

# « *Des atomes toujours en forme(s) !!!* »

***Abdelhafid KELLOU***

***afkellou@usthb.dz***

***Laboratoire de Physique Théorique***

***<http://www.lpt.usthb.dz>***

***Faculté de Physique***

***<http://www.usthb.dz/fphy>***

***Université des Sciences et de Technologie Houari Boumediene***

***<http://www.usthb.dz>***

***Octobre 2019***

# Contenu de la présentation

□ Un petit rappel des échelles

Stan Laurel (1890-1965) et Oliver Hardy (1892-1957)

□ Quelle est la forme de l'atome ?

Aristote (384 - 322 av. J.-C.) et John Dalton (1766-1844)

□ Quelles sont les autres formes d'arrangements atomiques et comment les étudier?

Zosime de Panopolis (III<sup>e</sup> siècle) et Antoine Lavoisier (1743-1794)

□ Quelles sont les enjeux des formes atomiques ?

William Shakespeare (1564-1616) et le reste du monde ???

# Un petit rappel des échelles

Stan Laurel (1890-1965) et Oliver Hardy (1892-1957)



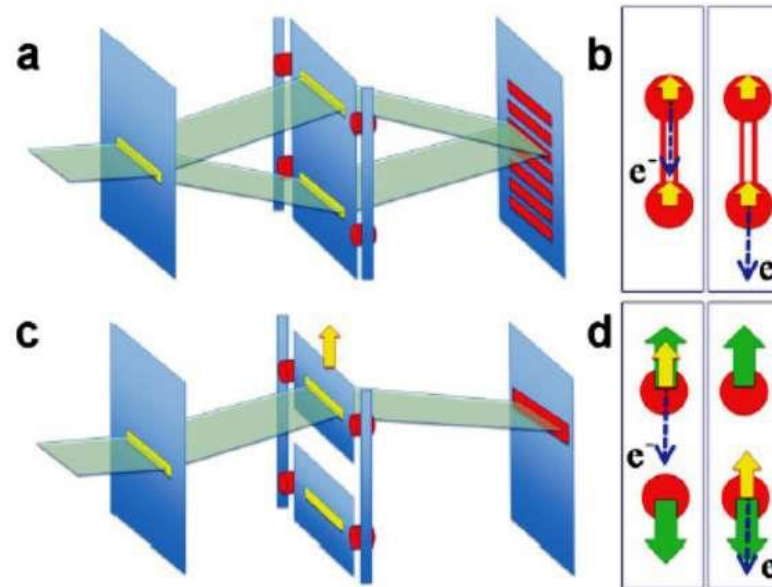
## Un petit rappel des échelles

- **L'Espace** : L'espace réel où nous vivons est à 3 dimensions métriques (largeur, longueur, profondeur ou hauteur) qu'on peut élargir à tout l'univers !
- **Le Temps** : Le temps qu'on utilise est à 1 dimension (seconde, minute, heure) qu'on peut utiliser dans tout l'univers !
- Sur **TERRE**: le temps en jours (24 h), en mois (30 jours) et en ans (12 mois) n'est valable que sur terre!
- Sur **VENUS**: un jour vénusien est plus long qu'une année vénusienne (0.92 jour vénusien) !!!
- 49 ans sur Terre: 80 ans sur Venus, 205 ans sur Mercure, 4 ans sur Jupiter et 0.2 ans sur Pluton !!!

**Echelle Terrestre ne peut être celle  
de l'Univers (l'infiniment grand)!!!**

## Un petit rappel des échelles

### 1801- Fente d'Young et la Dualité Onde-Corpuscule de la matière



- **Une fente:** comportement corpusculaire ! Tout à fait acceptable à l'échelle terrestre !
- **Deux fentes:** Comportement ondulatoire ! Inacceptable à l'échelle terrestre !

**Echelle Terrestre ne peut être celle**

**des entités de la matière (l'infiniment petit) !!!**

# Un petit rappel des échelles

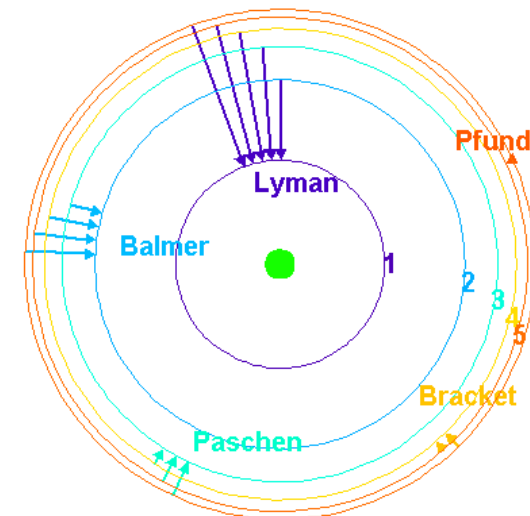
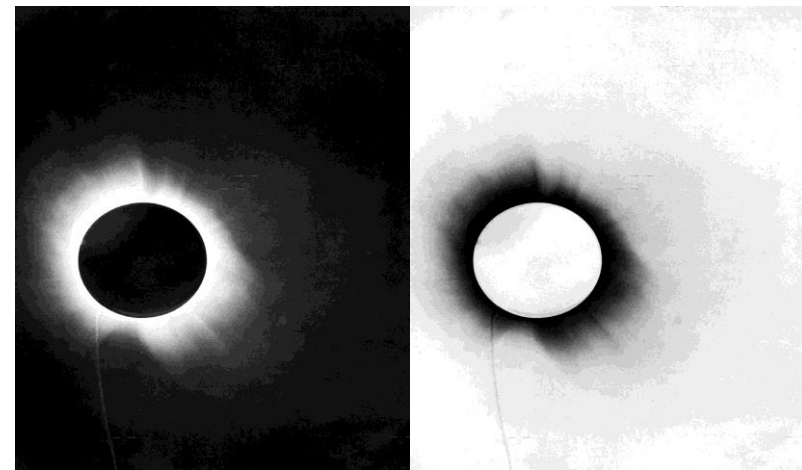
Désaccord entre Albert Einstein (1879-1955)

et Niels Bohr (1885-1962) !!!

« Dieu ne joue pas au dés ! »



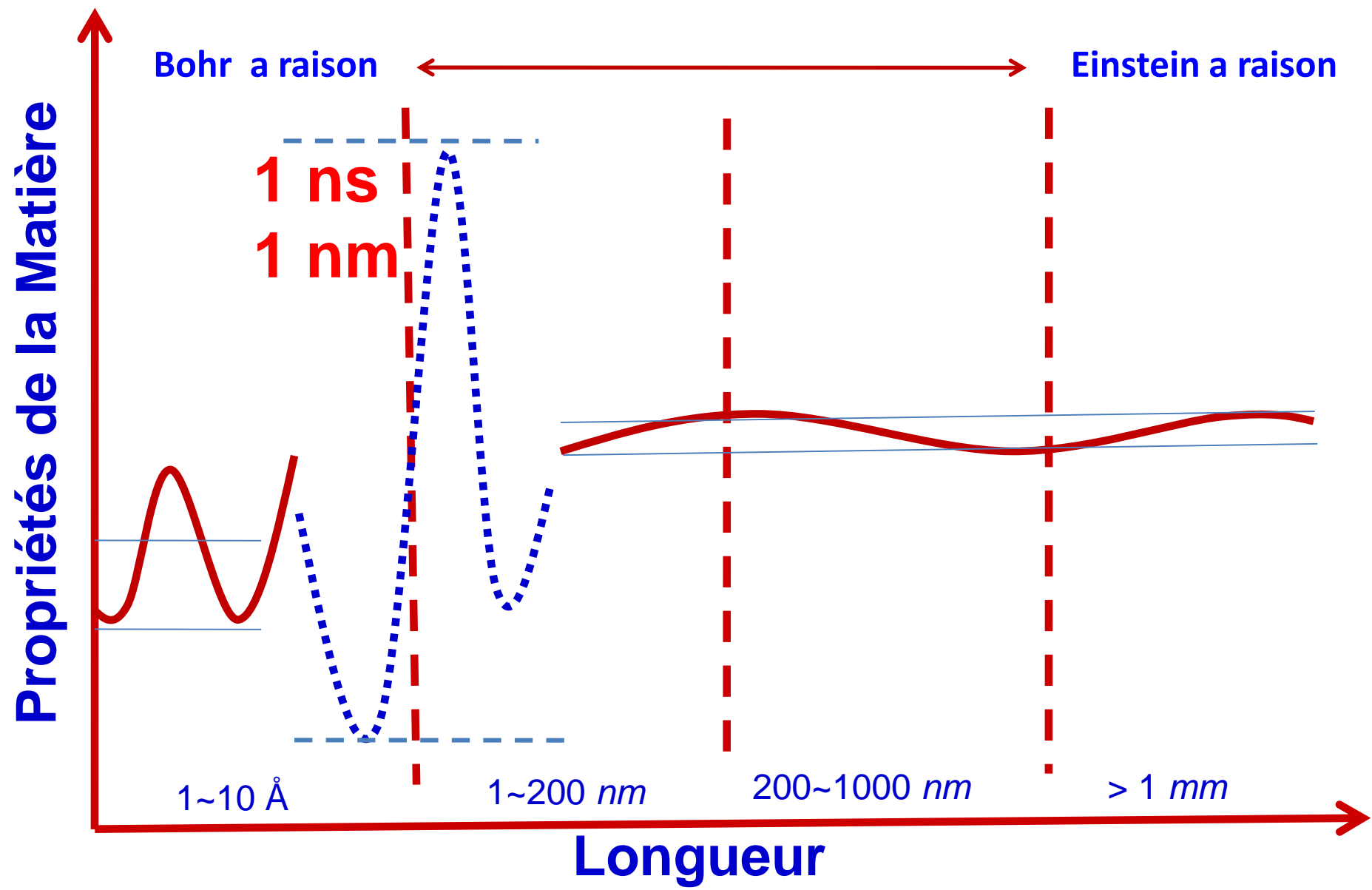
Infiniment grand (**Temps**) **Déterministe** ↔ **Echelle** ↔ Infiniment petit (**Espace**) **Probabiliste**



1919- L'astronome britannique Arthur Eddington démontra la **Relativité Générale** d'Einstein

1913- Modèle de Bohr qui expliqua les raies spectrales des atomes hydrogénés !

# Un petit rappel des échelles



# Un petit rappel des échelles

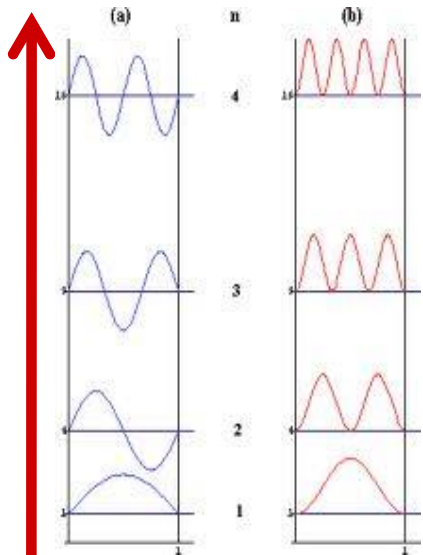
Théorie quantique des champs  
+  
Mécanique quantique

Dynamique Moléculaire  
/  
Monte Carlo

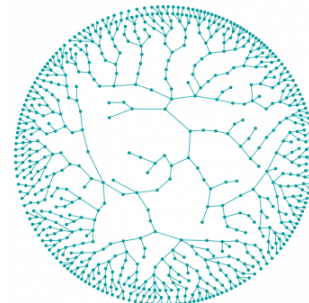
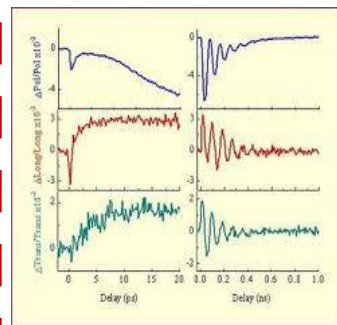
Eléments Finis  
+  
Réseau de Neurones

Mécanique Classique Newtonienne  
+  
Relativité Générale

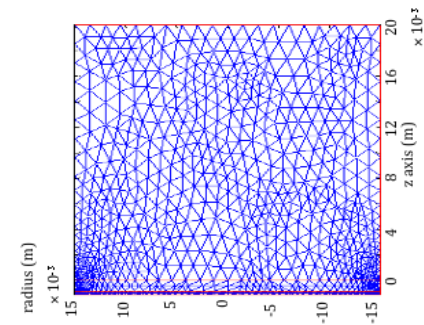
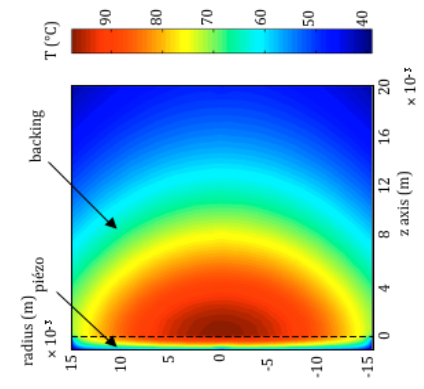
Méthodes



1~10 Å



1~200 nm



200~1000 nm

$$F = m \cdot a$$

$$+ E = m \cdot C^2$$

Longueur

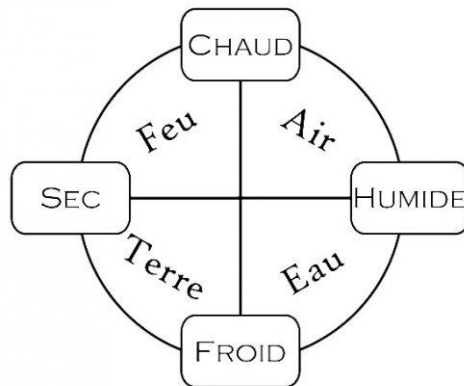
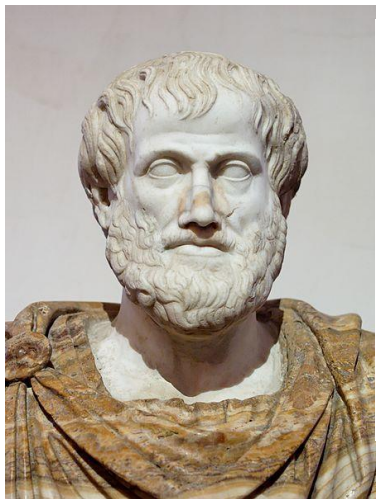
> 1 mm



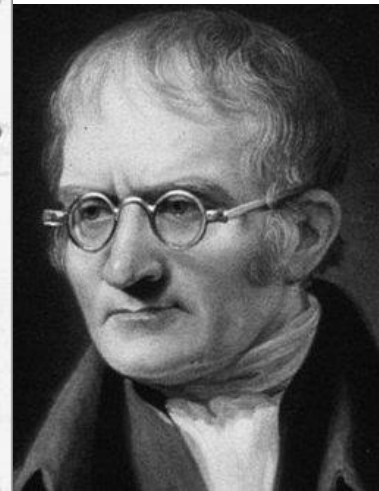
## Quelle est la forme de l'atome ?

Aristote (384 - 322 av. J.-C.) et John Dalton (1766-1844)

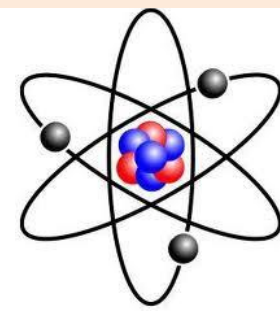
- Aujourd'hui, la matière est composée de particules indivisibles appelées « atome ».
- Mais ce concept d'atome est du au philosophe grec Leucippe (-460 , -370) et son disciple Démocrite d'Abdère qui ont imaginé que la matière est faite de particules indivisibles.



ELEMENTS					
	Hydrogen	1		Strontian	46
	Azote	5		Barytes	68
	Carbon	5		Iron	50
	Oxygen	7		Zinc	56
	Phosphorus	9		Copper	56
	Sulphur	13		Lead	90
	Magnesia	20		Silver	190
	Lime	24		Gold	190
	Soda	28		Platina	190
	Potash	42		Mercury	167

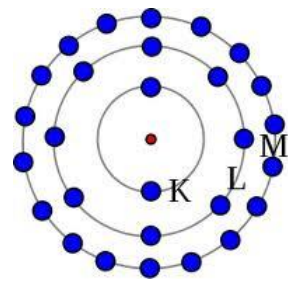


# Quelle est la forme de l'atome ?

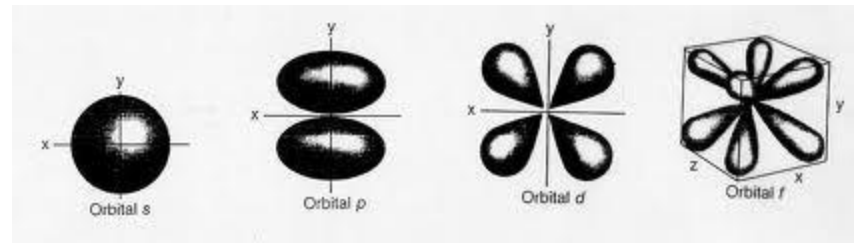


• L'atome est décrit par quatre (4) nombres quantiques :

• *Nombre quantique principal, n* (1,2,3, ....), correspondant aux couches, notées **K, L, M, ...**



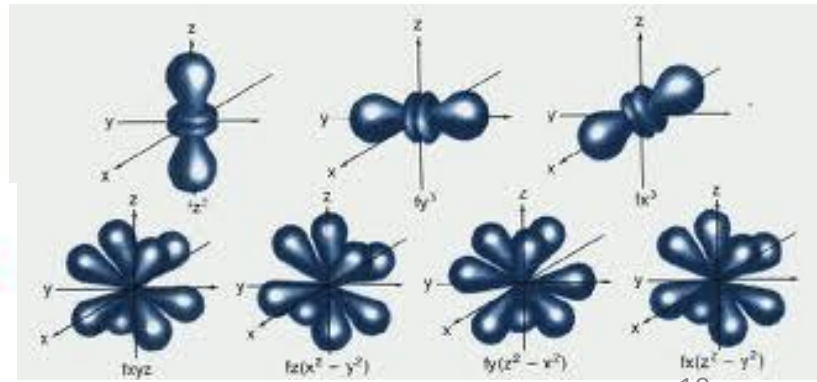
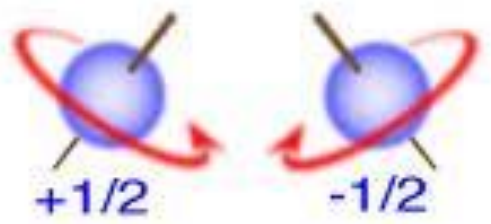
• *Nombre quantique azimutal, l* (0,1,2, ....n-1), correspondant aux orbitales, notées **s, p, d, f...**  
**sharp, principal, diffuse et fundamental**



• *Nombre quantique magnétique, m* ( $\pm 1, \pm 2, \dots \pm l$ ), correspondant à l'orientation spatiale.

• *Nombre quantique de spin, ms* ( $\pm 1/2$ ), correspondant à la rotation de l'électron

• autour de lui-même.

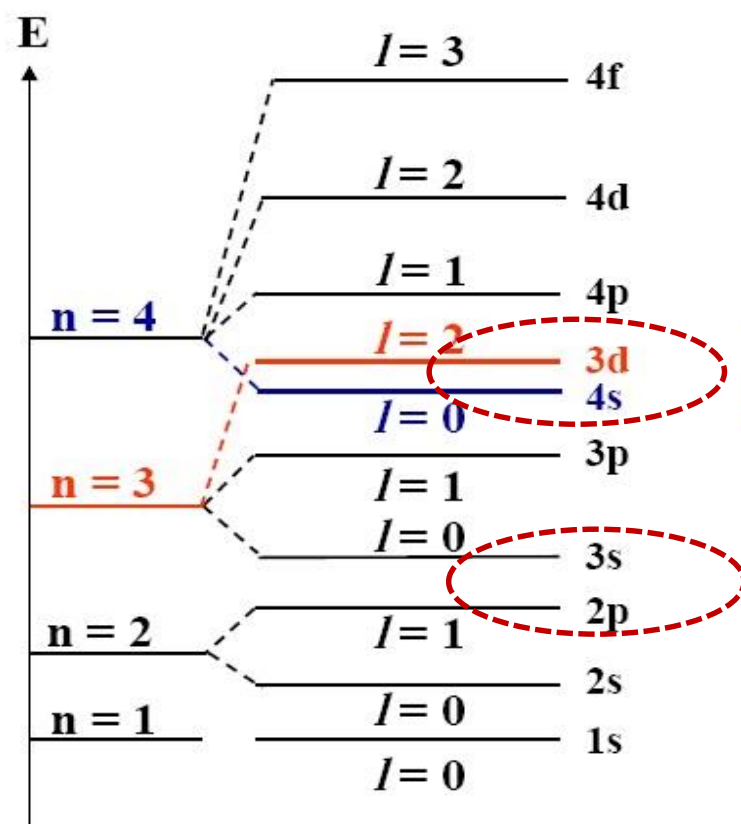


## Quelle est la forme de l'atome ?

$n = 1$ , couche K	→	$l = 0$ , orbitale s	→	$m = 0$	→	$ms = \pm 1/2$	→	<b>2 é</b>
$n = 2$ , couche L	→	$l = 0$ , orbitale s $l = 1$ , orbitale p	→	$m = -1$ , $m = 0$ , $m = 1$ ,	→	$ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$	→	<b>6 é</b>
$n = 3$ , couche M	→	$l = 0$ , orbitale s $l = 1$ , orbitale p $l = 2$ , orbitale d	→	$m = -2$ , $m = -1$ , $m = 0$ , $m = 1$ , $m = 2$ ,	→	$ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$	→	<b>10 é</b>
$n = 4$ , couche N	→	$l = 0$ , orbitale s $l = 1$ , orbitale p $l = 2$ , orbitale d $l = 3$ , orbitale f	→	$m = -3$ , $m = -2$ , $m = -1$ , $m = 0$ , $m = 1$ , $m = 2$ , $m = 3$ ,	→	$ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$ $ms = \pm 1/2$	→	<b>14 é</b>

• Ainsi on peut déterminer le nombre d'électrons dans chaque couche en respectant les définitions qu'on vient de voir.

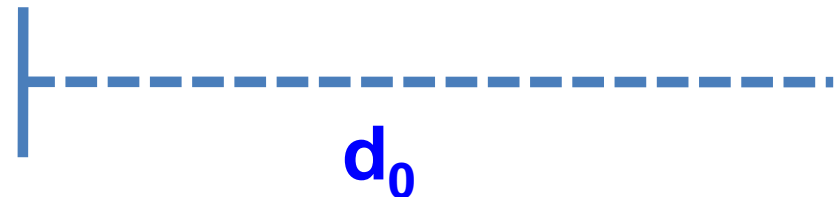
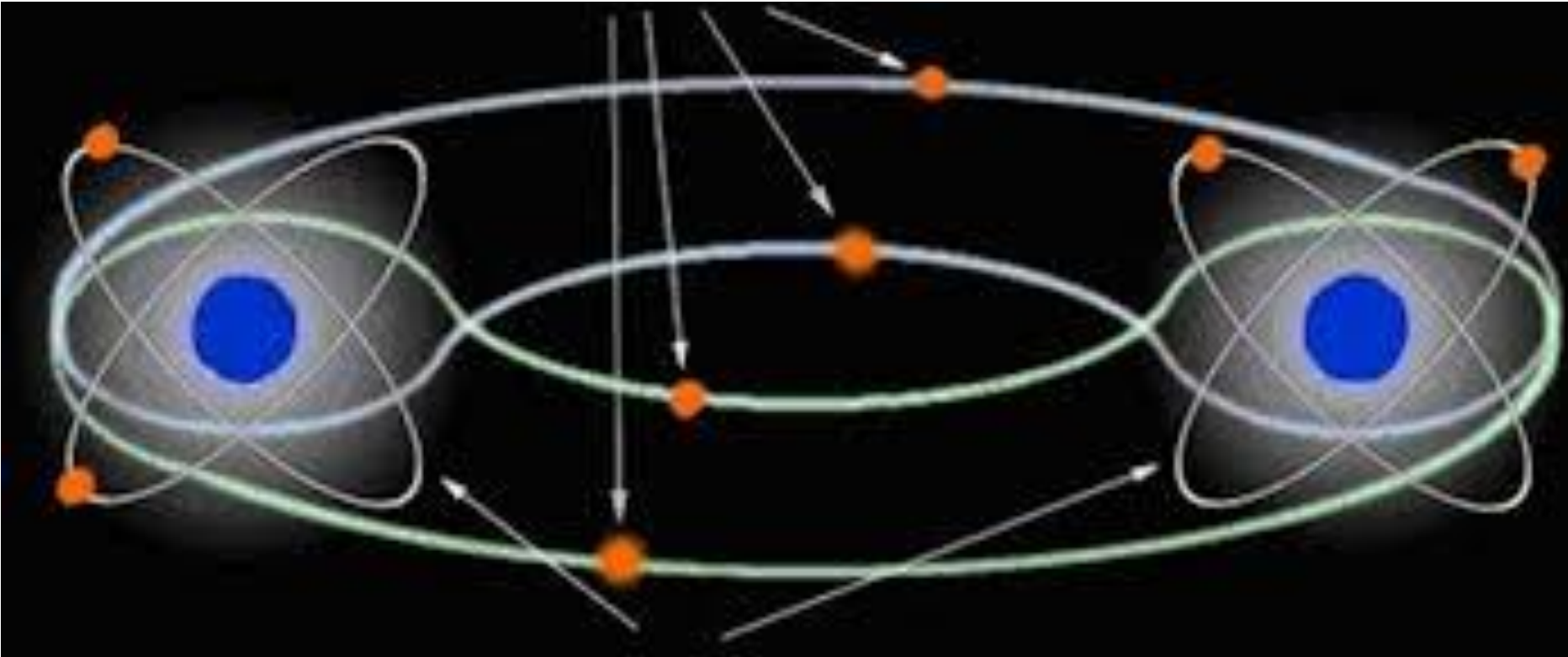
## Quelle est la forme de l'atome ?



## Diagramme énergétique

- On remarque que certaines couches ont des énergies proches !
- Les électrons des couches profondes sont difficilement arrachables à l'inverse des électrons des couches externes. Ces derniers sont dits **électrons de valence**. Donc, ils peuvent être mis en jeu.

## Quelle est la forme de l'atome ?



Les deux atomes se mettent en équilibre !

**Conséquence:** d'autres formes existent !!!

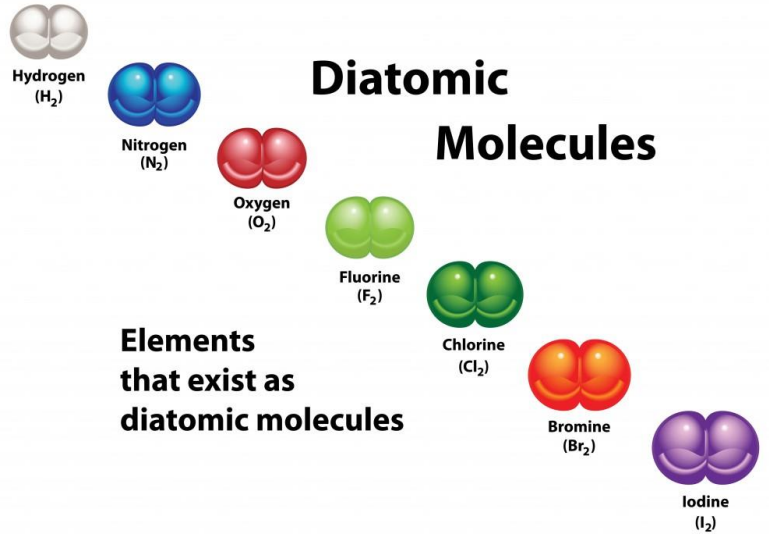


# Quelles sont les autres formes d'arrangements atomiques et comment les étudier?

Zosime de Panopolis (IIIeme siècle) et Antoine Lavoisier (1743-1794)



# Quelle sont les autres formes d'arrangements atomiques et comment les étudier?



# Molécules

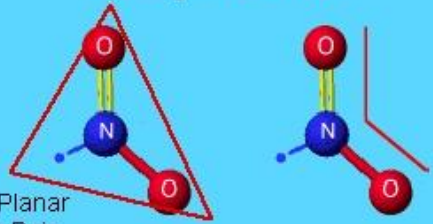
## Triatomic Molecules

### Carbon Dioxide



Linear

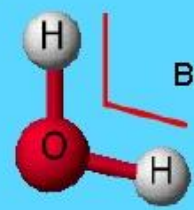
### Nitrogen Dioxide



Trigonal Planar Electron Pair Geometry

Bent

### Water

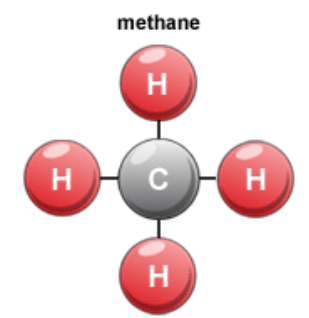
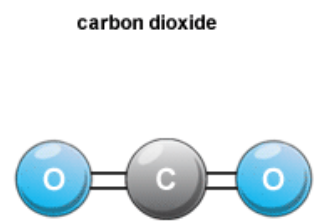
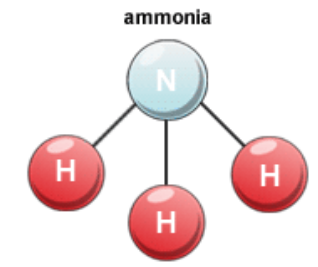
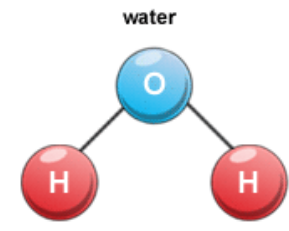


Bent

Tetrahedron Electron Pair Geometry

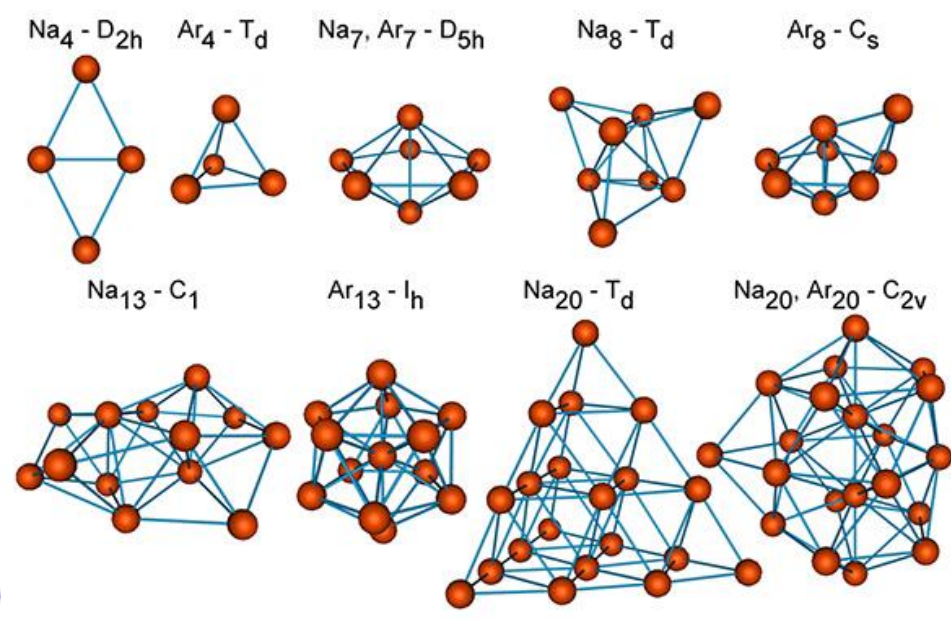
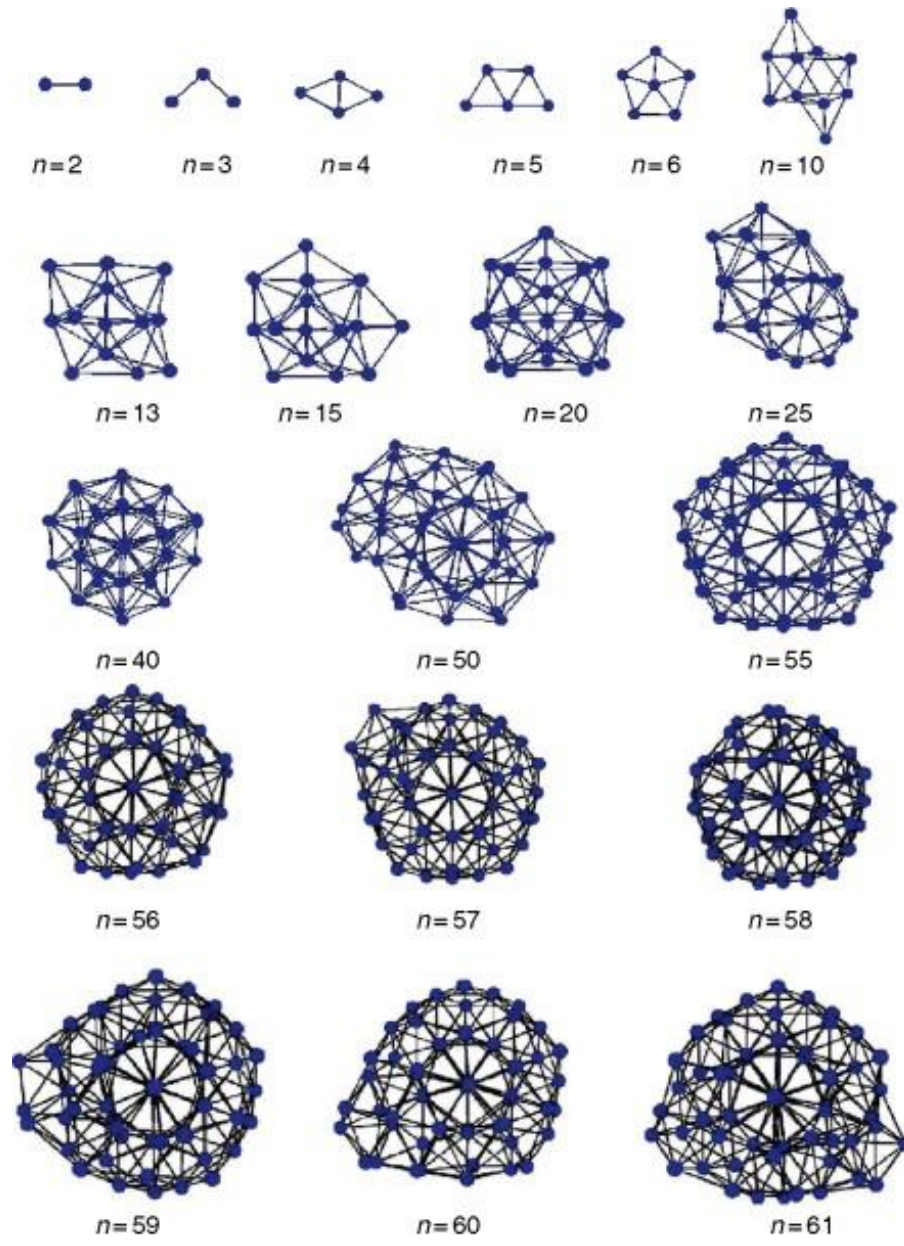
## Molecular Geometry

C. Ophardt, c. 2003



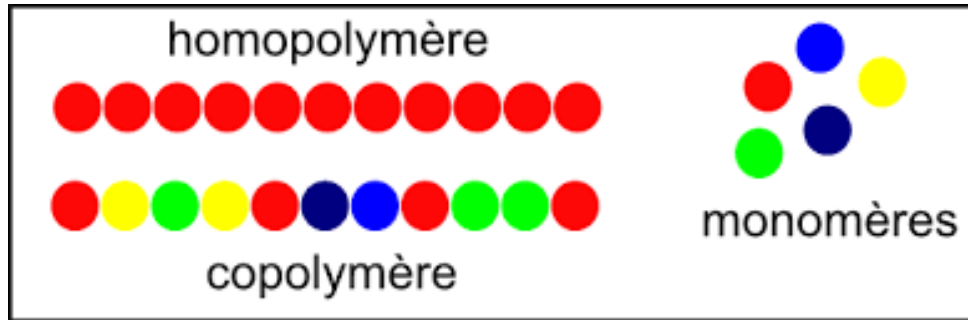
# Quelle sont les autres formes d'arrangements atomiques et comment les étudier?

## Clusters ou Agrégat d'atomes

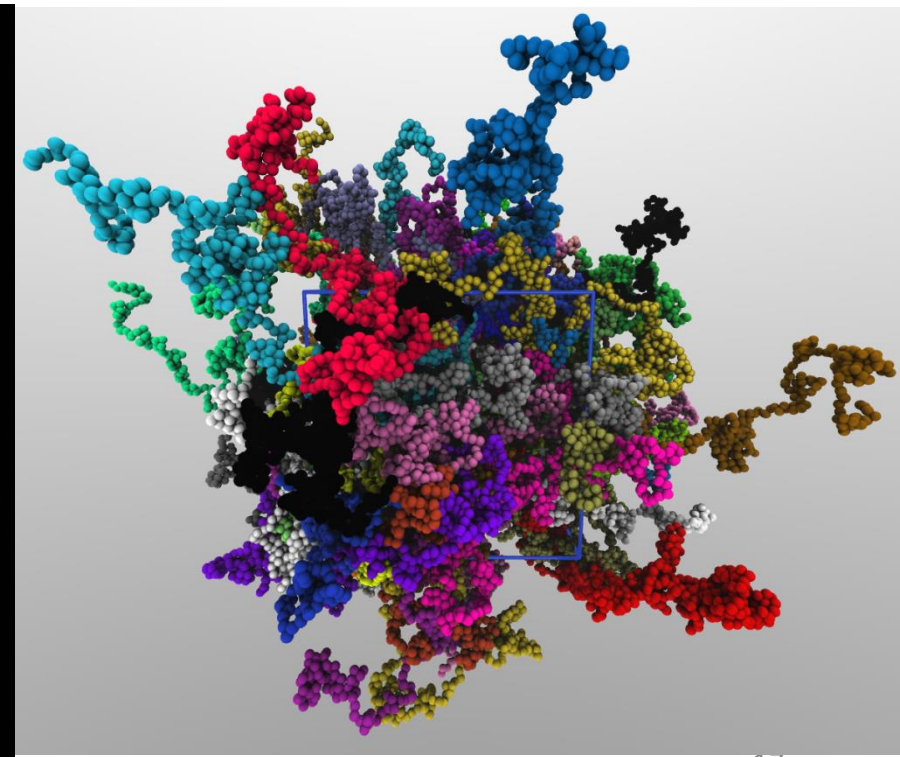
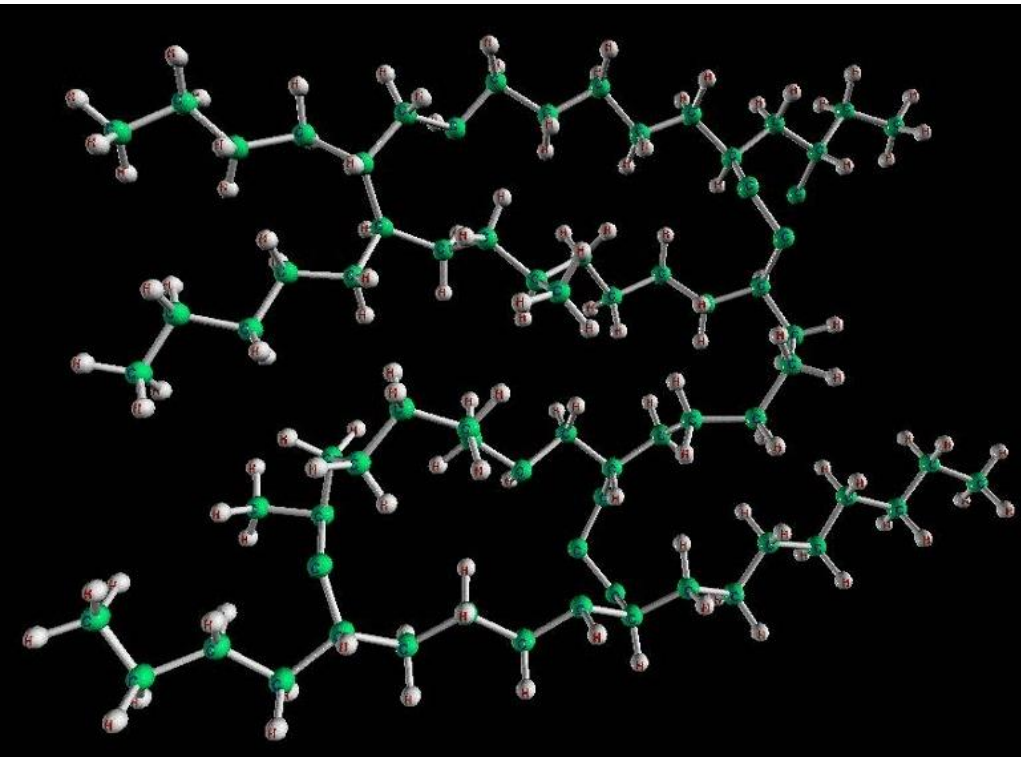




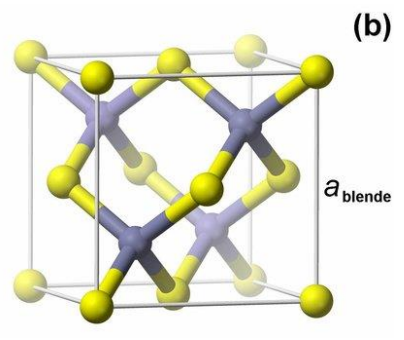
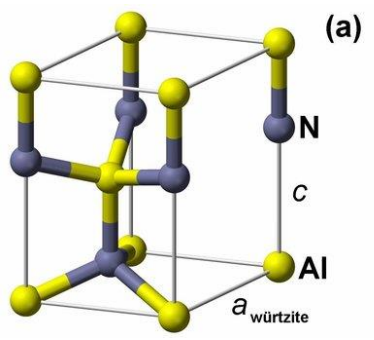
Quelle sont les autres formes d'arrangements atomiques et comment les étudier?



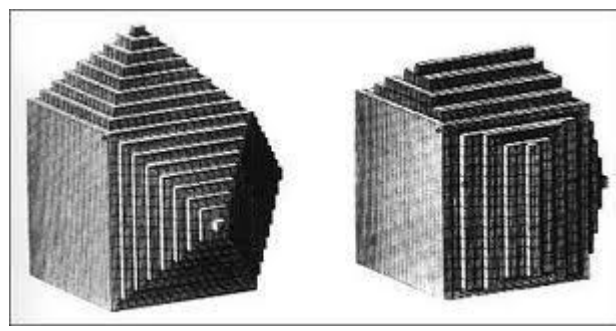
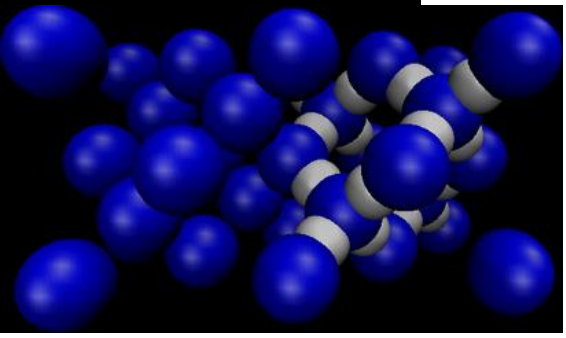
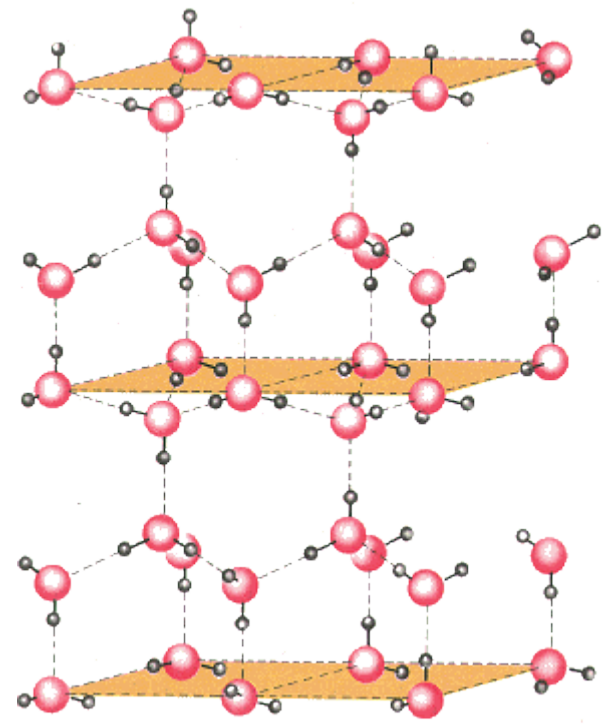
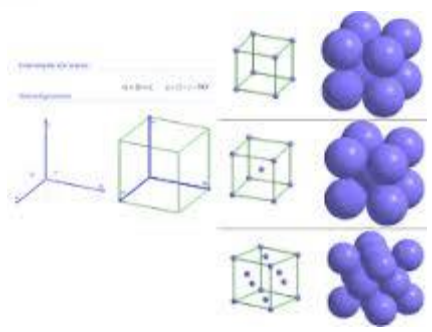
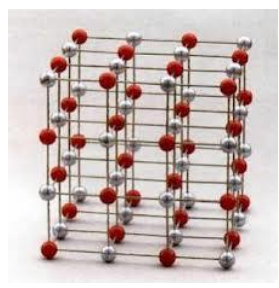
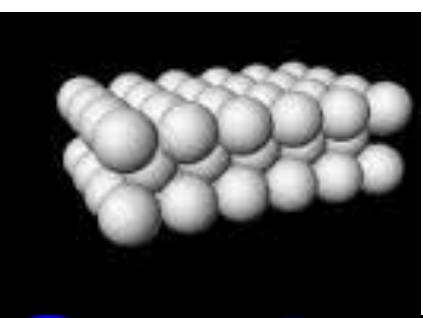
# Polymères



# Quelle sont les autres formes d'arrangements atomiques et comment les étudier?



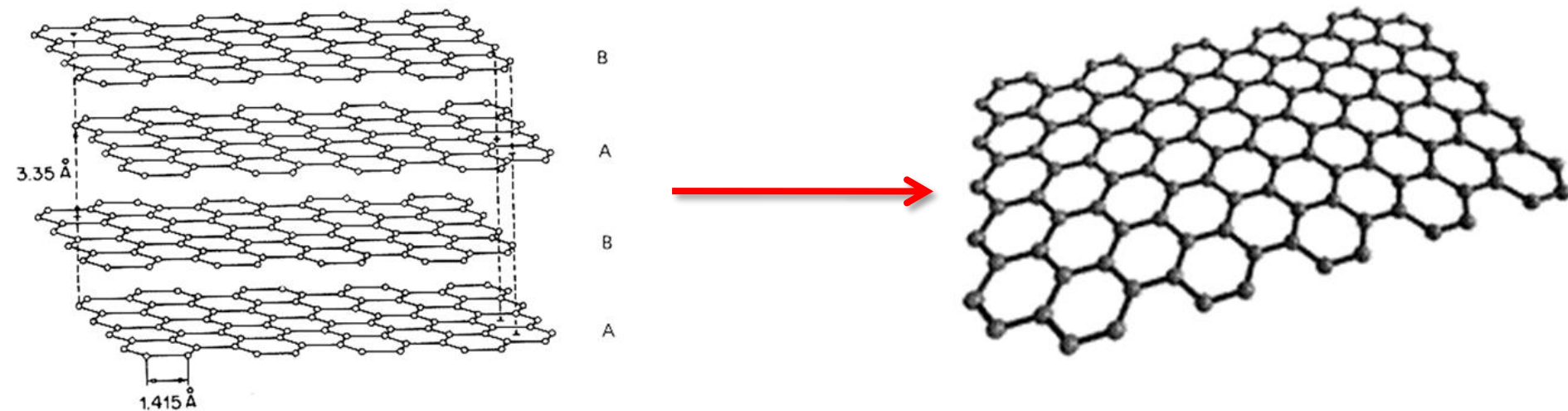
## Cristaux



# Quelle sont les autres formes d'arrangements atomiques et comment les étudier?

## LE GRAPHENE

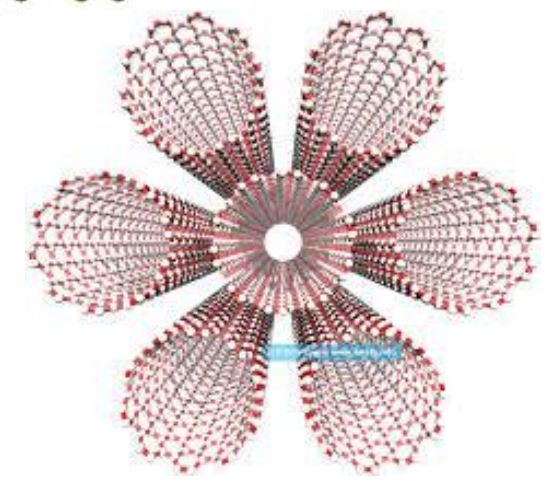
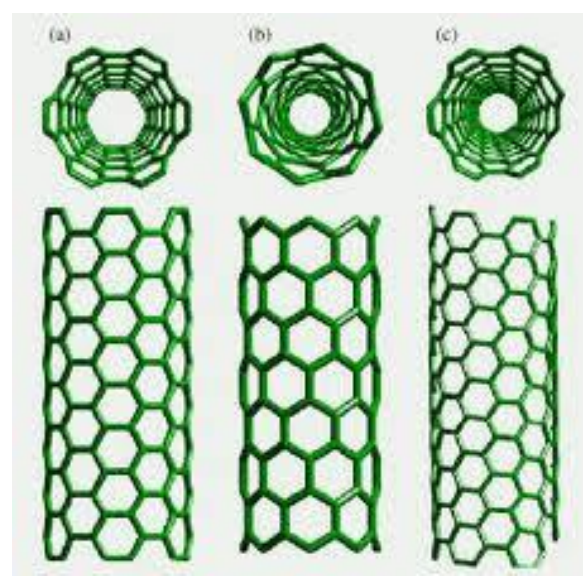
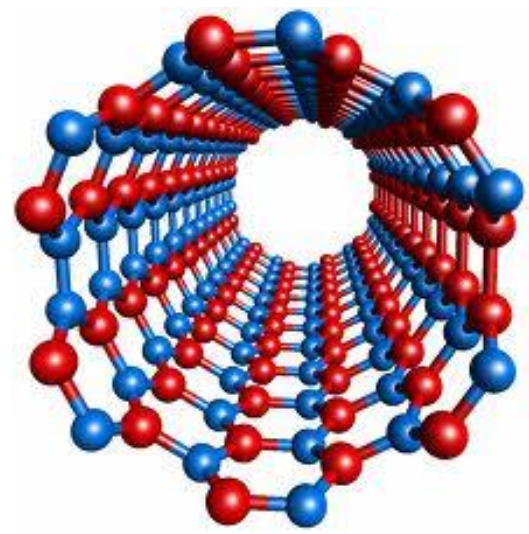
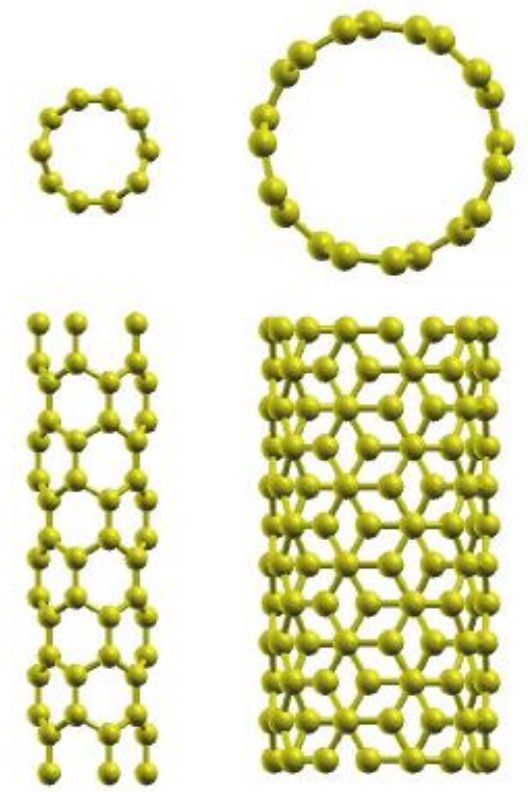
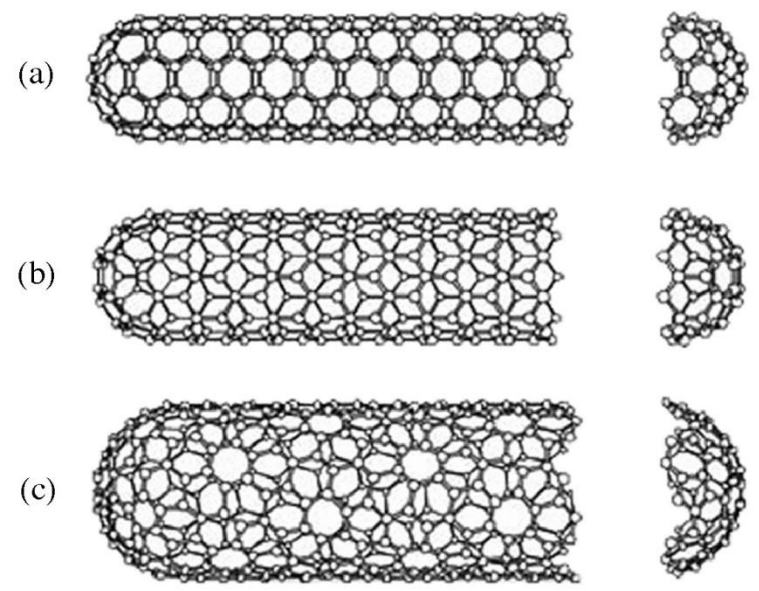
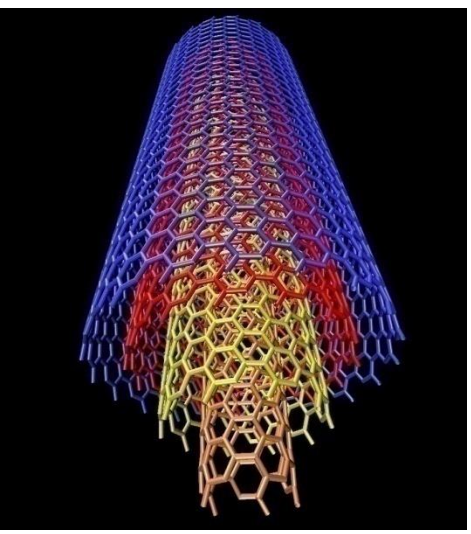
Le graphène est une feuille d'une molécule de graphite d'épaisseur, plus résistant que le diamant, plus élastique que la soie ; il peut prendre n'importe quelle forme. Il a été isolé en 2004 par, **Andre Geim** (Université de manchester), qui a reçu pour cette découverte le prix Nobel de physique en 2010 avec **Konstantin Novoselov**.



➤ Il conduit l'électricité à la vitesse de la lumière, et peut transmettre 1000 fois plus de courant électrique que le cuivre. Il conduit l'électricité à un taux 30 fois plus rapide que le silicium.



# Quelle sont les autres formes d'arrangements atomiques et comment les étudier?



Quelle sont les autres formes d 'arrangements atomiques et comment les étudier?

## Méthodes Expérimentales

RX,  
AFM  
MEB  
MET  
HRTM  
SIMS  
EBSD  
DSC  
RHEED  
SQUID  
FMR  
XMCD  
...etc.

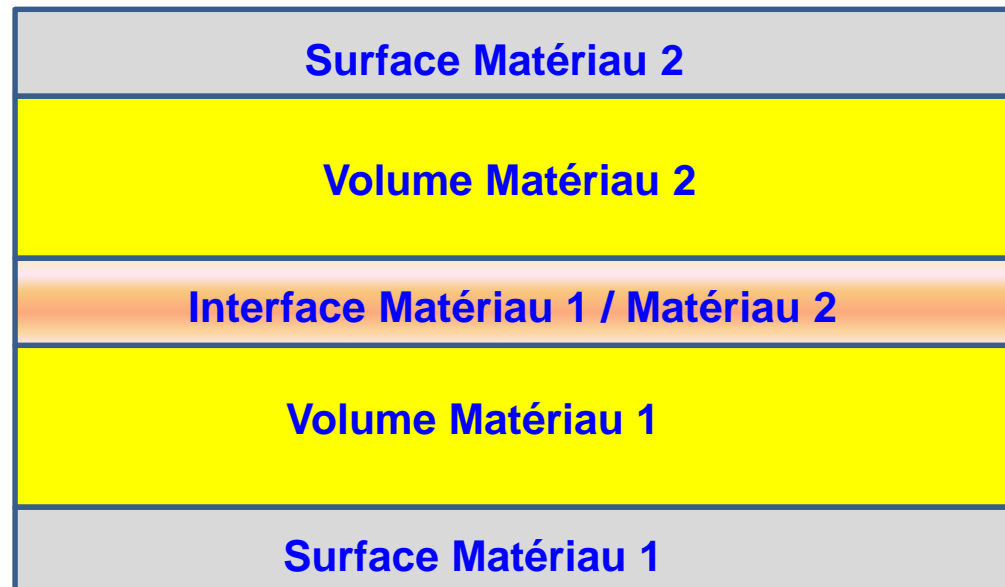
Plusieurs Sondes  
Expérimentales

Une  
Sonde  
Théorique

## Méthodes Théoriques

DFT  
H-F  
LMTO  
LCAO  
CALPHAD

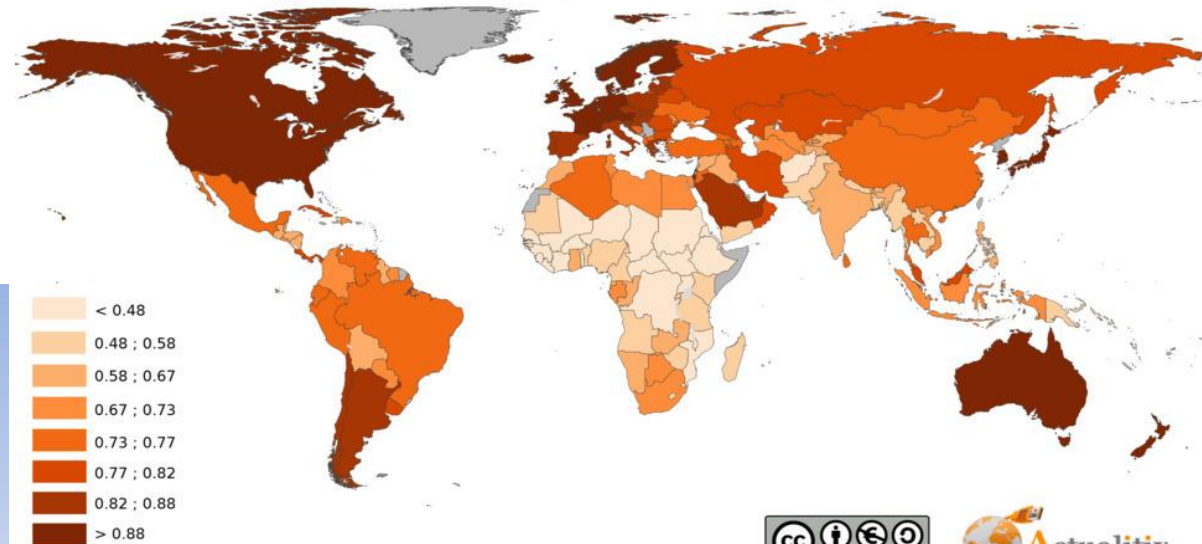
...etc.



## Quelles sont les enjeux des formes atomiques ?

### William Shakespeare (1564-1616) et le reste du monde ???

Indice de développement humain (1 = parfait / 0 = mauvais)



Source : UNDP - 2014



## William Shakespeare



*To be or not to be*

## INDICE DE BONHEUR EN 2019

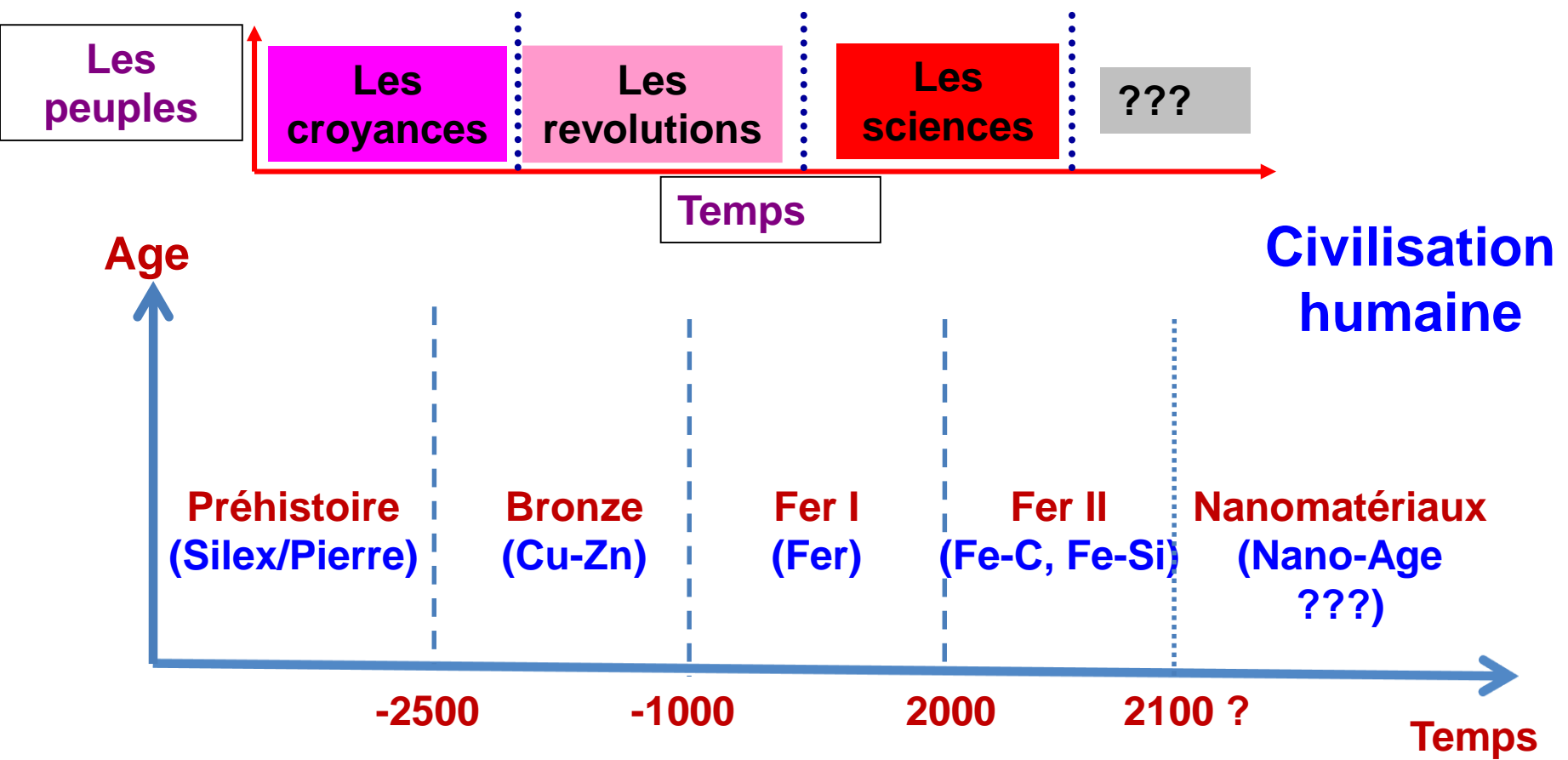


© ATLASOCIO.COM

Source : World Happiness Report 2019, Sustainable Development Solutions Network.  
Note : Le WHR 2019 concerne les données relevées pour la période 2016-2018.



# Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?

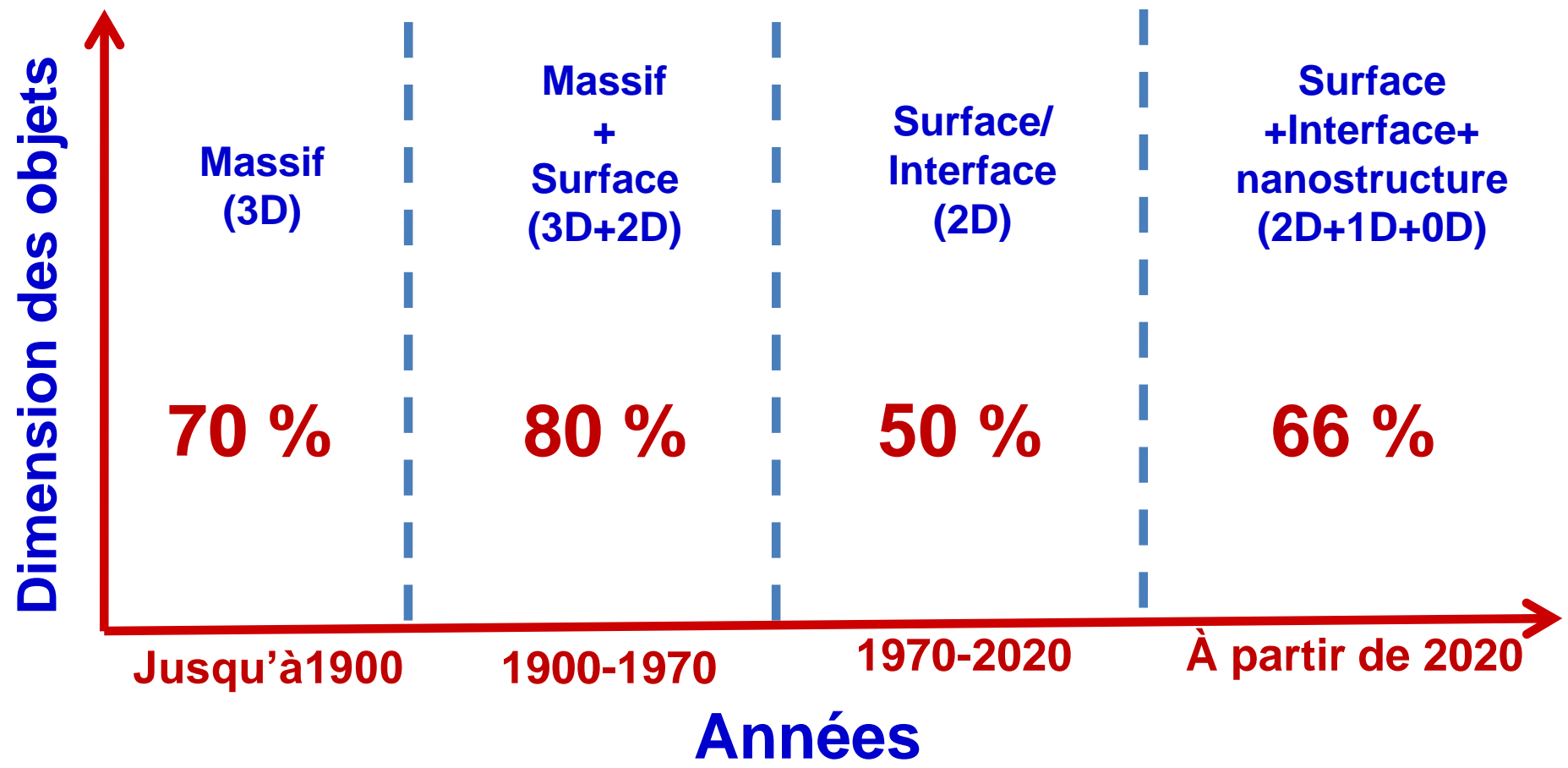


**L'évolution de l'humanité est liée aux avantages des matériaux existants et la domination appartient à la nation qui maîtrise la technologie des matériaux et leur application !!!**

# Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?

## Dimensionnalité

**A partir de 2050;  
40 % des objets  
seront nanostructurés !!!**





## Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?

➤ **Multiplés:** Santé, Eau, Transport, Pollution, Logement, Déchets, Catastrophes Naturelles, Environnement, Autosuffisance, ... **MAIS** à partir de 2050 **les énergies renouvelables !** Les nouvelles énergies produiront soit de l'électricité soit de la chaleur que seuls les **nano-objets** ou **nanomatériaux** peuvent **produire, stocker et distribuer !!!**

➤ Plusieurs pays ont du pétrole/gaz mais n'ont aucun brevet et aucune invention, Ils ont du soleil, ils peuvent ne pas avoir des brevets et des inventions ! Premiers arrivés, premiers servis !

➤ Les pays du Maghreb; en particulier l'Algérie, sont plus que concernés : pays exposés tous les jours à de fortes fenêtres (taux) d'ensoleillement et leur proximité du continent européen, l'un des plus grands consommateurs et demandeurs d'électricité !

## Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?

### Composition d'un ordinateur

• Plastiques	27 %
• Tube cathodique	37 %
• Métaux non ferreux	7 %
• Métaux ferreux	13 %
• Composants électroniques	11 %
• Déchets industriels s	1 %
• Câbles et divers	4 %

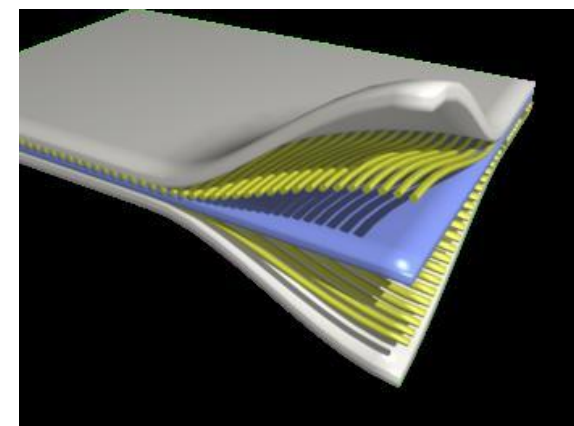
### Composition d'une voiture :

- ferreux : 65 % ;
- divers (verre, peinture, tissus, élastomères, etc.) : 18,5 % ;
- plastiques : 10 % ;
- aluminium : 6,5 %

### Composition d'un avion

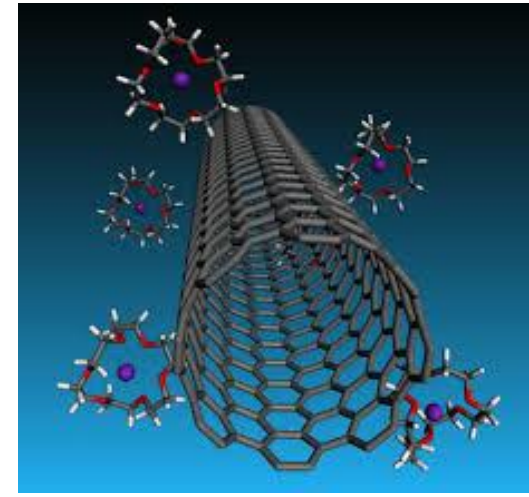
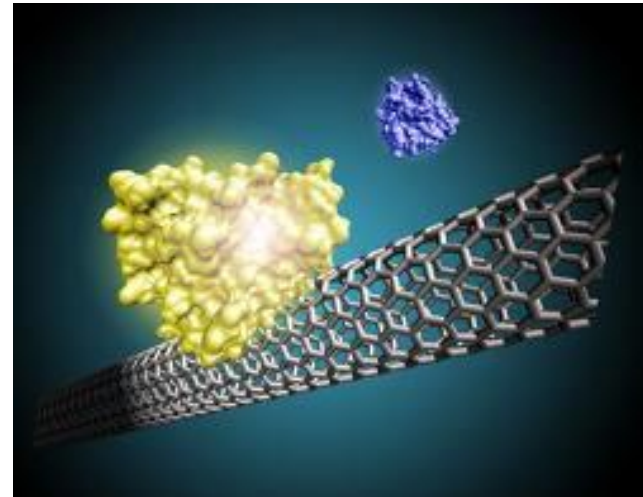
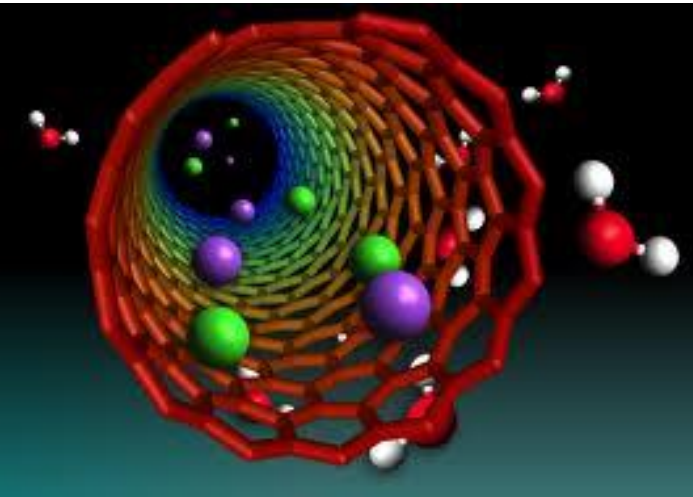
Appareils	Alliages Al	Alliages Ti	Composites org	Aciers	Autres
A310	67 %	5 %	10 %	13 %	5 %
A320	58 %	6 %	20 %	13 %	3 %
A330/A340	73 %	6,5 %	10 %	7,5 %	3 %
A380	75 %	7 %	8 %	7 %	3 %

**Dés 2050 : 40~50 %  
Nanocomposites**



# Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?

## Nanocarbones pour la pharmacologie

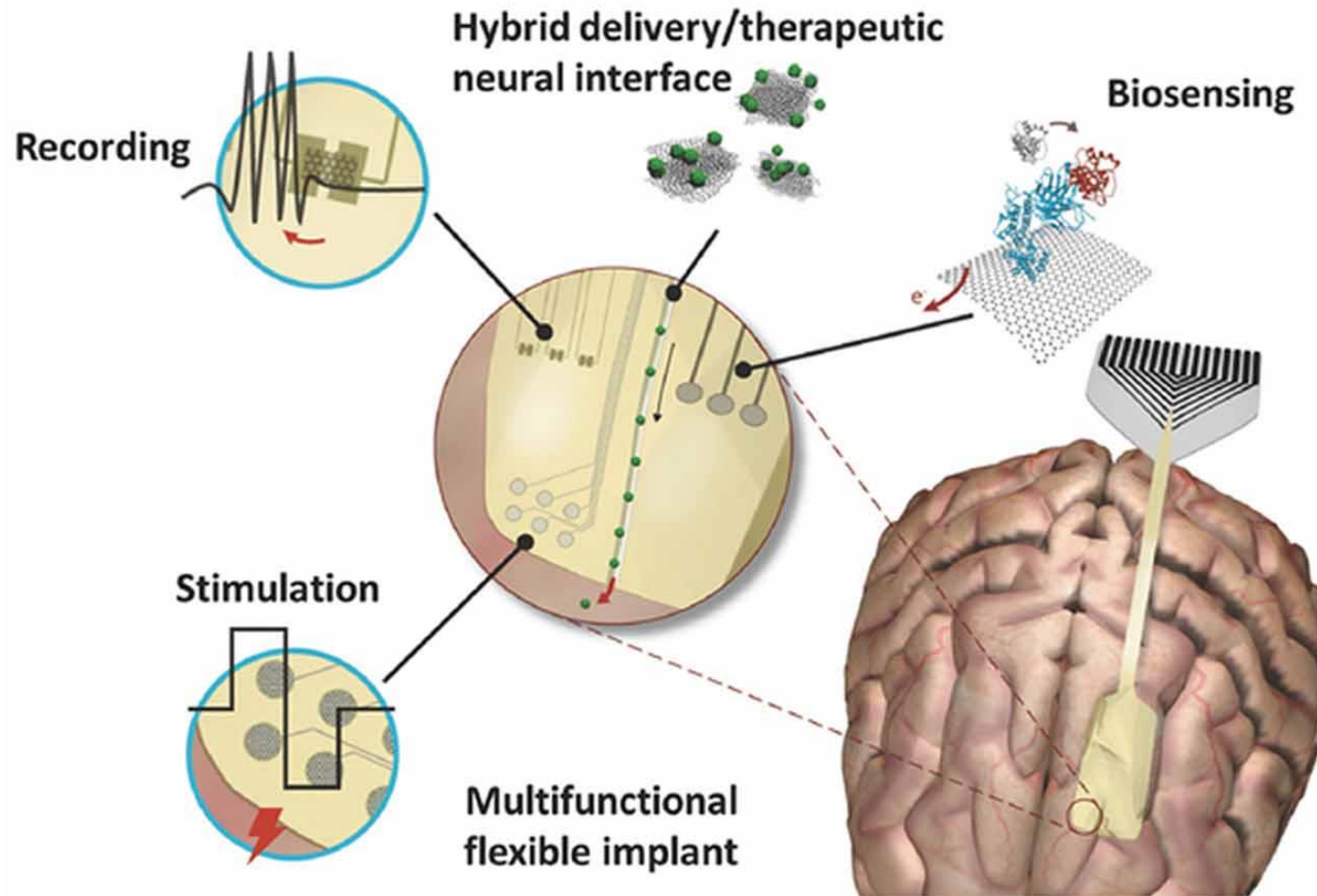


### Problèmes physiques

- Géométrie et structure instables
- Chiralité, flexibilité
- Nature des liaisons: covalentes-VdW, métalliques-VdW,
- Force: Elasticité-viscosité (sang humain)
- Energie : stabilité

# Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?

## Nanocarbones pour la pharmacologie



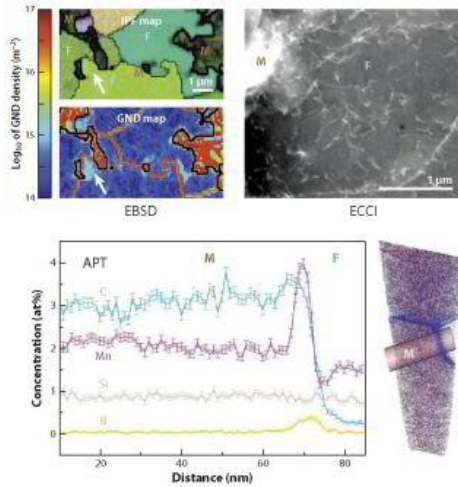
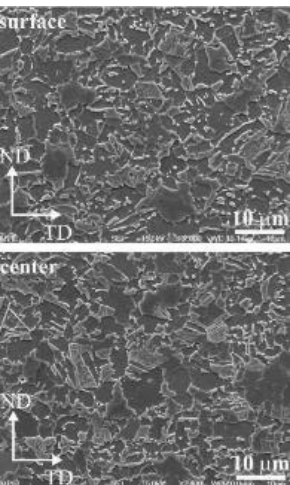
[\\_ Mattia Bramini](#)<sup>1,2\*</sup>, [Giulio Alberini](#)<sup>1,3</sup>, [\\_ Elisabetta Colombo](#)<sup>1,2</sup>, [\\_ Martina Chiacchiaretta](#)<sup>1,3</sup>, [\\_ Mattia L. DiFrancesco](#)<sup>1,2</sup>, [\\_ José F. Maya-Vetencourt](#)<sup>1</sup>, [\\_ Luca Maragliano](#)<sup>1</sup>, [\\_ Fabio Benfenati](#)<sup>1,2,3†</sup> and [\\_ Fabrizia Cesca](#)<sup>1,2†</sup>

Review ARTICLE

Front. Syst. Neurosci., 11 April 2018 |

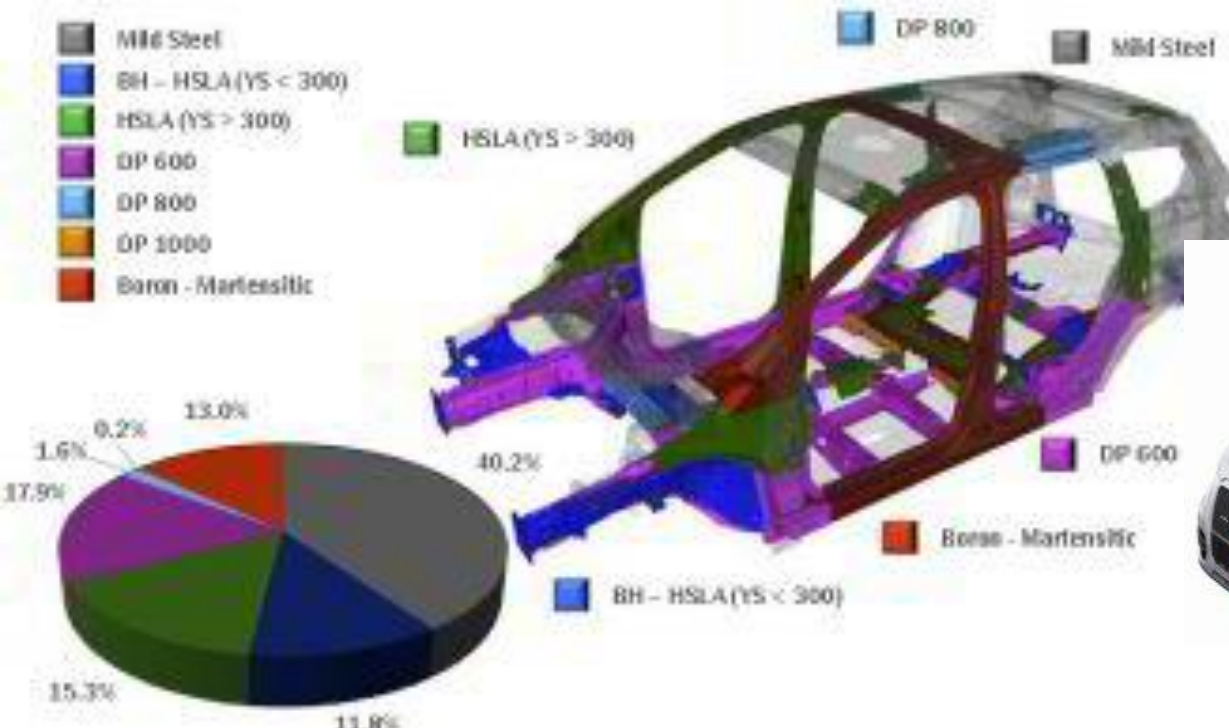


# Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?

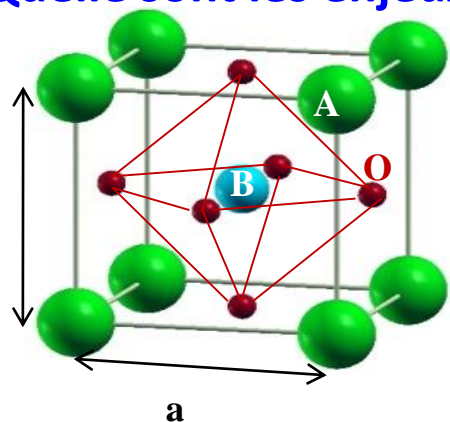


**Dual-phase steels (DP steels)** consist of ferrite and a dispersed hard martensitic second phase in the form of islands.


C.C. Tasan, et al. **D. Raabe**  
 Overview of Dual-Phase Steels: Advances in Microstructure-Oriented Processing and Micromechanically Guided Design  
[Annu. Rev. Mater. Res. 2015. \(45\) 391-43\[...\]](#)

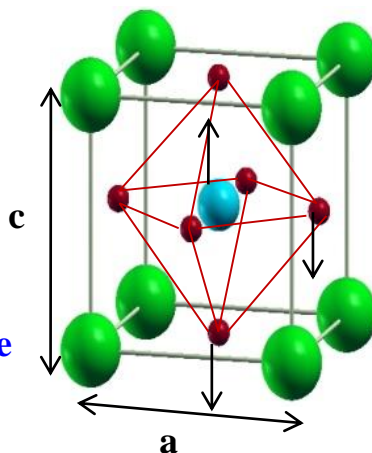


# Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?



**Cubique**  
Centro-symétrique

$T > T_c$   
  
**Distorsion**  
**Ferroélectrique**



**Tetragonale**  
Non centro-symétrique

$P_s$

**Surface structure and polarization of cubic and tetragonal BaTiO<sub>3</sub>: An ab initio study**

[N. Iles](#), [K. Driss Khodja](#), [A. Kellou](#), [P. Aubert](#)

Computational Materials Science  
01/2014; 87:123–128.

## Applications:

Mémoires non volatiles à base de multicouches pérovskites

Maitrise de la qualité des interface à l'échelle Nanométrique

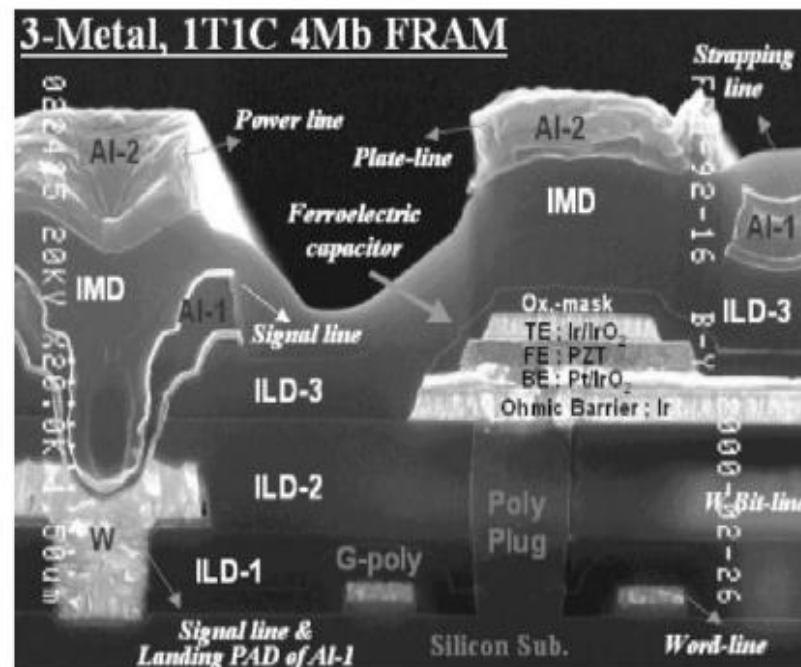
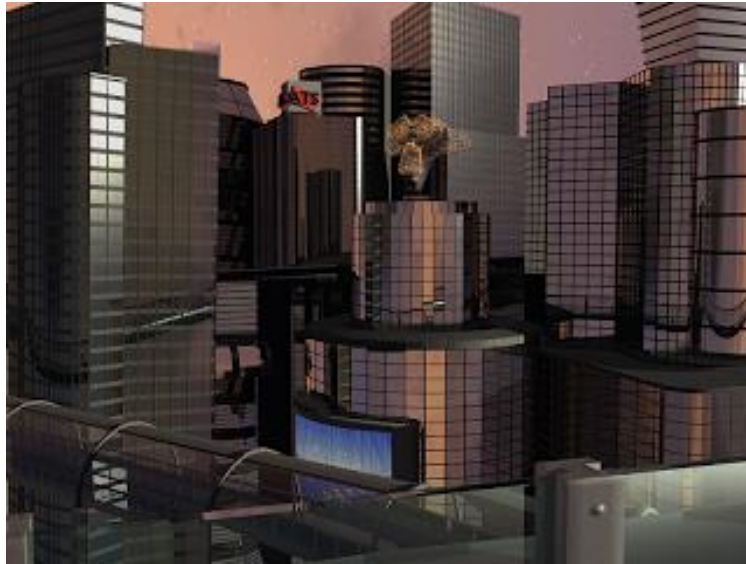


Image de Microscopie en champ proche d'une mémoire ferroélectrique (FeRAM) Samsung 4Mbit



## Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?



**Domotique  
de demain !!!**

**Ville**

**Ferme**

**Maison**



## Quelle sont les enjeux des formes des atomes ?

Téléphone



Voiture



Avion



**Le tableau périodique  
était le passé, est le  
présent et sera l'avenir  
de l'humanité !!!**