



HAL
open science

Analyse de la morphologie d'un nanofil immergé sous illumination à partir de la bulle produite par une approche inverse

Anis Chaari, Laurence Giraud-Moreau, Thomas Grosjes, Dominique Barchiesi

► To cite this version:

Anis Chaari, Laurence Giraud-Moreau, Thomas Grosjes, Dominique Barchiesi. Analyse de la morphologie d'un nanofil immergé sous illumination à partir de la bulle produite par une approche inverse. 12e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2015, Giens, France. hal-01136517v2

HAL Id: hal-01136517

<https://hal.science/hal-01136517v2>

Submitted on 1 May 2017

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.

Public Domain

Analyse de la morphologie d'un nanofil immergé sous illumination à partir de la bulle produite par une approche inverse

A. Chaari¹, L. Giraud-Moreau¹, T. Grosjes¹
D. Barchiesi¹

¹ *Equipe Projet Gamma3, Université de Technologie de Troyes,
{anis.chaari,laurence.moreau,thomas.grosjes,dominique.barchiesi}@utt.fr*

Résumé — Les nanofils sont souvent utilisés par les industries chimiques. Or suivant leur forme, ils peuvent être toxiques ou non. Une voie possible de détection des nanofils dans l'eau consiste à étudier la réponse thermique du nanofil immergé sous illumination et analyser la bulle produite lorsque le nanofil s'échauffe. Dans ce papier, ce problème multiphysique est résolu avec la méthode des E.F. couplée à une technique de remaillage. Une approche inverse est utilisée afin d'obtenir des relations entre la forme et taille de la bulle produite et la morphologie du nanofil.

Mots clés — nanofil, approche inverse, morphologie, E.F.

1. Introduction

Depuis 2012, l'utilisation des nanomatériaux a connu un développement très rapide. Leurs domaines d'application étant encore amenés à s'ouvrir et augmenter, l'utilisation des nanomatériaux va certainement s'étendre de façon importante dans les prochaines années. Depuis quelques années, des scientifiques s'interrogent sur les risques que font courir ces nouvelles technologies sur la santé et l'environnement. Dans la mesure où certaines substances peuvent être toxiques, développer des moyens de les détecter et de les analyser devient primordial. Dans le cadre de l'industrie chimique et de la fabrication de nanotubes et nanofils, les matériaux largement utilisés sont TiO₂, ZnO. Depuis le développement de la théorie de Lorentz-Mie utilisée pour calculer les sections efficaces de diffusion et d'absorption des particules, le calcul exact du champ électromagnétique à courte distance est devenu un intérêt pour diverses applications (biologie, nano-capteurs, nano-antenne...). Une voie possible de détection et d'analyse des propriétés de ces nanoparticules consiste à étudier les effets liés aux couplages lumière-matière, c'est-à-dire la réponse photo-thermique des nanomatériaux illuminés par une onde électromagnétique. Pour détecter la présence d'un nanofil dans un liquide, on propose dans ce papier de détecter la bulle autour du nanofil, produite par un procédé de photothermie. Le nanofil de TiO₂ est un diélectrique absorbant (dans une gamme de longueurs d'onde), par conséquent, il s'échauffe en absorbant le rayonnement électromagnétique. Lorsque la température dépasse le seuil de vaporisation de l'eau, il y a création d'une bulle nanométrique. Cette bulle évolue au cours du temps et croît jusqu'à pouvoir être détectée. La détection de cette bulle permet donc une détection indirecte de la présence du nanofil dans l'eau. Dans ce papier, des relations entre la forme et taille de la bulle et la morphologie du nanofil sont établies grâce à une approche inverse dans l'objectif de pouvoir remonter à des informations sur la toxicité du nanofil uniquement à partir de l'analyse de la bulle produite.

2. Résolution du problème couplé

Le problème étudié se ramène à la résolution d'un problème couplé électromagnétique et thermique: lumière, matière, thermique en fonction de la géométrie du nanofil et des paramètres électromagnétiques et thermiques. La première phase consiste à résoudre un problème électromagnétique, basé sur les équations aux dérivées partielles de Maxwell. La résolution du problème électromagnétique permet d'obtenir la source de chaleur Q . La deuxième phase est associée

à la résolution du problème thermique. La résolution de celui-ci nécessite de résoudre l'équation de la chaleur, équation aux dérivées partielles de type parabolique, décrivant l'évolution de la température T en fonction de la source de chaleur Q . Une méthode de résolution de ce problème multi physique basée sur la méthode aux Eléments Finis, a été proposée par les auteurs de ce papier [3, 4]. Dans ces articles, les équations associées aux deux problèmes électromagnétique et thermique sont détaillées. Le nanostructure elliptique et le milieu (eau) sont maillés avec des éléments triangulaires. Ce problème étant connu pour présenter de forts gradients de champ dans des zones limitées de l'espace, au niveau de l'interface nanofil-eau [5], l'adaptation du maillage est nécessaire pour converger vers la solution stable, en particulier dans les régions où une forte variation du champ de température se produit, et pour contrôler la précision du calcul du champ physique (électrothermique) [1, 6]. La méthode de résolution proposée consiste à modifier localement la topologie du maillage en utilisant le remaillieur BL2D à travers le solveur FreeFEM++, dans le but d'améliorer la qualité de la solution. Le processus de remaillage est régi par une carte de taille permettant d'adapter le maillage dans les zones présentant de forts gradients des champs électromagnétiques et de température [2]. Afin de capter les variations du processus photo-thermique et d'assurer la convergence de la solution Eléments Finis vers la solution physique, une boucle de calcul incluant trois boucles de remaillages adaptatifs a été proposée. Les deux premières boucles sont liées à la résolution du problème électromagnétique et la résolution du problème thermique. Elles permettent d'obtenir la distribution de température sur le domaine. Afin de détecter la bulle produite, un seuil de vaporisation est fixé. La bulle créée est représentée par la zone spatiale dans laquelle le seuil de vaporisation est dépassé. La troisième boucle de remaillage est liée à une nouvelle résolution du problème thermique, en tenant compte de la bulle produite avec une modification des paramètres matériaux (permittivité et conductivité de la vapeur d'eau et non plus de l'eau). La Figure 1 présente un exemple de maillage obtenu après détection de la bulle produite.

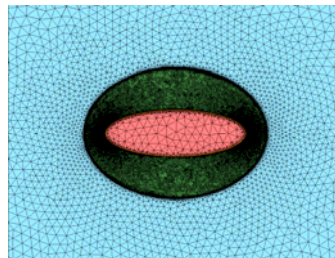


Figure 1- Maillage final adapté obtenu après détection de la bulle

2. Relations entre la taille de la bulle produite et la taille du nanofil

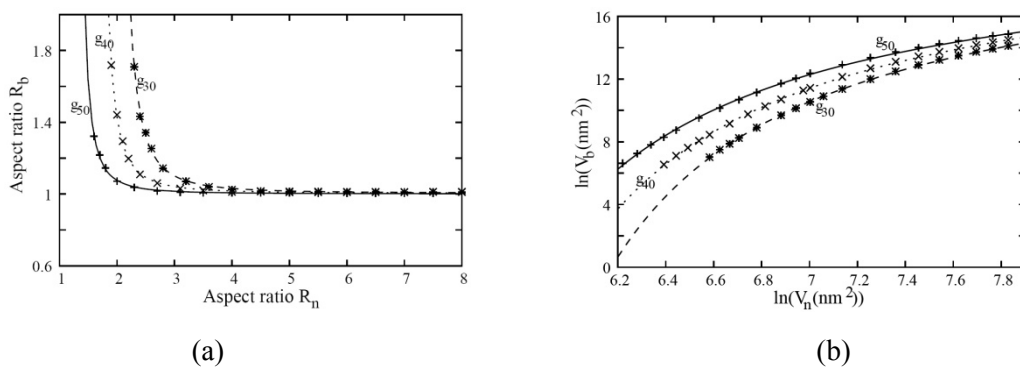


Figure 2– (a) Evolution du rapport de taille de la bulle créée R_b en fonction du rapport de taille du nanofil R_n pour les trois températures initiales, (b) Evolution du volume de la bulle produite V_b en fonction de l'évolution du volume du nanofil V_n

Considérons une nanoparticule de TiO_2 de forme elliptique de demi-axes a et b , de permittivité complexe $\epsilon_r(TiO_2) = 5.50007 + j0.00164$ et de conductivité thermique $k_{TiO_2} = 11.7 Wm^{-1}K^{-1}$, immergée dans l'eau ($\epsilon_r(eau) = 1.79$, $k_{eau} = 0.6 Wm^{-1}K^{-1}$) à température T_0 et illuminée par une impulsion laser polarisée (TM) de longueur d'onde $\lambda = 950 nm$ et de densité de puissance par unité de surface $PS = 1,75 \cdot 10^{12} W/m^2$. Afin de relier la forme de la bulle créée à la forme du nanofil, plusieurs simulations numériques ont été réalisées, en suivant la méthode de résolution décrite dans le paragraphe précédent, pour des rapports de taille de nanofil $R_n = a/b$ compris entre 1.5 et 8 et des températures initiales T_0 égales 30°C, 40°C et 50°C. L'évolution du rapport de taille de la bulle créée $R_b = A/B$ en fonction du rapport de taille du nanofil R_n pour les trois températures initiales est présentée sur la Figure 2a. La Figure 2b présente l'évolution du volume de la bulle produite V_b (en 2D, $V_b = \pi AB$) en fonction de l'évolution du volume du nanofil V_n (en 2D, $V_n = \pi ab$). Les courbes représentant l'évolution du rapport de taille de la bulle produite et l'évolution du volume de cette bulle peuvent être caractérisées par des fonctions f et g telles que $R_b = f(R_n)$ et $\ln(V_b) = g(\ln(V_n))$. La technique la plus appropriée pour déterminer l'équation d'une courbe passant au plus près de différents points expérimentaux est la méthode des moindres carrés. Au vu de l'allure des courbes obtenues, nous avons choisi des fonctions du type suivant :

$$R_b = f(R_n) = A + \frac{B}{(R_n - C)^2} \text{ et } \ln(V_b) = g(\ln(V_n)) = D - \frac{E}{\ln(V_n) - F} \quad (1)$$

L'identification des paramètres (A, B, C) et (D, E, F) a été effectuée par une méthode inverse, basée sur un algorithme d'optimisation. La table 1 présente la valeur des paramètres obtenus, en utilisant la méthode de Levenberg-Marquardt en fonction de la température initiale.

Table 1 – Valeurs des paramètres A, B, C, D, E, F en fonction de la température initiale

T_0 (°C)	A	B	C	D	E	F
30	1.00467	0.11874	1.88810	21.24270	17.49110	5.33605
40	1.00399	0.07595	1.57577	21.28880	17.42950	5.17428
50	1.00074	0.04488	1.22998	21.11470	17.44720	5.02575

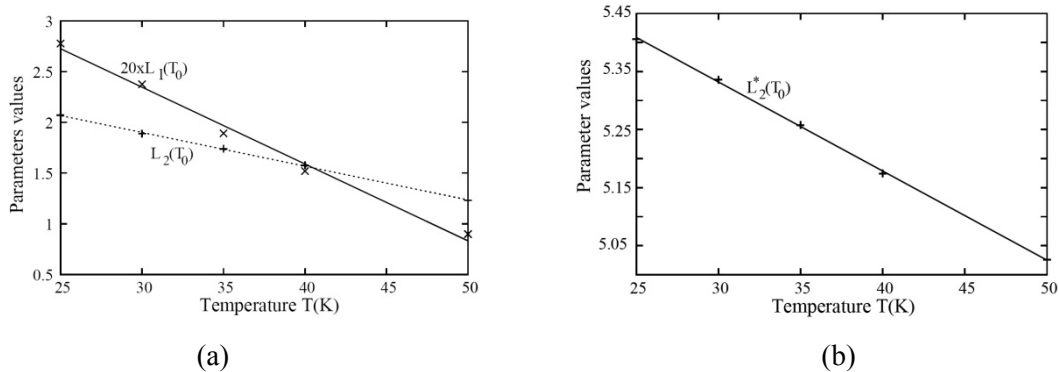


Figure 3– (a) Evolution des paramètres B et C en fonction de la température T_0 , (b) Evolution du paramètre F en fonction de la température T_0

On peut remarquer que les paramètres A, D et E du tableau 1 sont quasiment constants pour les trois températures différentes. La figure 3 présente l'évolution des paramètres B, C et F en fonction de la température T_0 . Ces trois courbes ayant un comportement linéaire, des fonctions linéaires ont été choisies afin de représenter l'évolution des paramètres en fonction de la température initiale T_0 .

$$B = L_1(T_0) = a_1 T_0 + b_1, C = L_2(T_0) = a_2 T_0 + b_2, F = L_2^*(T_0) = a_2^* T_0 + b_2^* \quad (2)$$

Les valeurs des paramètres $(a_1, b_1), (a_2, b_2), (a_2^*, b_2^*)$ obtenues par approche inverse sont présentées dans la Table 2.

Table 2 – Valeurs des paramètres $(a_1, b_1), (a_2, b_2), (a_2^*, b_2^*)$

a_1	b_1	a_2	b_2	a_2^*	b_2^*
-0.00378	0.23097	-0.03327	2.89820	-0.01535	5.79252

En intégrant les équations (2) dans les équations (1), on obtient les relations suivantes:

$$R_b = f(R_n, T_0) = A + \frac{a_1 T_0 + b_1}{(R_n - a_2 T_0 - b_2)^2}, \ln(V_b) = g(\ln(V_n), T_0) = D - \frac{E}{\ln(V_n) - a_2^* T_0 - b_2^*} \quad (3)$$

On peut alors facilement définir le rapport de taille du nanofil R_n en fonction de celui de la bulle R_b et de la température T_0 ($R_n = F(R_b, T_0)$), ainsi le volume du nanofil en fonction du volume de la bulle et de la température ($\ln(V_n) = G(\ln(V_b), T_0)$). On en déduit les demi-axes a et b définissant la morphologie du nanofil, le volume (en 2D) du nanofil étant égal à $V_n = \pi ab = \pi b^2 R_n$:

$$b = \left(\frac{\exp(G(\ln(V_b), T_0))}{\pi F(R_b, T_0)} \right)^{1/2}, a = \left(\frac{F(R_b, T_0) \exp(G(\ln(V_b), T_0))}{\pi} \right)^{1/2} \quad (4)$$

3. Conclusion

Dans ce papier, l'évolution de la forme et de la taille de la bulle produite lors de l'échauffement d'un nanofil immergé sous illumination a été étudiée. Grâce à une approche inverse, des relations ont été établies et permettent à partir des mesures de la taille et forme de la bulle, de la température initiale d'obtenir la forme et la taille du nanofil.

Références

- [1] D. Barchiesi, T. Grosques, E. Kremer and M. Lamy de la Chapelle, Electromagnetic Heat induced in Mesostructures : Computation of Temperature in Metallic Dimers, PIERS Online 7 (5), page406-page410, 2011.
- [2] H. Borouchaki, T. Grosques and D. Barchiesi, Improved 3D adaptive remeshing scheme applied in high electromagnetic field gradient computation, Finite Elem. Anal. Des. 46 (1-2), page 84- page 95, 2010.
- [3] A. Chaari, T. Grosques, L. Giraud-Moreau, Barchiesi D. et Borouchaki H., Remaillage adaptatif et simulation de l'échauffement de nanofils dans l'eau, Actes du 11ème Colloque National en Calcul des Structures, CSMA 2013, Giens, Mai 2013.
- [4] A. Chaari, L. Giraud-Moreau, T. Grosques and D. Barchiesi, Numerical modeling of the photothermal processing for bubble forming around nanowire in a liquid, The Scientific World Journal, Vol. 2014, ID 794630, 2014.
- [5] T. Grosques, H. Borouchaki and D. Barchiesi, "Improved scheme for accurate computation of high electric near-field gradients", Opt. Express 15 (3), page1307-page1321, 2007.
- [6] T. Grosques, H. Borouchaki and D. Barchiesi, New adaptive mesh development for accurate nearfield enhancement computation, J. Microscopy 229 (2), page293-page301, 2008.