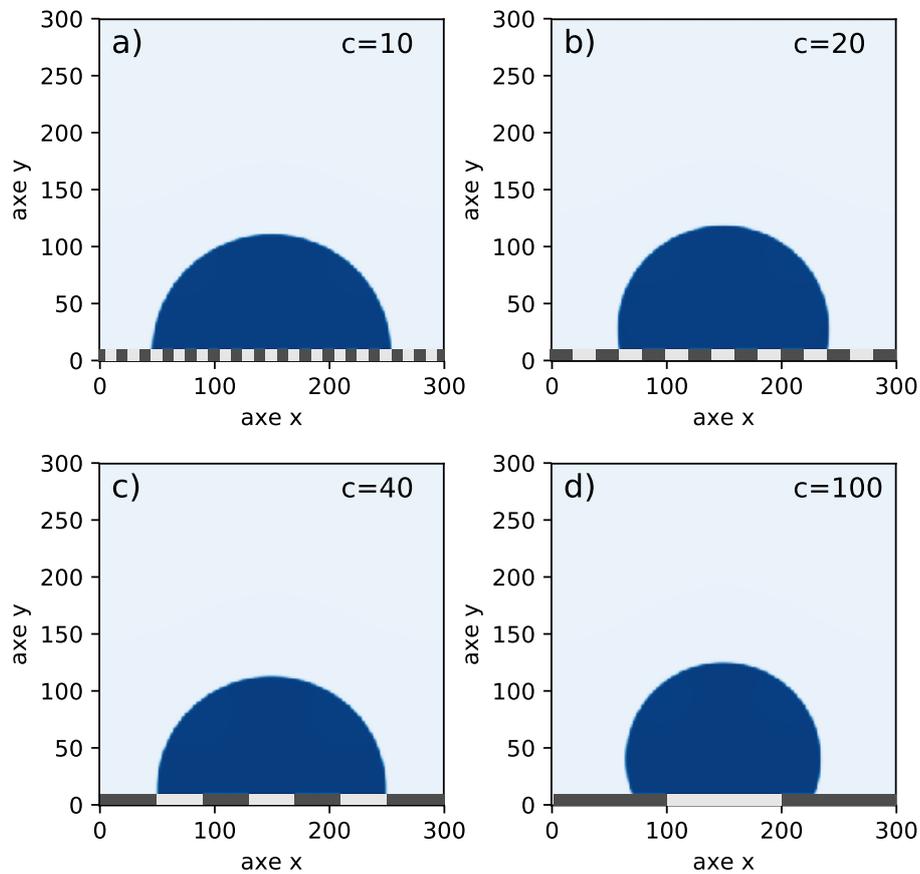


FIGURE 6.7 – Simulations sur substrat texturé chimiquement avec des bandes de largeur c hydrophiles (gris clair) et hydrophobes (gris foncé).

On peut voir que dans les cas a, b et c les deux points triples sont sur une transition $Hi \rightarrow Ho$, ce qui correspond au collage. Le domaine de collage a la condition suivante :

$$\theta_e \in [\theta_{Hi}; \theta_{Ho}] \quad (6.4)$$

On peut voir qu'à l'équilibre et pour des petites textures, la condition de collage semble restreindre l'étalement et piéger la ligne triple de la goutte pendant son étalement. On a présenté dans l'étude de la littérature que la mesure de l'hystérèse se fait par variation de

c	θ_e (°)	r_w (lu)	Bandes hydrophiles mouillées	Position des points triples
10	85	105	11	Collage
20	104	90	5	Collage
40	90	100	3	Collage
100	112	81	1	Surface Ho

TABLE 6.1 – Mesures des caractéristiques de l'état final des simulations en fonction de la largeur de bande c

volume ou inclinaison du substrat. Ces deux méthodes vont faire croître l'angle de contact jusqu'à ce que la condition de collage (6.4) ne soit plus vérifiée.

Le ratio de textures est le même dans toutes les simulations de la figure 6.7 et vaut 1 : 1. Pourtant le rayon mouillé varie en fonction des textures. Le rayon mouillé est directement lié au nombre de bandes mouillées.

Il est possible d'anticiper la valeur de l'angle de contact et du rayon mouillé en fonction de c . En effet, on propose l'algorithme suivant en se basant sur les observations et les valeurs du tableau 6.1 avec c_{Hi} la largeur d'une texture hydrophile, c_{Ho} la largeur d'une texture hydrophobe et n le nombre de paires de nouvelles textures rencontrées par la ligne triple (n vaut 1 pour la cas 6.7 d).

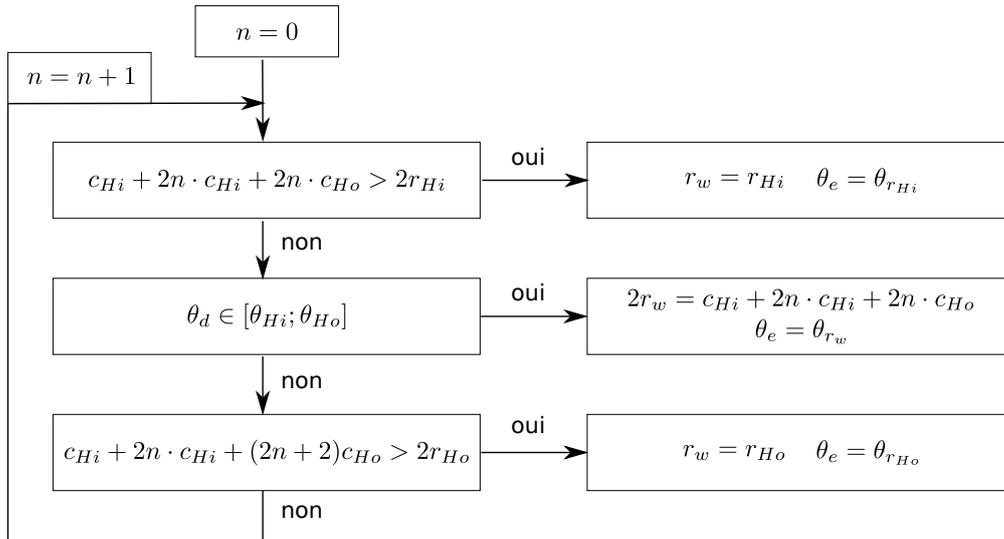


FIGURE 6.8 – Algorithme de l'étalement sur une surface texturée périodiquement avec comme texture centrale une bande hydrophile.

Si on applique l'algorithme de la figure 6.8 aux texturations proposées précédemment 6.7, on obtient les résultats présentés dans le tableau 6.2. On constate que les résultats sont très proches des simulations (tab. 6.1). Il y a tout de même un écart pour $c = 10$ où l'algorithme considère que 9 bandes hydrophiles mouillées et donc un rayon mouillé plus faible et un angle de contact plus grand que pour la simulation. On peut supposer que cet écart entre algorithme et simulation peut venir d'effets dynamiques et d'un phénomène de sur-étalement qui permet à la ligne triple de sortir de domaine hydrophobe pour s'étaler dans l'hydrophile.

Seulement trois conditions d'étalement sont prises en compte. L'étalement sur une surface

c	θ_e (°)	r_w (lu)	Bandes hydrophiles mouillées	Position des points triples
10	108	85	9	Collage
20	104	90	5	Collage
40	95	100	3	Collage
100	112	81	1	Surface Ho

 TABLE 6.2 – Résultats de l'application de l'algorithme 6.8 en fonction de la largeur de bande c

hydrophile, la traversée de la frontière $Hi \rightarrow Ho$ et l'étalement sur une surface hydrophobe. Ces trois conditions sont répétées n fois, une fois par période. Elles suivent un ordre précis, dépendant de la texture centrale et du pattern de texturation. Il est aussi possible d'écrire l'algorithme pour une surface hydrophobe en son centre (fig. 6.9).

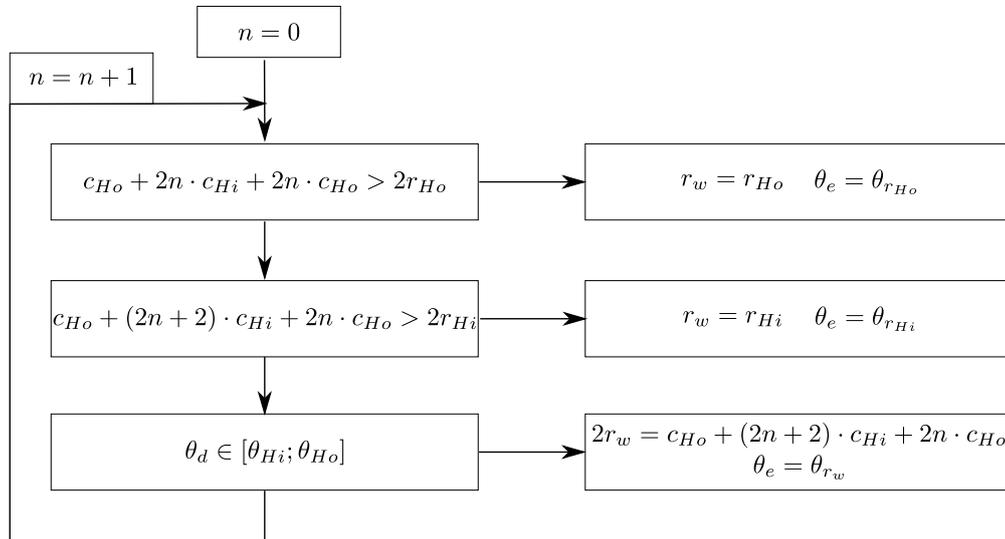


FIGURE 6.9 – Algorithme de l'étalement sur une surface texturée périodiquement avec comme texture centrale une bande hydrophobe.

On constate que la transition $Ho \rightarrow Hi$ qui correspond à l'effet de relâche n'est pas prise en compte. En effet, comme on l'avait expliqué précédemment, la relâche n'empêche pas l'étalement, au contraire, l'étalement est forcé. Le phénomène de relâche empêche la ligne triple de s'arrêter dans certaines zones, ce qui explique pourquoi il n'y a pas de condition d'équilibre liée à l'angle dynamique quand il y a une transition $Ho \rightarrow Hi$.

Cette étude montre qu'il est important de considérer les textures traversées par la goutte. Ce sont les successions de choix d'avancée ou de blocage de la ligne triple qui permettent de définir l'état d'équilibre.

On se pose maintenant la question suivante, comment la goutte se comporte-t-elle si la ligne triple à droite et la ligne triple à gauche ne rencontre pas les mêmes textures ?

Pour étudier cette question, on propose de reprendre le cas étudié dans la figure 6.7 c et de modifier la position de la goutte à l'état initial. La goutte est décalée de 20 et 30 lattices sur la droite et on obtient les résultats présentés dans la figure 6.10.

On observe que dans le cas avec un offset de 20lu (6.10d), la goutte à un état d'équilibre

c	offset	θ_e (°)	r_w (lu)	Bandes hydrophiles mouillées	Position des points triples
40	0	90	100	3	Collage
40	20	90	100	3	Collage
40	30	112	81	2	Surface Ho

TABLE 6.3 – Mesures des caractéristiques de l'état final des simulations en fonction de la largeur de bande c .

identique à une goutte centrée sans offset (6.10b). La goutte s'est étalée à gauche. Pour un offset de 30lu, on observe un déplacement de la goutte sur la droite. Les données à l'équilibre sont présentées dans le tableau 6.3

Sur la figure 6.10 c, on observe que la ligne triple à l'état initial est : à droite sur la surface hydrophobe et à gauche sur la surface hydrophile. Sur la figure 6.10 e, la ligne triple est sur le substrat hydrophobe mais plus proche de la transition $Ho \rightarrow Hi$ à gauche qu'à droite. L'asymétrie de texturation a un effet sur l'étalement.

Cette asymétrie nous questionne sur la notion de priorité d'étalement. Pour des surfaces non symétriques, on se demande quelle direction la ligne triple va choisir pour s'étaler en fonction des textures rencontrées. Si une texture est choisie par rapport à une autre, elle a la priorité d'étalement.

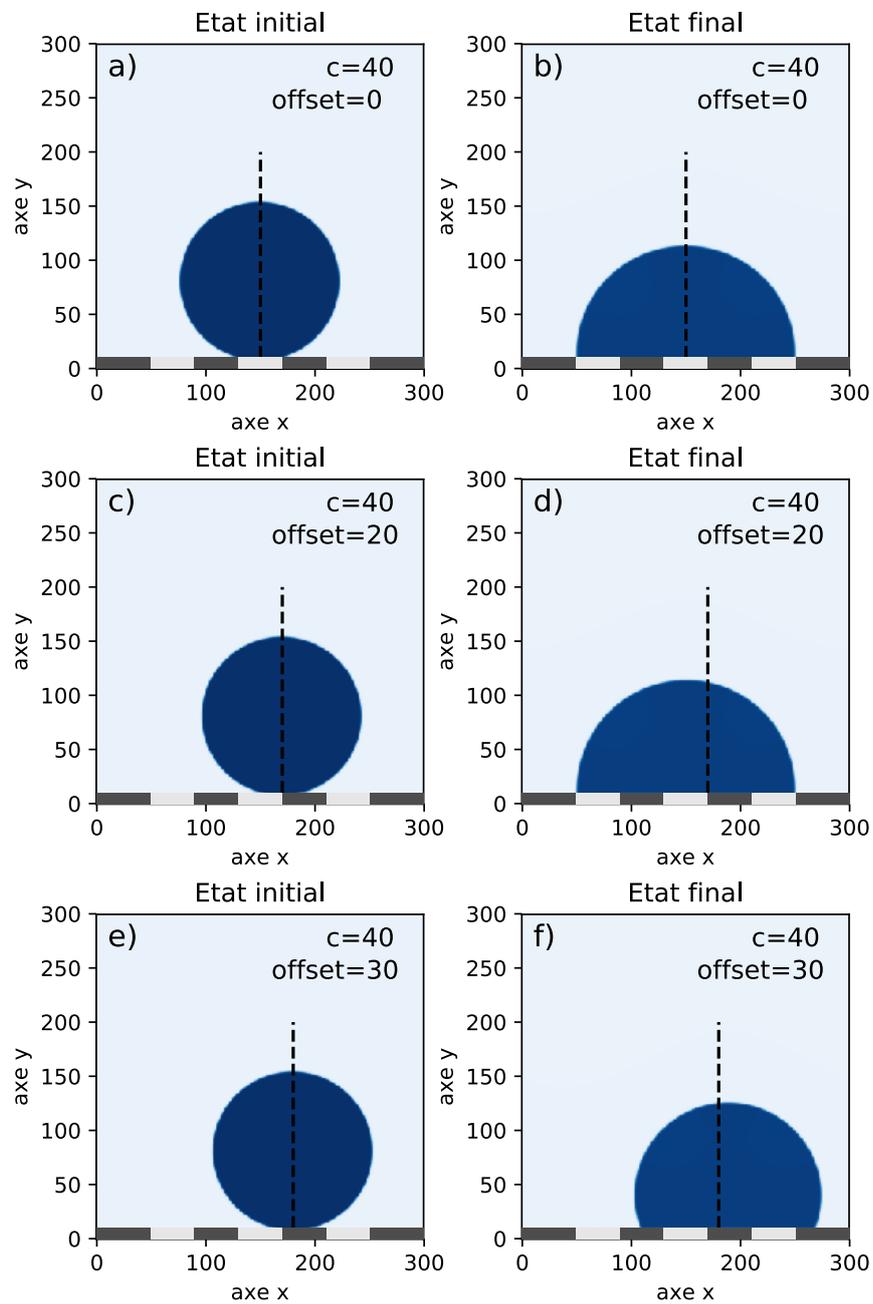


FIGURE 6.10 – Simulations sur substrat texturé chimiquement avec des bandes de largeur c hydrophiles (gris clair) et hydrophobes (gris foncé) et une goutte décalée à l'état initial.

Substrat	Texture gauche	Texture droite	Texture gagnante
A	Plan N	Collage	Plan N
B	Plan Hi	Plan Ho	Plan Hi
C	Relâche	Plan N	Relâche
D	Relâche	Collage	Relâche

TABLE 6.4 – Résultats des tests de priorité d'étalement sur surfaces texturées chimiquement

6.3.3 Priorité d'étalement

Dans le cas d'une texturation chimique, on propose d'étudier la compétition entre deux textures et leur impact sur l'étalement. Cette étude est très intuitive mais quelques simulations vont être réalisées afin de vérifier ces intuitions.

Pour commencer, on compare les texturations chimiques puis on s'intéressera ensuite aux texturations topographiques. Ces études vont nous permettre de caractériser quelle texturation est la plus adaptée à une surface qui cherche un plus grand étalement ou à l'inverse un plus faible étalement.

On se place dans le cas d'un système carré avec $500lu$ de côté et une goutte de rayon $100lu$ tangente à la surface à l'état initial (simulation de l'essai sessile). Trois matériaux sont choisis pour le substrat, un hydrophile $\theta_{Hi} = 60^\circ$, un hydrophobe $\theta_{Ho} = 120^\circ$ et un neutre $\theta_N = 90^\circ$. La frontière est placée pour $r = 80lu$. Quatre configurations de texturation sont simulées et présentées dans la figure 6.11. Les résultats sont présentés dans la tableau 6.4 avec la texturation gagnante.

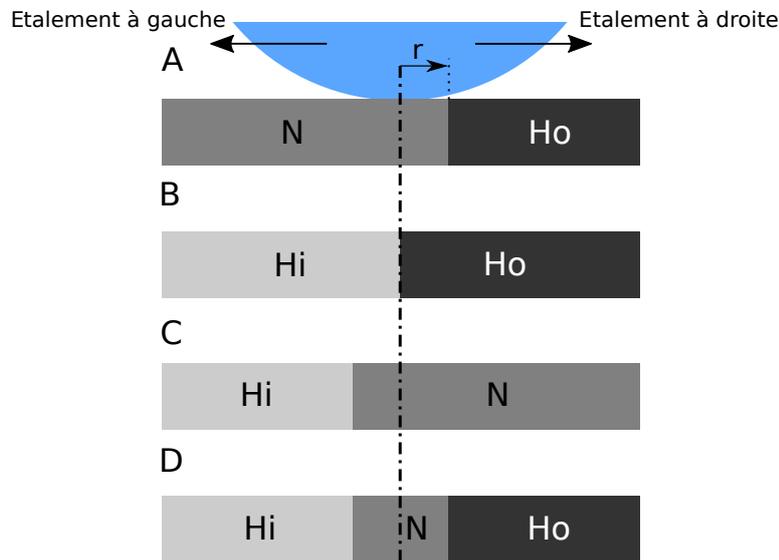


FIGURE 6.11 – Texturations chimiques comparées pour les tests de priorité d'étalement.

La relâche a toujours gagné, ce résultat n'est pas surprenant, on avait montré que la relâche augmentait la force d'avancée de ligne triple ce qui favorise l'étalement. Le collage est toujours perdant, la force d'avancée est diminuée donc le collage s'oppose toujours à l'étalement. Les substrats plans donnent la priorité à la surface hydrophile (cas B).

Pour le cas d'une texturation topographique, on va réaliser le même principe d'étude.

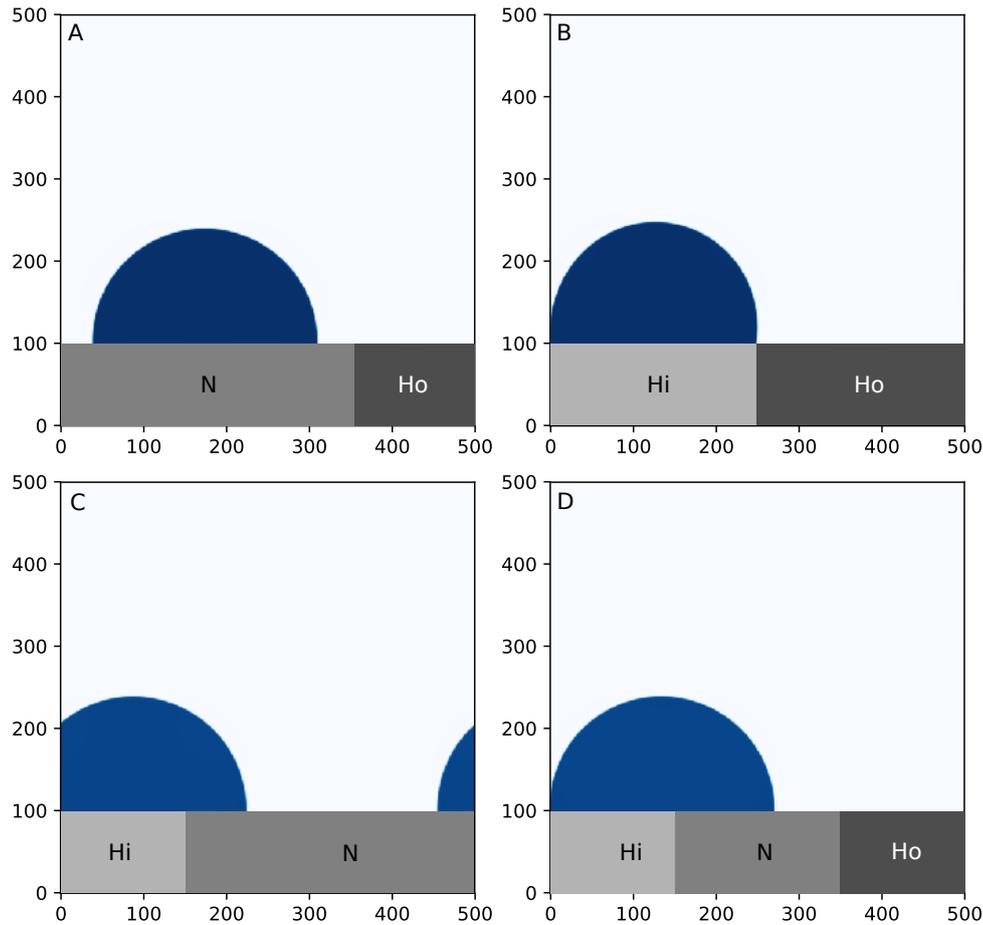


FIGURE 6.12 – Résultats des simulations des tests de priorité d'étalement sur surfaces texturées chimiquement. a) plan N vs collage, b) plan Hi vs plan Ho , c) relâche vs plan N et d) relâche vs collage.

Le système est un carré de côté $500lu$ avec une goutte tangente à la surface et de rayon $100lu$ à l'état initial. Le substrat est hydrophile pour favoriser l'étalement $\theta_{int} = 60^\circ$ et la texturation est placée à $r = 120lu$. Les topographies texturées sont présentées dans la figure 6.13.

Les textures sortantes sont favorisées alors que les textures entrantes sont perdantes. On a donc dans l'ordre de priorité, les surfaces sortantes puis le plan puis les surfaces entrantes. Il est important de noter que la notion de priorité d'étalement n'exclut pas un étalement sur la seconde texture. La notion de priorité signifie juste que la ligne triple va favoriser un sens d'étalement par rapport à l'autre.

Substrat	Texture gauche	Texture droite	Texture gagnante
A	Plan	Rentrant	Plan
B	Plan	Sortant	Sortant
C	Rentrant	Sortant	Sortant

TABLE 6.5 – Résultats des tests de priorité d'étalement sur surfaces texturées topographiquement

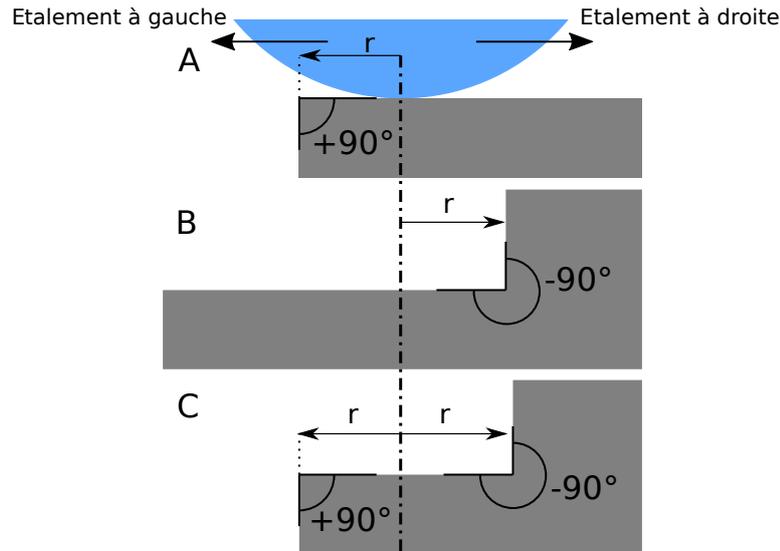


FIGURE 6.13 – Texturations topographiques comparées pour les tests de priorité d'étalement.

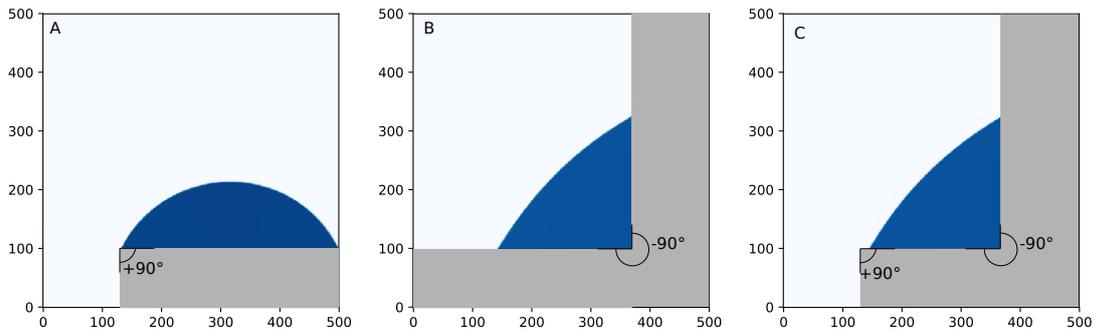


FIGURE 6.14 – Résultats des simulations des tests de priorité d'étalement sur surfaces texturées topographiquement. a) collage vs plan, b) plan vs relâche et c) collage vs relâche.

Les résultats de cette étude confirment le fait que la force d'avancée de ligne triple est impactée par la texturation. Dans le cas où la texture impose une force opposée au sens du déplacement, cas du collage, l'étalement est défavorisé. Dans le cas contraire ou la texture rajoute une force dans le sens du déplacement, l'étalement est favorisé, c'est le cas de la relâche.

Pour une texturation 2D, il n'y a que deux choix de déplacements de ligne triple car il n'y a que deux points triple. Dans un cas 3D, il y a une infinité de points triples et donc une infinité de textures en compétition pour l'étalement. On va donc maintenant s'intéresser à la texturation 3D et son impact sur la forme de la goutte.

6.3.4 Mouillage 3D

Il a été montré que le mouillage était impacté par la périodicité et la priorité des textures. Les études précédentes se basaient sur des gouttes avec seulement 2 points triples. On s'intéresse aux simulations 3D où la ligne triple n'est plus seulement 2 points mais une infinité de points qui sont en compétition pendant l'étalement.

Le système simulé est cubique de 250 lu de côté. Le schéma de discrétisation est le D3Q15. La goutte est initialement une boule de rayon 75lu et positionnée tangente au solide. Quatre texturations chimiques sont étudiées, elles sont présentées dans le tableau 6.6. Il y a deux matériaux, l'un hydrophile $\theta_{Hi} = 67^\circ$ l'autre hydrophobe $\theta_{Ho} = 112^\circ$. On a choisi de tester deux paramètres : la taille de la texturation et la chimie initiale de la surface. Pour étudier l'effet de la taille de la texture, il faut comparer les simulations sur les surfaces A, B et C. Pour étudier l'effet de la texturation initiale, il faut comparer les simulations sur les surfaces C et D.

Étude	c (lu)	Texture centrale
A	10	PDMS (Ho)
B	25	PDMS (Ho)
C	50	PDMS (Ho)
D	50	PA6.6 (Hi)

TABLE 6.6 – Caractéristiques des textures pour l'étude 3D

Les résultats des simulations sont présentés dans la figure 6.15 et les grandeurs mesurées sont présentées dans le tableau 6.7. Ces grandeurs sont :

- L'aire de contact liquide - solide $A_w = A_{Hi} + A_{Ho}$
- Le rapport des aires de contact liquide-solide hydrophile et liquide - solide hydrophobe (A_{Hi}/A_{Ho})
- Le nombre de bandes hydrophiles atteintes N_{Hi}
- Le paramètre de circularité ΔR_{rms}
- L'angle de contact maximal θ_{max}
- L'angle de contact minimal θ_{min}

Pour chaque simulation, les angles de contact à l'équilibre sont égaux aux angles intrinsèques du PDMS et du PA6.6. On constate que le ratio des aires de contact est supérieur à 1, cela signifie que la surface hydrophile a été favorisée par rapport à la surface hydrophobe. Dans les études A, B et C, on observe que ce ratio diminue en fonction de la taille des bandes. De plus, la circularité est meilleure pour des largeurs de bandes faibles.

Pour le cas A, on peut confronter la périodicité suivant l'axe \vec{x} et la continuité de la texture sur l'axe \vec{y} . On constate que la goutte est plutôt circulaire, ce qui veut dire que l'alternance

Etude	c (lu)	Aire mouillée (lu^2)	Rapport des aires	Nombre de bandes hydrophiles mouillées	Circularité	θ_{max} ($^\circ$)	θ_{min} ($^\circ$)
A	25	11726	1.16	6	2.48	113	67
B	50	10602	1.47	2	7.78	113	68
C	50	15004	1.93	2	9.61	112	66
D	50	10740	2.19	1	10.74	113	66

TABLE 6.7 – Grandeurs caractéristiques des résultats de l'étude 3D

de collage et relâche n'a pas suffisamment contraint la ligne triple pour observer une anisotropie d'étalement.

Pour les cas C et D, l'inversion des textures a fortement modifié l'état final. En effet dans le cas C, la première transition suivant l'axe \vec{x} est $Ho \rightarrow Hi$ donc il y a de la relâche de ligne triple alors que pour le cas D, c'est une transition $Hi \rightarrow Ho$, du collage. On sait que le collage s'oppose à l'étalement et à l'opposé la relâche incite à l'étalement. Ces deux premières textures au comportement opposé nous indiquent déjà que dans le cas C, la goutte devrait plus s'étaler sur l'axe \vec{x} que pour le cas D.

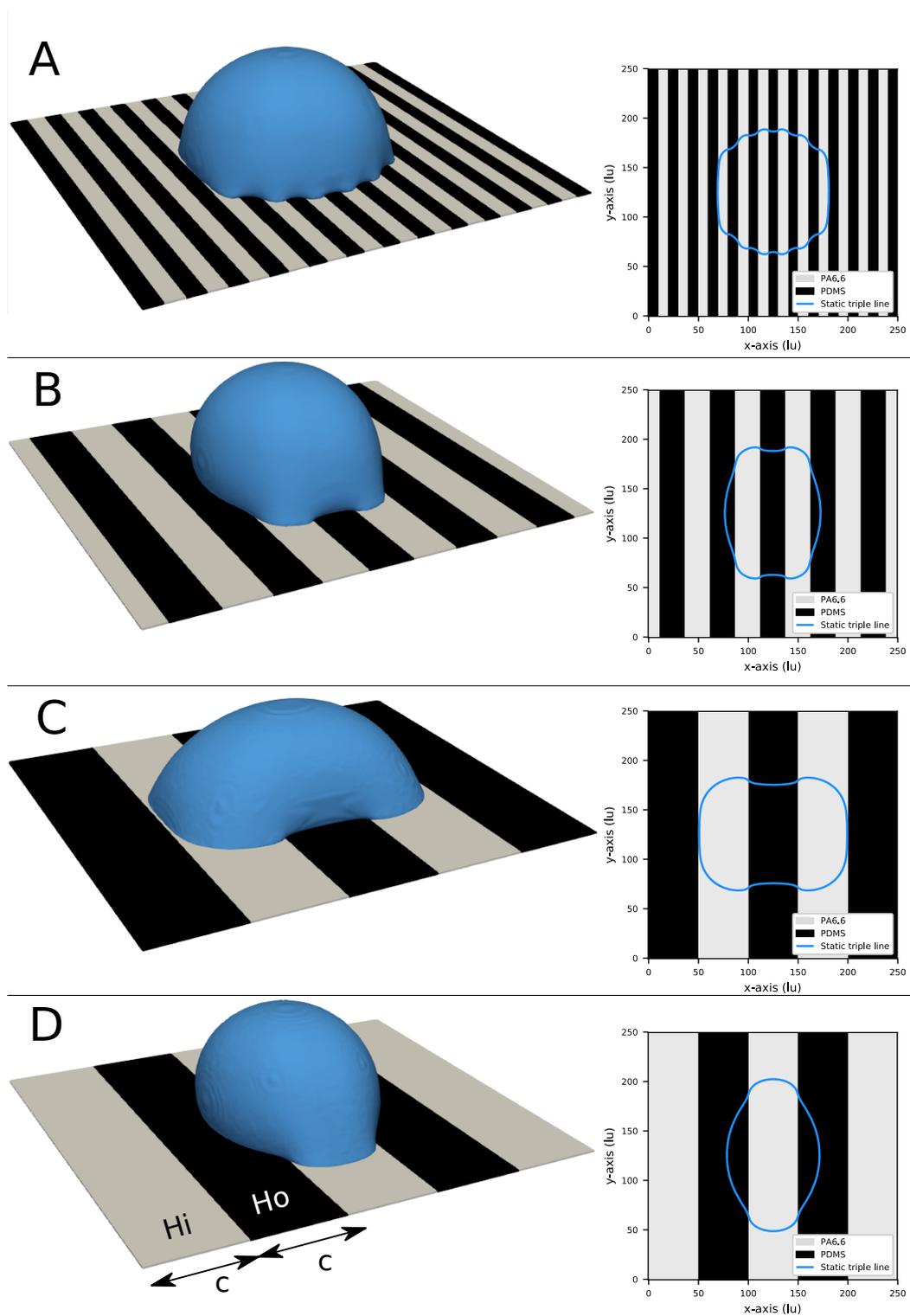


FIGURE 6.15 – Résultats des simulations 3D sur surface texturée chimiquement.

6.3.5 Influence de la dynamique

On a vu précédemment qu'il était possible d'anticiper le déplacement d'une goutte en fonction des textures successives de la surface mais que cette approche semblait limitée par un effet de sur-étalement induit par la dynamique de l'étalement.

On se place dans un cas où une surface est texturée avec deux chimies (fig. 6.16). Le substrat gris clair est hydrophile ($\theta_{Hi} = 60^\circ$) et le substrat gris foncé est hydrophobe ($\theta_{Ho} = 120^\circ$). La goutte est un disque de rayon $100lu$ et elle est placée centrée, contre le substrat à l'état initial. Le système est un carré de $500 \times 500lu$.

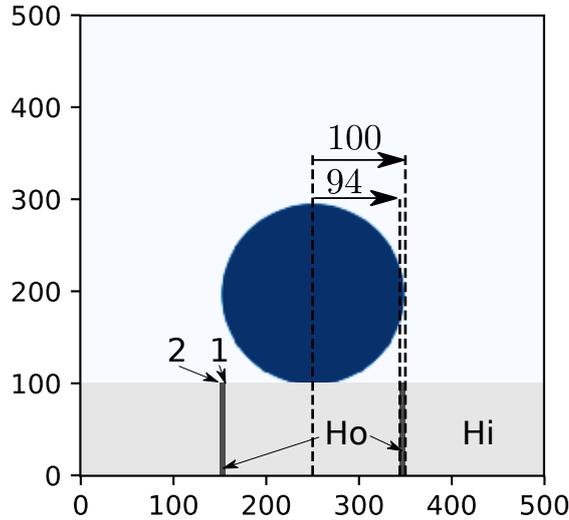


FIGURE 6.16 – Surface texturée chimiquement avec deux bandes hydrophobes et goutte à l'état initial.

On propose d'appliquer les études précédentes à ce cas de texturation. Le substrat est hydrophile au centre et deux bandes fines de $6lu$ sont placées à $94lu$ du centre.

Pour commencer, la goutte va s'étaler sur la surface hydrophile jusqu'à ce que le rayon mouillé vaille $r_{hi} = 196lu$ ou que la ligne triple rencontre une texture.

La ligne triple arrive au point "1" qui est positionné à $94lu$ du centre de la goutte. La texture est une transition $Hi \rightarrow Ho$ ce qui signifie qu'il peut y avoir du collage si les conditions de collage sont respectées. Pour un rayon mouillé de $94lu$, $\theta_d = 121.7^\circ$. La condition de collage $\theta_d \in [60, 120]$ n'est pas respectée. La ligne triple avance donc sur le domaine hydrophile jusqu'à $r_w = r_{Ho}$ ou jusqu'à ce qu'elle rencontre une nouvelle texture.

La texture au point "2" est placée à $100lu$ du centre de la goutte et le rayon caractéristique de la surface hydrophobe vaut $97lu$. Par conséquent, la ligne triple s'arrête sur la surface hydrophobe avec les conditions suivantes : $\theta_e = 120^\circ$ et $r_w = r_{Ho} = 97lu$.

Si on réalise la simulation on obtient le résultat présenté dans la figure 6.17.

La condition d'équilibre sur le domaine hydrophobe a visiblement été dépassée. Cela signifie que le rayon mouillé était supérieur à sa valeur maximale théorique $r_w > 97lu$. Ce qui a permis à la ligne triple d'atteindre la transition $Ho \rightarrow Hi$ au point "2" ($r_w = 100lu$). La relâche étant prioritaire, la goutte s'est donc étalée de force sur le domaine hydrophile sans possibilité de retrait vers le domaine hydrophobe.

Cette étude met en avant le principe de sur-étalement résultant de la dynamique d'étalement. Dans le cas de la relâche de ligne triple, il y a un effet irréversible sur l'étalement de la goutte. En effet, en dépassant le rayon d'équilibre local, la goutte a rencontré une autre texture qui lui a permis de changer de domaine d'étalement. Cette transition est irréversible car, on se rappelle que la transition $Ho \rightarrow Hi$ correspond à de la relâche pour une ligne

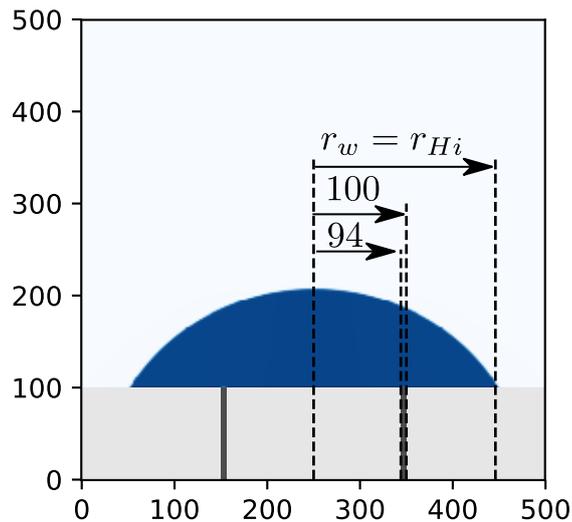


FIGURE 6.17 – Etat final avec un cas de sur-étalement sur une surface texturée chimiquement avec deux bandes hydrophobes.

triple qui avance mais pour une ligne triple qui recule, la transition $Ho \rightarrow Hi$ correspond à du collage, la ligne triple ne peut donc plus reculer dans le domaine hydrophobe. La relâche à ici un effet de diode, c'est à dire qu'elle n'autorise qu'un sens de déplacement de la ligne triple.

Le sur-étalement peut forcer la goutte à atteindre un état d'équilibre non anticipé par une étude théorique. Afin de pouvoir maîtriser le phénomène de sur-étalement, il faut étudier la dynamique de l'avancée de ligne triple afin de comprendre comment la texture modifie la dynamique du liquide.

6.4 Conclusion

Dans ce chapitre, on a montré que les texturations topographiques et chimiques sont liées à l'hystérèse d'angle de contact. On a relié les grandeurs suivantes :

$$\Delta\theta_{chimie} = \Delta H_{chimie} \quad (6.5)$$

$$\Delta\theta_{topo} = \Delta H_{topo} \quad (6.6)$$

Avec $\Delta\theta_{chimie}$ la texturation chimique, $\Delta\theta_{topo}$ la texturation topographique et ΔH_{chimie} et ΔH_{topo} les composantes chimiques et topographiques de l'hystérèse d'angle de contact. Ainsi, une autre forme de la force de déplacement de ligne triple a été proposée afin de prendre en compte cette notion d'hystérèse.

$$F_d = \gamma [\cos(\theta_{int,i} + \Delta H_{chimie}) - \cos(\theta_{d,i} - \Delta H_{topo})] \quad (6.7)$$

Avec $\theta_{int,i}$ l'angle intrinsèque local et $\theta_{d,i}$ l'angle dynamique local.

L'étude des phénomènes de collage et relâche nous ont permis de relier directement collage et hystérèse d'angle de contact (fig.6.2 et fig.6.3). Nous n'avons par contre pas réussi à relier le phénomène de relâche à un phénomène équivalent décrit dans la littérature. On a tout de même observé une forte instabilité du phénomène et son irréversibilité.

Les texturations ont été comparées et on est capable de caractériser quelle texture est la plus favorable à l'étalement. On a identifié l'effet de relâche comme texturation prioritaire et le collage comme texture la moins favorable à l'étalement.

L'étude des surfaces texturées périodiquement a permis de montrer que l'alternance de textures permet d'avoir périodiquement du collage et de la relâche de ligne triple sur la surface. En fonction de la taille des textures il est possible d'anticiper le comportement de la ligne triple. Cette démarche est complexe car en fonction des textures et de la dimension de la goutte (2D ou 3D) la ligne triple n'est plus seulement deux points mais peut devenir une infinité de points sur lesquels il faut appliquer les conditions d'équilibre local.

Enfin, on a montré que la dynamique d'étalement pouvait localement changer les conditions d'équilibre de la ligne triple et modifier le comportement de la goutte. Il est donc nécessaire d'étudier aussi le mouillage dynamiquement afin d'être capable de comprendre comment les textures influencent le mouillage et pouvoir identifier les propriétés de mouillabilité d'une surface.

Chapitre 7

Caractérisation de la dynamique de l'étalement d'une goutte sur une surface par simulation numérique

Sommaire

6.1	Introduction	128
6.2	Comportements caractéristiques identifiés	128
6.2.1	Collage	128
6.2.2	Relâche	130
6.3	Limites des études statiques	132
6.3.1	L'infinité de points triples	132
6.3.2	Texturation périodique	133
6.3.3	Priorité d'étalement	138
6.3.4	Mouillage 3D	141
6.3.5	Influence de la dynamique	144
6.4	Conclusion	146

Il a précédemment été montré que la dynamique de l'étalement joue un rôle sur l'état d'équilibre d'une goutte. On a fait l'hypothèse qu'un phénomène de sur-étalement pouvait parfois contraindre la goutte à changer d'état d'équilibre. Ce sur-étalement a besoin d'être caractérisé afin de pouvoir anticiper l'état final d'une goutte étalée sur une surface.

Dans ce chapitre, nous proposons donc d'étudier la dynamique de l'étalement. Trois grandeurs caractéristiques du mouillage vont être observées en fonction du temps : la longueur du rayon mouillé, l'angle de contact dynamique et la hauteur de goutte.

Ces trois grandeurs vont être étudiées en fonction des texturations de surfaces. Dans un premier temps, on va s'intéresser au comportement dynamique d'une goutte qui s'étale sur une surface plane et homogène. Puis, dans un second temps on introduira de la texturation chimique et topographique aux surfaces afin de caractériser l'effet de la texturation sur le comportement dynamique d'une goutte. Enfin dans un troisième temps, les surfaces auront des textures périodiques chimiques ou topographiques.

7.1 Etude du comportement dynamique d'une goutte sur une surface plane et chimiquement homogène

Dans cette première étude, nous allons nous intéresser au comportement dynamique d'une goutte sur une surface plane et chimiquement homogène : une surface sans texture. Le comportement va être caractérisé avec deux configurations, une ligne triple qui avance et une ligne triple qui recule. On va aussi faire varier l'angle de contact intrinsèque de la surface afin de caractériser les différences dynamiques induites par la nature hydrophile ou hydrophobe de la surface. Les angles de contact intrinsèques choisis sont compris entre 40° et 150° .

On va utiliser la même configuration que dans l'étude de l'influence de la texturation chimique (Chapitre 5). Les états initiaux sont présentés dans le figure 7.1.

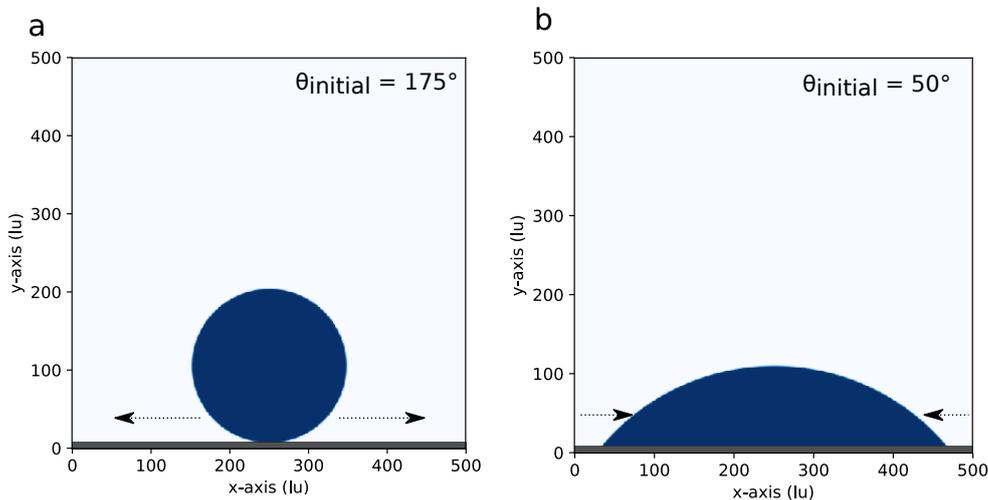


FIGURE 7.1 – États initiaux des simulations pour l'étude de la dynamique de l'étalement sur surface non texturée. a) Avancée de ligne triple, b) reculée de ligne triple.

Les courbes d'évolution de la position de la ligne triple et de l'angle de contact au point triple à droite de la goutte sont présentés dans la figure 7.2.

On observe dans la figure 7.2 que pour une ligne triple qui avance, la courbe de l'évolution de la position de la ligne triple (a) augmente puis se stabilise pour une valeur r_w égale au rayon caractéristique, r_c , de la surface. Pour des angles intrinsèques de surface proches de 90° , on observe un dépassement de r_w puis une oscillation du rayon mouillé. L'étude de

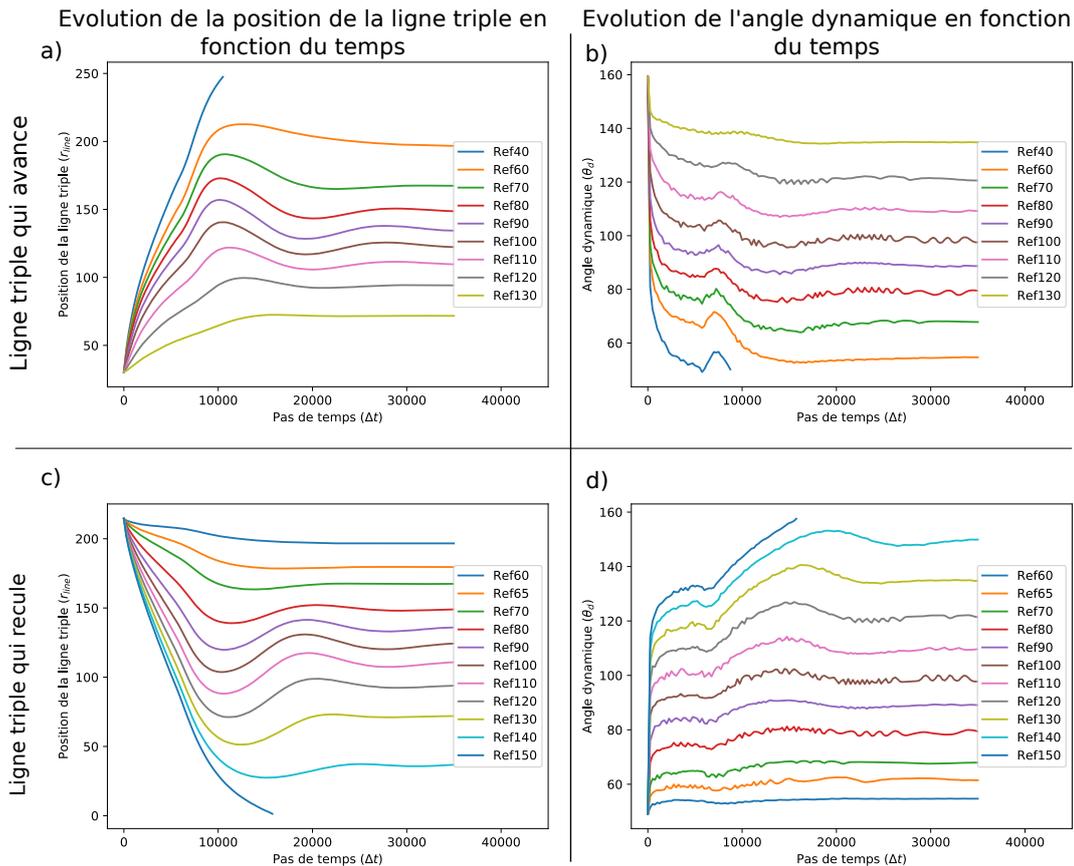


FIGURE 7.2 – Evolution de la position de la ligne triple et de l'angle de contact en fonction des pas de temps. a)-b) Avancée de ligne triple, c)-d) Reculée de ligne triple.

l'angle dynamique pour une ligne triple qui avance (fig. 7.2b) montre une forte décroissance de l'angle de contact suivi d'une augmentation puis une nouvelle diminution qui tend vers l'angle d'équilibre. On remarque que l'augmentation brusque de l'angle de contact est visible pour toutes les natures de surface.

Pour le cas d'une ligne triple qui recule, (fig. 7.2c et 7.2d), on constate que la position de la ligne triple diminue avec le temps puis se stabilise à r_w . Pour les angles intrinsèques près de 90° , la courbe est déformée et oscille vers l'équilibre. Ensuite, pour l'évolution de l'angle de contact, on observe aussi une très forte augmentation de l'angle suivie d'une diminution et ensuite une ré-augmentation de l'angle dynamique pour atteindre l'équilibre.

On a vu que l'avancée et la reculée ont des courbes d'évolution similaires, on va donc s'intéresser plus en détail à l'avancée dans le cas d'un substrat à 90° d'angle intrinsèque. Les courbes de l'évolution de la position de la ligne triple et de l'angle de contact dynamique en fonction du temps sont affichées dans la figure 7.3. La hauteur de la goutte est aussi affichée dans cette figure car on a constaté que la hauteur de goutte varie fortement pendant l'étalement.

A partir de la figure 7.3, on caractérise quatre domaines de comportement de la goutte. Le domaine I qui va de l'état initial au point A, la domaine II entre les points A et B. Le domaine III entre les points B et C et le domaine IV du point C à l'équilibre.

Les états d'étalement initial et final et aux points A, B, C et D sont présentés dans la figure 7.4. Le point D qui n'a pas encore été explicité correspond à l'étalement maximal de

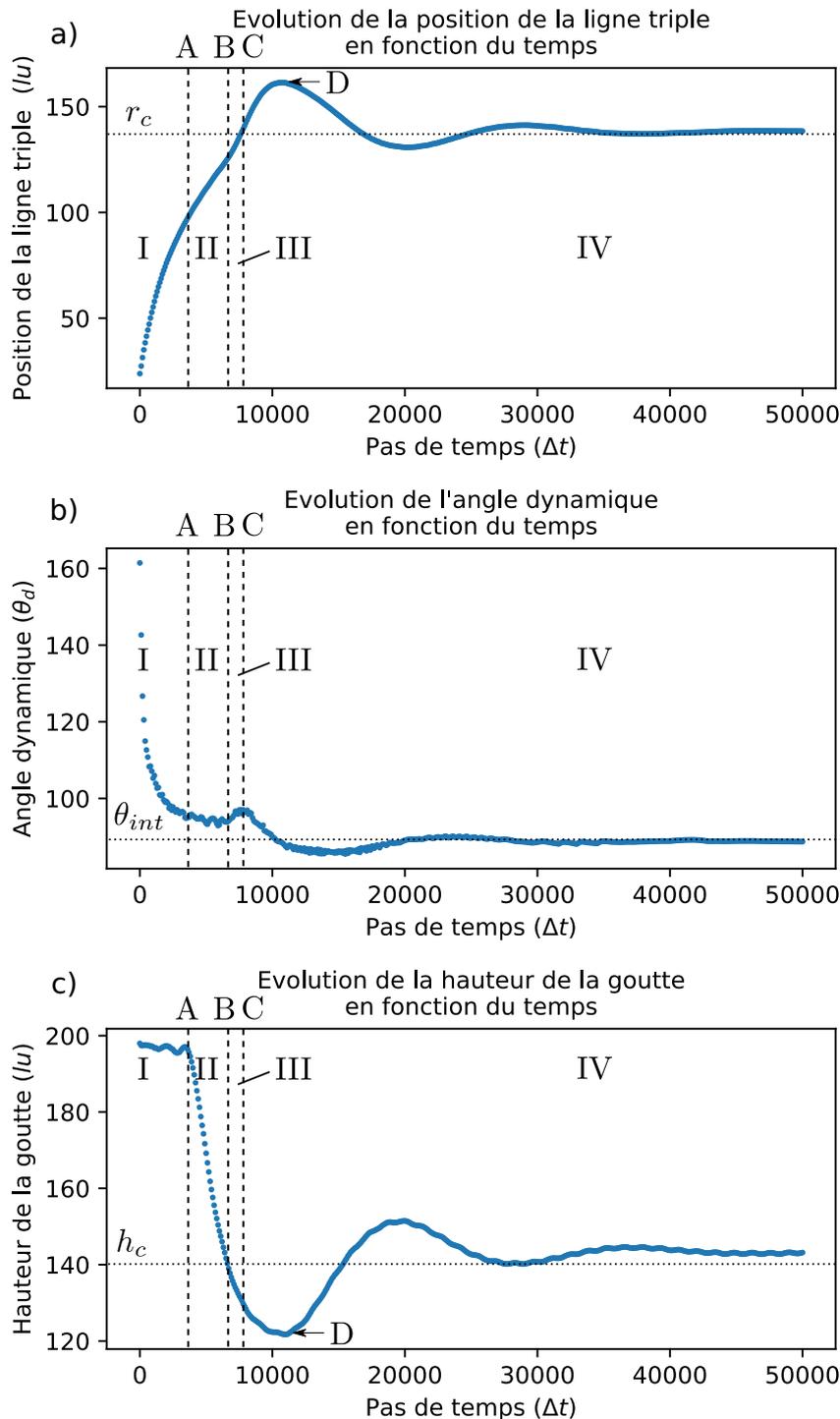


FIGURE 7.3 – Évolution des paramètres de la goutte en fonction du temps et pour un substrat d'angle intrinsèque de 90° et une ligne triple qui avance : a) Évolution de la position de la ligne triple, b) Évolution de l'angle de contact dynamique, c) Évolution de la hauteur de goutte.

la goutte, c'est-à-dire le rayon mouillé maximal de la goutte pendant l'étalement. D'après les courbes (fig. 7.3) et les images de la goutte déformée pendant l'étalement (fig. 7.4), les différents domaines d'évolution de la goutte pendant son étalement vont être caractérisés. En plus, des schémas 7.5, permettent mieux imagier le comportement de la goutte.

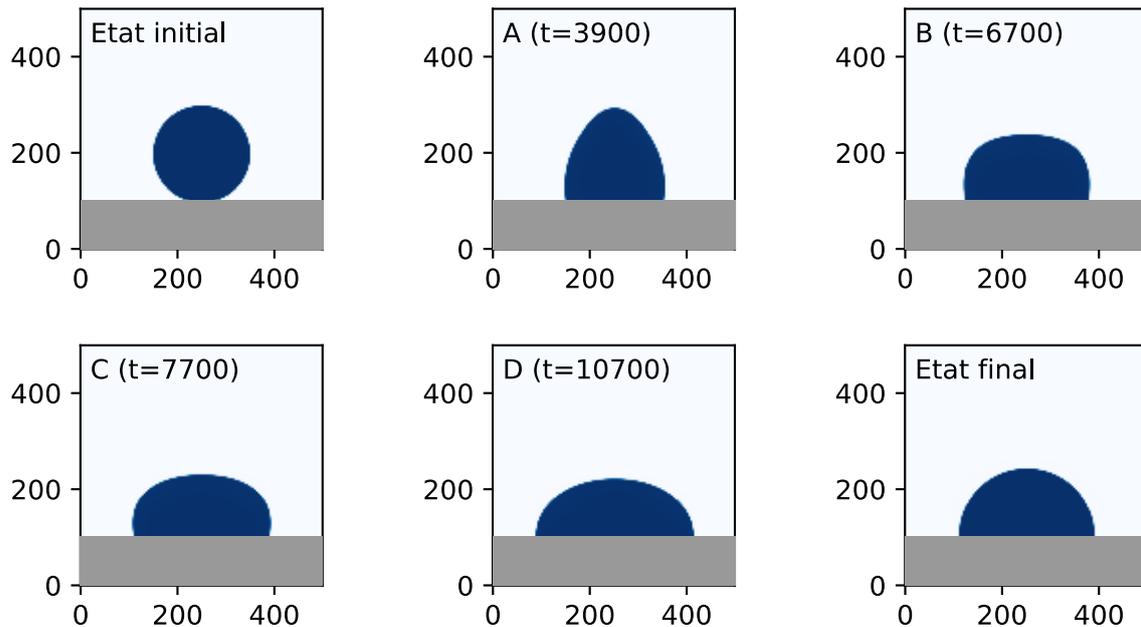


FIGURE 7.4 – Évolution d'une goutte sur un substrat d'angle intrinsèque de 90° . Les états initial et final sont présentés ainsi que les temps caractéristiques, A pour la transition entre les domaines I et II, B transition entre les domaines II et III, C pour la transition entre les domaines III et IV et enfin, D la cas où la goutte présente le rayon mouillé maximal et la hauteur de goutte minimale.

Domaine I : On remarque que la hauteur de goutte reste constante, l'angle dynamique diminue et le rayon mouillé augmente. Avec ces conditions, la goutte prend une forme triangulaire. C'est la force d'avancée de la ligne triple qui semble piloter le comportement de la goutte. La ligne triple avance vite et l'angle diminue. La hauteur ne suit pas le mouvement de ligne triple, la goutte a donc une forme triangulaire. Si on découpe la goutte en deux parties : inférieure et supérieure, la partie inférieure, proche du solide avance très vite comparé à la partie supérieure de la goutte. Cette différence de vitesses génère une diminution d'angle de contact.

Domaine II : On remarque que ce domaine se caractérise par une forte chute de la hauteur de la goutte. L'angle de contact varie peu et est proche de l'équilibre. Le rayon mouillé augmente. La goutte prend une forme rectangulaire. La partie supérieure et inférieure de la goutte vont à la même vitesse, l'angle de contact dynamique est donc constant.

Domaine III : On remarque un point d'inflexion sur la courbe de la position de la ligne triple au début du domaine III. Cette augmentation plus importante du rayon mouillé s'explique par l'augmentation de l'angle de contact. La goutte reprend une forme arrondie. La hauteur de goutte diminue trop par rapport à sa hauteur à l'équilibre. Ce phénomène entraîne une augmentation du déplacement de la ligne triple et une augmentation de l'angle dynamique. On remarque que la vitesse au niveau de la ligne triple est plus faible que dans la partie supérieure de la goutte.

Domaine IV : Ce dernier domaine correspond à une oscillation de toutes les grandeurs : positions de la ligne triple, angle de contact dynamique et hauteur de goutte, jusqu'à l'équilibre.

Les différents domaines et leurs caractéristiques sont présentés dans le tableau 7.1.

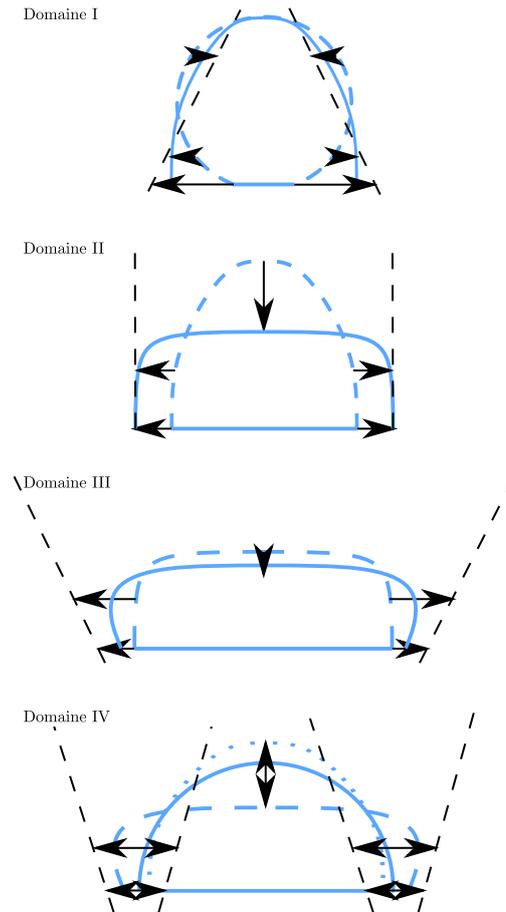


FIGURE 7.5 – Schéma des quatre comportements de la goutte pendant son étalement.

Domaine	Hauteur h	Rayon mouillé r_w	Angle dynamique θ_d
I	→	↗	↘
II	↘	↗	→
III	↘	↗	↗
IV	↕	↕	↕

TABLE 7.1 – Caractéristiques des domaines d'évolution dynamique d'une goutte pendant son étalement sur une surface plane (→ : constant, ↗ : augmente, ↘ : diminue et ↕ : oscille).

Ces quatre configurations d'étalement sont à prendre en compte pour l'étude dynamique de l'effet de la texturation sur le comportement d'une goutte. En effet, on a remarqué que la vitesse au niveau de la ligne triple et dans les couches supérieures de la goutte ont un rôle important dans l'étalement dynamique. On peut donc s'intéresser à l'effet de la texturation sur la vitesse de la ligne triple. On note aussi que la notion de la viscosité du fluide semble être une grandeur caractéristique du comportement dynamique d'une goutte.

La différence de vitesse entre le fluide près du substrat et loin du substrat sont présentés dans la figure 7.5.

- Si la partie du fluide proche du solide va plus vite que la partie supérieure du solide, alors l'angle de contact diminue. Ce cas correspond au domaine I.
- Si la partie du fluide proche du solide va à la même vitesse que la partie supérieure du fluide, alors l'angle de contact reste constant. Ce cas correspond au domaine II.

- Si la partie du fluide proche du solide va moins vite que la partie supérieure du solide, alors l'angle de contact augmente. Ce cas correspond au domaine III.

Nous allons étudier dans un premier temps la texturation chimique puis dans un second temps la texturation topographique en prenant en compte la position de la texture par rapport au domaine d'évolution dynamique de la goutte. Cela nous permettra d'observer l'effet de la texturation en fonction de la vitesse relative entre la partie du fluide proche du solide et loin du solide.

7.2 Etude de l'effet de la texturation chimique sur le comportement dynamique d'une goutte pour des surfaces à une texture

Nous avons précédemment montré que quatre domaines de comportement existent. Nous allons donc les prendre en compte pour cette étude. Pour les considérer, nous choisissons de placer la texturation chimique dans ces domaines.

7.2.1 Paramétrage de l'étude

Les différents paramètres qui vont être étudiés sont : le domaine de la position de la texture (I à IV), l'intensité de la texture ($|\Delta H_{chimie}|$) et la nature de la texture (collage ou relâche). On va reprendre le même système que dans l'étude de la section précédente. La goutte a un rayon de $100lu$ dans un lattice carré de $500lu$ de côté. l'état initial est présenté dans la figure 7.6.

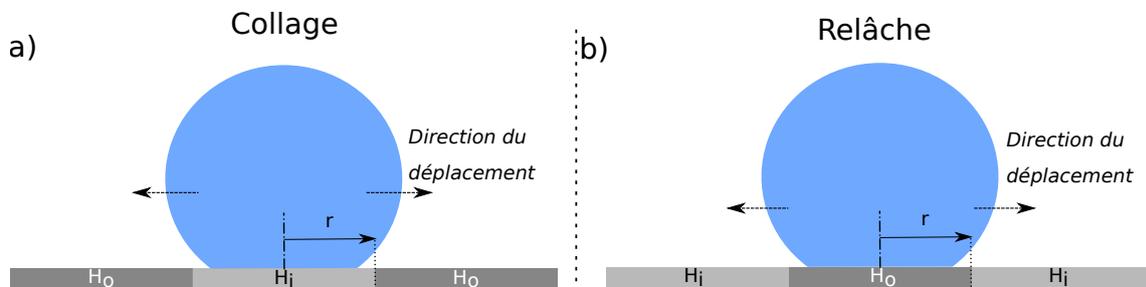


FIGURE 7.6 – États initiaux de l'étude de l'influence de la texturation chimique sur le comportement dynamique d'une goutte qui s'étale. a) Effet de collage, b) effet de relâche.

Les positions de texture r sont : $80lu$, $110lu$, $135lu$, $150lu$. L'intensité de la texturation vaut 30° et 60° . Dans le cas du collage, cela correspond à une chimie centrale de 90° et une chimie extérieure de 120° et 150° . Dans le cas de la relâche, cela correspond à une chimie centrale de 90° et une chimie extérieure de 60° et 30° .

Les résultats sont présentés en deux temps. Pour commencer, nous allons présenter l'influence de l'effet de collage et pour finir nous étudierons l'influence de l'effet de relâche.

7.2.2 Effet du collage chimique sur le comportement dynamique d'une goutte

Nous allons présenter l'évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps pour les quatre valeurs de r proposées (fig. 7.7 \rightarrow fig. 7.10). Ainsi, nous allons pouvoir observer comment la texturation chimique, dans cette étude une transition $H_i \rightarrow H_o$ (collage), peut influencer le comportement d'étalement d'une goutte.

Texture dans le domaine I (fig. 7.7)

La texture est placée dans le domaine I. Le domaine I correspond au domaine d'évolution de la goutte dans lequel la ligne triple et l'angle de contact évoluent fortement et la hauteur de goutte reste constante. Les courbes de référence présentées dans l'étude de l'étalement sur surface plan sont tracées sur les graphes afin de comparer l'effet de la texture à cette

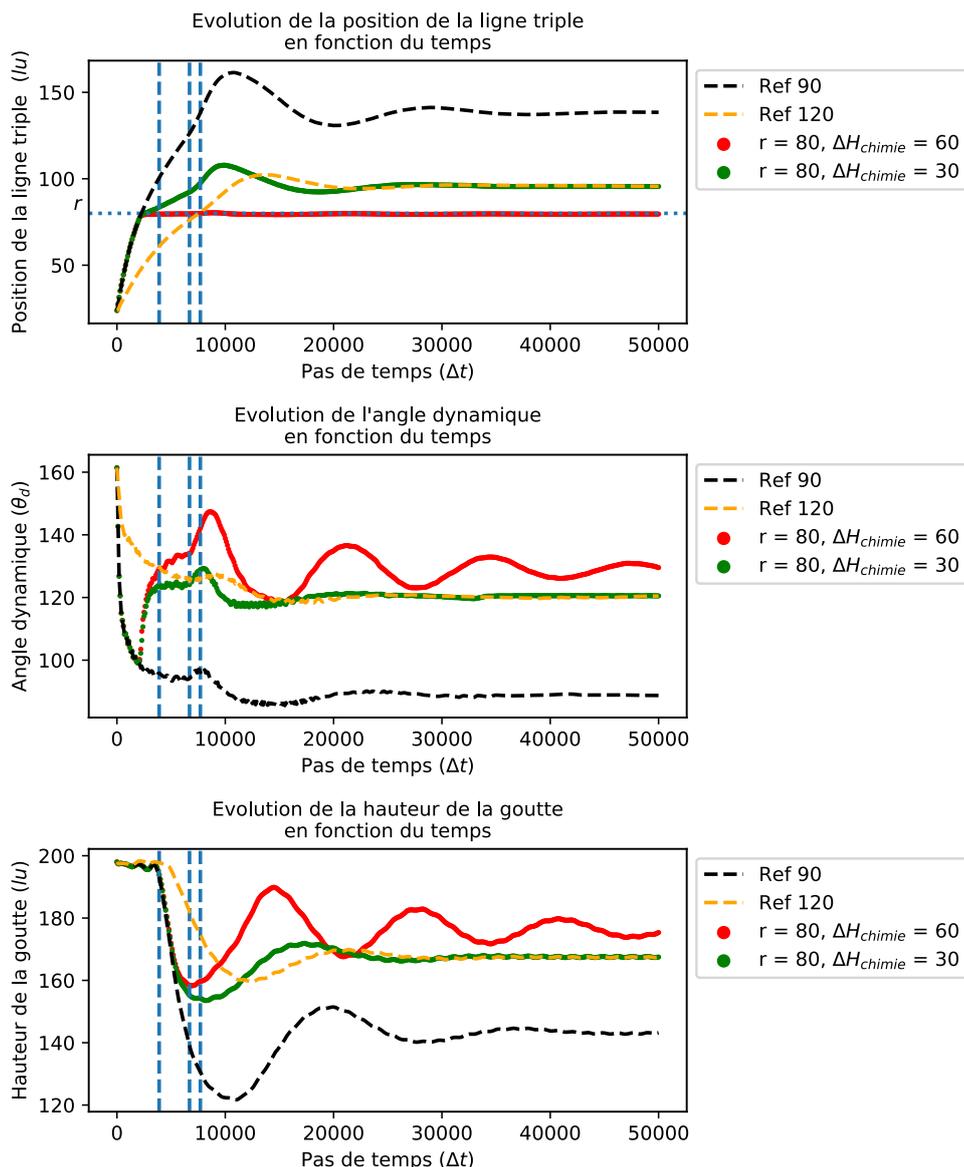


FIGURE 7.7 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de collage placée dans le domaine I.

référence.

On note déjà deux comportements très différents en fonction de ΔH_{chimie} pour les courbes de la position de la ligne triple. Pour un ΔH_{chimie} de 60° , la ligne triple devient fixe à la texture. C'est l'effet de collage. On a $r_{\theta=150^\circ} = 50lu$ et comme $r = 80lu$ la ligne triple colle à la texture. Pour le cas où $\Delta H_{chimie} = 30$, la ligne triple peut s'étaler sur la surface hydrophobe car $r_{\theta=120^\circ} = 97lu$ et donc $r_{\theta=120^\circ} > r$. On a donc ici deux cas très différents. Dans le cas d'une hystérèse faible (courbe verte dans la figure 7.7), la ligne triple traverse la texture. On observe que la position de la ligne triple en fonction du temps est très impactée par la texture. La ligne triple évolue beaucoup plus lentement après la texture. On observe que dans le domaine I, le comportement de la goutte avant texture est le même que la référence à 90° et après texture, il y a une transition vers le comportement de la référence à 120° . Cette transition se caractérise par une augmentation très brusque de l'angle de contact dynamique. Les domaines II, III et IV deviennent similaires aux domaines d'une goutte sur un plan d'angle de contact intrinsèque de 120° .

Dans le cas d'une hystérèse forte (courbe rouge dans la figure 7.7), on a remarqué que la ligne triple se bloque sur la texture et elle reste collée à la texture jusqu'à l'équilibre. Le domaine IV de la courbe, le domaine oscillatoire, est fortement perturbé. Cette perturbation peut être expliquée par la perte d'un degré de liberté de la goutte. En effet, dans les cas de référence, pendant la phase oscillatoire, la goutte a un angle dynamique, une hauteur et une position de ligne triple qui varie. Dans le cas d'une ligne triple collée à la surface, on observe que la position n'oscille pas, elle est fixe, ce qui accroît le comportement oscillatoire de la goutte. Seulement deux variables peuvent osciller au lieu de trois.

Texture dans le domaine II (fig. 7.8)

Dans cette étude, la texture est placée dans le domaine II. Ce domaine correspond au domaine d'évolution de la goutte dans lequel la ligne triple continue son évolution, l'angle de contact devient constant et la hauteur de goutte chute fortement. Les courbes de référence présentées dans l'étude de l'étalement sur surface plan sont tracées sur les graphes afin de comparer l'effet de la texture à cette référence.

La texture est placée plus loin que dans l'étude dans le domaine I et on observe le phénomène de collage. A l'équilibre, la ligne triple est collée à la texture pour les deux valeurs d'intensité de texturation.

Dans le cas d'une hystérèse faible (courbe verte dans la figure 7.8), avant la texture, l'évolution dynamique de la goutte est identique à l'évolution de la goutte de référence. La texture n'a aucun effet sur la goutte tant que la ligne triple ne touche pas la texture. Ensuite, lorsque la ligne triple entre en contact avec la texture, elle se bloque. Ce collage entraîne une forte augmentation de l'angle de contact mais ne semble pas affecter l'évolution de la hauteur de goutte qui continue de décroître en suivant la courbe de référence. On a défini le domaine II comme le domaine dans lequel la hauteur de goutte chute fortement, l'angle de contact est constant et l'étalement de la ligne triple est supposé continuer son évolution en conséquence. On observe que dans le cas du collage dans le domaine II, la descente brusque de la hauteur de goutte n'est pas influencée par la texture dans le domaine II, la ligne triple est bloquée et l'angle de contact qui devrait être constant varie fortement en réponse au blocage de la ligne triple.

Après la fin du domaine II observée pour la courbe de référence, la ligne triple avance sur la surface hydrophobe. Ce déplacement peut s'expliquer par la forte diminution de la hauteur de goutte qui a fortement augmenté l'angle de contact et lorsque l'angle de contact dynamique a dépassé les 120° , la condition de collage a été dépassée et la ligne triple s'est détachée de la texture pour s'étaler sur la surface hydrophobe. Enfin la hauteur de goutte et l'angle dynamique oscillent. Lorsque l'amplitude d'oscillation de l'angle de contact est suffisante pour dépasser la condition de collage, on observe une faible oscillation de la ligne triple. On voit bien dans cette étude que l'angle de contact, en oscillant, peut dépasser temporairement la condition de collage et permettre à la ligne triple d'osciller elle aussi. On remarque aussi que la courbe d'évolution de la hauteur de goutte commence son oscillation plus tôt avec une valeur de dépassement plus faible, une fréquence plus importante et une valeur d'équilibre plus grande. On note aussi que les oscillations de l'angle dynamique et de la hauteur de goutte sont déphasées d'une demi-période. Lorsque la hauteur est maximale, l'angle est minimal et inversement.

Dans le cas d'une hystérèse forte (courbe rouge dans la figure 7.8), le comportement de la goutte suite le comportement de la goutte de référence jusqu'à ce que la ligne triple touche la texture. Ensuite, on observe directement le comportement oscillatoire. La ligne triple est collée à la texture, elle est donc fixe. La perte de ce degré de liberté entraîne une forte oscillation de l'angle de contact et de la hauteur de goutte. On observe aussi le déphasage

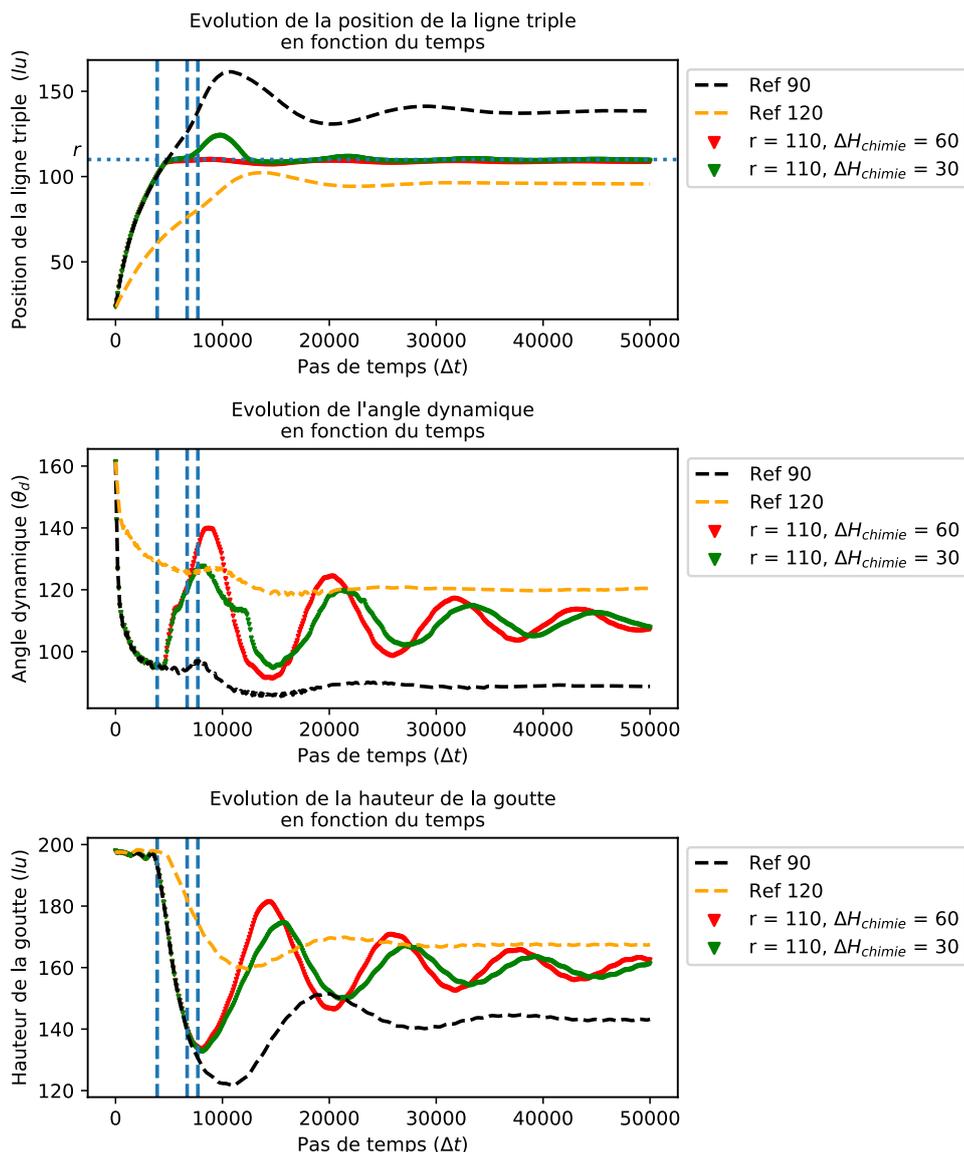


FIGURE 7.8 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de collage placée dans le domaine II.

d'une demi-période entre les deux variables libres. L'angle de contact dynamique ne dépasse jamais la condition de collage, la ligne triple reste donc fixe tout le temps après le collage.

Avant le contact ligne triple – texture, l'évolution de la goutte est identique quelque soit l'intensité de la texture. On remarque que l'amplitude maximale des oscillations après contact dépend de l'intensité de la texturation. Plus l'intensité est importante, plus l'amplitude d'oscillation est importante.

Texture dans le domaine III (fig. 7.9)

Dans cette étude, la texture est placée dans le domaine III. Ce domaine correspond au domaine d'évolution de la goutte dans lequel la ligne triple continue son évolution, l'angle de contact augmente et la hauteur de goutte continue de diminuer. Les courbes de référence présentées dans l'étude de l'étalement sur surface plan sont tracées sur les graphes afin de

comparer l'effet de la texture à cette référence.

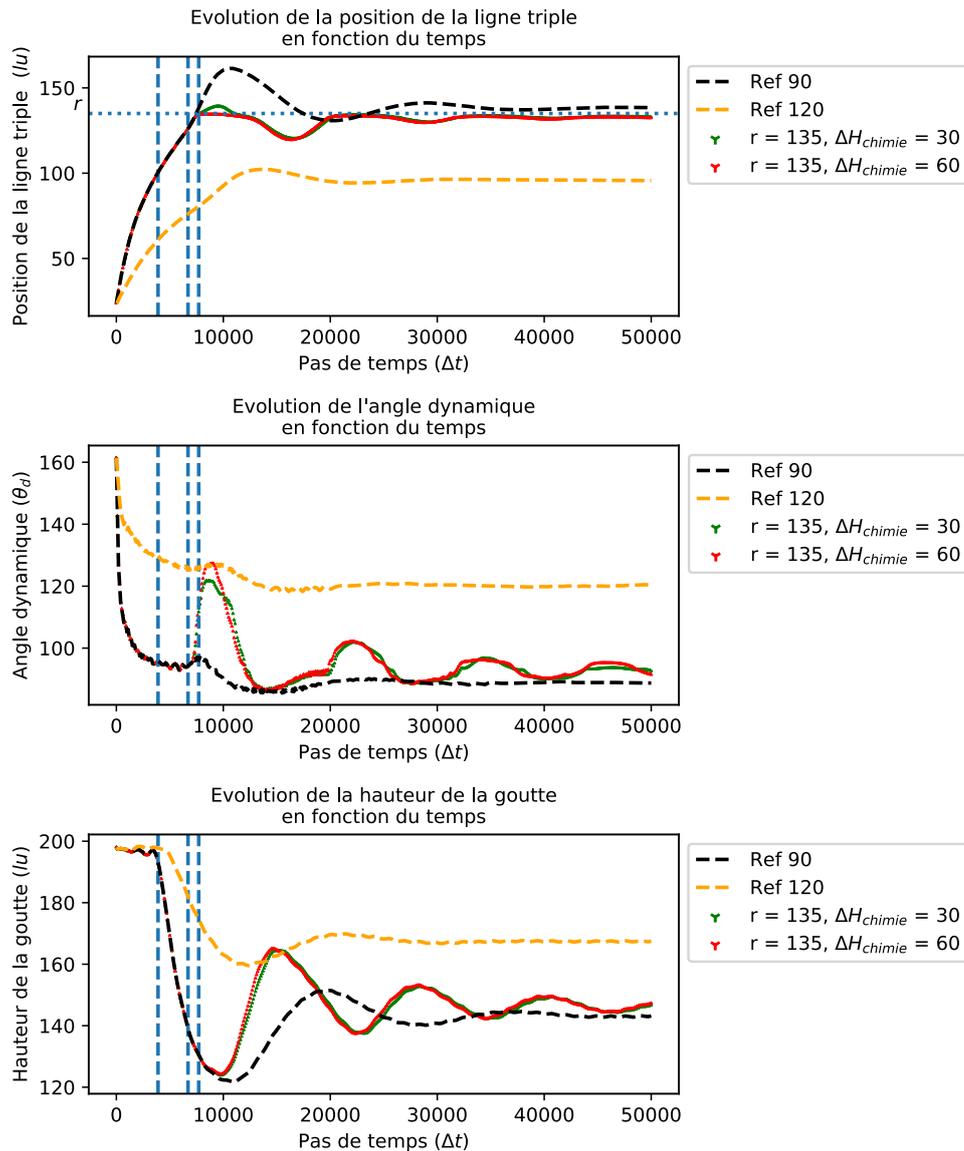


FIGURE 7.9 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de collage placée dans le domaine III.

Dans le cas d'une hystérèse faible (courbe verte dans la figure 7.9) et d'une hystérèse forte (courbe rouge dans la figure 7.9), le comportement de la goutte est similaire. La différence se fait au niveau de la condition de collage, qui est dépassée pour la première oscillation pour une texturation chimique faible.

Comme pour les deux études précédentes, tant que la ligne triple n'a pas atteint la texture, l'évolution de la goutte n'est pas influencée par la texture. Une fois la texture atteinte. Les trois variables (ligne triple, angle et hauteur) oscillent. On remarque que l'oscillation de la ligne triple est bloquée par la texturation chimique et ainsi la ligne triple ne peut pas dépasser cette valeur seuil. Ce blocage de la ligne triple sur la texture impacte beaucoup l'évolution de l'angle de contact tandis que l'évolution de la hauteur ne semble pas impactée.

Texture dans le domaine IV (fig. 7.10)

La texture est placée dans le domaine IV. Dans ce domaine, la goutte oscille jusqu'à atteindre l'équilibre entre la position de la ligne triple, l'angle de contact et la hauteur de goutte. Les courbes de référence présentées dans l'étude de l'étalement sur surface plan sont tracées sur les graphes afin de comparer l'effet de la texture à cette référence. Dans cette configuration, r est supérieur au rayon statique.

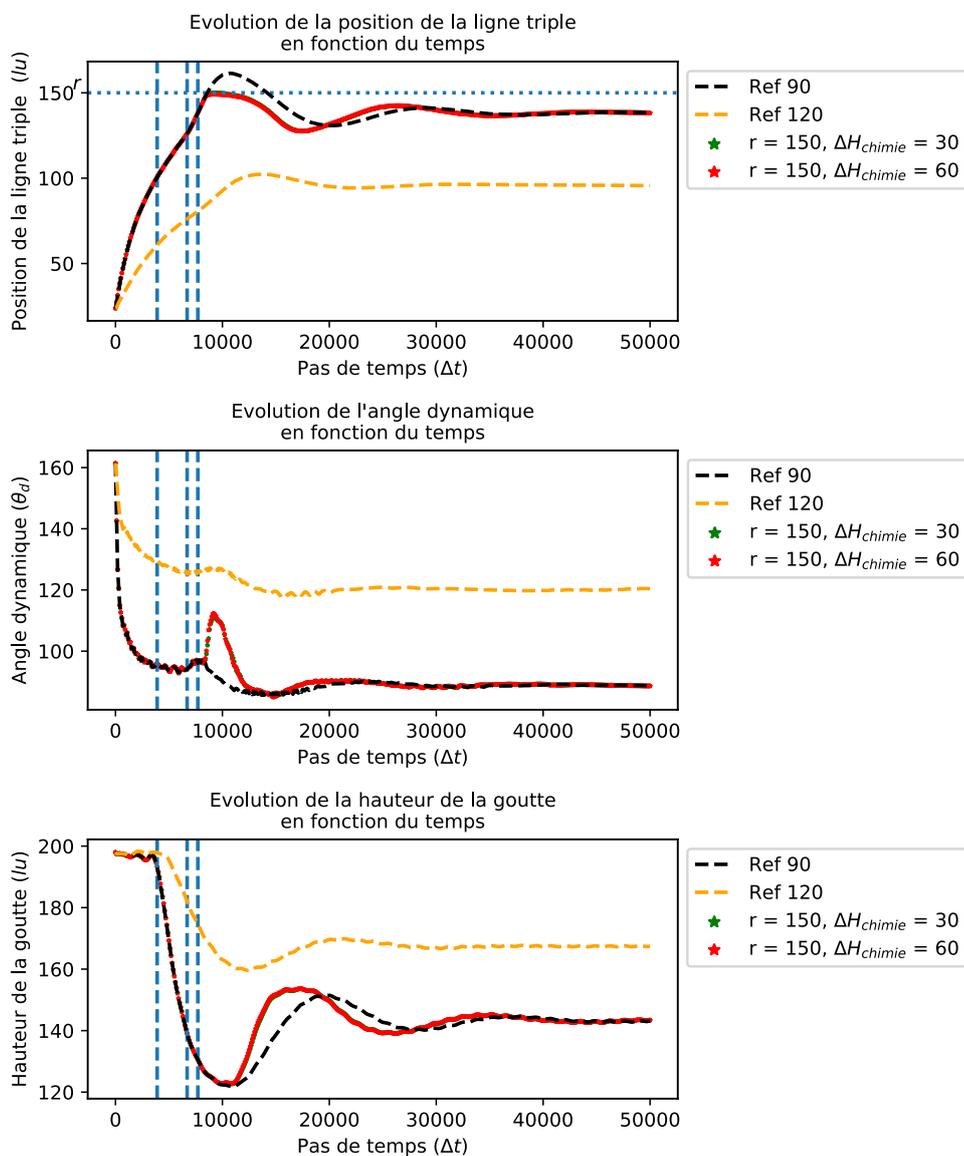


FIGURE 7.10 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de collage placée dans le domaine IV.

Dans le cas d'une hystérèse faible (courbe verte dans la figure 7.9) et d'une hystérèse forte (courbe rouge dans la figure 7.9), les courbes sont confondues. On peut faire l'hypothèse que dans le domaine IV, l'intensité de la texturation n'a plus d'effet sur le comportement de la goutte tant qu'il n'y a pas de dépassement des conditions de collage.

On remarque que la ligne triple touche la texture pendant la première oscillation, ce qui entraîne un blocage de la ligne. En réaction, l'angle de contact augmente très fortement. L'évolution de la hauteur a sa première période qui est réduite par cet effet de collage.

Nous avons montré qu'en dynamique et pour une texturation chimique de collage, tant que la ligne triple ne touche pas la texture, l'évolution de la goutte n'est pas impactée par la texture.

Nous constatons que l'effet de collage bloque la ligne triple et que ce blocage entraîne une forte augmentation de l'amplitude d'oscillation de l'angle de contact et de la hauteur de goutte. Cette oscillation de l'angle de contact accrue peut entraîner un dépassement temporaire des conditions de collage et permettre un sur-étalement dans le domaine hydrophobe. De plus, la réponse de l'angle de contact au phénomène de blocage est grande, l'angle augmente brusquement, ce qui facilite le dépassement des conditions de collage comme on peut l'observer dans la figure 7.9.

Cette notion de degré de liberté perdu par le phénomène de collage est importante. En réponse, l'angle de contact va directement réagir en augmentant fortement. La hauteur est impactée plus tard, sa période est réduite.

7.2.3 Effet de la relâche chimique sur le comportement dynamique d'une goutte

Le détail de cette étude est présenté en Annexe A.

Il est montré que l'effet de relâche pour une texturation chimique va annuler le phénomène oscillatoire. Tant que la texture n'est pas traversée, la goutte se comporte comme si elle s'étalait sur une surface plane et homogène chimiquement. Lorsque la texture est traversée, la goutte subit un second étalement sur la nouvelle chimie. Il est intéressant de noter que l'angle dynamique qui augmentait fortement pour le collage a un comportement contraire pour la relâche. L'angle dynamique chute à la traversé de la texture. L'effet de relâche permet à la goutte d'atteindre l'équilibre statique plus tôt que pour le cas d'un étalement sur un plan homogène. Cela s'explique par la suppression du domaine oscillatoire.

7.2.4 Conclusion sur l'effet de la texturation chimique sur le comportement dynamique de l'étalement d'une goutte

Nous avons précédemment expliqué que les quatre domaines d'évolution dynamique d'une goutte viennent de la différence de vitesse entre les couches au cœur de la goutte et la vitesse de la ligne triple.

Le collage a pour effet de bloquer l'évolution de la ligne triple. Ce blocage impose une vitesse nulle de la ligne triple. Cette contrainte vient faire perdre un degré de liberté à la goutte ce qui génère une forte oscillation des deux variables restantes : la hauteur de goutte et l'angle de contact dynamique. Nous avons aussi remarqué que lorsque la condition de collage n'est pas respectée, la ligne triple peut se déplacer sur le domaine hydrophobe. Dans ce cas, la ligne triple est plus lente que sur le domaine hydrophile. La transition $Hi \rightarrow Ho$ a pour effet de ralentir la ligne triple. Comme nous avons vu précédemment, un ralentissement de la ligne triple permet aux couches de liquide supérieures de dépasser la vitesse de la ligne triple plus tôt et ainsi une très forte augmentation de l'angle de contact est observée.

Contrairement au collage, la relâche va accélérer la ligne triple. Nous avons remarqué que le domaine oscillatoire avant équilibre est très court lorsque la ligne triple traverse une frontière $Ho \rightarrow Hi$. Cela s'explique par le fait que sans texture, pendant le domaine III, la ligne triple est plus lente que les couches supérieures du fluide, or, avec un effet de relâche, la ligne triple est réactivée et s'étale suffisamment vite pour conserver une avance sur les couches supérieures. Ainsi, la goutte a un comportement beaucoup plus stable.

7.3. Etude de l'effet de la texturation topographique sur le comportement dynamique d'une goutte pour des surfaces à une texture

Ces deux texturations et leur effet sur le comportement d'une goutte est représenté dans la figure 7.11.

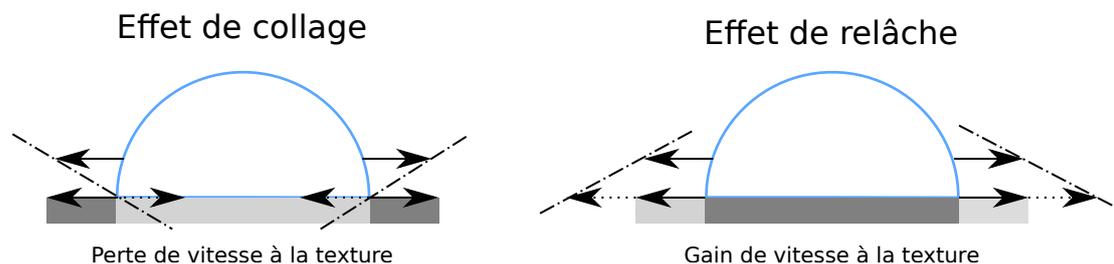


FIGURE 7.11 – Représentation de l'effet des texturations chimiques sur le comportement dynamique d'une goutte qui s'étale.

7.3 Etude de l'effet de la texturation topographique sur le comportement dynamique d'une goutte pour des surfaces à une texture

L'influence de la texturation topographique sur l'étalement d'une goutte est aussi étudiée. Nous allons regarder l'évolution de la hauteur de goutte, de la position de la ligne triple et de l'angle dynamique en fonction des effets de collage et de relâche pour une texturation topographique brusque et continue.

Pour l'étude des topographies brusques, une texture est placée dans chacun des domaines afin d'étudier l'effet de la texturation en fonction de l'évolution d'étalement d'une goutte. Pour l'étude des surfaces continues, nous allons nous intéresser au cas d'une surface courbe avec un rayon de courbure constant.

7.3.1 Paramétrage de l'étude

Pour l'étude de la texturation brusque, les différents paramètres qui vont être étudiés sont : le domaine de la position de la texture (I à IV) et la nature de la texture (collage ou relâche). On va reprendre le même système que dans l'étude plane de la section précédente. La goutte a un rayon de $100lu$ dans un lattice carré de $500lu$ de côté. L'état initial est représenté dans la figure 7.12 Les positions de texture r sont : $80lu$, $110lu$, $135lu$, $150lu$. L'intensité de la

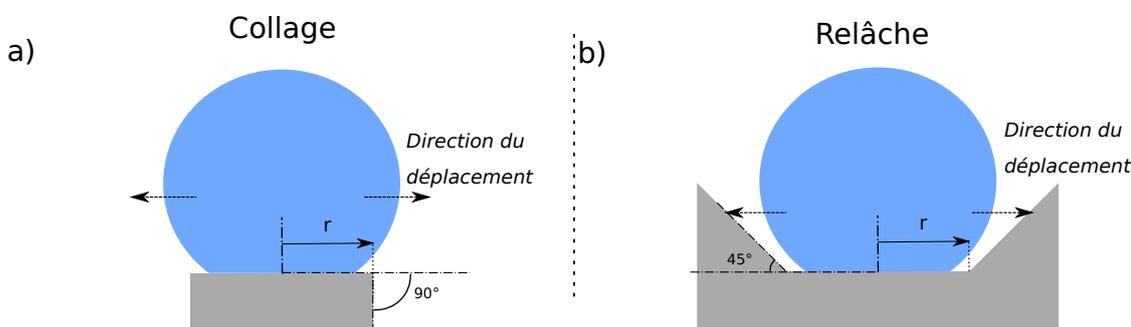


FIGURE 7.12 – États initiaux de l'étude de l'influence de la texturation topographique brusque sur le comportement dynamique d'une goutte qui s'étale. a) Effet de collage pour une texturation entrante, b) effet de relâche pour une texturation sortante.

texturation dans le cas des textures entrantes est de 90° . Dans le cas des texture sortantes, l'intensité étudiée vaut 45° . Enfin, le substrat a un angle de contact intrinsèque de 90° .

Pour la texturation continue, deux surfaces vont être simulées : une surface concave avec un rayon de $250l_u$ et une surface convexe avec un rayon de $250l_u$. Les surfaces ont un angle de contact intrinsèque de 90° . La représentation de l'état initial est proposée dans la figure 7.13

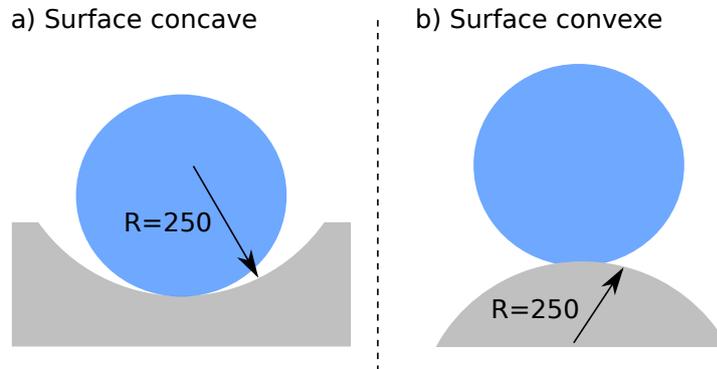


FIGURE 7.13 – États initiaux de l'étude de l'influence de la texturation topographique continue sur le comportement dynamique d'une goutte. a) Surface concave, b) surface convexe.

Les résultats sont présentés en trois temps. Pour commencer, nous allons présenter l'influence de l'effet de collage pour une texturation topographique brusque. Puis, nous étudierons l'effet de relâche pour une texturation topographique brusque. Pour finir, nous présenterons l'étude de l'influence de la texturation continue concave et convexe.

7.3.2 Effet du collage topographique sur le comportement dynamique d'une goutte

Nous allons pouvoir observer comment la texturation topographique - dans cette étude une texturation entrante (collage) - peut influencer le comportement d'étalement d'une goutte.

Texture dans le domaine I (fig. 7.14)

La texture est placée dans le domaine I.

On observe qu'avant que la ligne triple ne touche la texture, l'évolution de la position de la ligne triple, de la hauteur de la goutte et de l'angle dynamique suit celle de la courbe de référence. Dès que la ligne triple rencontre la texture, elle devient fixe. On observe une forte croissance de l'angle de contact qui passe de 90° à 130° pendant que la hauteur de goutte reste constante. Ensuite, l'angle de contact dynamique continue légèrement d'augmenter de 130° à 135° et la hauteur de goutte diminue fortement. Puis, la hauteur de goutte et l'angle de contact oscillent jusqu'à l'équilibre de la goutte. L'angle de contact dynamique atteint l'équilibre pour un angle de 128° .

On constate que la perte d'un degré de liberté lorsque la ligne triple est fixée à la texture entraîne une forte réaction du système qui se traduit par une forte oscillation de la hauteur et de l'angle dynamique.

Texture dans le domaine II (fig. 7.15)

Dans cette étude, la texture est placée dans le domaine II.

On observe que tant que la ligne triple n'a pas touché la texture, le système évolue comme

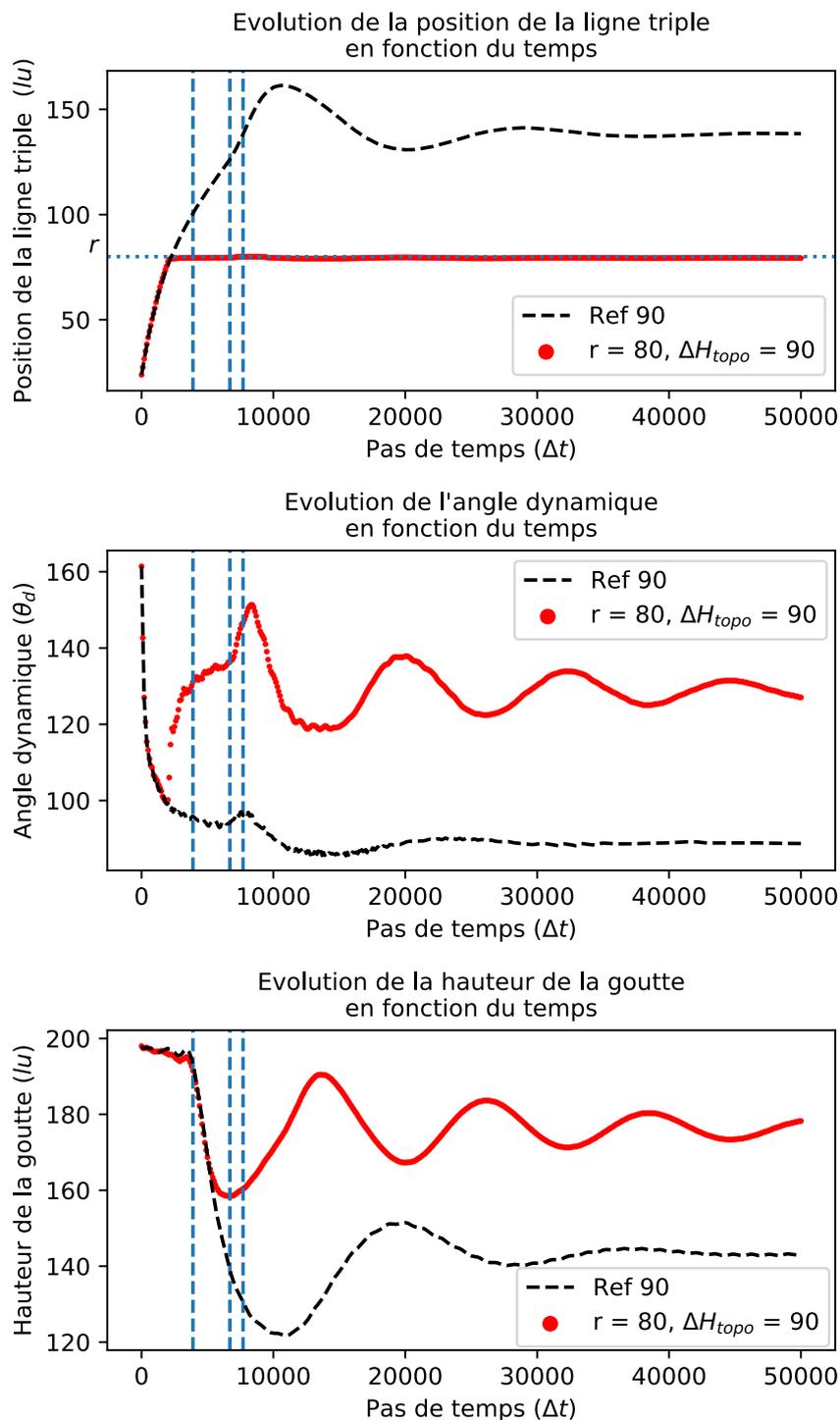


FIGURE 7.14 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine I.

la courbe de référence, c'est-à-dire comme si la surface était plane et non texturée. Dès que la ligne triple rencontre la texture, elle se fixe à la texture. L'angle de contact se met à croître fortement. La hauteur de goutte continue d'évoluer en suivant la courbe de référence. L'évolution de l'angle dynamique est constante en fin de domaine II puis se met à osciller en même temps que la hauteur oscille mais de façon opposée. L'oscillation des deux

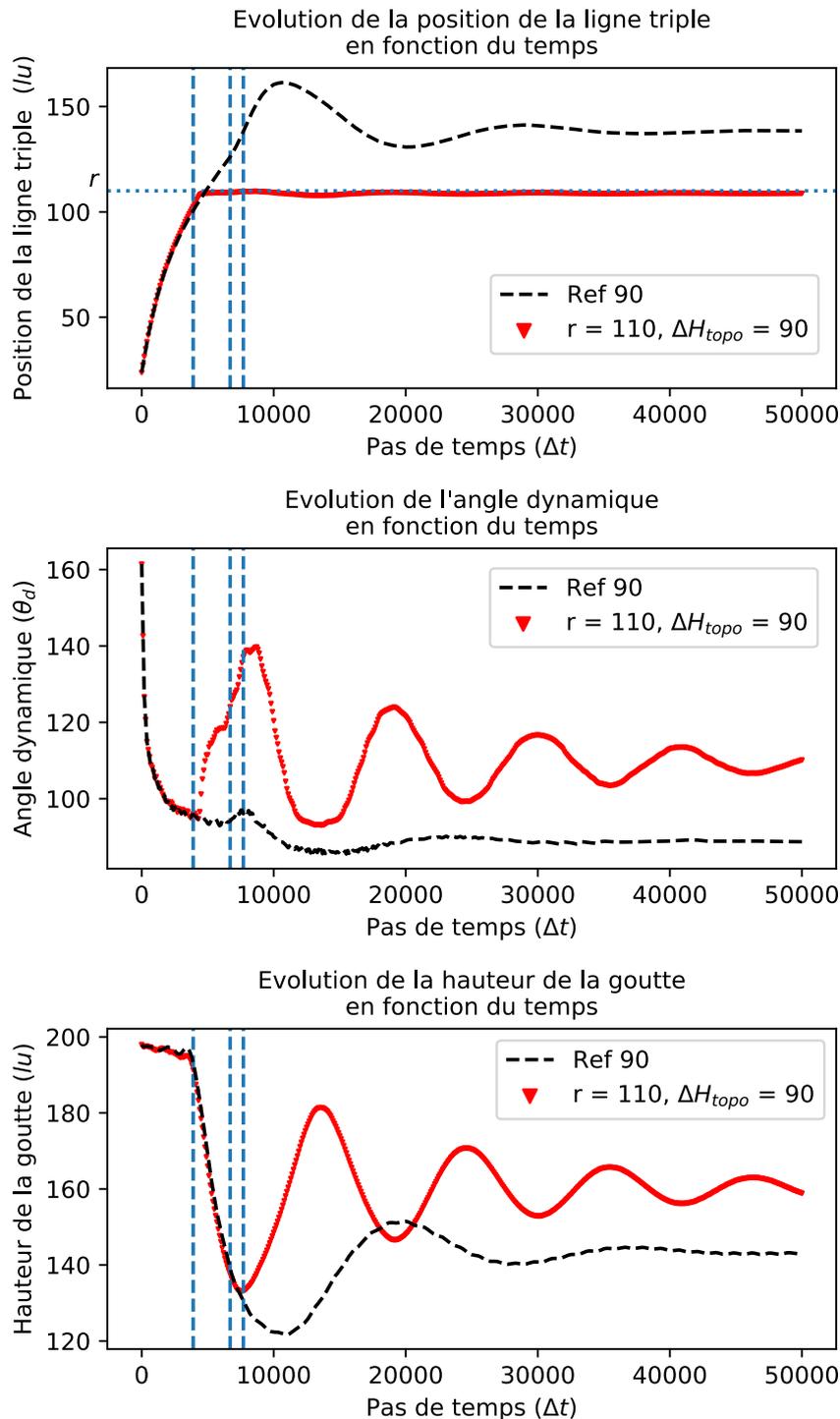


FIGURE 7.15 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine II.

paramètres commence lorsque la hauteur arrête de suivre l'évolution de la courbe de référence. On observe bien un décalage entre le moment où la ligne triple touche la texture et la réaction de la hauteur de goutte à la texture. Il semble y avoir un temps pour que la texture modifie le comportement de la hauteur de goutte. On observe aussi la forte oscillation de l'angle dynamique et de la hauteur de la goutte lorsque la ligne triple se fixe à la texture.

Texture dans le domaine III (fig. 7.16)

La texture est placée dans le domaine III.

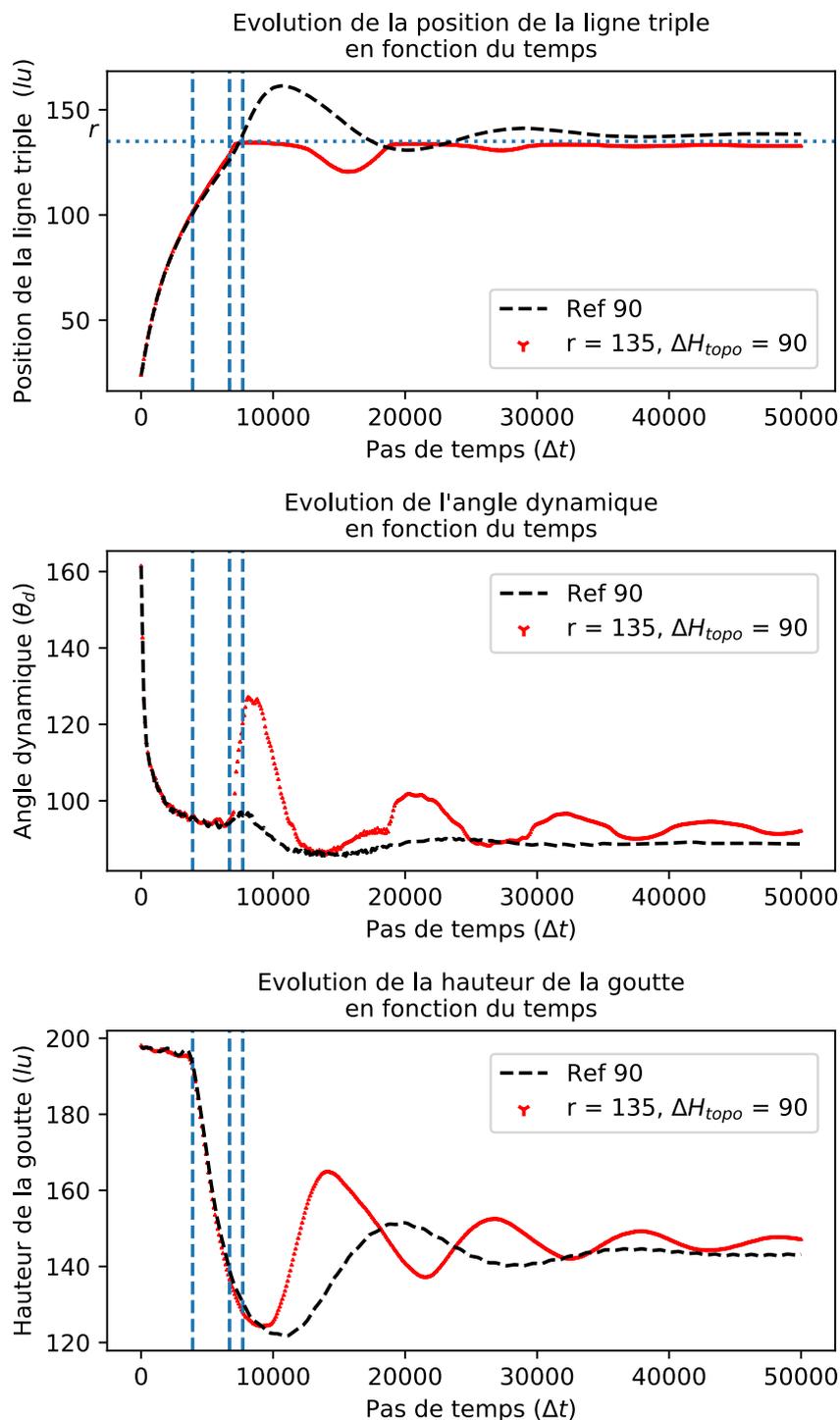


FIGURE 7.16 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine III.

Avec une texture placée dans le domaine III, on n'observe aucun effet de la texturation sur la ligne triple, la hauteur de goutte et l'angle dynamique tant que la ligne triple n'a pas touché la texture. On observe après le contact ligne triple – texture, des décollages

temporaires entre la ligne triple et la texture. L'évolution de la hauteur oscille toujours avec un temps de retard par rapport au premier contact ligne triple-texture. On remarque tout de même que la hauteur de goutte ne semble pas affectée par les décollages de ligne triple sur la texture. Par contre, l'angle de contact dynamique a une évolution difforme. Quand la ligne triple est en contact avec la texture, l'angle de contact oscille. Dès que la ligne triple se décolle, l'angle de contact devient constant puis lorsque la ligne triple se refixe à la texture, l'angle dynamique croit fortement.

Texture dans le domaine IV (fig. 7.17)

La texture est placée dans le domaine IV. Dans cette configuration, r est supérieur au rayon statique.

Dans le dernier cas où la texture est dans le domaine IV, la goutte à un équilibre identique à une goutte sur surface plane, pourtant on observe un comportement dynamique différent. Lorsque la ligne triple rencontre la texture, elle se bloque puis se décolle et recule. La ligne triple recule car la goutte est en état de sur-étalement. La ligne triple s'équilibre plus vite qu'une goutte sur plan. On remarque une forte croissance de l'angle de contact lorsque la ligne triple touche la texture. L'angle décroît fortement lorsque la hauteur de goutte se met à diverger de la courbe de référence. La hauteur de goutte et l'angle dynamique s'équilibrent aussi plus vite que pour le cas de l'étalement sur une surface plane.

Cette dernière étude tend à montrer que la texturation peut permettre de trouver un état d'équilibre plus tôt que sur une surface plane. Ce phénomène pourrait s'expliquer par le fait que deux effets se sont opposés et « annulés » ou du moins réduits grâce à la texturation. Le premier effet est la diminution rapide de la hauteur de goutte qui entraîne le sur-étalement de la ligne triple. Le second effet est le blocage de la ligne triple généré par la texturation. Le blocage de la ligne triple s'est opposé au sur-étalement. Ainsi, la texture a réduit l'amplitude de la réaction de la ligne triple face à la variation de la hauteur de la goutte. On peut aussi faire l'hypothèse que la forte variation de l'angle de contact, à ce moment, est témoin de la forte dissipation énergétique liée au cisaillement dans le fluide.

7.3.3 Effet de la relâche topographique sur le comportement dynamique d'une goutte

Le détail de cette étude est présenté en Annexe B.

Il est montré que tant que la texture n'est pas traversée, la goutte se comporte comme si elle s'étalait sur une surface plane et homogène chimiquement. Lorsque la texture est traversée, la goutte subit un second étalement sur la nouvelle chimie. Il est intéressant de noter que l'angle dynamique chute fortement à la traversé de la texture. La hauteur de goutte est plus faible à l'équilibre que pour un plan, cela s'explique par le fait que le liquide est descendu dans la texture. Le domaine oscillatoire a été supprimé par l'effet de relâche.

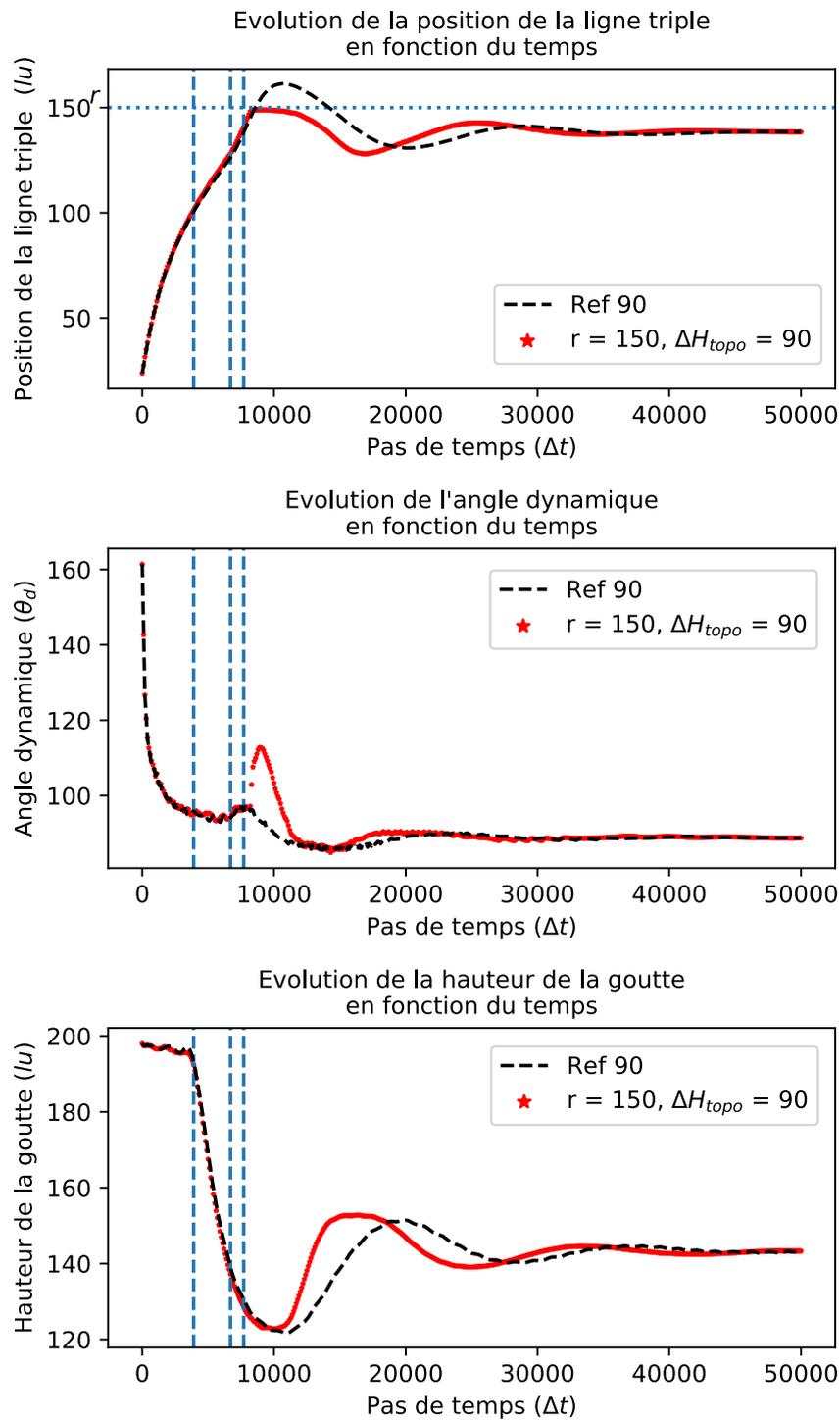


FIGURE 7.17 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine IV.

7.3.4 Effet de la texturation topographique continue sur le comportement dynamique d'une goutte

Nous allons présenter l'évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps pour des surfaces concave et convexe. Ainsi, nous allons pouvoir observer comment l'effet de collage ou de relâche appliqué continuellement sur la surface va modifier le comportement de la goutte. Les résultats des simulations sont présentés dans la figure 7.18.

Pour une surface concave, on observe que la ligne triple s'étale plus que sur un plan. Il n'y a pas d'oscillation de la ligne triple proche de l'équilibre. L'angle de contact met plus de temps avant de s'équilibrer. Dans un premier temps son évolution suit la courbe de référence sur surface plane mais au moment où l'angle devrait être constant (domaine d'évolution II), l'angle continu de décroître jusqu'à son équilibre. Enfin la hauteur de goutte diminue moins que la courbe de référence. Son oscillation a aussi une amplitude plus faible.

Pour une surface convexe, on observe que la ligne triple évolue plus lentement que sur un plan. La ligne triple est néanmoins stable plus vite. L'angle de contact dynamique devient constant (domaine II) plus tôt et s'équilibre pour une valeur plus grande. La hauteur de goutte diminue plus que pour la surface plane et se stabilise plus vite.

On constate que comme il a été supposé pendant l'étude statique, une texturation concave accélère la ligne triple et une texturation convexe la ralentit. On remarque aussi que l'angle dynamique est localement atteint plus vite pour une surface convexe que pour une surface concave. En effet, on avait expliqué que la texturation convexe avait pour effet de diminuer localement la valeur de l'angle dynamique. C'est le phénomène inverse pour la texturation concave où l'angle de contact est augmenté localement. Comme représenté dans la figure 7.19.

7.3.5 Conclusion sur l'effet de la texturation topographique sur le comportement dynamique de l'étalement d'une goutte

Nous avons précédemment expliqué que les quatre domaines d'évolution dynamique d'une goutte venaient de la différence de vitesse entre les couches au coeur de la goutte et de la vitesse de la ligne triple.

Dans le cas du collage généré par texturation topographique, la ligne triple s'arrête brusquement entre deux plans et y reste bloquée. En réaction directe à cet arrêt brusque de ligne triple, l'angle de contact dynamique a une forte augmentation. Après un certain temps, la hauteur de goutte aussi réagit au blocage de la ligne triple et augmente rapidement. Ensuite, la hauteur de goutte et l'angle de contact oscillent jusqu'à l'équilibre. Nous avons remarqué que si le collage avait lieu sur une texture pendant la phase de sur-étalement (début du domaine IV), on observe un phénomène de décollement et ce décollement perturbe le phénomène d'oscillation des variables.

Pour un phénomène de relâche généré pour une texturation topographique brusque, la ligne triple est accélérée au moment où elle traverse la texture. En réaction, l'angle de contact chute et, passé un temps, la hauteur de goutte chute elle aussi. Ces trois variables oscillent faiblement avant d'atteindre l'équilibre.

L'effet du collage brusque et de la relâche brusque sur le comportement d'une goutte sont représentés dans la figure 7.20.

Ces effets de textures ont aussi été observés dans l'étude des textures concaves et convexes.

En effet, on a remarqué que les surfaces courbes convexes ralentissent la ligne triple alors que les surfaces concaves accélèrent la ligne triple. On a aussi observé que l'angle de contact dynamique est très différent pour une surface convexe ou concave. Dans le cas d'une surface convexe, l'angle diminue moins et moins longtemps. A l'opposé, l'angle de contact dynamique pour une surface concave diminue plus et plus longtemps. Le phénomène contraire s'applique à l'évolution de la hauteur de goutte. Pour une surface convexe, elle diminue plus et plus longtemps alors que pour une surface concave, elle diminue moins et moins longtemps.

Cette opposition entre hauteur de goutte et angle dynamique pendant la phase d'étalement semble contre intuitive, en effet, plus l'angle de contact est grand, plus la goutte est ronde et donc sa hauteur grande. Hors c'est le phénomène inverse en dynamique. Cela s'explique par la désynchronisation entre l'évolution de l'angle et la hauteur de goutte. Ce temps de réaction est visible dans le domaine I, où la hauteur reste constante alors que la ligne triple se déplace. Ce délai de réaction est aussi visible pour les études de collage où quand la ligne triple se fixe à la texture, l'angle de contact augmente directement mais la hauteur ne réagit qu'après un certain temps. Ce temps dépendrait de la viscosité dynamique du fluide.

Nous pouvons maintenant nous questionner sur les effets des phénomènes de collage et de relâche appliqués périodiquement à une ligne triple.

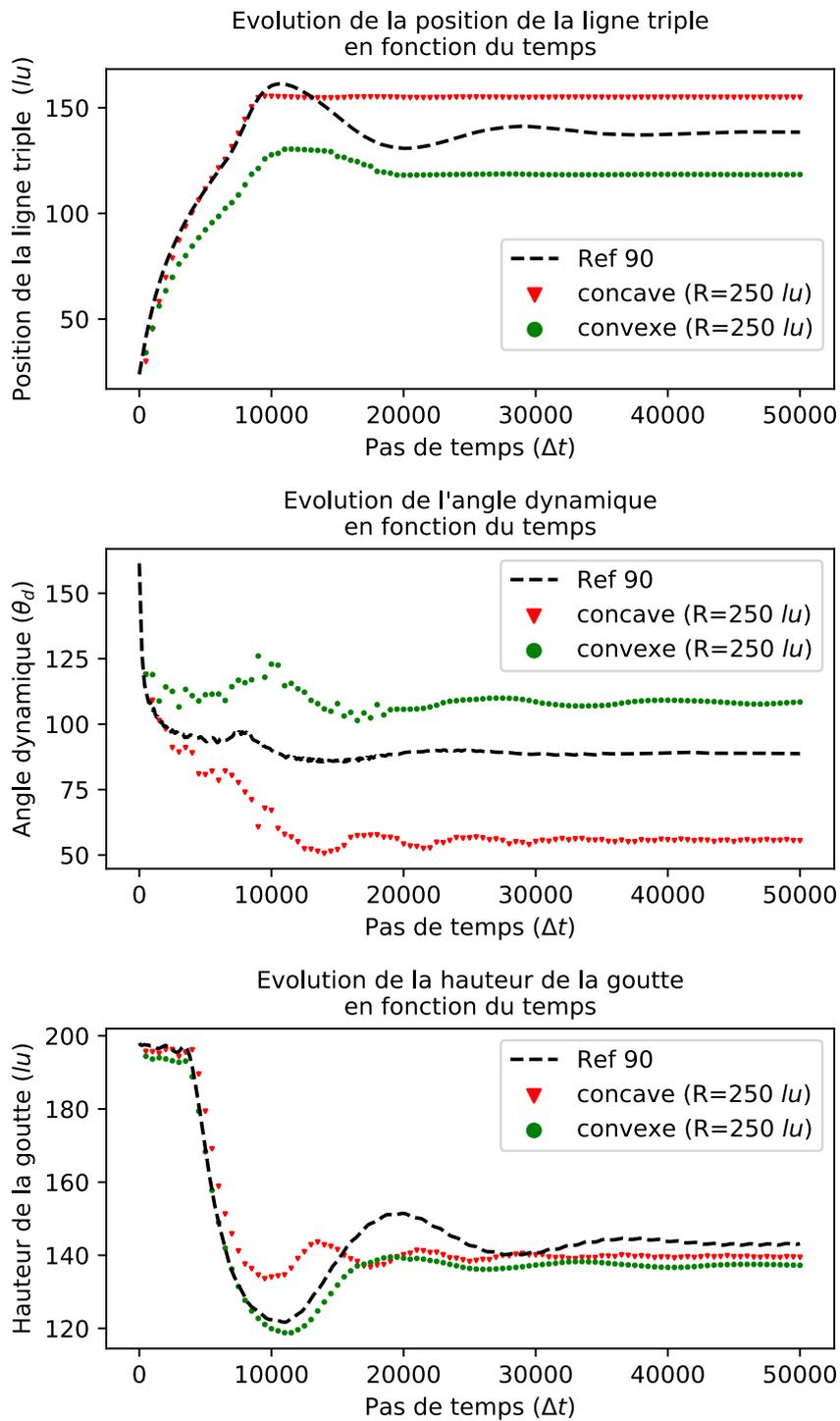


FIGURE 7.18 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact et de la hauteur de goutte en fonction du temps pour une texturation concave et une texturation convexe.

7.3. Etude de l'effet de la texturation topographique sur le comportement dynamique d'une goutte pour des surfaces à une texture

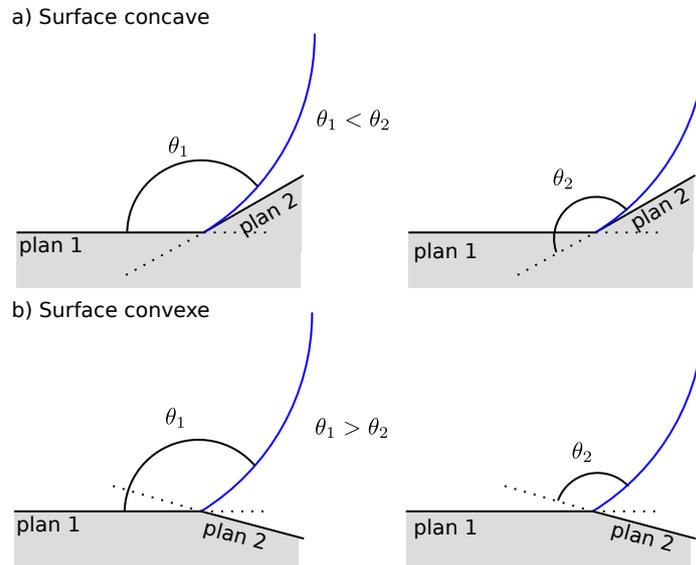


FIGURE 7.19 – Représentation de l'effet de la texturation concave et convexe sur l'angle de contact dynamique. a) Angle du plan 2 supérieur à l'angle du plan 1 ($\theta_2 > \theta_1$), b) angle du plan 2 inférieur à l'angle du plan 1 ($\theta_2 < \theta_1$).

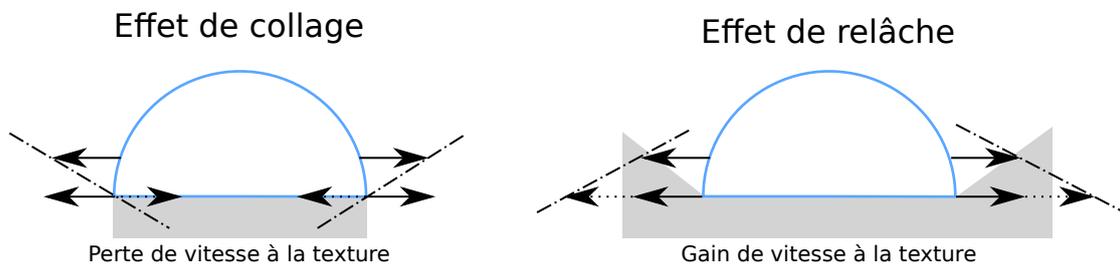


FIGURE 7.20 – Représentation de l'effet des texturations topographique brusque sur le comportement dynamique d'une goutte qui s'étale.

7.4 Etude de l'effet des texturations périodiques sur le comportement dynamique d'une goutte

Nous allons étudier deux texturations périodiques : chimique et topographique. L'objectif est d'observer comment la succession des phénomènes de collage et relâche va affecter le comportement de la goutte.

Dans un premier temps nous allons nous intéresser à l'effet de la texturation périodique chimique sur le comportement dynamique d'une goutte. Puis, dans un second temps, nous allons étudier l'effet de la texturation périodique topographique sur l'étalement d'une goutte.

7.4.1 Etude de l'effet de la texturation chimique périodique sur le comportement dynamique d'une goutte

Le système simulé est un carré de côté $500lu$ avec un substrat plan texturé chimiquement avec une goutte de rayon $100lu$ qui s'étale sur cette surface. L'état initial est représenté dans la figure 7.21. La surface est composée d'une alternance de bandes hydrophiles (60°) et hydrophobes (120°) de largeur $20lu$.

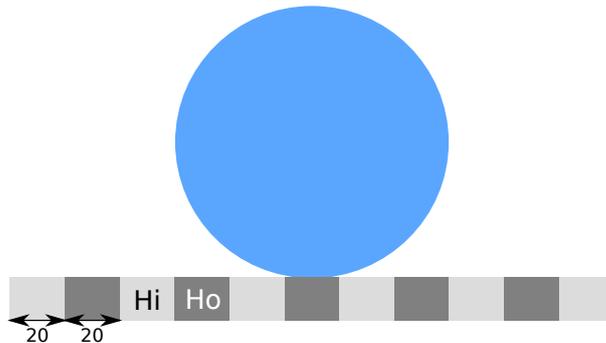


FIGURE 7.21 – Représentation de l'état initial de la simulation numérique sur surface texturée périodiquement par texturation chimique avec des bandes de $20lu$ hydrophiles (60°) et hydrophobes (120°).

L'évolution de la position de la ligne triple, de l'angle dynamique et de la hauteur de goutte est affichée dans la figure 7.22.

On distingue deux états d'étalement, le premier est avant les 10 000 itérations où la ligne triple avance et traverse les textures. Après 10 000 itérations, la goutte est en état de collage et la ligne triple est collée à une texture.

Dans la première partie de l'étalement, on constate qu'à chaque transition $Ho \rightarrow Hi$, la ligne triple ralentit et qu'à chaque transition $Hi \rightarrow Ho$, la ligne triple accélère. Dans le domaine hydrophile, la ligne triple s'étale plus vite et dans les domaines hydrophobes, la ligne triple s'étale plus lentement. En réaction aux phases d'accélération et décélération, l'angle de contact varie fortement. Lors d'une transition $Ho \rightarrow Hi$, l'angle chute très rapidement alors qu'à l'inverse, lors d'une transition $Hi \rightarrow Ho$, l'angle augmente fortement. On remarque aussi que le temps où la ligne triple est dans le domaine hydrophile est très court comparé au temps où elle est dans le domaine hydrophobe. Les moments où la courbe de l'angle dynamique est constante correspondent aux deux moments où la ligne triple s'étale lentement dans le domaine hydrophobe. La hauteur de goutte avant 10 000 itérations ne semble pas impactée par la texturation chimique. On remarque quand même une petite

perturbation dans son évolution vers 6 000 itérations. Cette perturbation pourrait venir de la seconde transition $Hi \rightarrow Ho$, en effet la première s'est produite quand la hauteur était constante, ce qui n'a eu aucun effet mais pour la seconde transition, on remarque une diminution de la hauteur plus importante ce qui pourrait venir de l'effet de la relâche avec un retard.

Dans la seconde partie de l'évolution, après 10 000 itérations, la ligne triple est fixe et constante. L'angle de contact croit fortement au moment du blocage puis se stabilise. On ne reconnaît pas l'état oscillatoire des simulations avec une seule texture. On remarque un pic vers 15 000 itérations, ce pic fait monter l'angle à une valeur égale au pic du blocage à 10 000 itérations. La hauteur varie aussi sans osciller comme dans les études précédentes. Le premier pic après 10 000 itérations est suivi d'une forte chute de la hauteur. On peut supposer que ce pic est à l'origine du pic d'angle de contact à 15 000 itérations. On peut aussi supposer que cette variation de hauteur est liée à l'effet de collage, avec un temps de retard.

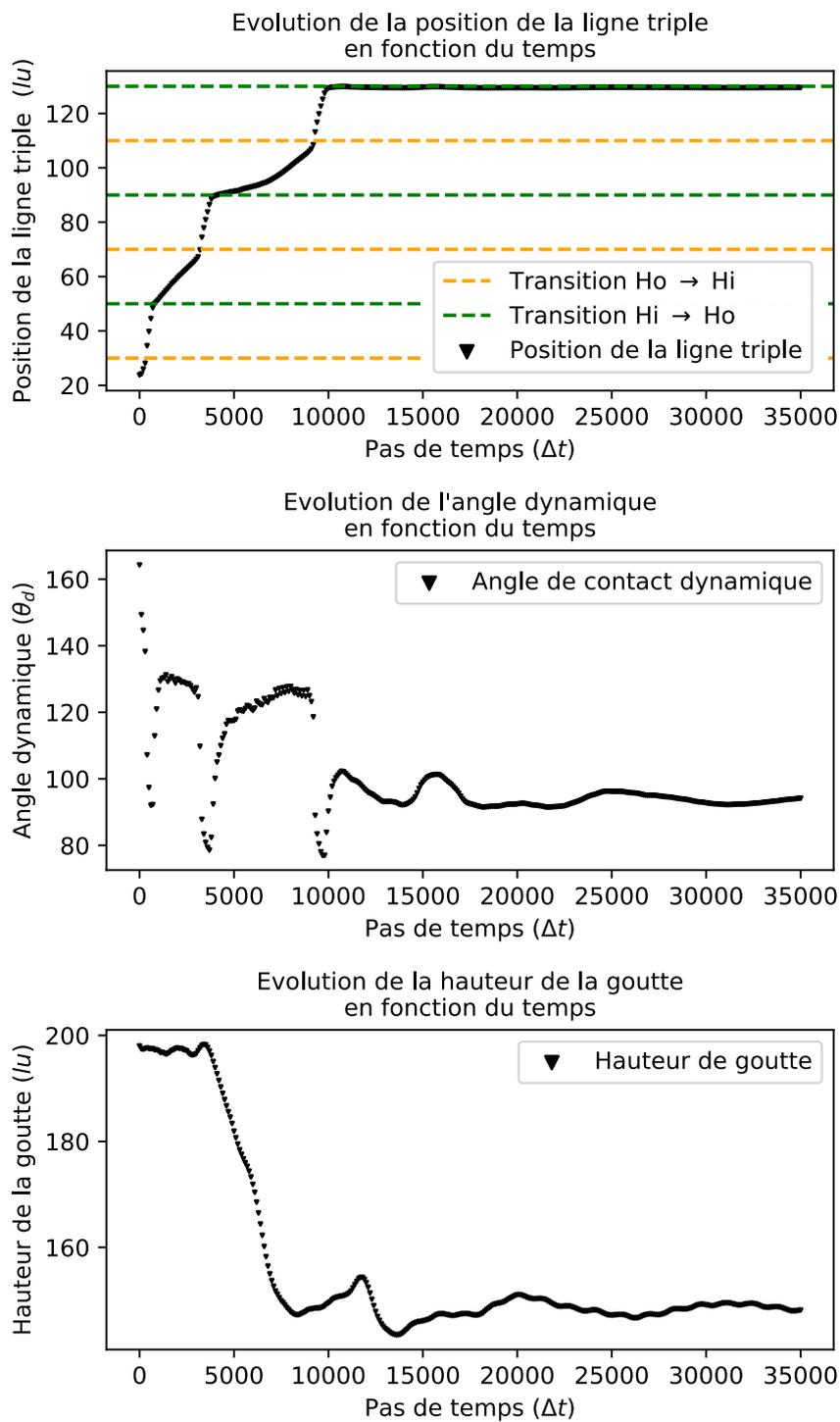


FIGURE 7.22 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact et de la hauteur de goutte en fonction du temps pour une surface texturée chimiquement par une alternance de bandes hydrophiles (60°) et hydrophobes (120°).

7.4.2 Etude de l'effet de la texturation topographique périodique sur le comportement dynamique d'une goutte

Le système simulé est un carré de côté $500lu$ avec un substrat texturé topographiquement avec une goutte de rayon $100lu$ qui s'étale sur cette surface. L'état initial est présenté dans la figure 7.23. La surface a un angle de contact intrinsèque de 90° . Elle est texturée avec un effet de collage de 45° pour descendre dans la texture, puis d'un effet de relâche de 90° en fond de texture et enfin d'un effet de collage de 45° pour ressortir de la texture. L'évolution de la position de la ligne triple, de l'angle dynamique et de la hauteur de goutte est affichée dans la figure 7.24.

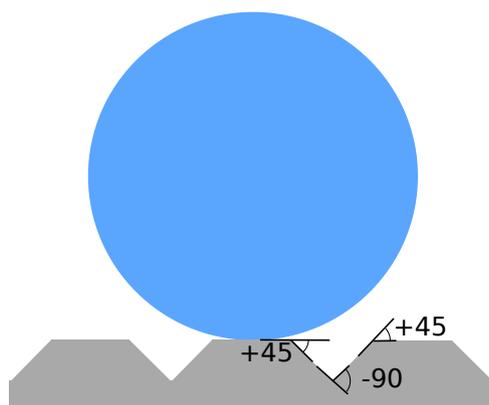


FIGURE 7.23 – Représentation de l'état initial de l'étude de l'étalement sur surface texturée topographiquement avec une succession d'effet de collage et relâche.

On remarque un comportement de goutte en deux temps : avant et après 25 000 itérations. Dans le premier temps, la ligne triple traverse la première texture mais ne semble pas affectée et évolue sur le plan incliné et après 20 000 itérations devient stable. L'angle de contact décroît puis oscille vers sa valeur d'équilibre sur le plan incliné, c'est à dire 135° . La hauteur de goutte chute puis oscille. Ce premier temps d'évolution est semblable à l'évolution sur un plan classique. Les trois paramètres ont une première période d'évolution puis une seconde période d'oscillation pour trouver l'équilibre.

Après 25 000 itérations, l'état qui tendait vers l'équilibre est rompu. La ligne triple fait un bond de plus de $20lu$. Et en réaction, l'angle de contact chute brusquement. La hauteur de goutte chute aussi avec du retard. Ensuite la ligne triple rencontre une texture et s'y fixe. L'angle dynamique croît fortement suite au collage. La hauteur augmente avec du retard ce qui fait chuter l'angle de contact et décolle la ligne triple de la texture. Les trois paramètres oscillent jusqu'à ce que la ligne triple retouche la texture et relance le processus du collage : ligne triple fixe, forte augmentation de l'angle dynamique et augmentation de la hauteur de goutte avec du retard. Ensuite, l'angle dynamique et la hauteur oscillent jusqu'à s'équilibre.

On peut donc se demander quel est le phénomène observé à 25 000 itérations et comment il s'est produit. Pour cela, on a affiché la goutte avant et après 25 000 itérations dans la figure 7.25. On remarque qu'un pont s'est créé car l'interface fluide-fluide en oscillant a touché le haut de la texture voisine. Ainsi le pseudo-équilibre du système a été rompu et a permis à la ligne triple de se déplacer sur un nouveau plan.

On remarque dans la figure 7.25 qu'en s'étalant, la goutte déforme son interface fluide-fluide et à un moment, cette interface touche le sommet de la texture voisine. Cette texture offre de nouveaux plans d'étalement à la goutte. Si, comme dans le cas présenté, la condition

d'équilibre n'est pas respectée, la ligne triple se déplace afin de satisfaire le nouvel équilibre. C'est pour cela qu'on a observé deux périodes d'étalement. La première période est liée à la première texture et la seconde période est liée à la seconde texture. Il est intéressant de noter qu'il n'y a pas de transition entre les deux périodes d'étalement car un nouveau point triple est créé au moment où l'interface fluide-fluide touche le solide. On peut rajouter que ce phénomène apparaît pendant la période d'oscillation de la hauteur de goutte et de l'angle dynamique. C'est un phénomène purement dynamique où on remarque que la hauteur de goutte est minimale localement, c'est-à-dire que la goutte s'est écrasée sur la surface. On remarque aussi qu'à ce moment l'angle de contact était en train de diminuer ce qui signifie que le dessous de la goutte pousse le fluide vers le haut. La combinaison de ces deux effets entraîne une compression du fluide et étant incompressible, le fluide se déforme et suivant l'axe x , ce qui permet à l'interface fluide-fluide de toucher la seconde texture 7.26.

7.4.3 Conclusion sur l'effet de la texturation périodique chimique et topographique

Nous avons observé que lorsqu'une surface est texturée périodiquement, chimiquement ou topographiquement, on observe des phases d'accélération, de décélération et de blocage de la ligne triple, de l'angle de contact et de la hauteur de goutte. Dans le cas d'une texturation périodique chimique, l'alternance collage – relâche nous a permis d'observer une périodicité dans l'évolution de la position de la ligne triple mais surtout la réaction de l'angle dynamique à ces différentes textures. Ce phénomène a aussi été observé en texturation topographique où dès que la ligne triple ralentit (cas du collage), l'angle de contact augmente brusquement. A l'opposé, lorsque la ligne triple est accélérée, cas de la relâche, l'angle de contact diminue fortement. On a remarqué un retard de réaction de la hauteur de la goutte par rapport au moment où la ligne triple rencontre une texture.

On a remarqué que les textures modifient le comportement de la goutte pendant l'étalement mais dès que l'on se rapproche de l'équilibre, on retrouve la phase oscillatoire du domaine IV des études précédentes.

La création d'un pont fluide-solide a même été observée pour la texturation topographique périodique. Ce phénomène a eu lieu lorsque la ligne triple était sur un plan et son angle de contact était proche de l'équilibre mais comme la hauteur de fluide diminuait, le fluide a été comprimé et c'est la déformation fluide-fluide résultante qui a créé un pont. Enfin, en comparaison avec les études avec une seule texture, on observe que si il y a plusieurs textures les différents phénomènes : ralentissement, accélération, blocage, compression et retard de la hauteur rendent complexe l'anticipation du mouillage sur une surface texturée.

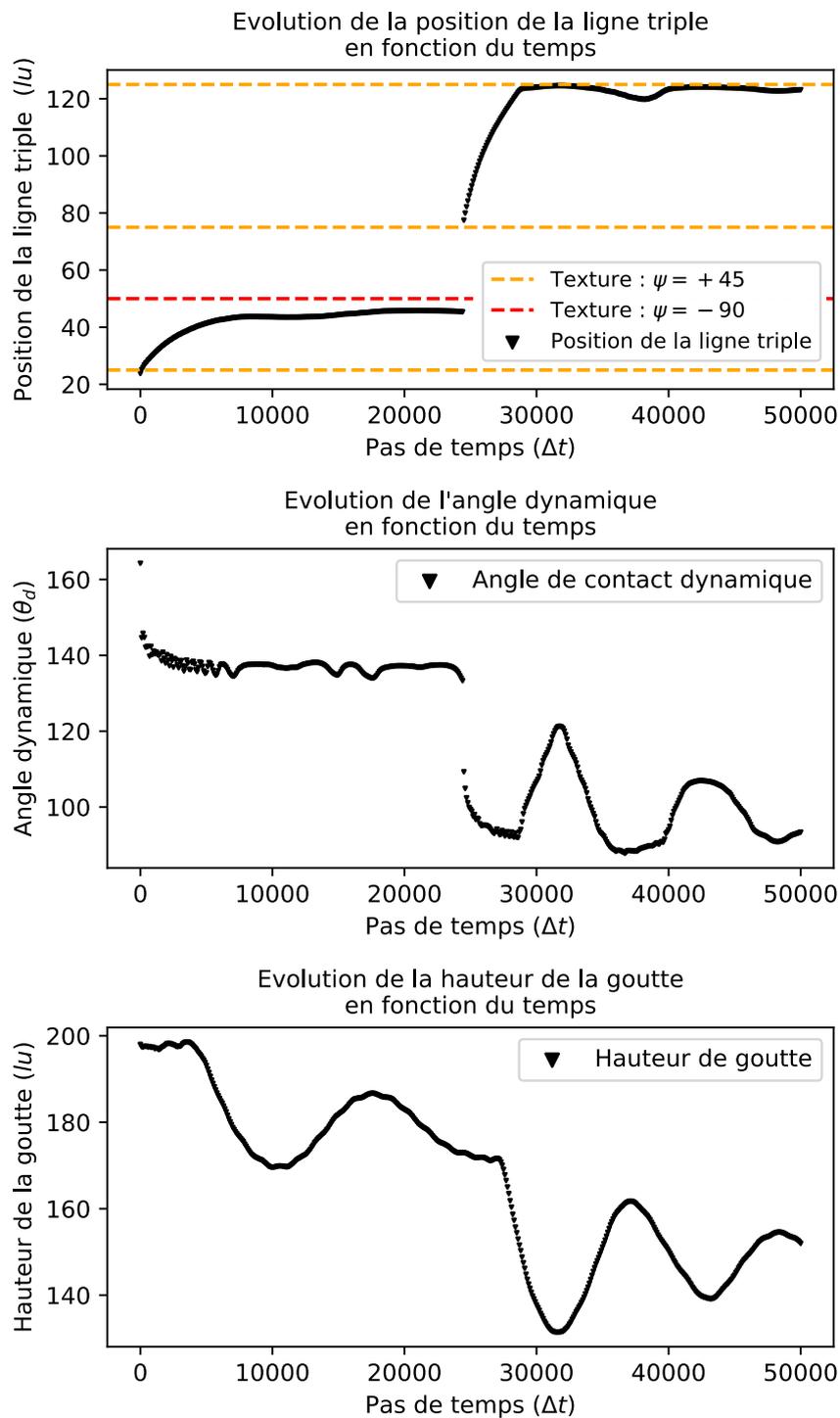


FIGURE 7.24 – Evolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact et de la hauteur de ligne triple en fonction du temps pour une surface texturée topographiquement par alternance d'effet de collage et de relâche.

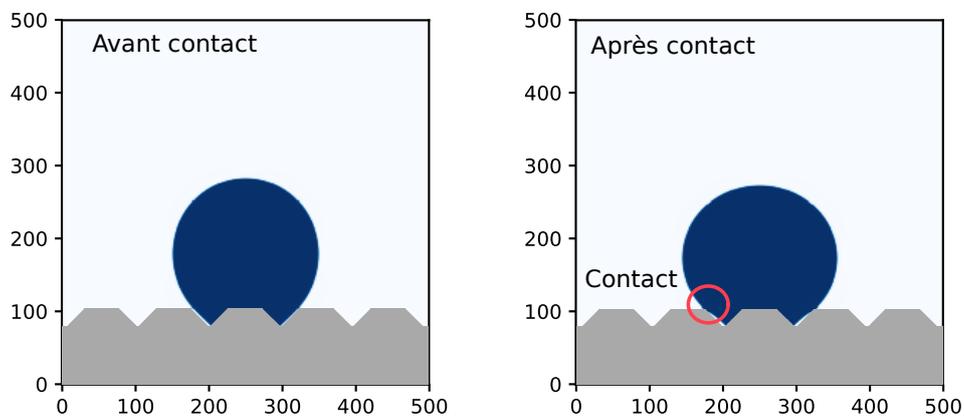


FIGURE 7.25 – Contact entre l'interface fluide-fluide et le solide au sommet de la texture à 25 000 itérations. Création d'un pont liquide entre les deux textures.

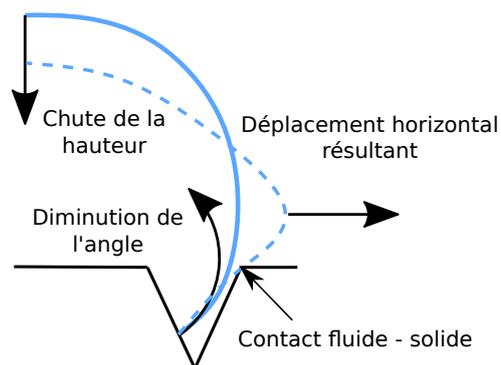


FIGURE 7.26 – Schéma de l'effet d'écrasement de la goutte qui entraîne le contact avec la seconde texture.

7.5 Discussions et conclusion

Ces études nous ont permis de mettre en avant des phénomènes dynamiques qui peuvent impacter l'état d'équilibre d'une goutte. On a remarqué que l'interface fluide-fluide, caractérisée par la hauteur de goutte varie pendant l'étalement et a une incidence sur l'étalement. Il faut donc prendre en compte la texturation du solide mais aussi la déformation de l'interface fluide-fluide lorsque l'on cherche à designer une surface avec des propriétés de mouillabilité spécifiques.

L'étalement d'une goutte se fait en deux temps : pour commencer, une étape de transition, caractérisée par les domaines I, II et III où la ligne triple, l'angle dynamique et la hauteur de goutte évoluent loin de leur état d'équilibre. Pendant cette première période, l'évolution de la goutte est pilotée majoritairement par l'interaction fluide-solide. L'interface fluide-fluide se déforme en réaction à l'évolution de l'interface fluide-solide avec un temps de retard. Le second temps de l'étalement est la période d'oscillation proche de l'équilibre où les variables oscillent les unes par rapport aux autres pour trouver l'équilibre. Ces oscillations sont dues à la déformation fluide-fluide et à l'inertie d'étalement. C'est la combinaison des interactions fluide-fluide et fluide-solide qui pilotent cette période.

En introduisant des hétérogénéités de surface, on peut perturber ces évolutions. Le collage permet de ralentir la ligne triple et à l'opposé la relâche l'accélère. Ainsi, il est possible de bloquer la ligne triple ou de la pousser. Ces modifications entraînent une variation brusque des variables d'évolution et perturbent l'étalement. Dans certains cas, ces perturbations permettent de dépasser les conditions d'équilibre locales et forcent la goutte à s'étaler sur un nouveau domaine. De plus, ces phénomènes d'accélération et ralentissement génèrent une déformation locale de l'interface fluide-fluide au niveau du point triple. Cette déformation est ensuite envoyée vers l'autre côté de la goutte. Dans nos simulations, les textures sont rencontrées au même moment à droite et à gauche de la goutte, ce qui fait que les deux « vagues » générées par les textures se rencontrent sur le haut de la goutte d'où l'oscillation du haut de la goutte. Cet effet est visible lorsque la ligne triple subit un effet de relâche. L'effet de vague est montré dans la figure 7.27.

Du fait que les effets soient synchronisés, les deux vagues se collisionnent. Leur déplacement latérale est annulé, par contre, leur déplacement vertical s'ajoute. Si on décale les textures, la vague traverse toute la goutte pour atteindre l'autre point triple. On peut observer ce phénomène dans la figure 7.28 où l'angle dynamique à droite augmente lorsque la déformation issue de la texture à gauche l'atteint. L'angle de contact dynamique a augmenté alors que la ligne triple s'est étalée.

Nous pouvons nous questionner sur la possibilité d'utiliser cette effet de vague pour transporter de l'énergie d'un point triple à un autre et ainsi, dépasser les conditions d'équilibre locales du second point triple. On peut imaginer un cas de surface déperlante où lorsque le point triple de droite rencontre un phénomène de collage, quelque temps avant, la ligne triple de gauche aura rencontré un phénomène de relâche. Une déformation est envoyée de droite à gauche et permet à l'angle de contact au niveau du collage d'augmenter suffisamment pour dépasser la condition locale de collage. La goutte pourrait ainsi continuer son déplacement et son glissement sur la surface par cycle de charge décharge, induite par la texturation, et le transport de la déformation d'interface fluide-fluide.

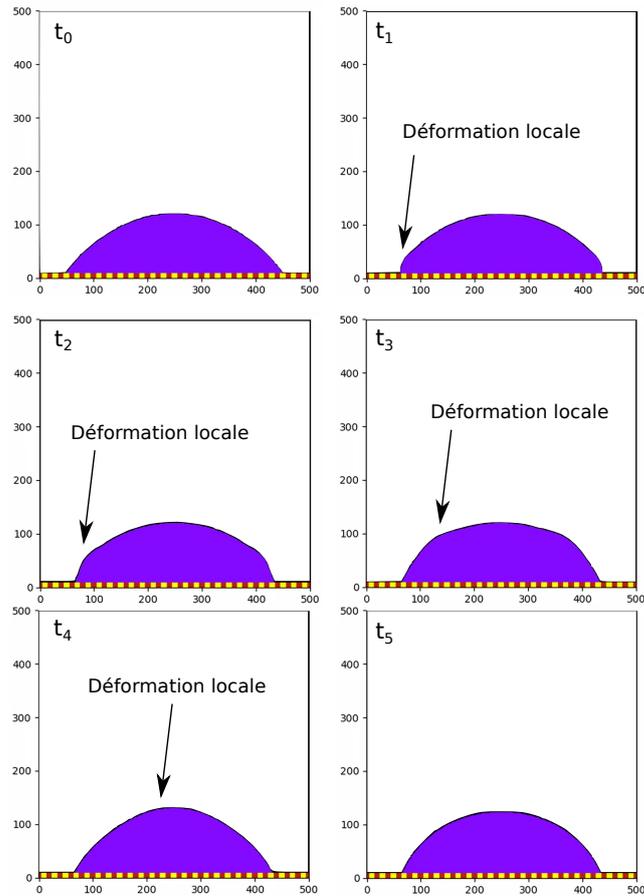


FIGURE 7.27 – Observation de l'effet de vague à différents pas de temps : évolution d'une déformation de l'interface fluide-fluide lorsque la ligne triple subit un effet de relâche. La surface jaune est hydrophile et la surface rouge est hydrophobe.

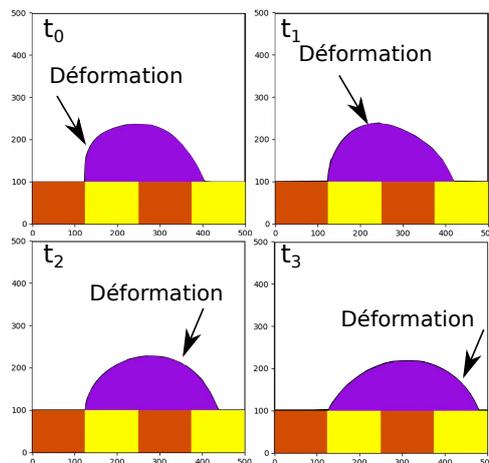


FIGURE 7.28 – Observation de l'effet de vague qui part de la gauche à différents pas de temps : évolution d'une déformation de l'interface fluide-fluide lorsque la ligne triple subit un effet de relâche. La surface jaune est hydrophile et la surface rouge est hydrophobe.

Conclusion générale et perspectives

Les travaux de thèse présentés dans ce mémoire avaient pour objectif d'étudier le mouillage au travers de la simulation numérique en utilisant la méthode lattice Boltzmann. Le mouillage est un phénomène difficile à caractériser précisément en partie à cause du phénomène d'hystérèse d'angle de contact. L'approche par des méthodes numériques permet de choisir de négliger certaines hétérogénéités non désirées subies pour des études expérimentales. De plus, la simulation numérique permet un suivi plus précis de paramètres qui caractérisent le mouillage, comme la position de la ligne triple, l'angle de contact dynamique ou statique et la hauteur de goutte.

Pour commencer, des premières simulations en statique ont été réalisées sur des surfaces texturées chimiquement. Ces surfaces sont composées de deux matériaux, un matériau central à géométrie variable et un matériau extérieur différent. Plusieurs configurations ont été étudiées en fonction de l'avancée ou reculée de ligne triple, de la taille du domaine central et de la différence de chimie entre le matériau extérieur et central. Ces simulations ont mis en avant deux comportements de goutte, le premier cas est le collage de la ligne triple sur la texture et le second cas est le saut de la ligne triple à la texture. Une seconde étude a été proposée afin de confirmer par une autre méthode ces comportements observés. Cette étude consiste à étudier la variation de la force de déplacement de ligne triple en fonction de l'angle dynamique de la goutte et de la position de la texture. Cette seconde étude a aussi montré le phénomène de collage et le phénomène de relâche. Avec ces différentes caractérisations, il a été possible de définir les conditions de collage et de relâche en fonction des textures chimiques des surfaces dans le cas d'une seule texture.

Un second ensemble de simulations a été réalisé afin de vérifier que ces phénomènes observés avec une texturation chimique étaient aussi observables avec une texturation topographique. Les surfaces simulées ont une seule texture centrale qui est un changement de plan d'étalement. La position de ce changement de plan et l'angle d'inclinaison du plan sont variables. Les phénomènes de collage et relâche ont aussi été observés en fonction de l'angle d'inclinaison de la texture. Pour des textures entrantes, le phénomène de collage a été observé. Pour des textures sortantes, le phénomène de relâche a été observé. Il a été possible de retrouver par simulation la condition de décrochage d'une ligne triple sur une texture. Une étude de la force d'étalement a été combinée à cette étude numérique afin de compléter cette étude. Les différents résultats ont permis de caractériser les conditions de collage et relâche pour des surfaces texturées topographiquement.

Combiné à cette étude de variation topographique brusque. Une étude du mouillage sur surface texturée avec des variations topographiques continues a été réalisée. Une surface à variation topographique continue est une surface courbe. En fonction du sens de la courbure, il a été montré que l'étalement était plus ou moins important. Une surface concave a une aire mouillée supérieure à une surface plane et une surface convexe a une aire mouillée inférieure. Il a été montré que ces résultats s'expliquent par le fait qu'une surface continue applique un phénomène de collage ou de relâche continuellement sur la surface. Ainsi une surface concave applique continuellement l'effet de relâche et une surface convexe applique un phénomène de collage. De plus, il a été montré que l'intensité du collage et de la relâche

est directement reliée au rayon de courbure de la surface.

Suite à ces premières études une réécriture de la force de déplacement a été proposée afin d'inclure localement la texturation de surface. Ainsi, il est possible de déterminer la force de déplacement locale en fonction de la texture que la ligne triple rencontre. Ce modèle inclut texturation chimique et texturation topographique.

En s'inspirant de ces premiers travaux, une étude sur surfaces texturées chimiquement périodiquement a été réalisée en 2D et 3D. Il a été montré que la taille des textures a un effet sur la géométrie finale de la goutte. A partir des simulations 2D, un algorithme d'anticipation d'étalement a été proposé. Un cas où l'algorithme ne fonctionne pas a été identifié. Une hypothèse comme quoi la dynamique de l'étalement serait à l'origine de l'écart entre la prédiction et la simulation a été avancée. Afin d'approfondir le cas où l'algorithme de prévision de mouillage ne fonctionne pas, une autre simulation a été proposée et a confirmé la présence d'un effet dynamique qui permet un dépassement des conditions d'équilibre statique.

Ainsi, une étude dynamique du mouillage a été réalisée. Dans un premier temps, c'est l'étalement sur une surface homogène et plane qui a été étudié. Il a été montré que la goutte avait plusieurs états d'étalement caractérisés par des variations de la ligne triple, de la hauteur de goutte et de l'angle dynamique. Quatre états d'évolution dynamique de la goutte ont été définis en fonction des variations des trois caractéristiques de la goutte. Ensuite, il a été proposé d'étudier les phénomènes de collage et de relâche générés par des texturations chimiques et topographiques. Il a été montré que si la ligne triple se colle à une texture, l'angle dynamique varie brusquement en réaction au collage. La hauteur de goutte est aussi impactée après un temps de retard. Le blocage de la ligne triple sur la texture génère une phase d'oscillation plus importante de l'angle dynamique et de la hauteur de goutte et retarde l'équilibre. Au contraire, la relâche accélère l'étalement et permet d'atteindre l'équilibre plus tôt et fait diminuer fortement l'angle de contact dynamique.

Pour compléter ces études dynamiques avec une seule texture, des études dynamiques ont été réalisées sur des surfaces avec des texturations périodiques. Il a été montré dans le cas d'une texturation chimique que la ligne triple subit une succession de phases d'accélération et de décélération et en réaction l'angle de contact varie beaucoup au cours du temps. Arrivé à l'équilibre, la ligne triple se retrouve collée à une texture ce qui entraîne une forte oscillation de la hauteur de goutte et de l'angle de contact dynamique. Pour la texturation topographique périodique, il a été montré que dans certains cas, la goutte peut s'écraser et se déformer suffisamment pour toucher une texture sans s'étaler entièrement dans la cavité.

Les perturbations de l'évolution de la goutte ont été plus précisément étudiées et il a été montré que lorsqu'une texture est traversée, l'interface fluide-fluide au niveau de la texture est déformée. Cette déformation se propage dans l'interface fluide-fluide. Jusqu'à atteindre le point triple opposé où elle est renvoyée. A chaque fois que cette vague rencontre un point triple, l'angle dynamique est localement fortement augmenté ou réduit. L'idée a été proposée de se servir de ce phénomène comme un moyen de transporter de l'énergie d'un point triple à un autre afin de dépasser localement les conditions d'équilibre par cycle de charge décharge. Il a été expliqué que la viscosité dynamique est un paramètre important pour l'étude du mouillage dynamique car l'hypothèse a été faite que la vitesse de propagation de la vague dépend de la viscosité dynamique du fluide. Il a aussi été souligné par ces simulations que la texturation de surface n'affecte pas seulement la position de la ligne triple mais génère aussi des déformations de l'interface fluide-fluide qui doivent être prise en compte lorsqu'une surface avec des propriétés de mouillage spécifiques est conçue.

Pour compléter ce travail de thèse, il serait intéressant d'étudier des surfaces qui combinent à la fois des texturations chimiques et des texturations topographiques ainsi que différentes échelles de texturation.

Il serait intéressant dans de futurs travaux de regarder si la viscosité dynamique joue un rôle dans la propagation des déformations sur l'interface fluide-fluide. Cette étude pourrait être couplée avec une étude qui cherche à cartographier les textures optimales pour générer ces déformations afin de pouvoir par la suite se servir de ces textures pour concevoir des surfaces texturées complexes. Ces études permettraient de définir comment générer des déformations fonctionnelles.

Une étude des courants à l'intérieur de la goutte et leur effet sur l'évolution de la déformation de l'interface fluide-fluide pourrait permettre de comprendre comment évoluent ces déformations dans la goutte et au cours du temps.

Enfin, par rapport aux possibilités de simulation, il serait intéressant d'inclure de nouveaux modèles d'interaction fluide-fluide afin de pouvoir simuler deux fluides à fort rapport de densité, comme l'eau et l'air. Il serait aussi important d'ajouter la gravité aux simulations pour pouvoir simuler une chute de goutte. Dans l'objectif de simuler le mouillage sur des surfaces réelles, il serait aussi intéressant d'utiliser d'autres ressources de calcul pour pouvoir faire des simulations sur des surfaces avec plusieurs dizaines de texturations sous la goutte.

Annexe A

Etude de l'effet de la relâche chimique sur le comportement dynamique d'une goutte

Nous allons présenter dans cette partie l'évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps pour les quatre valeurs de r proposées (fig. A.1 → A.4). Ainsi, nous allons pouvoir observer comment la texturation chimique - dans cette étude une transition $Ho \rightarrow Hi$ (relâche) - peut influencer le comportement d'étalement d'une goutte.

Texture dans le domaine I (fig. A.1)

La texture est placée dans le domaine I. Les courbes de référence présentées dans l'étude de l'étalement sur surface plan sont tracées sur les graphes afin de comparer l'effet de la texture à cette référence.

Le comportement de la goutte pour une texturation de faible intensité et de forte intensité est similaire, c'est à dire que initialement les courbes suivent l'évolution de la courbe de référence mais lorsque la texture est atteinte, il y a une rapide transition de la ligne triple, de l'angle de contact et de la hauteur de goutte pour atteindre la courbe d'étalement sur la surface texturée. On note tout de même un léger retard des courbes avec textures par rapport aux courbes sans textures après le dépassement de la ligne triple. Ce retard s'explique par le fait que les trois grandeurs qui suivent le comportement de la surface la plus hydrophobe, varient plus lentement que pour les surfaces plus hydrophiles.

Texture dans le domaine II (fig. A.2)

La texture est placée dans le domaine II.

On observe que les deux courbes suivent la courbe de référence avant texture. Après texture, les courbes transitent vers leur nouvelle courbe de référence : 60° pour la texturation forte et 75° pour la texturation faible. On observe un retard plus important des courbes texturées par rapport aux courbes de référence. Cela s'explique encore par le fait que initialement, c'est la courbe de la surface hydrophobe qui est suivie. Comme la texturation est rencontrée plus tard, les courbes prennent plus de retard. Il est important de noter que l'évolution de la hauteur n'est que légèrement impactée par le moment où la ligne triple touche la texture. C'est seulement à l'entrée du domaine IV (domaine oscillatoire) que la hauteur subit une grande perturbation.

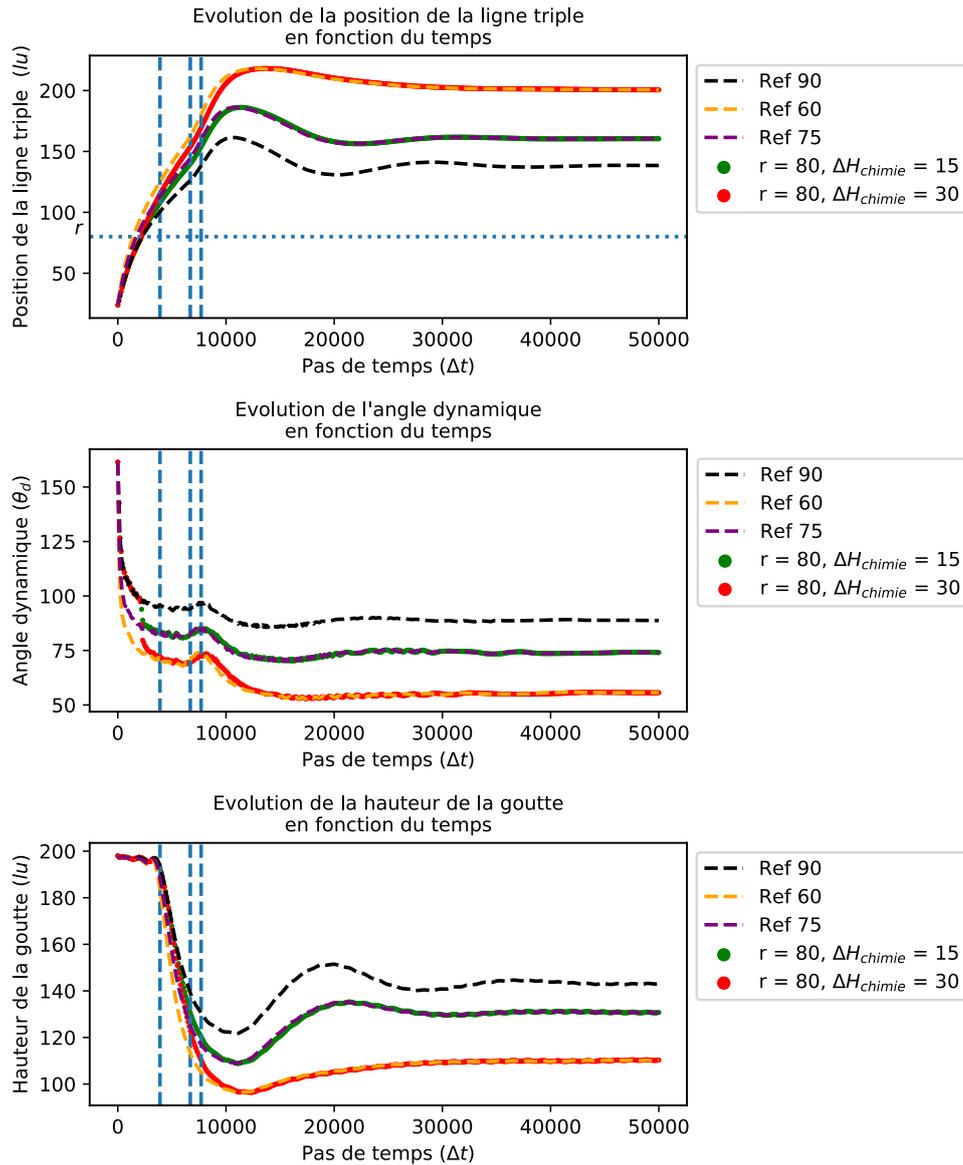


FIGURE A.1 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de relâche placée dans le domaine I.

Texture dans le domaine III (fig. A.3)

La texture est placée dans le domaine III.

On observe que les deux courbes suivent la courbe de référence avant texture. Après texture, les courbes transitent vers leur nouvelle courbe de référence : 60° pour la texturation forte et 75° pour la texturation faible.

On remarque que dans cette configuration, le domaine IV (oscillatoire) est presque inexistant. On observe bien pour le cas de la texture de 30° que la hauteur de goutte est impactée par la texture après un certain temps. Le sur-étalement est très faible et la hauteur de goutte atteint très rapidement son état d'équilibre.

On peut se questionner sur le lien entre le domaine III et le domaine IV. Le domaine III est décrit comme le domaine d'évolution dans lequel tous les paramètres varient. Le rayon mouillé croît plus vite, l'angle de contact anciennement constant augmente et la hauteur

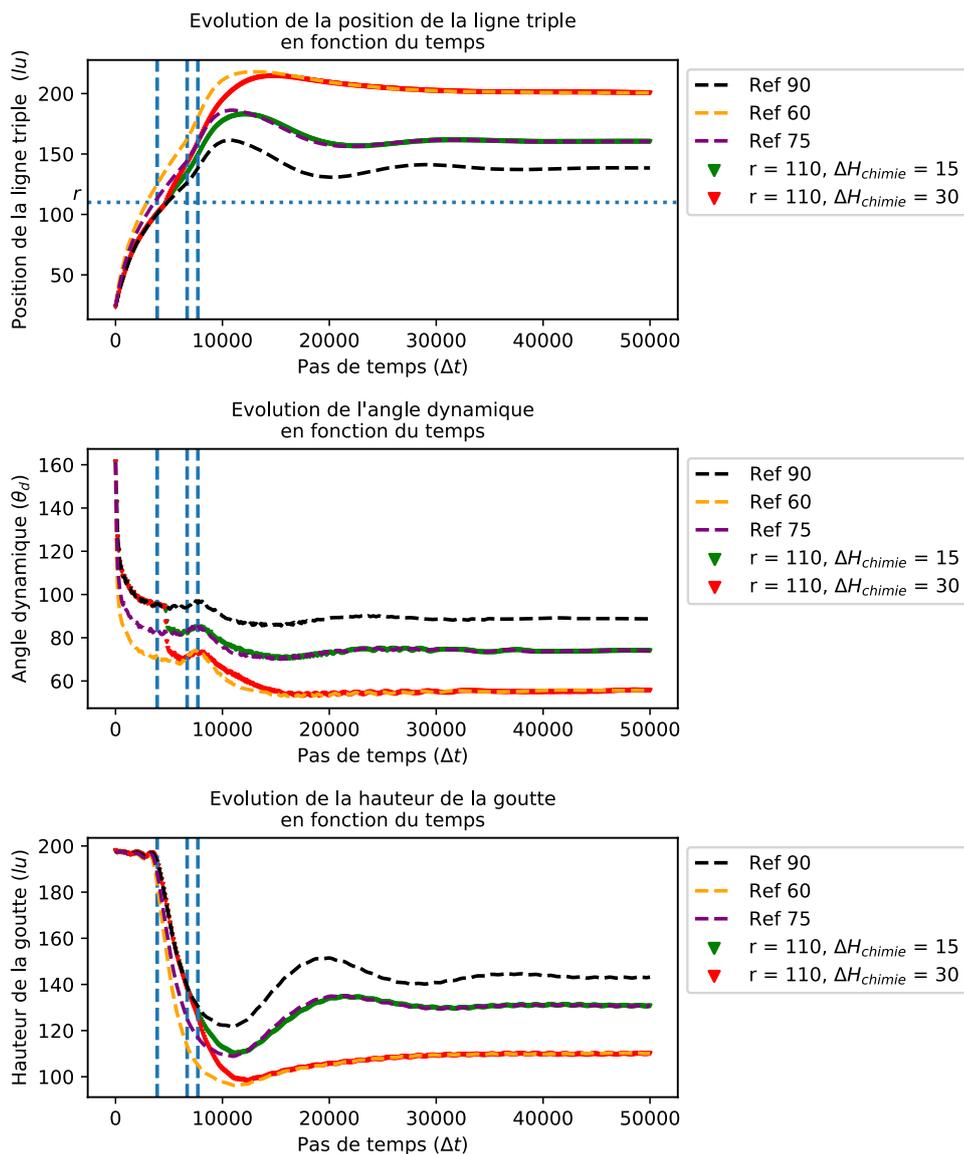


FIGURE A.2 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de relâche placée dans le domaine II.

de goutte continue de diminuer. Dans le cas de la texturation de relâche dans ce domaine, on observe que l'angle de contact n'augmente pas mais diminue. On peut faire l'hypothèse que c'est sûrement pendant cette variation que l'oscillation est amorcée et en perturbant l'amorce par un phénomène de relâche, l'oscillation est beaucoup plus faible.

Texture dans le domaine IV (fig. A.4)

La texture est placée dans le domaine IV.

On observe que le comportement des courbes est semblable au comportement observé pour une texture dans le domaine III (fig. A.3). Au moment où la ligne triple rencontre la texture, il y a une transition brusque des variables vers la courbe de référence de la nouvelle chimie de surface. Le comportement oscillatoire est annulé par la texture.

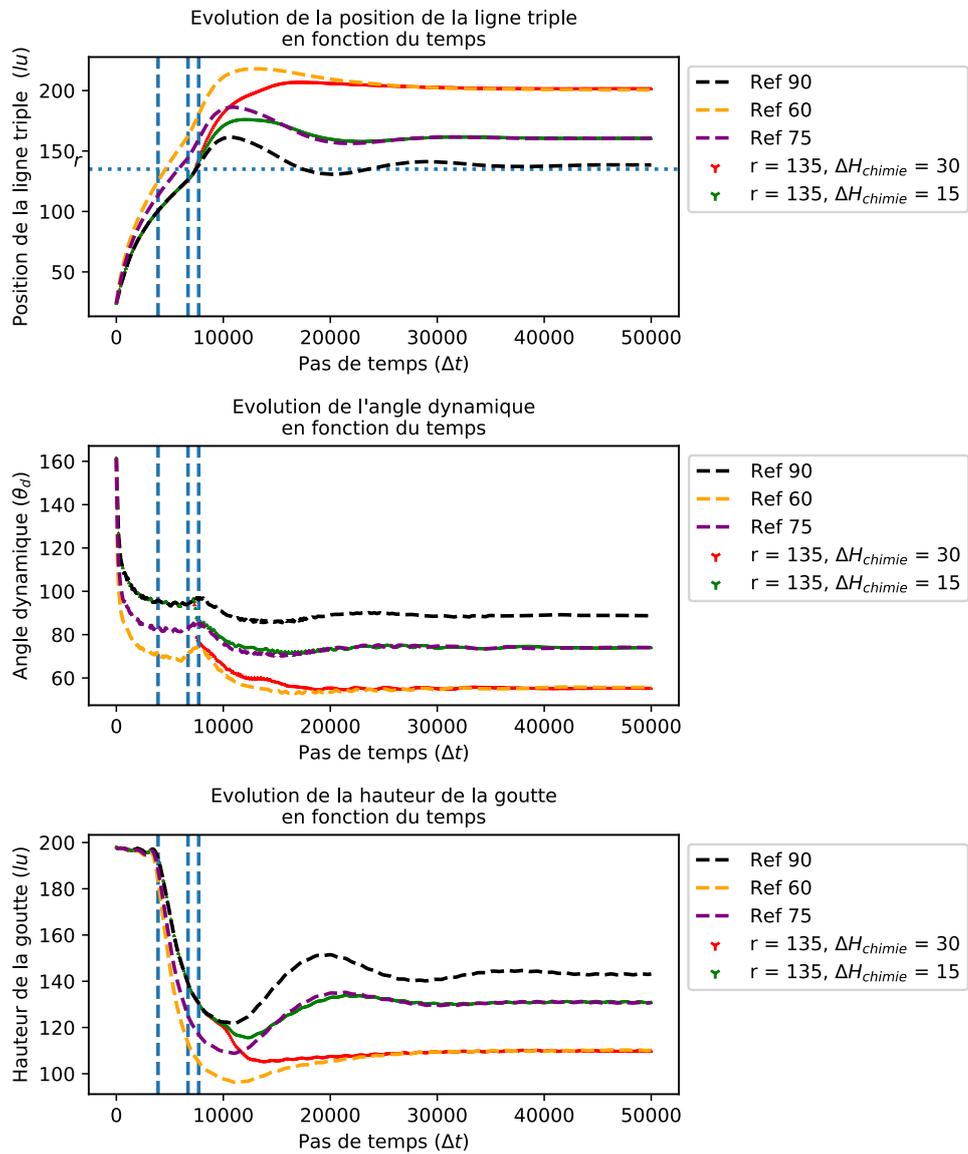


FIGURE A.3 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de relâche placée dans le domaine III.

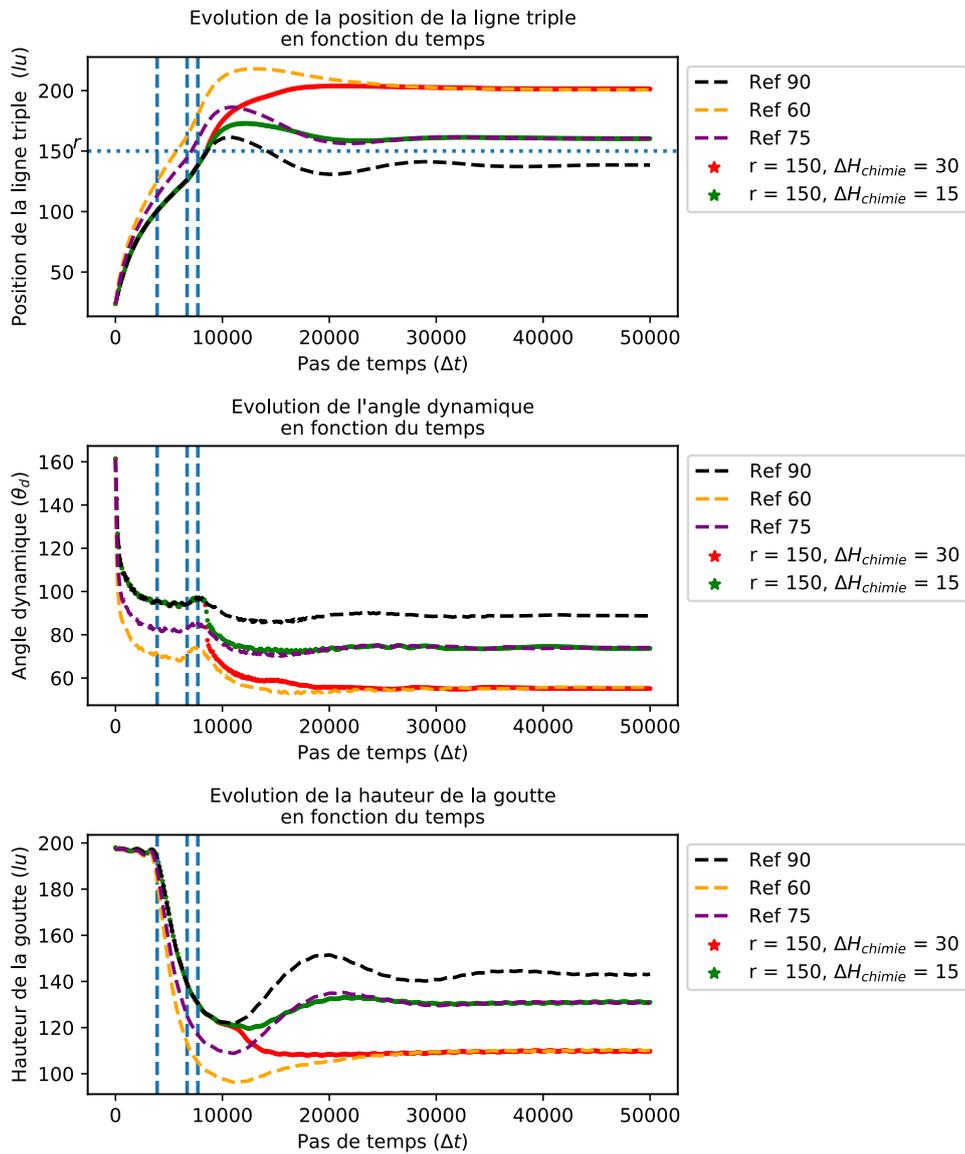


FIGURE A.4 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation chimique de relâche placée dans le domaine IV.

Annexe B

Etude de l'effet de la relâche topographique sur le comportement dynamique d'une goutte

Nous allons présenter l'évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps pour les quatre valeurs de r proposées. Ainsi, nous allons pouvoir observer comment la texturation topographique, dans cette étude une texturation sortante (relâche), peut influencer le comportement d'étalement d'une goutte.

Texture dans le domaine I (fig. B.1)

La texture est placée dans le domaine I.

Pour un effet de relâche de la ligne triple dans le domaine I, on observe qu'au moment où la ligne triple traverse la texture, il y a un point d'inflexion et la courbe de l'évolution de la ligne triple passe au-dessus de la courbe de référence. On observe une oscillation beaucoup plus faible de la ligne triple et un équilibre beaucoup plus tôt et un étalement plus important. L'angle de contact dynamique chute fortement au moment où la ligne triple traverse la texture. L'angle s'équilibre pour une valeur de 45° . La hauteur de goutte est affectée par la texturation longtemps après l'angle dynamique et se stabilise très vite. L'effet de relâche a accéléré la ligne triple et a permis d'atteindre un équilibre plus tôt que pour une surface plane et pour un étalement plus grand.

Texture dans le domaine II (fig. B.2)

Dans cette étude, la texture est placée dans le domaine II.

Avec un effet de relâche dans le domaine II, il y a un point d'inflexion sur la courbe d'évolution de la ligne triple. Il n'y a presque pas d'effet de sur-étalement. L'angle de contact chute brusquement lorsque la ligne triple traverse la texture, il s'équilibre ensuite sans osciller. La hauteur de goutte n'oscille pas. On remarque que la hauteur de goutte diminue plus que sur la simulation sur surface plane mais s'équilibre très vite. On remarque aussi un point d'inflexion sur la courbe d'évolution de la hauteur qui fait rechuter la hauteur de goutte et lui permet de diminuer plus que pour une surface plane. On peut faire l'hypothèse que ce point d'inflexion est la réaction de la hauteur de goutte suite à la forte diminution de l'angle de contact.

Texture dans le domaine III (fig. B.3)

La texture est placée dans le domaine III.

La position de la ligne triple a un point d'inflexion dans le domaine III où la ligne triple traverse la texture. La courbe d'évolution de la ligne triple n'oscille pas. On observe une forte diminution de l'angle dynamique lorsque la ligne triple traverse la texture. Cette courbe a une évolution en deux temps : une forte diminution suivie d'un état constant puis de nouveau au passage de la texture, une forte diminution suivie d'un plateau stable. La hauteur de goutte est en train de diminuer lorsque la ligne triple traverse la texture cela a pour effet de freiner la diminution de la hauteur de goutte lorsque la valeur de l'angle de contact chute. Lorsque l'angle de contact devient constant, la hauteur de goutte diminue à nouveau et s'équilibre.

Texture dans le domaine IV (fig. B.4)

La texture est placée dans le domaine IV.

Le comportement de la goutte pour une texturation topographique de relâche dans le domaine IV est semblable au comportement d'une goutte pour une même texturation dans le domaine III. C'est-à-dire que la ligne triple a un point d'inflexion et se stabilise vers son équilibre très vite. L'angle de contact chute fortement lorsque la ligne triple traverse la texture puis se stabilise. La hauteur de goutte se stabilise lorsque l'angle de contact chute au moment où la texture est traversée puis la hauteur diminue lorsque l'angle se stabilise.

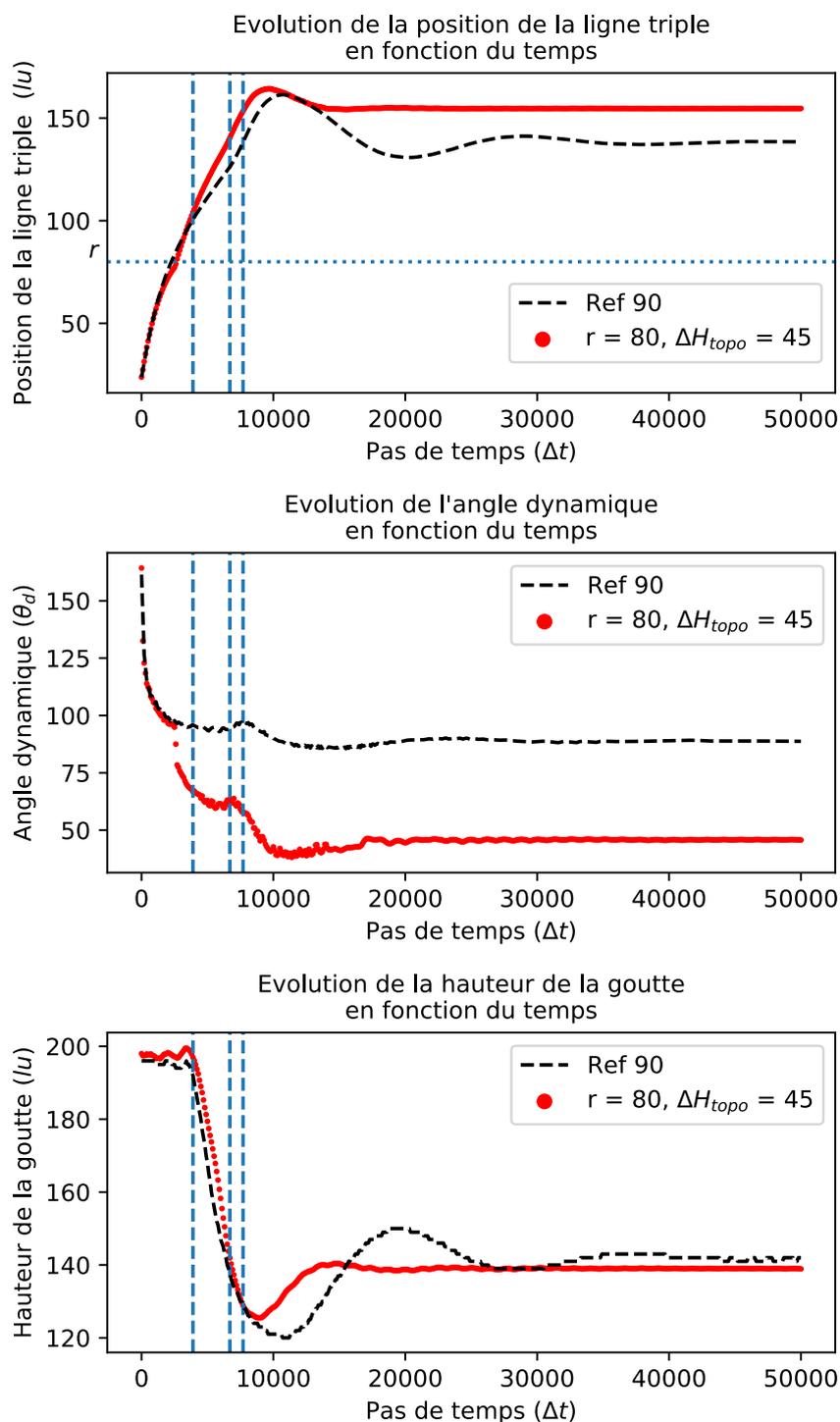


FIGURE B.1 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine I.

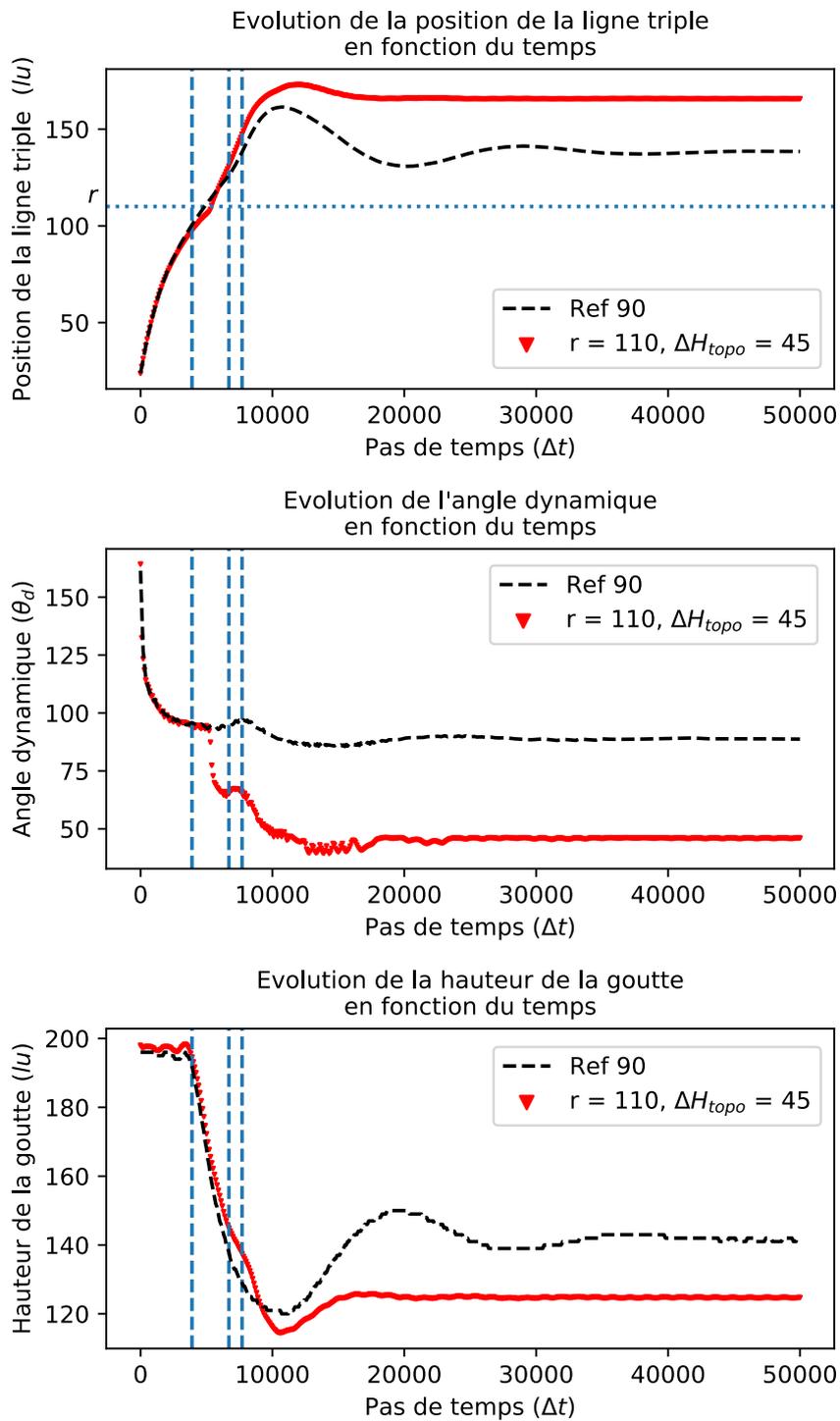


FIGURE B.2 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine II.

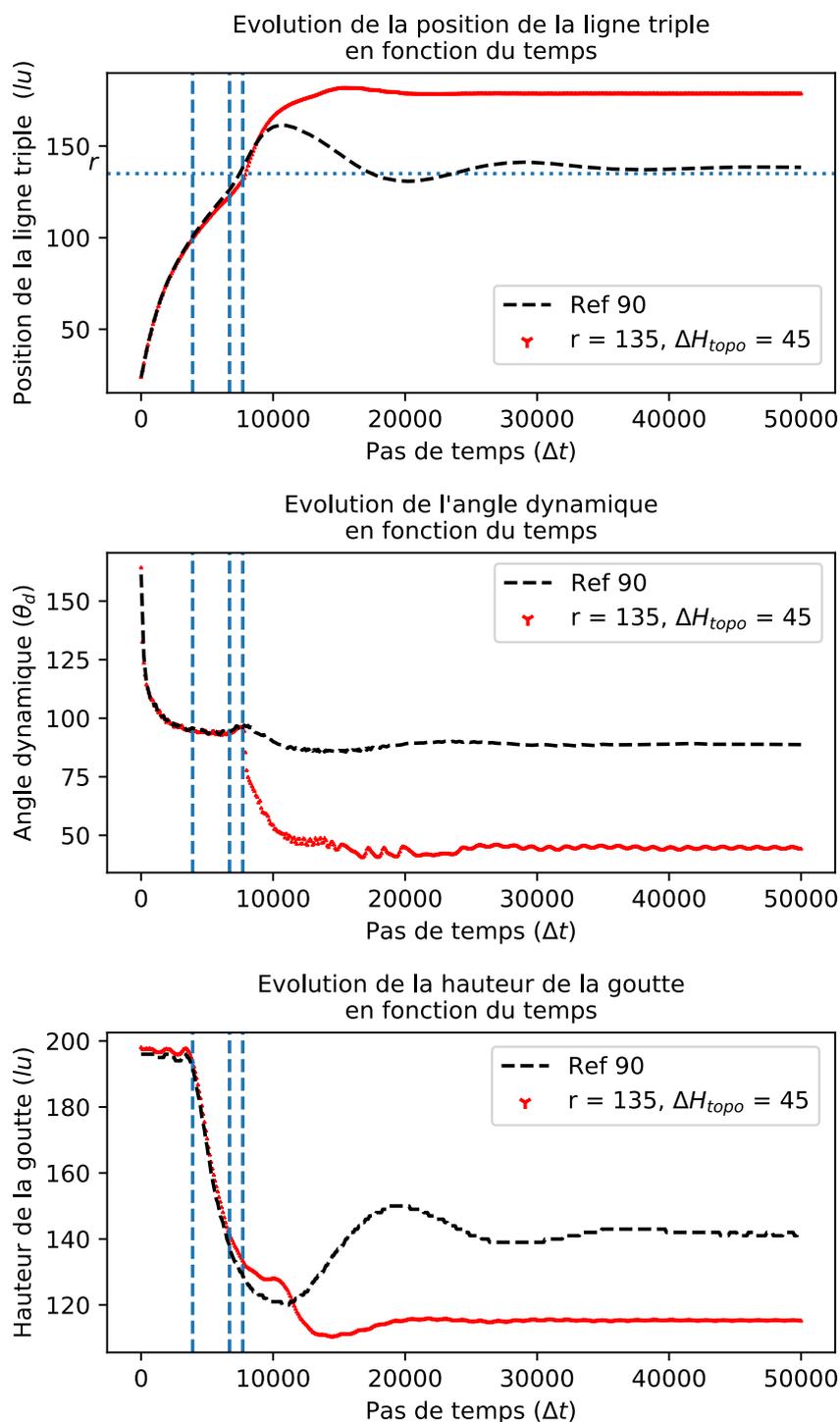


FIGURE B.3 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine III.

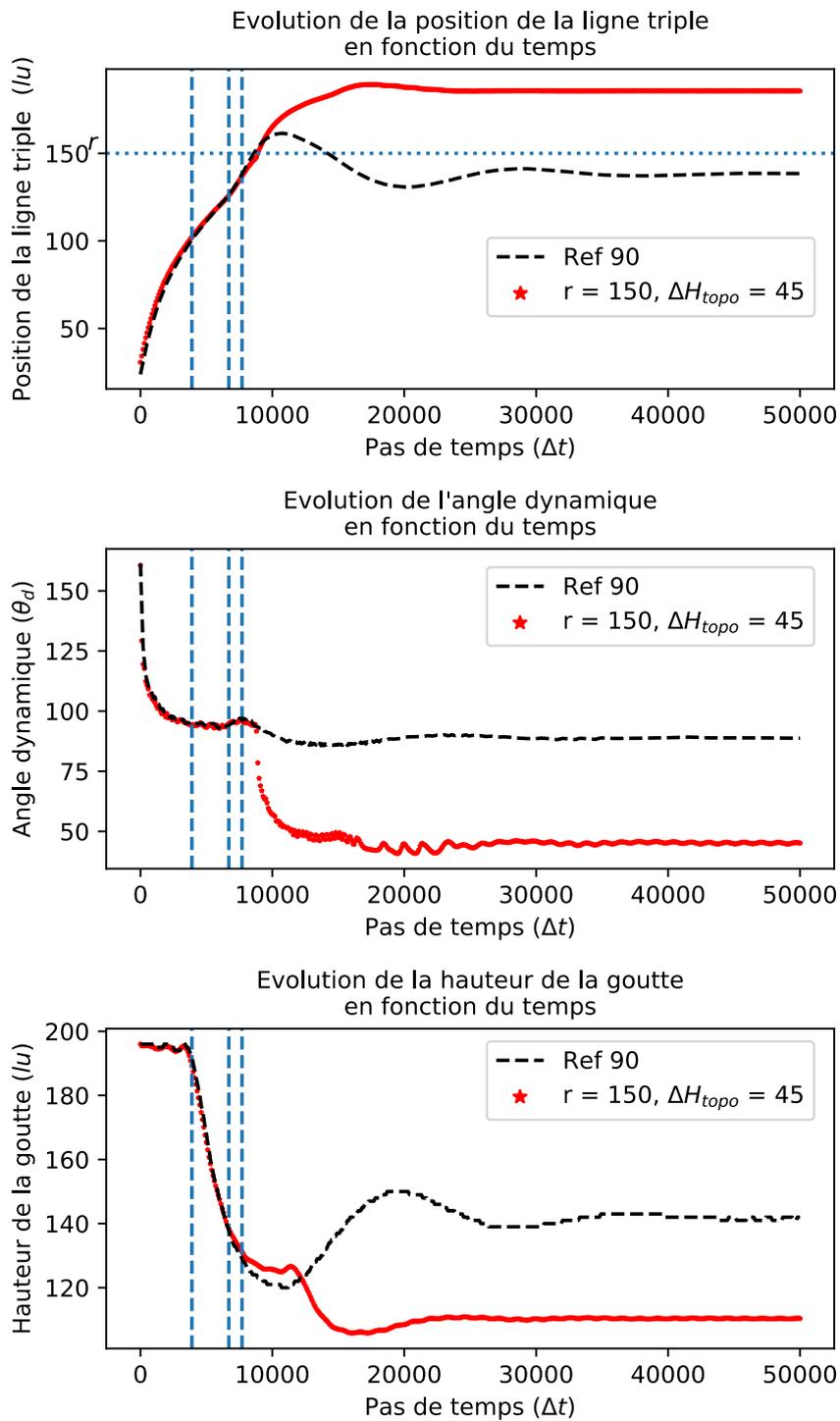


FIGURE B.4 – Évolution de la position de la ligne triple, de l'angle de contact dynamique et de la hauteur de la goutte en fonction du temps, pour une texturation topographique de collage placée dans le domaine IV.

Références

- [1] S. NIU, B. LI, Z. MU, M. YANG, J. ZHANG, Z. HAN et L. REN. « Excellent Structure-Based Multifunction of Morpho Butterfly Wings : A Review ». en. In : *Journal of Bionic Engineering* 12.2 (avr. 2015), p. 170–189. ISSN : 1672-6529. DOI : [10.1016/S1672-6529\(14\)60111-6](https://doi.org/10.1016/S1672-6529(14)60111-6).
- [2] T. JIANG, Z. PENG, W. WU, T. SHI et G. LIAO. « Gas sensing using hierarchical micro/nanostructures of Morpho butterfly scales ». en. In : *Sensors and Actuators A : Physical* 213 (juil. 2014), p. 63–69. ISSN : 0924-4247. DOI : [10.1016/j.sna.2014.04.002](https://doi.org/10.1016/j.sna.2014.04.002).
- [3] M. ZHANG, S. FENG, L. WANG et Y. ZHENG. « Lotus effect in wetting and self-cleaning ». In : *Biotribology* 5 (2016), p. 31–43. ISSN : 2352-5738. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.biotri.2015.08.002>.
- [4] Z. LIAN, J. XU, Z. YU, P. YU et H. YU. « A simple two-step approach for the fabrication of bio-inspired superhydrophobic and anisotropic wetting surfaces having corrosion resistance ». In : *Journal of Alloys and Compounds* 793 (juil. 2019), p. 326–335. ISSN : 0925-8388. DOI : [10.1016/j.jallcom.2019.04.169](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.04.169).
- [5] C. NEINHUIS et W. BARTHOLOTT. « Characterization and Distribution of Water-repellent, Self-cleaning Plant Surfaces ». en. In : *Annals of Botany* 79.6 (juin 1997), p. 667–677. ISSN : 0305-7364. DOI : [10.1006/anbo.1997.0400](https://doi.org/10.1006/anbo.1997.0400).
- [6] Y. LIU et G. LI. « A new method for producing "Lotus Effect" on a biomimetic shark skin ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 388.1 (2012), p. 235–242. ISSN : 0021-9797. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2012.08.033>.
- [7] N. A. PATANKAR. « Mimicking the Lotus Effect : Influence of Double Roughness Structures and Slender Pillars ». In : *Langmuir* 20.19 (sept. 2004), p. 8209–8213. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la048629t](https://doi.org/10.1021/la048629t).
- [8] S. S. LATTHE, R. S. SUTAR, V. S. KODAG, A. K. BHOSALE, A. M. KUMAR, K. K. SADASIVUNI, R. XING et S. LIU. « Self – cleaning superhydrophobic coatings : Potential industrial applications ». In : *Progress in Organic Coatings* 128 (2019), p. 52–58. ISSN : 0300-9440. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.porgcoat.2018.12.008>.
- [9] S. B. CREAGER et M. E. PORTER. « Stiff and tough : a comparative study on the tensile properties of shark skin ». In : *Zoology* (2017). ISSN : 0944-2006. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.zool.2017.10.002>.
- [10] D.-y. ZHANG, Y.-h. LUO, X. LI et H.-w. CHEN. « Numerical simulation and experimental study of drag-reducing surface of a real shark skin ». en. In : *Journal of Hydrodynamics, Ser. B* 23.2 (avr. 2011), p. 204–211. ISSN : 1001-6058. DOI : [10.1016/S1001-6058\(10\)60105-9](https://doi.org/10.1016/S1001-6058(10)60105-9).
- [11] K. AUTUMN, Y. A. LIANG, S. T. HSIEH, W. ZESCH, W. P. CHAN, T. W. KENNY, R. FEARING et R. J. FULL. « Adhesive force of a single gecko foot-hair ». en. In : *Nature* 405.6787 (juin 2000), p. 681–685. ISSN : 0028-0836, 1476-4687. DOI : [10.1038/35015073](https://doi.org/10.1038/35015073).
- [12] Z. L. PENG, C. WANG et S. H. CHEN. « Effects of surface wettability on gecko adhesion underwater ». In : *Colloids and Surfaces B : Biointerfaces* 122 (2014),

- p. 662–668. ISSN : 0927-7765. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2014.07.047>.
- [13] W. BARTHLOTT, M. MAIL, B. BHUSHAN et K. KOCH. « Plant Surfaces : Structures and Functions for Biomimetic Innovations ». In : *Nano-Micro Letters* 9.2 (jan. 2017), p. 23. ISSN : 2150-5551. DOI : [10.1007/s40820-016-0125-1](https://doi.org/10.1007/s40820-016-0125-1).
- [14] R. JETTER et S. SCHÄFFER. « Chemical Composition of the Prunus laurocerasus Leaf Surface. Dynamic Changes of the Epicuticular Wax Film during Leaf Development ». en. In : *Plant Physiology* 126.4 (août 2001). Publisher : American Society of Plant Biologists Section : WHOLE PLANT AND ECOPHYSIOLOGY, p. 1725–1737. ISSN : 0032-0889, 1532-2548. DOI : [10.1104/pp.126.4.1725](https://doi.org/10.1104/pp.126.4.1725).
- [15] K. KOCH, K. D. HARTMANN, L. SCHREIBER, W. BARTHLOTT et C. NEINHUIS. « Influences of air humidity during the cultivation of plants on wax chemical composition, morphology and leaf surface wettability ». en. In : *Environmental and Experimental Botany* 56.1 (mai 2006), p. 1–9. ISSN : 0098-8472. DOI : [10.1016/j.envexpbot.2004.09.013](https://doi.org/10.1016/j.envexpbot.2004.09.013).
- [16] H. GUAN, Z. HAN, H. CAO, S. NIU, Z. QIAN, J. YE et L. REN. « Characterization of Multi-scale Morphology and Superhydrophobicity of Water Bamboo Leaves and Biomimetic Polydimethylsiloxane (PDMS) Replicas ». en. In : *Journal of Bionic Engineering* 12.4 (oct. 2015), p. 624–633. ISSN : 1672-6529. DOI : [10.1016/S1672-6529\(14\)60152-9](https://doi.org/10.1016/S1672-6529(14)60152-9).
- [17] H. Y. ERBIL. « The debate on the dependence of apparent contact angles on drop contact area or three-phase contact line : A review ». In : *Surface Science Reports* 69.4 (2014), p. 325–365. ISSN : 0167-5729. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2014.09.001>.
- [18] C. W. EXTRAND. « Uncertainty in contact angle measurements from the tangent method ». In : *Journal of Adhesion Science and Technology* 30.15 (août 2016). Publisher : Taylor & Francis _eprint : <https://doi.org/10.1080/01694243.2016.1142799>, p. 1597–1601. ISSN : 0169-4243. DOI : [10.1080/01694243.2016.1142799](https://doi.org/10.1080/01694243.2016.1142799).
- [19] D. WOLF-GLADROW. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models - An Introduction*. T. 308. Berlin : Springer, 2000. ISBN : 978-3-540-66973-9.
- [20] J. BAO et L. SCHAEFER. « Lattice Boltzmann equation model for multi-component multi-phase flow with high density ratios ». In : *Applied Mathematical Modelling* 37.4 (fév. 2013), p. 1860–1871. ISSN : 0307-904X. DOI : [10.1016/j.apm.2012.04.048](https://doi.org/10.1016/j.apm.2012.04.048).
- [21] E. ATTAR et C. KÖRNER. « Lattice Boltzmann method for dynamic wetting problems ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 335.1 (2009), p. 84–93. ISSN : 0021-9797. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2009.02.055>.
- [22] R. BENZI, S. SUCCI et M. VERGASSOLA. « The lattice Boltzmann equation : theory and applications ». In : *Physics Reports* 222.3 (déc. 1992), p. 145–197. ISSN : 0370-1573. DOI : [10.1016/0370-1573\(92\)90090-M](https://doi.org/10.1016/0370-1573(92)90090-M).
- [23] T. KRÜGER, H. KUSUMAATMAJA, A. KUZMIN, O. SHARDT, G. SILVA et E. M. VIGGEN. *The Lattice Boltzmann Method : Principles and Practice*. en. Graduate Texts in Physics. Springer International Publishing, 2017. ISBN : 978-3-319-44647-9. DOI : [10.1007/978-3-319-44649-3](https://doi.org/10.1007/978-3-319-44649-3).
- [24] X. HE et L.-S. LUO. « Theory of the lattice Boltzmann method : From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation ». In : *Phys. Rev. E* 56.6 (déc. 1997), p. 6811–6817. DOI : [10.1103/PhysRevE.56.6811](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.56.6811).
- [25] P. BIZI-BANDOKI, S. BENAYOUN, S. VALETTE, B. BEAUGIRAUD et E. AUDOUARD. « Modifications of roughness and wettability properties of metals induced by femtosecond laser treatment ». en. In : *Applied Surface Science*. E-MRS 2010 Spring

- Meeting Symposium R. "Laser Processing and Diagnostics for Micro and Nano Applications" 257.12 (avr. 2011), p. 5213–5218. ISSN : 0169-4332. DOI : [10.1016/j.apsusc.2010.12.089](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2010.12.089).
- [26] V. BELAUD, S. VALETTE, G. STREMSDOERFER, M. BIGERELLE et S. BENAYOUN. « Wettability versus roughness : Multi-scales approach ». en. In : *Tribology International*. 2013 Joint Event on Tribology in Lyon 40th Leeds-Lyon Symposium on Tribology. Leeds-Lyon at 40 : is the past still present ? and Tribochemistry 2013, the Satellite Forum of WTC'2013 Torino Exploring tribochemical processes 82 (fév. 2015), p. 343–349. ISSN : 0301-679X. DOI : [10.1016/j.triboint.2014.07.002](https://doi.org/10.1016/j.triboint.2014.07.002).
- [27] W. S. MIELCZAREK, E. A. OBAJE, T. T. BACHMANN et M. KERSAUDY-KERHOAS. « Microfluidic blood plasma separation for medical diagnostics : is it worth it ? » eng. In : *Lab Chip* 16.18 (2016), p. 3441–3448. ISSN : 1473-0189. DOI : [10.1039/c6lc00833j](https://doi.org/10.1039/c6lc00833j).
- [28] J. VERA, E. CONTRAIRES, A.-C. BRULEZ, M. LAROCLETTE, S. VALETTE et S. BENAYOUN. « Wetting of polymer melts on coated and uncoated steel surfaces ». en. In : *Applied Surface Science* 410 (juil. 2017), p. 87–98. ISSN : 0169-4332. DOI : [10.1016/j.apsusc.2017.02.067](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.02.067).
- [29] N. PIONNIER, J. VERA, E. CONTRAIRES, S. BENAYOUN, R. BERGER et S. VALETTE. « The effect of the orientation and the height of periodic sub-micrometric texturing on dropwise condensation ». en. In : *Journal of Colloid and Interface Science* 526 (sept. 2018), p. 184–193. ISSN : 0021-9797. DOI : [10.1016/j.jcis.2018.04.043](https://doi.org/10.1016/j.jcis.2018.04.043).
- [30] S. DIVIN-MARIOTTI, P. AMIEUX, A. PASCALE-HAMRI, V. AUGER, G. KERMOUCHE, F. VALIORGUE et S. VALETTE. « Effects of micro-knurling and femtosecond laser micro texturing on aluminum long-term surface wettability ». In : *Applied Surface Science* 479 (2019), p. 344 –350. ISSN : 0169-4332. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.02.025>.
- [31] B. SHIN, J. HA, M. LEE, K. PARK, G. H. PARK, T. H. CHOI, K.-J. CHO et H.-Y. KIM. « Hygrobot : A self-locomotive ratcheted actuator powered by environmental humidity ». en. In : *Science Robotics* 3.14 (jan. 2018). ISSN : 2470-9476. DOI : [10.1126/scirobotics.aar2629](https://doi.org/10.1126/scirobotics.aar2629).
- [32] D. Q. Pierre-Gilles de GENNES Françoise Brochard-Wyart. *Gouttes, bulles, perles et ondes*. Sous la dir. de BELIN. 2002.
- [33] A. WILHELM NEUMANN, R. DAVID et Y. ZUO. *Applied surface thermodynamics*. Second edition. CRC Press, 2011.
- [34] A. MARCHAND. « Mouillage statistique et dynamique : Influence géométriques aux échelles moléculaires ». PhD Thesis. Université Paris-Diderot Paris VII, 2011.
- [35] J. W. GIBBS. « On the equilibrium of heterogenous substances ». In : *Transactions of the Connecticut Academy of Art and Sciences* 3 (1878), p. 329. DOI : [10.11588/heidok.00013220](https://doi.org/10.11588/heidok.00013220).
- [36] A. MARCHAND, J. H. WEIJS, J. WEIJS, J. H. SNOEIJER et B. ANDREOTTI. « Why is surface tension a force parallel to the interface ? » In : *American journal of physics* 79.10 (2011), p. 999–1008. ISSN : 0002-9505. DOI : [10.1119/1.3619866](https://doi.org/10.1119/1.3619866).
- [37] P. S. d. LAPLACE. « Oeuvres complètes de Laplace ». In : 1805, p. 392.
- [38] H. Y. ERBIL. *Solid and liquid interfaces*. Blackwell Publishing, Oxford, 2006.
- [39] A. HOURLIER-FARGETTE, A. ANTKOWIAK et S. NEUKIRCH. « Contact lines on silicone elastomers promote contamination ». In : nov. 2017, p. L6.010.
- [40] P. G. de GENNES. « Wetting : statics and dynamics ». In : *Rev. Mod. Phys.* 57.3 (juil. 1985), p. 827–863. DOI : [10.1103/RevModPhys.57.827](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.57.827).
- [41] A. L. DUBOV, A. MOURRAN, M. MÖLLER et O. I. VINOGRADOVA. « Contact angle hysteresis on superhydrophobic stripes ». In : *J. Chem. Phys.* 141.7 (août 2014).

- Publisher : American Institute of Physics, p. 074710. ISSN : 0021-9606. DOI : [10.1063/1.4892801](https://doi.org/10.1063/1.4892801).
- [42] T. YOUNG. « An essay on the cohesion of fluids ». In : *Philos. Trans. Roy. Soc. London* (1805).
- [43] A. DUPRÉ et P. DUPRÉ. *Théorie mécanique de la chaleur*, French. OCLC : 7530342. Paris : Gauthier-Villars, 1869.
- [44] D. C. PEASE. « The Significance of the Contact Angle in Relation to the Solid Surface ». In : *J. Phys. Chem.* 49.2 (fév. 1945), p. 107–110. ISSN : 0092-7325. DOI : [10.1021/j150440a007](https://doi.org/10.1021/j150440a007).
- [45] R. N. WENZEL. « RESISTANCE OF SOLID SURFACES TO WETTING BY WATER ». In : *Industrial & Engineering Chemistry* 28.8 (1936), p. 988–994. DOI : [10.1021/ie50320a024](https://doi.org/10.1021/ie50320a024).
- [46] QUÉRÉ, DAVID et BICO, JOSÉ. « Modulation du mouillage par des microtextures ». In : *La Houille Blanche* 4 (2003), p. 21–24. DOI : [10.1051/lhb/2003070](https://doi.org/10.1051/lhb/2003070).
- [47] A. B. D. CASSIE et S. BAXTER. « Wettability of porous surfaces ». In : *Trans. Faraday Soc.* 40.0 (1944), p. 546–551. DOI : [10.1039/TF9444000546](https://doi.org/10.1039/TF9444000546).
- [48] A. MARMUR. « Wetting on Hydrophobic Rough Surfaces : To Be Heterogeneous or Not To Be ? » In : *Langmuir* 19.20 (sept. 2003), p. 8343–8348. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la0344682](https://doi.org/10.1021/la0344682).
- [49] P. BRUNET, F. LAPIERRE, V THOMY, Y. COFFINIER et R. BOUKHERROUB. « Extreme Resistance of Superhydrophobic Surfaces to Impalement : Reversible Electro-wetting Related to the Impacting/Bouncing Drop Test ». In : 25 (mar. 2009). DOI : [10.1021/la900144d](https://doi.org/10.1021/la900144d).
- [50] C. W. EXTRAND. « Contact Angles and Hysteresis on Surfaces with Chemically Heterogeneous Islands ». In : *Langmuir* 19.9 (avr. 2003), p. 3793–3796. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la0268350](https://doi.org/10.1021/la0268350).
- [51] L. GAO et T. J. MCCARTHY. « How Wenzel and Cassie Were Wrong ». In : *Langmuir* 23.7 (2007), p. 3762–3765. DOI : [10.1021/la062634a](https://doi.org/10.1021/la062634a).
- [52] C. W. EXTRAND. « Model for Contact Angles and Hysteresis on Rough and Ultraphobic Surfaces ». In : *Langmuir* 18.21 (oct. 2002), p. 7991–7999. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la025769z](https://doi.org/10.1021/la025769z).
- [53] C. W. EXTRAND. « Criteria for Ultralyophobic Surfaces ». In : *Langmuir* 20.12 (juin 2004), p. 5013–5018. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la036481s](https://doi.org/10.1021/la036481s).
- [54] C. W. EXTRAND. « Designing for Optimum Liquid Repellency ». In : *Langmuir* 22.4 (fév. 2006), p. 1711–1714. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la0525401](https://doi.org/10.1021/la0525401).
- [55] G. MCHALE. « Cassie and Wenzel : Were They Really So Wrong ? » In : *Langmuir* 23.15 (juil. 2007), p. 8200–8205. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la7011167](https://doi.org/10.1021/la7011167).
- [56] M. NOSONOVSKY. « On the Range of Applicability of the Wenzel and Cassie Equations ». In : *Langmuir* 23.19 (sept. 2007), p. 9919–9920. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la701324m](https://doi.org/10.1021/la701324m).
- [57] A. MARMUR et E. BITTOUN. « When Wenzel and Cassie Are Right : Reconciling Local and Global Considerations ». In : *Langmuir* 25.3 (fév. 2009), p. 1277–1281. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la802667b](https://doi.org/10.1021/la802667b).
- [58] BORMASHENKO EDWARD. « Wetting transitions on biomimetic surfaces ». In : *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 368.1929 (oct. 2010), p. 4695–4711. DOI : [10.1098/rsta.2010.0121](https://doi.org/10.1098/rsta.2010.0121).
- [59] E. BORMASHENKO. « General equation describing wetting of rough surfaces ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 360.1 (2011), p. 317–319. ISSN : 0021-9797. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2011.04.051>.

- [60] M. MIWA, A. NAKAJIMA, A. FUJISHIMA, K. HASHIMOTO et T. WATANABE. « Effects of the Surface Roughness on Sliding Angles of Water Droplets on Superhydrophobic Surfaces ». In : *Langmuir* 16.13 (juin 2000). Publisher : American Chemical Society, p. 5754–5760. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la991660o](https://doi.org/10.1021/la991660o).
- [61] T.-S. WONG, A. P.-H. HUANG et C.-M. HO. « Wetting Behaviors of Individual Nanostructures ». In : *Langmuir* 25.12 (2009), p. 6599–6603. DOI : [10.1021/la900874f](https://doi.org/10.1021/la900874f).
- [62] L. BORUVKA et A. W. NEUMANN. « Generalization of the classical theory of capillarity ». In : *The Journal of Chemical Physics* 66.12 (1977), p. 5464–5476. DOI : [10.1063/1.433866](https://doi.org/10.1063/1.433866).
- [63] J. H. SNOEIJER et B. ANDREOTTI. « Moving Contact Lines : Scales, Regimes, and Dynamical Transitions ». In : *Annual Review of Fluid Mechanics* 45.1 (2013), p. 269–292. DOI : [10.1146/annurev-fluid-011212-140734](https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-011212-140734).
- [64] R. E. JOHNSON et R. H. DETTRE. « Contact Angle Hysteresis. III. Study of an Idealized Heterogeneous Surface ». In : *The Journal of Physical Chemistry*. T. 68. Juil. 1964, p. 1744–1750.
- [65] R. E. JOHNSON et R. H. DETTRE. « Contact Angle Hysteresis : I. Study of an Idealized Rough Surface ». en. In : *Contact Angle, Wettability, and Adhesion*. Sous la dir. de F. M. FOWKES. T. 43. WASHINGTON, D.C. : AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, jan. 1964, p. 112–135. ISBN : 978-0-8412-0044-9 978-0-8412-2212-0. DOI : [10.1021/ba-1964-0043.ch007](https://doi.org/10.1021/ba-1964-0043.ch007).
- [66] R. H. DETTRE et R. E. JOHNSON. « Contact Angle Hysteresis. IV. Contact Angle Measurements on Heterogeneous Surfaces¹ ». In : *The Journal of Physical Chemistry*. T. 69. Mai 1965, p. 1507–1515.
- [67] E. BORMASHENKO. « Progress in understanding wetting transitions on rough surfaces ». In : *Advances in Colloid and Interface Science* 222.Supplement C (2015), p. 92 –103. ISSN : 0001-8686. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cis.2014.02.009>.
- [68] G. FANG, W. LI, X. WANG et G. QIAO. « Droplet Motion on Designed Microtextured Superhydrophobic Surfaces with Tunable Wettability ». In : *Langmuir* 24.20 (oct. 2008), p. 11651–11660. ISSN : 0743-7463. DOI : [10.1021/la802033q](https://doi.org/10.1021/la802033q).
- [69] A. DUBOV, J. TEISSEIRE et E. BARTHEL. « Elastic Instability and Contact Angles on Hydrophobic Surfaces with Periodic Textures ». In : *EPL - Europhysics Letters* 97 (2012), p. 26003. DOI : [10.1209/095-5075/97/97/26003](https://doi.org/10.1209/095-5075/97/97/26003).
- [70] C. G. L FURMIDGE. « Studies at phase interfaces. I. The sliding of liquid drops on solid surfaces and a theory for spray retention ». In : *Journal of Colloid Science* 17.4 (avr. 1962), p. 309–324. ISSN : 0095-8522. DOI : [10.1016/0095-8522\(62\)90011-9](https://doi.org/10.1016/0095-8522(62)90011-9).
- [71] M. RAMIASA, J. RALSTON, R. FETZER et R. SEDEV. « The influence of topography on dynamic wetting ». In : *Advances in Colloid and Interface Science* 206.Supplement C (2014), p. 275 –293. ISSN : 0001-8686. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cis.2013.04.005>.
- [72] O. V. VOINOV. « Hydrodynamics of wetting ». en. In : *Fluid Dyn* 11.5 (sept. 1976), p. 714–721. ISSN : 1573-8507. DOI : [10.1007/BF01012963](https://doi.org/10.1007/BF01012963).
- [73] R. G. COX. « The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface. Part 1. Viscous flow ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 168 (1986), p. 169–194. DOI : [10.1017/S0022112086000332](https://doi.org/10.1017/S0022112086000332).
- [74] T. D. BLAKE et J. M. HAYNES. « Kinetics of liquidliquid displacement ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 30.3 (1969), p. 421 –423. ISSN : 0021-9797. DOI : [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(69\)90411-1](https://doi.org/10.1016/0021-9797(69)90411-1).
- [75] T. D. BLAKE. « The physics of moving wetting lines ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 299.1 (2006), p. 1 –13. ISSN : 0021-9797. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2006.03.051>.

- [76] P. HÄNGGI, P. TALKNER et M. BORKOVEC. « Reaction-rate theory : fifty years after Kramers ». In : *Rev. Mod. Phys.* 62.2 (avr. 1990), p. 251–341. DOI : [10.1103/RevModPhys.62.251](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.62.251).
- [77] T. D. BLAKE et J. DE CONINCK. « Dynamics of wetting and Kramers’ theory ». en. In : *Eur. Phys. J. Spec. Top.* 197.1 (août 2011), p. 249. ISSN : 1951-6401. DOI : [10.1140/epjst/e2011-01467-2](https://doi.org/10.1140/epjst/e2011-01467-2).
- [78] J. ZHANG, M. K. BORG et J. M. REESE. « Multiscale simulation of dynamic wetting ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 115.Part A (2017), p. 886–896. ISSN : 0017-9310. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.07.034>.
- [79] S. O. UNVERDI et G. TRYGGVASON. « A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows ». In : *Journal of Computational Physics* 100.1 (1992), p. 25–37. ISSN : 0021-9991. DOI : [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90307-K](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90307-K).
- [80] S. MANSERVISI et R. SCARDOVELLI. « A variational approach to the contact angle dynamics of spreading droplets ». In : *Computers & Fluids* 38.2 (2009), p. 406–424. ISSN : 0045-7930. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2008.05.001>.
- [81] Y. ZHAO. *Numerical simulations of violent free surface by a Coupled Level-Set and Volume-Of-Fluid method*. en. 2014.
- [82] W. F. NOH et P. WOODWARD. « SLIC (Simple Line Interface Calculation) ». In : *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28 – July 2, 1976 Twente University, Enschede*. Sous la dir. d’A. I. van de VOOREN et P. J. ZANDBERGEN. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1976, p. 330–340. ISBN : 978-3-540-37548-7.
- [83] R. DEBAR. « Fundamentals of the KRAKEN code. [Eulerian hydrodynamics code for compressible nonviscous flow of several fluids in two-dimensional (axially symmetric) region] ». In : (1974). DOI : [10.2172/7227630](https://doi.org/10.2172/7227630).
- [84] S. AFKHAMI, S. ZALESKI et M. BUSSMANN. « A mesh-dependent model for applying dynamic contact angles to VOF simulations ». In : *Journal of Computational Physics* 228.15 (2009), p. 5370–5389. ISSN : 0021-9991. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.04.027>.
- [85] H. F. WU, K. A. FICHTHORN et A. BORHAN. « An atomistic–continuum hybrid scheme for numerical simulation of droplet spreading on a solid surface ». In : *Heat and Mass Transfer* 50.3 (mar. 2014), p. 351–361. ISSN : 1432-1181. DOI : [10.1007/s00231-013-1270-4](https://doi.org/10.1007/s00231-013-1270-4).
- [86] P. VIGNEAUX. « Methodthodes Level Set pour des problemmes d’interface en microfluidique. » PhD Thesis. Universite Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2007.
- [87] M. SUSSMAN, A. S. ALMGREN, J. B. BELL, P. COLELLA, L. H. HOWELL et M. L. WELCOME. « An Adaptive Level Set Approach for Incompressible Two-Phase Flows ». In : *Journal of Computational Physics* 148.1 (1999), p. 81–124. ISSN : 0021-9991. DOI : <https://doi.org/10.1006/jcph.1998.6106>.
- [88] Y. SUI et P. D. M. SPELT. « An efficient computational model for macroscale simulations of moving contact lines ». In : *Journal of Computational Physics* 242.Supplement C (2013), p. 37–52. ISSN : 0021-9991. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.02.005>.
- [89] P. D. M. SPELT. « A level-set approach for simulations of flows with multiple moving contact lines with hysteresis ». In : *Journal of Computational Physics* 207.2 (2005), p. 389–404. ISSN : 0021-9991. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.01.016>.
- [90] Z. SOLOMENKO, P. D. M. SPELT et P. ALIX. « A level-set method for large-scale simulations of three-dimensional flows with moving contact lines ». In : *Journal of*

- Computational Physics* 348.Supplement C (2017), p. 151 –170. ISSN : 0021-9991. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.07.011>.
- [91] Y. KWAK, C.-C. J. KUO et A. NAKANO. « Hybrid Lattice-Boltzmann/Level-set Method for Liquid Simulation and Visualization ». In : (2010).
- [92] M. A. SAFI et S. TUREK. « Efficient computations for high density ratio rising bubble flows using a diffused interface, coupled lattice Boltzmann-level set scheme ». In : *Computers & Mathematics with Applications* 70.6 (2015), p. 1290 –1305. ISSN : 0898-1221. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2015.07.007>.
- [93] D. ENRIGHT, R. FEDKIW, J. FERZIGER et I. MITCHELL. « A Hybrid Particle Level Set Method for Improved Interface Capturing ». In : *Journal of Computational Physics* 183.1 (2002), p. 83 –116. ISSN : 0021-9991. DOI : <https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7166>.
- [94] J. BRUCHON, Y. LIU et N. MOULIN. « Finite element setting for fluid flow simulations with natural enforcement of the triple junction equilibrium ». en. In : *Computers & Fluids* 171 (juil. 2018), p. 103–121. ISSN : 0045-7930. DOI : [10.1016/j.compfluid.2018.06.007](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.06.007).
- [95] W. GONG, Y. YAN, S. CHEN et D. GIDDINGS. « Numerical Study of Wetting Transitions on Biomimetic Surfaces Using a Lattice Boltzmann Approach with Large Density Ratio ». In : *Journal of Bionic Engineering* 14.3 (2017), p. 486 –496. ISSN : 1672-6529. DOI : [https://doi.org/10.1016/S1672-6529\(16\)60414-6](https://doi.org/10.1016/S1672-6529(16)60414-6).
- [96] W. GONG, Y. ZU, S. CHEN et Y. YAN. « Wetting transition energy curves for a droplet on a square-post patterned surface ». In : *Science Bulletin* 62.2 (2017), p. 136 –142. ISSN : 2095-9273. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.scib.2016.12.003>.
- [97] A. J. BRIANT, A. J. WAGNER et J. M. YEOMANS. « Lattice Boltzmann simulations of contact line motion. I. Liquid-gas systems ». eng. In : *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys* 69.3 Pt 1 (mar. 2004), p. 031602. ISSN : 1539-3755. DOI : [10.1103/PhysRevE.69.031602](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.69.031602).
- [98] Y. Y. YAN, Y. Q. ZU et B. DONG. « LBM, a useful tool for mesoscale modeling of single-phase and multiphase flow ». In : *Applied Thermal Engineering* 31.5 (2011), p. 649 –655. ISSN : 1359-4311. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2010.10.010>.
- [99] H. KUSUMAATMAJA, A. DUPUIS et J. M. YEOMANS. « Lattice Boltzmann simulations of drop dynamics ». In : *Mathematics and Computers in Simulation* 72.2 (2006), p. 160 –164. ISSN : 0378-4754. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2006.05.016>.
- [100] M. R. SWIFT, W. R. OSBORN et J. M. YEOMANS. « Lattice Boltzmann Simulation of Nonideal Fluids ». In : *Phys. Rev. Lett.* 75.5 (juil. 1995), p. 830–833. DOI : [10.1103/PhysRevLett.75.830](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.830).
- [101] T. PRAVINRAJ et R. PATRIKAR. « Modelling and investigation of partial wetting surfaces for drop dynamics using lattice Boltzmann method ». In : *Applied Surface Science* 409 (juil. 2017), p. 214–222. ISSN : 0169-4332. DOI : [10.1016/j.apsusc.2017.02.242](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.02.242).
- [102] X. SHAN et H. CHEN. « Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation ». In : *Phys. Rev. E* 49.4 (avr. 1994), p. 2941–2948. DOI : [10.1103/PhysRevE.49.2941](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.49.2941).
- [103] N. S. MARTYS et H. CHEN. « Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method ». en. In : *Phys. Rev. E* 53.1 (jan. 1996), p. 743–750. ISSN : 1063-651X, 1095-3787. DOI : [10.1103/PhysRevE.53.743](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.53.743).

- [104] K. J. KUBIAK, M. C. T. WILSON, T. G. MATHIA et S. CARRAS. « Dynamics of contact line motion during the wetting of rough surfaces and correlation with topographical surface parameters ». en. In : *Scanning* 33.5 (2011). _eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/sca.20289>, p. 370–377. ISSN : 1932-8745. DOI : [10.1002/sca.20289](https://doi.org/10.1002/sca.20289).
- [105] K. J. KUBIAK et T. G. MATHIA. « Anisotropic Wetting of Hydrophobic and Hydrophilic Surfaces—Modelling by Lattice Boltzmann Method ». en. In : *Procedia Engineering*. 37th National Conference on Theoretical and Applied Mechanics (37th NCTAM 2013) & The 1st International Conference on Mechanics (1st ICM) 79 (jan. 2014), p. 45–48. ISSN : 1877-7058. DOI : [10.1016/j.proeng.2014.06.307](https://doi.org/10.1016/j.proeng.2014.06.307).
- [106] H. KUSUMAATMAJA, C. M. POOLEY, S. GIRARDO, D. PISIGNANO et J. M. YEOMANS. « Capillary filling in patterned channels ». In : *Phys. Rev. E* 77.6 (juin 2008), p. 067301. DOI : [10.1103/PhysRevE.77.067301](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.067301).
- [107] A. R. G. HARWOOD et A. J. REVELL. « Parallelisation of an interactive lattice-Boltzmann method on an Android-powered mobile device ». en. In : *Advances in Engineering Software* 104 (fév. 2017), p. 38–50. ISSN : 0965-9978. DOI : [10.1016/j.advengsoft.2016.11.005](https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2016.11.005).
- [108] S. SUO, M. LIU et Y. GAN. « An LBM-PNM framework for immiscible flow : With applications to droplet spreading on porous surfaces ». en. In : *Chemical Engineering Science* 218 (juin 2020), p. 115577. ISSN : 0009-2509. DOI : [10.1016/j.ces.2020.115577](https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.115577).
- [109] B. MA, L. SHI, C. HUANG et Q. XU. « Effects of nanoscale pore structure on permeability and relative permeability loss analyzed by GPU enhanced Multiple-Relaxation-Time LBM ». en. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 117 (fév. 2018), p. 584–594. ISSN : 0017-9310. DOI : [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.09.136](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.09.136).
- [110] C. OBRECHT, F. KUZNIK, B. TOURANCHEAU et J.-J. ROUX. « Scalable lattice Boltzmann solvers for CUDA GPU clusters ». en. In : *Parallel Computing* 39.6 (juin 2013), p. 259–270. ISSN : 0167-8191. DOI : [10.1016/j.parco.2013.04.001](https://doi.org/10.1016/j.parco.2013.04.001).
- [111] A. A. MOHAMAD. *Lattice Boltzmann Method : Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. en. London : Springer-Verlag, 2011. ISBN : 978-1-4471-6099-1. DOI : [10.1007/978-0-85729-455-5](https://doi.org/10.1007/978-0-85729-455-5).
- [112] P. L. BHATNAGAR, E. P. GROSS et M. KROOK. « A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems ». In : *Phys. Rev.* 94.3 (mai 1954), p. 511–525. DOI : [10.1103/PhysRev.94.511](https://doi.org/10.1103/PhysRev.94.511).
- [113] Y. H. QIAN, D. D’HUMIÈRES et P. LALLEMAND. « Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation ». en. In : *EPL* 17.6 (fév. 1992), p. 479–484. ISSN : 0295-5075. DOI : [10.1209/0295-5075/17/6/001](https://doi.org/10.1209/0295-5075/17/6/001).
- [114] T. INAMURO, M. YOSHINO et F. OGINO. « A nonslip boundary condition for lattice Boltzmann simulations ». In : *Physics of Fluids* 7.12 (déc. 1995). Publisher : American Institute of Physics, p. 2928–2930. ISSN : 1070-6631. DOI : [10.1063/1.868766](https://doi.org/10.1063/1.868766).
- [115] Q. ZOU et X. HE. « On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model ». In : *Physics of Fluids* 9.6 (juin 1997). Publisher : American Institute of Physics, p. 1591–1598. ISSN : 1070-6631. DOI : [10.1063/1.869307](https://doi.org/10.1063/1.869307).
- [116] U. FRISCH, B. HASSLACHER et Y. POMEAU. « Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation ». In : *Phys. Rev. Lett.* 56.14 (avr. 1986). Publisher : American Physical Society, p. 1505–1508. DOI : [10.1103/PhysRevLett.56.1505](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.1505).
- [117] D. H. ROTHMAN et J. M. KELLER. « Immiscible cellular-automaton fluids ». en. In : *J Stat Phys* 52.3 (août 1988), p. 1119–1127. ISSN : 1572-9613. DOI : [10.1007/BF01019743](https://doi.org/10.1007/BF01019743).

- [118] A. K. GUNSTENSEN, D. H. ROTHMAN, S. ZALESKI et G. ZANETTI. « Lattice Boltzmann model of immiscible fluids ». In : *Phys. Rev. A* 43.8 (avr. 1991). Publisher : American Physical Society, p. 4320–4327. DOI : [10.1103/PhysRevA.43.4320](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.43.4320).
- [119] D. GRUNAU, S. CHEN et K. EGGERT. « A lattice Boltzmann model for multiphase fluid flows ». In : *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 5.10 (oct. 1993). Publisher : American Institute of Physics, p. 2557–2562. ISSN : 0899-8213. DOI : [10.1063/1.858769](https://doi.org/10.1063/1.858769).
- [120] U. ORTONA, D. SALIN, M. CIEPLAK et J. R. BANAVAR. « Interfacial Phenomena in Boltzmann Cellular Automata ». en. In : *EPL* 28.5 (nov. 1994). Publisher : IOP Publishing, p. 317–322. ISSN : 0295-5075. DOI : [10.1209/0295-5075/28/5/004](https://doi.org/10.1209/0295-5075/28/5/004).
- [121] P. V. COVENEY, S. SUCCI, I. GINZBURG et K. STEINER. « A free-surface lattice Boltzmann method for modelling the filling of expanding cavities by Bingham fluids ». In : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 360.1792 (mar. 2002). Publisher : Royal Society, p. 453–466. DOI : [10.1098/rsta.2001.0941](https://doi.org/10.1098/rsta.2001.0941).
- [122] B. AHRENHOLZ, J. TÖLKE, P. LEHMANN, A. PETERS, A. KAESTNER, M. KRAFCZYK et W. DURNER. « Prediction of capillary hysteresis in a porous material using lattice-Boltzmann methods and comparison to experimental data and a morphological pore network model ». en. In : *Advances in Water Resources. Quantitative links between porous media structures and flow behavior across scales* 31.9 (sept. 2008), p. 1151–1173. ISSN : 0309-1708. DOI : [10.1016/j.advwatres.2008.03.009](https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2008.03.009).
- [123] L. CHEN, Q. KANG, Y. MU, Y.-L. HE et W.-Q. TAO. « A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model : Methods and applications ». In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 76 (sept. 2014), p. 210–236. ISSN : 0017-9310. DOI : [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.04.032](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.04.032).
- [124] M. SBRAGAGLIA, R. BENZI, L. BIFERALE, S. SUCCI, K. SUGIYAMA et F. TOSCHI. « Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential ». In : *Phys. Rev. E* 75.2 (fév. 2007), p. 026702. DOI : [10.1103/PhysRevE.75.026702](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.026702).
- [125] P. YUAN et L. SCHAEFER. « Equations of state in a lattice Boltzmann model ». In : *Physics of Fluids* 18.4 (avr. 2006), p. 042101. ISSN : 1070-6631. DOI : [10.1063/1.2187070](https://doi.org/10.1063/1.2187070).
- [126] M. C. SUKOP et D. T. THORNE. *Lattice Boltzmann Modeling : An Introduction for Geoscientists and Engineers*. 1st. Springer Publishing Company, Incorporated, 2010. ISBN : 3-642-06625-9 978-3-642-06625-2.
- [127] B. T. NADIGA et S. ZALESKI. « Investigations of a Two-Phase Fluid Model ». In : *arXiv :comp-gas/9511003* (nov. 1995). arXiv : comp-gas/9511003.
- [128] A. K. GUNSTENSEN et D. H. ROTHMAN. « Microscopic Modeling of Immiscible Fluids in Three Dimensions by a Lattice Boltzmann Method ». en. In : *EPL* 18.2 (fév. 1992), p. 157–161. ISSN : 0295-5075. DOI : [10.1209/0295-5075/18/2/012](https://doi.org/10.1209/0295-5075/18/2/012).
- [129] W. CHOI, A. TUTEJA, J. M. MABRY, R. E. COHEN et G. H. MCKINLEY. « A modified Cassie–Baxter relationship to explain contact angle hysteresis and anisotropy on non-wetting textured surfaces ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 339.1 (nov. 2009), p. 208–216. ISSN : 0021-9797. DOI : [10.1016/j.jcis.2009.07.027](https://doi.org/10.1016/j.jcis.2009.07.027).
- [130] J. F. JOANNY et P. G. d. GENNES. « A model for contact angle hysteresis ». In : *The Journal of Chemical Physics* 81.1 (1984), p. 552–562. DOI : [10.1063/1.447337](https://doi.org/10.1063/1.447337).

AUTORISATION DE SOUTENANCE

Vu les dispositions de l'arrêté du 25 mai 2016,

Vu la demande du directeur de thèse

Monsieur S. VALETTE

et les rapports de

M. E. BARTHEL

Directeur de Recherche CNRS - ESPCI Paris PSL - 10 rue Vauquelin - 75231 Paris cedex 05

et de

M. J. BRUCHON

Professeur - Ecole des Mines de Saint-Etienne - 158 cours Fauriel
42023 Saint-Etienne cedex 2

Monsieur NEYRAND Vincent

est autorisé à soutenir une thèse pour l'obtention du grade de **DOCTEUR**

Ecole doctorale MATERIAUX

Fait à Ecully, le 1er avril 2021

P/Le directeur de l'E.C.L.
Le directeur des Etudes



Grégory VIAL