



HAL
open science

Etude du frottement local entre une bille nano-texturée et une surface de polymère vitreux.

Anne Rubin, C. Gauthier, M. Solar, H. Meyer, R. Schirrer

► **To cite this version:**

Anne Rubin, C. Gauthier, M. Solar, H. Meyer, R. Schirrer. Etude du frottement local entre une bille nano-texturée et une surface de polymère vitreux.. 2010. hal-00596526

HAL Id: hal-00596526

<https://hal.science/hal-00596526>

Preprint submitted on 30 May 2011

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.

Modélisation du contact et de l'usure

27 et 28 mai 2010 – Albi – France

**ETUDE DU FROTTEMENT LOCAL ENTRE UNE BILLE NANO-
TEXTURÉE ET UNE SURFACE DE POLYMERE VITREUX.**

**A STUDY OF LOCAL FRICTION BETWEEN A NANO-TEXTURED
SPHERICAL TIP AND A GLASSY POLYMER SURFACE**

A. Rubin, C. Gauthier, M. Solar, H. Meyer, R. Schirrer

Université de Strasbourg, Institut Charles Sadron CNRS-UPR 22,
23 rue du Loess, BP 84047, 67034 Strasbourg.

Résumé

Des simulations de Dynamique Moléculaire ont été réalisées pour estimer d'une part l'échelle seuil de rugosité qui change le frottement interfacial entre un objet infiniment rigide en mouvement sur la surface d'un polymère, et d'autre part obtenir quelques informations sur la rhéologie de la couche mince confinée et cisailée. D'un point de vue expérimental, la texturation des pointes rigides de différents rayons a été réalisée par attaque chimique et par voie mécanique pour commencer à disposer d'une gamme complète de rugosité (quelques nm – 20 à 30 nm). Les expériences de frottement réalisées sur une surface de Polycarbonate montrent que l'évolution de la contrainte de cisaillement moyenne en fonction de la pression de contact est clairement influencée par la rugosité.

Abstract

The Molecular Dynamic considers the matter with molecular details. The Molecular Dynamic simulation is relevant for try to estimate the threshold size of the roughness on the friction coefficient, and for obtain some physical information on the rheology of the interfacial process zone. For the experiments, the topographic fonctionnalization of the spherical tips has been made by chemical and physical processes to obtain various roughnesses (few nm to 20/30 nm). Friction tests on PC have shown that the interfacial shear stress versus the mean contact pressure depends on the roughness.

1. INTRODUCTION

L'étude du contact entre deux surfaces est un domaine interdisciplinaire au carrefour de la mécanique, de la physique et de la physicochimie [1,2]. Ce positionnement particulier peut expliquer le fait qu'il n'y ait pas à ce jour de loi de frottement pour les contacts dit secs. Il est en effet remarquable que l'on gère encore le frottement comme un coefficient adimensionnel – par opposition à une constante physique qui a une unité. Pour progresser vers une modélisation thermomécanique du frottement, il faut essayer de l'analyser comme un mécanisme de rhéologie interfaciale, en milieu confiné, avec une surface solide en mouvement que pilote le confinement tout en étant plus ou moins rugueuse. La réalité du contact entre deux surfaces est complexe : le frottement entre deux surfaces macroscopiques doit être modélisé par une approche statistique/microscopique prenant en compte la contribution élémentaire de chaque jonction entre rugosités antagonistes qui

intègre un comportement local au niveau de chaque contact. A l'échelle locale, le frottement est apparent et lié au frottement vrai, à l'écoulement viscoplastique de matière autour de la pointe rigide et/ou à la viscoélasticité qui entoure la zone de contact. Il y a donc trois échelles de frottement, et la connaissance à ces différentes échelles n'est pas égale. Les techniques expérimentales développées à ces différentes échelles peuvent générer des pressions de contact très différentes. Ainsi, à l'échelle du mono contact, les pressions de contact associées varient du MPa au GPa, en relation avec la contrainte seuil du matériau considéré. Il n'y a pas d'échelle géométrique spécifique pour ce frottement apparent : seule la singularité géométrique est à considérer, et c'est à cette échelle que la rugosité peut être considérée comme variable/paramètre important pilotant le frottement.

L'étude de cette couche cisailée nécessite de simuler la matière sous un aspect réaliste, et le recours aux simulations de Dynamique Moléculaire (DM) trouve pleinement son sens, puisqu'elles permettent de modéliser la matière avec des détails moléculaires [3,4]. De part sa formulation thermodynamique microscopique (donc plus physique), cette technique de modélisation permet d'observer d'éventuels changements fondamentaux dans les propriétés de la matière. Cependant, cette technique reste très gourmande en temps de calcul. Après avoir présenté les estimations des rugosités seuil à mettre en œuvre, les premiers résultats de frottement à différentes pressions moyennes sur Polycarbonate seront présentés.

2. MODELISATION DU CONTACT PAR SIMULATIONS DE DM

Les simulations de DM permettent de simuler l'évolution au cours du temps de la matière, sous d'éventuelles sollicitations mécaniques, par intégration numérique des équations du principe fondamental de la dynamique de Newton. Dans notre cas, un polymère est modélisé par un modèle type "gros - grains " ("coarse - grained"). Une particule désigne alors un groupe d'atomes d'une macrochaîne (un monomère) et est considérée comme étant une sphère quasi-impénétrable, de diamètre σ . Nous avons simulé la rayure avec un cône (de demi-angle 45°) sur des films de polymères amorphes linéaires (sans ramifications entre les chaînes) de désignation « 64x576 », c'est à dire un film constitué de 576 chaînes de 64 particules, reposant sur un substrat infiniment rigide (Fig. 1). Une caractérisation complète d'un modèle similaire a été réalisée par Peter *et al.* [5]. Le volume de ce film est suffisant pour être considéré comme représentatif [3]. Les rayures simulées sont réalisées avec deux types de pointes, constituées de particules de même diamètre que celles du film (Fig. 2) : une pointe « rugueuse » composée d'un réseau sans recouvrance de « particules » rigides (1x) de rayon « σ » soit environ 0.5 nm et une pointe « plus lisse » définie par une double couche interpénétrée de « particules », pour deux températures ($T=0.2$ et $T=0.4$). Ramenées en unité S.I., les rugosités effectives de ces pointes (rugosités filtrées par le diamètre d'un monomère) sont de l'ordre de 0.065 nm et 0.015 nm pour l'exemple du PMMA. Le diamètre du contact est d'environ 2.5 nm, dimension comparable à la pelote statistique. En simulations de DM, les résultats sont présentés en unités adimensionnées de Lennard - Jones (Unités LJ, symboles avec exposants « * »). Les plus utilisées sont rassemblées dans le tableau 1. Pour alléger les notations, le symbole « * » sera volontairement omis dans cette partie, puisqu'il n'y aura pas d'ambiguïté.

La taille de la boîte de simulation utilisée est de $(30\sigma \times 90\sigma \times 30\sigma)$, et la taille du film est de $(30\sigma \times 90\sigma \times \approx 15\sigma)$. La rayure a une longueur de 55σ . Les conditions aux limites périodiques sont appliquées au système suivant les axes X et Z. Une étude sur l'évolution de l'épaisseur d'un film en fonction de la température a révélé que la température moyenne de transition vitreuse du film est $T_g=0.4\pm 0.03$. Les simulations sont réalisées avec le logiciel **LAMMPS**® en système thermodynamique **NVT** :

- le nombre N de particules dans la boîte reste constant.
- le volume V de la boîte reste constant, même si le film peut se dilater.

- la température T moyenne de la boîte reste constante. La régulation en température se fait avec un thermostat DPD (Dissipative Particle Dynamics) [6]. Ce thermostat agit sur le mouvement des particules en introduisant des forces supplémentaires dans les équations de Newton : les particules trop rapides (= trop chaudes) sont ralenties, alors que les particules trop lentes (= trop froides) sont accélérées.

La surface du film est laissée libre, de sorte que le film s'arrange librement en surface (La surface du film est laissée libre, de sorte que le film s'arrange librement en surface (pression hydrostatique P_h nulle en surface). Les interactions moléculaires entre les particules se limitent aux potentiels suivants, qui constituent un modèle de chaînes "flexibles" (cf. Fig. 1) :

- potentiel d'élongation $U_{\text{élo}}$ (3), avec $k_{\text{élo}}$ raideur de la liaison, R_i longueur de la liaison et, r_0 sa longueur à l'équilibre ($k_{\text{élo}}=1111\varepsilon/\sigma^2$ et $r_0=0.967\sigma$).
- potentiel de LJ 12-6 U_{LJ} (4), tronqué à r_c (r_c désigne le rayon de coupure, avec $r_c = 2.3\sigma$).

$$U_{\text{élo}} = 0.5 \cdot k_{\text{élo}} \cdot (R_i - r_0)^2 \quad (3) \quad \text{et} \quad U_{LJ} = \begin{cases} 0 & \text{si } r > r_c \\ 4\varepsilon \cdot [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] & \text{si } r \leq r_c \end{cases} \quad (1)$$

L'interaction entre les particules de la pointe et celles du film se fait par un potentiel de Lennard - Jones 12-6 (4) tronqué à $r_c = 2^{1/6}\sigma \approx 1.12\sigma$: ceci constitue une interaction répulsive uniquement (r devient la distance entre la pointe et une particule).

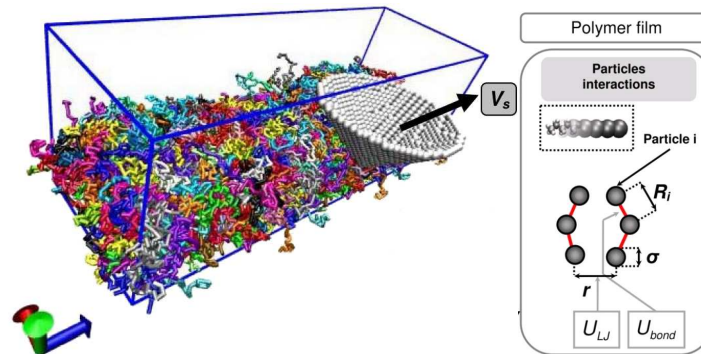


Fig. 1 Description Description du modèle utilisé pour simuler la rayure avec un cône rugueux en simulations de DM *Description of the model used in MD to simulate the scratching with a conical*

Fig. 2 *rough tip.*

Unités LJ	Désignation	Unité
$r^* = (1/\sigma) \cdot r$	Dimension	Adimensionnée
$T^* = (k_b/\varepsilon) \cdot T$	Température	Adimensionnée
$E^* = (1/\varepsilon) \cdot E$	Energie	Adimensionnée
$P_h^* = (\sigma^3/\varepsilon) \cdot P_h$	Pression	Adimensionnée
$t^* = (\varepsilon/(m\sigma^2))^{0.5} \cdot t$	Temps	Adimensionnée
$F^* = (\sigma/\varepsilon) \cdot F$	Force	Adimensionnée
$\rho^* = \sigma^3 \cdot \rho$	Masse volumique	Adimensionnée

Tab. 1 Principales unités de Lennard – Jones utilisées en simulations de DM (k_b est la constante de Boltzmann).

Lennard – Jones' most used units in MD (k_b is Boltzmann's constant).

Estimation du frottement local

Les simulations de rayure ont été réalisées à deux températures différentes, pour les deux rugosités de pointes. Ces rayures ont été réalisées à enfoncement constant et les résultantes normales et tangentielles ont été continûment estimées puis moyennées. En tenant compte de la géométrie locale du contact (de la dissymétrie du contact), il est possible de décomposer le frottement apparent estimé en une part de frottement local et une part de frottement global, de manière comparable à ce qui a déjà été réalisés pour des expériences « physiques » et des contacts microscopiques [7]. Il est remarquable que les valeurs de frottement locaux estimés à partir des simulations par DM soit comparables celles classiquement mesurées lors des essais à l'échelle micronique. Les valeurs augmentent avec la température et la rugosité de la pointe.

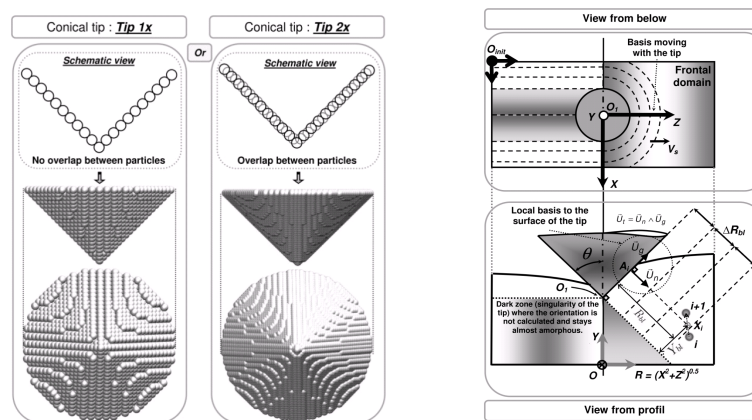


Fig. 3 Gauche : pointes de différente rugosité ; Droite : discétisation spaciale pour analyser les orientations des vecteurs de liaisons.

Left: Tips with various roughness Right: the film is cut in conical volume so as to study the chains' orientation

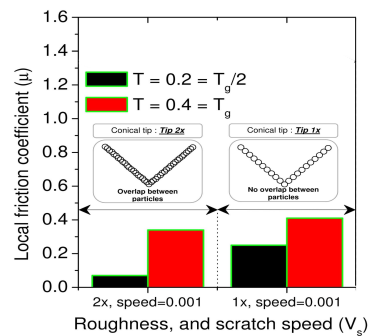


Fig. 4 Coefficient de frottement locaux pour les différentes températures et rugosités de pointes. Local friction coefficient from DM simulation as a function of the temperature and the tip roughness.

Orientation des liaisons sous la pointe

Cette analyse est réalisée pour estimer l'influence de la température et de la rugosité de la pointe sur le nombre de chaînes entraînées lors du mouvement de la pointe rigide, et plus spécifiquement sur l'orientation des liaisons des chaînes moléculaires sous la pointe. Il s'agit d'essayer de discerner une éventuelle apparition d'une structure mésomorphe sous la pointe (une structure intermédiaire entre amorphe et cristallin), un ordre nématique

(molécules // , mais centres de gravité disposés aléatoirement), ou une orientation d'ensemble des chaînes. Pour ce faire, le film a été découpé tronc de cône d'axe Y pour le domaine frontal. Seule l'analyse de ce domaine est présentée. L'influence de la rugosité de la pointe sur l'orientation des liaisons sera évaluée grâce à la moyenne du polynôme de Legendre (P_L) d'ordre 2 $\langle P_2(x) \rangle = 1.5 \cdot \langle x^2 \rangle - 0.5$. La valeur de $\langle P_2 \rangle$ varie de -0.5 (tous les vecteurs sont \perp) à 1 (tous les vecteurs sont // = ordre nématique), en passant par 0 (pas d'orientation préférentielle = isotropie) sachant que le film a une structure amorphe initialement. La valeur de cette moyenne est calculée sur toutes les orientations contenues dans un élément de tronc de cône, en prenant comme référence la base locale contenant les vecteurs normaux, tangents à la ligne horizontale de l'écoulement et parallèles aux génératrices du cône.

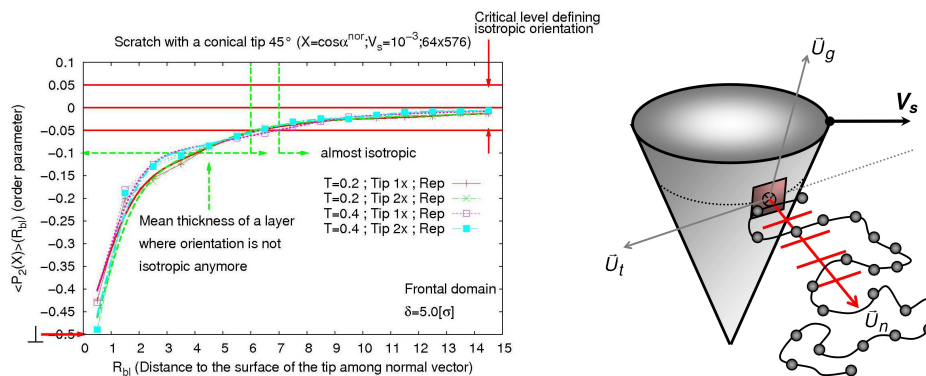


Fig. 5 Orientation des segments de chaînes par rapport à la normale locale du contact.
chains' orientation from the normal vector.

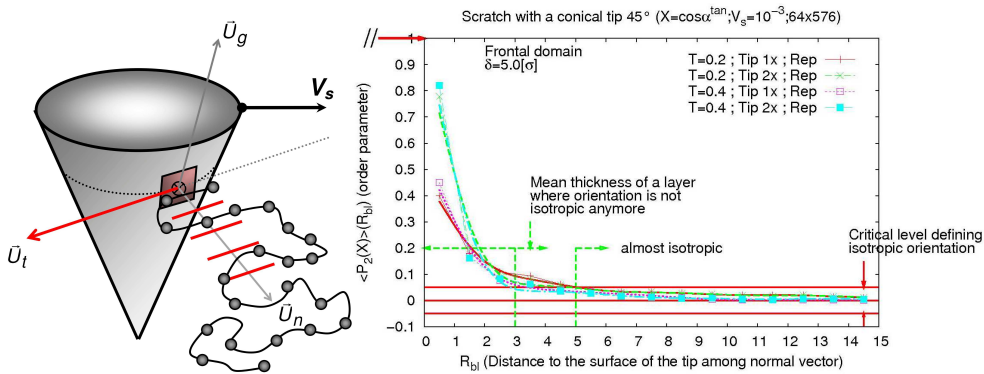


Fig. 6 Orientation des segments de chaînes par rapport au vecteur tangent.
Chains' orientation from the tangent vector.

Deux résultats majeurs sont à noter :

- La figure 4 montre que les segments de chaînes sont aplatis perpendiculairement à la normale locale et que cet effet porte sur 7 diamètres σ de monomères (soit 1.5 fois le rayon de contact)
- La figure 5 indique que l'orientation de ces mêmes segments de chaînes est influencée par la rugosité de la pointe. Ces segments sont quasiment parallèles au vecteur tangent si la pointe est de faible rugosité ; par contre une pointe rugueuse aura un effet sur l'orientation tangente avec une portée légèrement plus grande (environ 3 diamètres σ)

En conclusion, les simulations de DM indiquent que des rugosités nanométriques doivent être mise en œuvre pour analyser finement le frottement sur surface de polymère.

3. PREPARATION DES SURFACES

Les pointes simulées en DM sont parfaitement conique avec un défaut de pointe de 0.5 nm. De telles rugosités ne peuvent pas être réalisées facilement, et ne doivent pas résister longtemps aux cisaillements générés par le mouvement. L'enjeu est donc de réaliser des topographies nanométriques sur des pointes rigides de différents profils pour analyser leurs effets sur la rhéologie interfaciale, en cherchant des profils plutôt sphériques.

La texturation de billes en verre borosilicaté est réalisée par attaque chimique dont le mécanisme d'attaque associé – et donc la rugosité obtenue, dépend de la composition chimique du verre [8, 9]. Les agents chimiques les plus actifs pour l'attaque du verre sont l'acide fluorhydrique et les solutions fortement alcalines. Cette étude présente des résultats obtenus après attaque à l'acide fluorhydrique dilué (10%, 15%) à partir d'une solution commerciale (40%, Sigma). Les pointes sont préalablement nettoyées en solution Piranha ($\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}_2$ 3:1) à température ambiante pendant 5 minutes, rincées à l'eau Milli-Q et plongées dans la solution d'attaque soumise aux ultra-sons. Enfin les pointes sont soigneusement rincées à l'eau Milli-Q pour arrêter la réaction chimique. La figure 6 présente un relevé topographique (AFM en mode contact) des premières pointes rugueuses réalisées. La table 2 résume les valeurs classiques de rugosité : R_a - rugosité moyenne, R_q - valeur rms et W_{\max} - amplitude des ondulations. De plus, une étude statistique des rapports hauteur/largeur (h/e) des formes de surface a été réalisée (moyenne sur 10 pics).

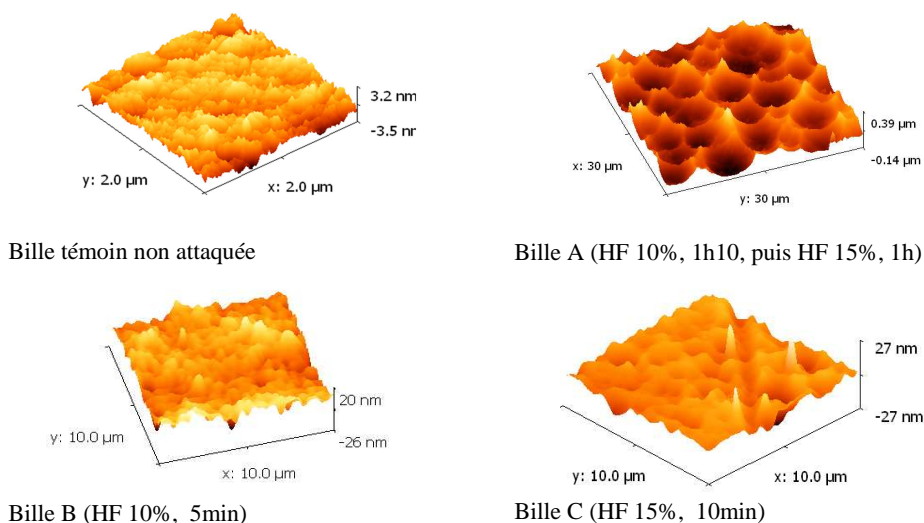


Fig. 7 Relevé topographique des billes sphériques.
Topography of the sperical tips.

Bille	Rapport h/e	Paramètres de rugosité (nm)		
		R_a (moyenne)	R_q (rms)	W_{\max} (amplitude)
Témoin	-	0,9	1,2	2
A	-	38,8	49,3	200
B	$9,5 \cdot 10^{-3}$	3,9	5,1	20
C	$5,7 \cdot 10^{-3}$	3,2	4,4	10

Tab. 2 Paramètres de forme et de rugosité des topographies de la fig. 6 (logiciel Gwyddion GNU).
Roughness parameters from fig.6

L'enjeu est d'obtenir à terme un jeu complet de billes de différents rayons – pour piloter la pression moyennes de contact – et de différentes rugosités. D'autres méthodes (mécaniques, chimiques) sont en cours d'évaluation pour disposer d'une gamme complète de rugosité (10nm-100nm).

4. DISPOSITIF ET PROTOCOLE EXPERIMENTAUX

Le dispositif expérimental utilisé, le « micro-visio-scratch » [10], a été élaboré au sein de l'équipe. Il est constitué d'une table motorisée supportant une enceinte thermique contenant l'échantillon. La force normale est appliquée sur une pointe immobile et une caméra CCD permettra à tout instant d'avoir une vision in situ du contact à travers l'échantillon transparent. La gamme de force normale applicable s'étend de 0.05 N à 25 N. La vitesse de déplacement est réglable de $1 \mu\text{m.s}^{-1}$ à 15mm.s^{-1} et la température des essais peut varier de -60°C à $+120^\circ\text{C}$. Tous ces paramètres sont contrôlés et enregistrés. Les données récupérées sont l'aire de contact in situ, et de manière plus générale, la géométrie du contact et du sillon, ainsi que la force tangentielle.

Les échantillons sont en Polycarbonate commercial. Le protocole de préparation a été précédemment mis en place pour des surfaces de PMMA [11]. Le nettoyage est effectué sans solvant, par un ponçage aux papiers abrasifs de plus en plus fins, jusqu'au grade 12000, afin d'éliminer sans solvant les couches contaminées présentes sur la surface. Pour obtenir un matériau rajeuni et une surface d'étude de bonne qualité optique (lisse), les échantillons sont comprimés sous presse, entre deux plaques de verre à une température supérieure de 50°C à leur température de transition vitreuse pendant 1h et en les écrasant d'environ 30%. Après refroidissement, les échantillons sont stockés à une température constante de 30°C et un taux d'humidité inférieur à quelques %, jusqu'au moment de l'essai. Le temps écoulé entre le passage sous la T_g lors de la préparation de l'échantillon et l'instant de l'essai représente le temps de vieillissement de l'échantillon. Une des spécificités des polymères amorphes vitreux est d'être sensible à la recouvrance structurale. Ce phénomène, également appelé vieillissement physique, est l'observation des changements de propriétés du polymère en fonction du temps de stockage à température constante, sans contrainte et sans aucune influence de paramètres extérieurs. En effet, un polymère amorphe situé à une température inférieure à sa température de transition vitreuse, est dans un état hors équilibre, et présente une évolution continue vers un équilibre thermodynamique. Ainsi, des manifestations du vieillissement physique, sont par exemple les diminutions des dérivées premières de l'enthalpie libre, à savoir le volume spécifique V et l'enthalpie H (propriétés thermodynamiques) ainsi que l'aptitude à la déformation plastique (propriété mécanique). Il est important de noter, que le vieillissement physique n'implique que des changements réversibles. Le mécanisme de rajeunissement des polymères peut être thermiquement activé si le matériau est chauffé à une température supérieure à sa température de transition vitreuse, ou mécaniquement activé par déformation plastique [12,13].

Les essais sont réalisés de la manière suivante : la force normale croît par paliers pendant que la pointe glisse à vitesse constante de $30 \mu\text{m.s}^{-1}$. L'atmosphère de l'enceinte est totalement contrôlée : une température de 30°C et taux d'humidité inférieur à 1%. Pour chaque palier de force normale, une image in-situ de l'aire de contact est enregistrée, et les mesures des efforts normaux et tangentiels sont enregistrés tous les 10 microns de déplacement (à comparer aux diamètres des billes compris entre 0.5 mm et 50 mm). Afin de contrôler les déformations imposées au contact et en conséquence la plasticité lors du glissement de la pointe, différents rayons de billes sont en effet utilisés.

5. RESULTATS

En respectant ce protocole expérimental, il n'y a pas d'influence d'une quelconque pollution au niveau de la surface du PC. Il faut noter que dans ces conditions la formation de troisième corps entre la pointe et la surface n'a pas lieu, et les variations de la valeur de coefficient de frottement entre le premier passage et les passages successifs attribuées au rodage de la pointe préalablement nettoyée sont minimales.

En fonction de la tête de force utilisée, donc de sa raideur, les mesures de frottement peuvent présenter un stick-slip. Nous avons retenu de calculer la valeur moyenne de la mesure enregistrée. Lorsque le contact ne présente pas de dissymétrie dans la forme, le coefficient de frottement apparent est identique au coefficient de frottement vrai local μ . Lorsque le contact présente une dissymétrie, ce coefficient de frottement vrai local est estimé à partir des mesures des forces normales et tangentielles et des informations géométriques en utilisant le modèle précédemment développé [7]. L'estimation de la contrainte de cisaillement moyenne se fait simplement en effectuant le produit de ce frottement vrai par la pression moyenne de contact.

La figure 7 présente l'évolution du coefficient de frottement en fonction de la force normale appliquée. Selon le rayon de la bille et pour une même rugosité, une force normale peut générer différentes pressions de contact et différents coefficients de frottement. Il est difficile d'identifier l'influence respective de la rugosité et de la géométrie de la pointe dans une classique représentation de ce type.

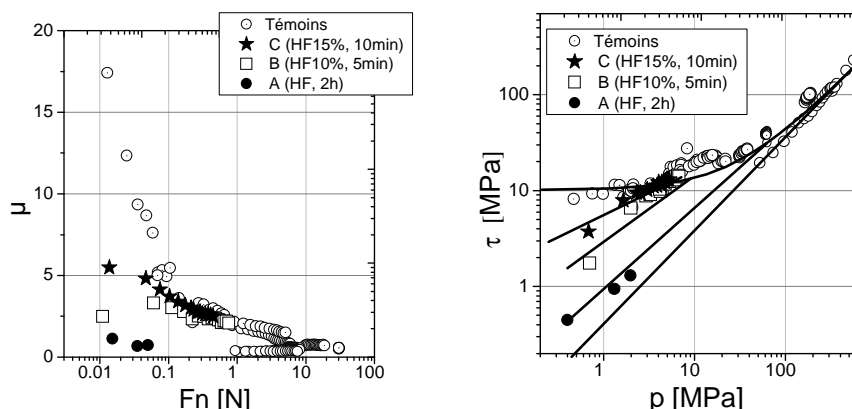


Fig. 8 Gauche : coefficient de frottement en fonction de la force normale pour les différents rayons de billes et rugosités. Droite : contrainte de cisaillement interfacial en fonction de la pression moyenne de contact.

Left: Friction coefficient versus the normal load for various radius of tip and roughness. Right: interfacial shear stress versus the mean contact pressure.

La figure 7b présente l'évolution de la contrainte moyenne de cisaillement interfacial en fonction de la pression moyenne de contact. Le jeu de pointe lisse (témoin) permet de mettre en évidence une évolution remarquable : le coefficient de frottement coulombien n'a de sens qu'aux hautes pressions de contact, lorsque le contact est plastifié. A basse pression, la contrainte de cisaillement interfacial atteint une valeur asymptotique d'environ 10 MPa. Ceci explique l'origine des hautes valeurs enregistrées pour le coefficient de frottement à faible force normale, i.e. à faible pression de contact. Ce résultat avait déjà été observé sur PMMA [11, 14].

Lorsque la rugosité de la bille augmente, il y a apparition de plasticité dans le contact même pour des faibles pressions moyennes de contact. Cette plasticité peut s'illustrer de deux manières : des ondulations de la surface pour les pointes B et C, et des micro rayures pour la bille A. Il est à noter que pour les plus faibles forces normales, les billes B et C peuvent glisser sur la surface sans laisser de traces visibles. L'existence de cette rugosité ne change pas la valeur moyenne de la pression de contact. Par contre, elle participe activement à la portance des billes car il règne localement une pression supérieure à la valeur moyenne. Au niveau de ces points de contacts plastiques, la valeur de la contrainte interfaciale est classiquement « coulombienne » (faible coefficient de frottement) et ces pics locaux de pression à faible scission interfaciale permettent de faire baisser la valeur moyenne de la contrainte de scission interfaciale. Il est possible d'imaginer une pointe suffisamment rugueuse pour laquelle la portance ne se ferait que sur les sommets des rugosités avec des microcontacts tous plastiques. En apparence la pression moyenne serait celle d'une bille de grand diamètre ; en réalité la pression moyenne serait supérieure à typiquement 100 MPa. De même, en apparence la contrainte de cisaillement interfaciale moyenne serait faible et de l'ordre de $0.4 p$; en réalité cette contrainte serait typiquement supérieure à 40 MPa. Ce décalage vers les hautes pressions est lié au fait que le contact n'est plus rugueux et continu, mais rugueux et discret ; en conséquence l'aire de contact n'est plus l'aire apparent mais l'aire réelle somme des aires locales et inférieure de plusieurs décades

La figure 8 représente de manière symbolique la compréhension actuelle de l'évolution de cette contrainte interfaciale de cisaillement en fonction de la pression de contact. Cette compréhension sera confirmée lorsque des essais pourront être réalisés avec un jeu complet de billes rugueuses, et après topographies AFM des microsillons dans le cas des essais avec billes rugueuses voire d'une simple orientation moléculaire dans le cas des billes les plus lisses.

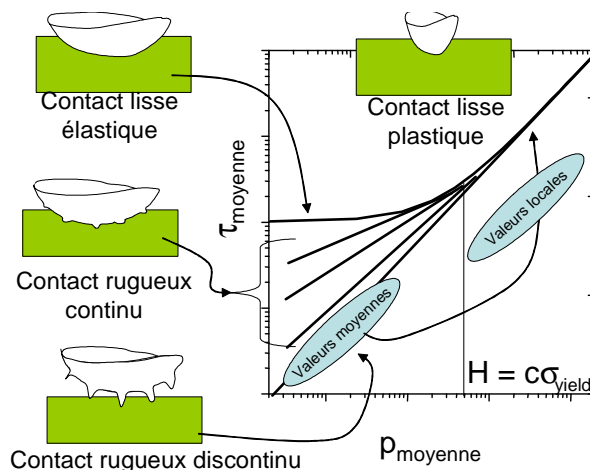


Fig. 9 Représentation symbolique de l'évolution de la contrainte interfaciale moyenne.
Symbolic draw of the evolution of the interfacial shear stress

6. CONCLUSIONS

Des simulations de Dynamique Moléculaire ont permis de montrer qu'une rugosité subnanométrique pouvait modifier les valeurs des coefficients de frottement des essais de nano rayage. La profondeur de rayage (2.5 nm) associée à l'acuité de la pointe utilisée lors

de ces simulations (pointe dont le défaut est 0.5 nm) est considérée comme une borne inférieure pour la topographie de surface à mettre en œuvre dans les expériences.

Un protocole de préparation a été développé pour obtenir des jeux de billes de différents rayons et de différentes rugosités, ces rugosités devant avoir entre quelques nanomètres et quelques dizaines de nanomètres. Des essais de frottement ont été réalisés sur des surfaces de Polycarbonate nettoyées et rajeunies physiquement. Il a été retrouvé un résultat connu sur PMMA :

- aux faibles pressions de contact, le coefficient de frottement peut prendre des valeurs importantes car la contrainte de cisaillement interfaciale a atteint une valeur seuil (même si la pression de contact continue de diminuer).
- pour les pressions de contact supérieures à la contrainte seuil d'écoulement plastique, le frottement peut être qualifié de coulombien : le rapport scission/pression est constant.

Ces essais confirment qu'une rugosité nanométrique peut modifier les valeurs de la contrainte de cisaillement interfacial, et donc le coefficient de frottement local.

7. RÉFÉRENCES

- [1] Bowden F.P., Tabor D., «The friction and lubrication of solids», *Clarendon Press, Oxford*, 1950.
- [2] Persson, B.N.J., «Sliding Friction: physical principles and applications», *Springer-Verlag, Berlin Germany*, 1998.
- [3] Solar M., Simulations numériques de dynamique moléculaire du contact normal et tangentiel sur surfaces de polymères amorphes linéaires. Thèse Université de Strasbourg Mai 2010
- [4] Solar M., Meyer H., Gauthier C., Benzerara O., Pelletier H., Schirrer R., Baschnagel, J., «Molecular dynamics simulations as a way to investigate local physics of contact mechanics: comparison between experimental data and numerical results» soumis *Journal of Physics D: Applied Physics*
- [5] Peter S., Meyer H., Baschnagel J., « Thickness – dependent reduction of the glass-transition temperature in thin polymer films with a free surface », *Journal. of Polymer Science B 44*, (2006) 2951-2967.
- [6] Nose S., « A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics method », *The Journal of Chemical Physics* (1984), 81 (1), 511-519.
- [7] Lafaye S., Gauthier C., Schirrer R., "A surface flow line model of a scratching tip: apparent and true local friction coefficients", *Tribology International*, 38 (2)(2005),113.
- [8] Spierings G.C.M., "Wet chemical etching of silicate glasses in hydrofluoric acid based solutions", *Journal of Materials Science*, Volume 28 (1993) 6261-6273.
- [9] Iliescu, C., Jing, J., Tay F.E.H., Miao J., Sun T., "Characterization of masking layers for deep wet etching of glass in an improved HF/HCl solution", *Surface & Coatings Technology*, 198 (2005) 314-318.
- [10] Gauthier C., Schirrer R., "Time and temperature dependence of the scratch properties of poly(methylmethacrylate) surfaces" *Journal of Materials Science*, 35 (2000), 2121-2130.
- [11] Charrault E., Gauthier C., Marie P., Schirrer R. «Structural recovery (physical ageing) of the friction coefficient of polymers», *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 46 (2008) 1337-1347.
- [12] Struik L.C.E., "On the rejuvenation of physically aged polymers by mechanical deformation" *Polymer*, 38 (1997), 4053-4057.
- [13] Mc Kenna G.B., "Mechanical rejuvenation in polymer glasses: fact or fallacy?", *Journal of Physics: Condensed Matter*, 15 (2003), S737-S763.
- [14] Whitten P.G., *Friction induced plastic deformation of high polymer surfaces*, PhD, University of Wollongong, Australia, 2004