

N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE & POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR & DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILLALI LIABES  
FACULTE DES SCIENCES EXACTE  
DEPARTEMENT DES MATERIAUX ET DEVELOPPEMENT  
DURABLE  
SIDI BEL ABBES

# ***THESE DE DOCTORAT***

*Présenté par:*

KHEROUBI BOUMEDIENE

*Spécialité : Physique*

*Option : Physique des Matériaux*

*Intitulé*

*L'étude de l'effet multi-échelle de nouveaux  
matériaux et applications technologiques*

*Soutenue le.....*

*Devant le jury composé de :*

<i>Président:</i>	<i>M<sup>R</sup> HEIRECHE Houari</i>	<i>Professeur</i>	<i>UDL -SBA</i>
<i>Examineurs :</i>	<i>M<sup>R</sup> TOUNSI Abdelouahed</i>	<i>Professeur</i>	<i>UDL -SBA</i>
	<i>M<sup>R</sup> BESSEGHIER Abderrahmane</i>	<i>MCA</i>	<i>C.V- Tissemsilet</i>
	<i>M<sup>R</sup> YEGHNEM Réda</i>	<i>MCA</i>	<i>U- SAIDA</i>
	<i>M<sup>R</sup> ZIDOUR Mohamed</i>	<i>MCA</i>	<i>U- Tiaret</i>
<i>Directeur de thèse :</i>	<i>M<sup>R</sup> BENZAIR Abdelnour</i>	<i>Professeur</i>	<i>UDL -SBA</i>

*Année universitaire:2016-2017*

# *Dédicaces*

---

*A mes parents*

*A mes frères et ma sœurs*

*A ma famille*

*A mes amis*

# Remerciements

*Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé aux deux Laboratoire Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi-échelle, Laboratoire des Matériaux et Hydrologie de l'Université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès.*

*tout d'abord je tiens à présenter mes sincères remerciements à mon encadreur Monsieur **Abdelnour BENZAIK**, Professeur à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès, de m'avoir guidé et éclairé tout au long de ce travail. Ses conseils et ses encouragements m'ont permis de mener à terme la rédaction de cette thèse.*

*Je tiens à remercier Monsieur **Houari HEIRECHE**, Professeur à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès pour m'avoir fait l'honneur de participer à mon jury de thèse en tant que Président. Je le suis sincèrement reconnaissant pour toutes les remarques pertinentes et pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail.*

*Mes vifs remerciements vont également à Monsieur **Abdelouahed TOUNSI**, Professeur à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès, Ses orientations et discussions scientifiques m'ont été d'une aide considérable, qui m'a fait un grand honneur en acceptant de juger le travail de cette thèse.*

*Je remercie vivement Monsieur **Abderrahmane BESSEGHIER**, Maître de conférences (A) à l'université de Tissemsilet, d'avoir accepté d'être membre du jury de cette thèse.*

*Je tiens à remercier Monsieur **Réda YEGHNEM**, Maître de conférences (A) à l'université de Saida, d'avoir accepté d'être membre du jury.*

*Je remercie sincèrement Monsieur **Mohamed ZIDOUR**, Maître de conférences (A) à Université de Tiaret, d'avoir accepté d'être membre du jury.*

*Enfin, je tiens à remercier tous les membres de Laboratoire des Matériaux et Hydrologie, et Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi-échelle, tous mes amis (es) et tous mes collègues de travail.*

# Sommaire

---

Table des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale.....	1
<b>Chapitre I : Généralités sur les nouveaux matériaux .....</b>	<b>04</b>
<b>I.1 Les nanotubes</b>	
I .1.1 Introduction .....	05
I .1.2 Structure d'un nanotube .....	05
I .1.3 description des nanotubes .....	08
I .1.4 Les nanotubes de nitrure de bore.....	08
I .1.4.1 Formes allotropiques de nitrure de bore.....	08
I .1.4.2 Methodes de synthèse.....	13
I .1.4.3 Propriétés générales.....	15
I .1.4.4 Synthèse des nanotubes de nitrure de bore.....	16
I .1.4.5 Propriétés des nanotubes de nitrure de bore et applications.....	20
I .1.4.5.a Propriétés électroniques.....	21
I .1.4.5.b Propriétés mécaniques.....	25
I .1.4.5.c Propriétés électromécaniques.....	26
I .1.4.5.d Propriétés vibrationnelles.....	27
I .1.4.5.e Propriétés chimiques.....	28
I .1.4.5.f Propriétés thermiques.....	29
I .1.5 Les nanotubes de carbone.....	30
I .1.5.1 Le carbone.....	30
I .1.5.2 Les formes traditionnelles du carbone.....	30
I .1.5.2.a Le graphite.....	30

---

I .1.5.2.b Le diamant.....	31
I .1.5.3 Les nouvelles formes de carbone.....	32
I .1.5.3.a Fullerènes et dérivés.....	32
I .1.5.3.b Différents types de nanotube de carbone.....	33
I .1.5.3.b.1 Nanotubes monofeuillets (SWNT).....	34
I .1.5.3.b.2 Nanotubes multifeuillets (MWNT).....	34
I .1.5.4 Les méthodes de synthèses.....	35
I .1.5.4.aMéthode de l'arc électrique.....	36
I .1.5.4.bMéthode d'ablation laser.....	37
I .1.5.4.c Méthode de dépôt chimique en phase vapeur.....	37
I .1.5.5 Les propriétés des nanotubes.....	38
I .1.5.5.a Les propriétés mécaniques.....	38
I .1.5.5.b Les propriétés électriques.....	39
I .1.5.5.c Les propriétés thermiques.....	41
I .1.5.5.d Les propriétés optiques.....	42
I .1.5.5.e Les propriétés d'émission de champ.....	42
I .1.5.6 Applications des nanotubes de carbone.....	42
<b>I.2 Les matériaux FGM.....</b>	<b>43</b>
I .2.1 Introduction.....	43
I .2.2 Concept des matériaux fonctionnellement gradués.....	44
I .2.3 Comparaison des matériaux types FGMet les matériaux composites traditionnels.....	47
I .2.4 Loi régissant la variation des propriétés matérielles des plaques FGM.....	48
I .2.4.1 Les propriétés matérielles de la plaque P-FGM .....	50
I .2.4.2 Les propriétés matérielles de la plaque S-FGM.....	51
I .2.4.3 Les propriétés matérielles de la plaque E-FGM.....	52

---

I .2.5 Domaines d'applications des matériaux fonctionnellement gradués.....	53
Bibliographiques.....	55
<b>Chapitre II : Les modèles théoriques des milieux continus.....</b>	<b>66</b>
II .1 Introduction.....	67
II .2 Le milieu continue.....	68
II .3 Théories mathématiques.....	69
II.3.1 La théorie d'Euler Bernoulli.....	69
II.3.2 La théorie de Timoshenko.....	71
II.3.3 La théorie d'ordre élevé.....	73
Bibliographiques.....	78
<b>Chapitre III : Modèle nonlocal appliqué aux nouveaux matériaux..</b>	<b>79</b>
III .1 Modèle nonlocal avec effet d'épaisseur.....	80
III .1.1Cécinématique .....	80
III.1.2 Equations de mouvement .....	81
III.1.3 Relations initiales.....	83
III.3.4 Solution analytique du nanomatériau par appuyé simple.....	85
Bibliographiques .....	87
<b>Chapitre IV : Résultats et discussions.....</b>	<b>88</b>
IV. 1Résultats .....	89
Bibliographiques .....	98
Conclusion générale .....	99

# Liste des tableaux

## Chapitre I : Généralités sur les nouveaux matériaux

Tableau I.1 : Récapitulatif des valeurs structurales des différents polymorphes cristallisés de nitrure de bore.....	11
Tableau I.2 : Récapitulatif des synthèses des NTs (et filaments) de BN les plus représentatives.....	18
Tableau I.3 : Comparaison des différentes propriétés, avec des valeurs expérimentales des deux sortes de NTs. ....	21
Tableau I.4 : comparaison entre les propriétés de la céramique et du métal. ....	46
Tableau I.5 : Les principaux domaines d'application des FGM.....	54

## Chapitre IV : Résultats et discussions

Tableau IV.1 Déflexion centrale maximale non dimensionnelle $\bar{w}$ sous une charge uniforme pour des nanomatériaux par des appuyés simple. ....	90
Tableau IV.2 Fréquence fondamentale non dimensionnelle $\bar{\omega}$ du nanomatériau par des appuyés simple ....	91
Tableau IV.3 Les trois premières fréquences non dimensionnelle $\bar{\omega}$ du nanomatériau par des appuyés simple avec ( $L/h=5$ ).....	92



# Liste des figures

## Chapitre I : Généralités sur les nouveaux matériaux

Figure I.1: Schéma représentatif de nanotubes de carbone et de BN monofeuillet.....	6
Figure I.2 : Schéma d'une feuille de graphène et des paramètres permettant de décrire la géométrie d'un nanotube.....	7
Figure I.3 : Empilement des feuillets dans le graphite et le h-BN.....	9
Figure I.4 : Mailles élémentaires des différentes phases allotropiques du nitrure de bore.....	11
Figure. I.5 : Diagramme Pression/Température pour le nitrure de bore (phases cubique et hexagonale).....	12
Figure I.6 : Photographie d'un monocristal de h-BN synthétisé par la méthode de gradient de température.....	13
Figure I.7 : Micrographie d'un monocristal de h-BN synthétisé à pression atmosphérique.....	15
Figure I.8 : Différents NTs (mono et multiparois).....	19
Figure I.9 : Structure de bandes pour le h-BN.....	22
Figure I.10 : Structures des bandes des différents tubes de nitrure de bore.....	22
Figure I.11 : structure du graphite.....	31
Figure I.12 : structure du diamant.....	32
Figure I.13 : Fullerène C <sub>60</sub> .....	33
Figure I.14 : le modèle parchemin et le modèle de la poupée russe.....	35
Figure I.15 : Variation continue des propriétés.....	44
Figure I.16 : Variation discrète des propriétés.....	44
Figure I.17 : Variation continue de la microstructure (schématisée).....	45
Figure I.18 : Variation continue de la microstructure (photo).....	46
Figure I.19 : Caractéristiques des matériaux composites FGM en comparaison avec les matériaux composites conventionnels.....	47
Figure I.20 : La distribution composante des matériaux.....	48

Figure I.21 : Géométrie d'une plaque FGM.....49

Figure I.22 : Variation de la fraction volumique dans une plaque P-FGM.....51

Figure I.23 : Variation de la fraction volumique dans une plaque S-FGM.....52

Figure I.24 : Variation de la fraction volumique dans une plaque E-FGM.....53

**Chapitre II : Les modèles théoriques des milieux continus**

Figure. II.1: Cinématique d'Euler Bernoulli.....69

Figure. II.2 : Cinématique de Timoshenko.....72

Figure. II.3: cinématique de la théorie d'ordre élevé.....74

Figure. II.4 :Variation de la fonction de gauchissement  $f(z)$  des modèles d'Afaq et Aydogdu en fonction de l'épaisseur.....76

Figure. II.5 : Variation de la fonction de cisaillement  $f'(z)$  des modèles d'Afaq et Aydogdu en fonction de l'épaisseur.....77

**Chapitre IV : Résultats et discussions**

Figure IV.1: Effet du rapport d'élancement( $L/h$ ) sur la déflexion, et les rapports des fréquences fondamentaux pour un nanomatériau par desappuyéssimple avec  $e_0 a = 1 \text{ nm}$  .....94

Figure IV.2: Effet du rapport d'élancement ( $L/h$ ) sur les rapports de fréquence plus élevés pour un nanomatériau par desappuyéssimple avec  $e_0 a = 1 \text{ nm}$  .....95

Figure IV.3: Effet du paramètre d'échelle sur la défection, et les rapports de fréquence fondamentale pour unnanomatériau par desappuyéssimple avec  $L / h = 10$  .....96

Figure IV.4:Effet du paramètre d'échelle sur les rapports de fréquence plus élevés pour unnanomatériau par des appuyéssimple avec  $e_0 a = 1 \text{ nm}$  .....97

# **Introduction générale**

### INTRODUCTION GENERALE

Parallèlement aux matériaux traditionnels sont apparus, dans les années 1970, les nouveaux matériaux : macro matériaux (composites complexes), puis nanomatériaux (structures artificielles à l'échelle moléculaire). Fiabilité, longévité, précision, légèreté, leurs avantages sont multiples. Les nanomatériaux interviennent désormais dans la presque totalité des domaines industriels : industries spatiales, aéronautiques, automobiles, secteur médical, construction électrique et électronique... jusqu'aux instruments de musique. Si la course à la miniaturisation promet une nouvelle révolution, le recyclage de ces nouveaux matériaux est aujourd'hui insuffisant, en raison de son coût et du fait même du nombre et de la complexité des composants. Il ouvre, lui aussi, un immense marché : laboratoires et bureaux d'études recrutent des ingénieurs-chercheurs diplômés d'une grande école à dominante matériaux ou titulaires d'un doctorat en science physique, en physique des solides ou sciences des matériaux.

Le monde industriel est en perpétuelle évolution et en quête obsessionnelle de la perfection. Cette évolution et cette perfection ne peuvent se concrétiser sans l'avancée de la science qui met à la disposition de l'industrie les résultats d'une recherche scientifique permettant de concevoir des procédés novateurs et porteurs de développements industriels.

Les matériaux sont considérés comme un axe de recherche très porteur car toute pièce, tout composant, toute machine est à la base un matériau, et innover dans cette discipline c'est révolutionner le monde de l'industrie. Depuis la nuit des temps, le moteur de la découverte de nouveaux matériaux a plus ou moins obéi à une double démarche. Cette double démarche est associée aux problèmes que l'homme doit résoudre pour sa vie matérielle d'une part et à son besoin intellectuel de connaître et de comprendre le monde qui l'entoure d'autre part. Il ya donc des matériaux qui ont été conçus pour répondre à un besoin technologique spécifique.

Deux objectifs seront visés à travers cette thèse.

Le premier objectif de cette thèse est l'étude de l'effet multi échelle de nouveaux matériaux et application technologiques.

Le deuxième objectif principal de ce travail a été de proposer une nouvelle théorie nonlocale des nouveaux matériaux en tenant en compte l'effet d'épaisseur à l'échelle nanométrique.

La présente thèse sera donc présentée selon l'organisation qui suit :  
Après une introduction générale sur le thème des nouveaux matériaux ainsi que la thématique développée dans le cadre de cette thèse.

Le premier chapitre sera consacré à une recherche bibliographique sur les nouveaux matériaux ( les nanotubes, matériaux fonctionnellement gradués), l'histoire de leur développement, leurs propriétés, leurs méthodes de synthèses, ainsi que leurs domaines d'applications.

Le second chapitre sera dédié à un rappel sur les modèles théoriques des milieux continus ( la théorie d'Euler-Bernoulli , la théorie de Timoshenko et la théorie d'ordre supérieur).

Dans le troisième chapitre, on présente un développement mathématique pour le modèle nonlocal appliqué aux nouveaux matériaux.

Le chapitre quatre est consacré aux résultats et discussions

Enfin, le travail s'achèvera par une conclusion générale relative à la recherche effectuée .

# Chapitre I

## Généralités sur les nouveaux matériaux

## **I.1 Les nanotubes**

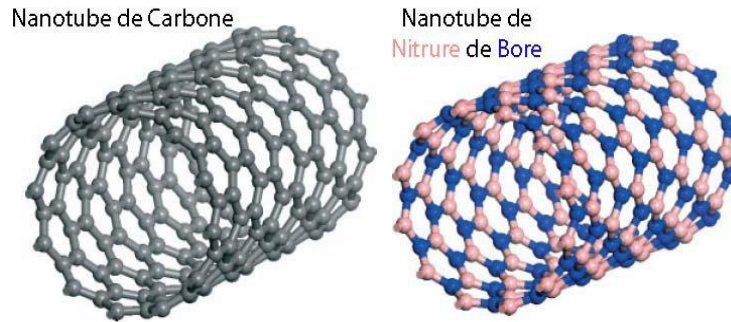
### **I.1.1 Introduction**

L'invention du transistor en 1948, a entraîné un bouleversement considérable dans le domaine de l'électronique. A partir de cette date, la taille des dispositifs n'a fait que diminuer pour atteindre rapidement des dimensions micrométriques. C'est dans les années 70 que cette réduction de taille a été la plus significative de telle sorte que dans les années 90, le terme de micro-technologie a été remplacé par celui de nano-technologie. A présent, la taille des objets auxquels nous nous intéressons est de l'ordre de quelques nanomètres. Dans ce sens, les fullerènes de carbone, découverts en 1985 par Kroto et al., représentent un bon exemple de ce type d'objets [1]. Par ailleurs, en 1991, S. Iijima [2] découvre un autre type de molécule formé également par du carbone et de dimensions nanométriques : les nanotubes (NTs). Cela a déclenché une intense activité au sein de la communauté scientifique internationale car leurs dimensions singulières (diamètre proche du nanomètre et longueur de plusieurs microns) font des NTs, des objets possédant des propriétés intrinsèques (mécaniques, électroniques...) uniques [3, 4].

### **I.1.2 Structure d'un nanotube**

C'est grâce à une étude en microscopie électronique des sous-produits de la synthèse de fullerènes que Iijima découvre, en 1991, les nanotubes de carbone [5]. La structure du nanotube est quasiment unidimensionnelle puisqu'elle présente un très grand rapport longueur sur diamètre. Plus précisément, un nanotube de carbone peut se concevoir comme l'enroulement concentrique d'une ou plusieurs feuilles de graphène ; de manière analogue, un nanotube de BN peut être décrit comme l'enroulement d'une ou plusieurs feuilles de BN (forme hexagonale) (figure I.1).

Selon le nombre de feuillets, un nanotube est monofeuillet (1 feuillet), bifeuillets (2 feuillets)... ou multifeuillets (plusieurs feuillets). Cet enroulement peut se faire de différentes façons, en fonction de l'angle entre l'axe d'enroulement de la feuille et les directions du réseau hexagonal constitutif de la feuille enroulée [6].



**Fig. I.1** - Schéma représentatif de nanotubes de carbone et de BN monofeuillet [194].

C'est ainsi que l'on définit l'angle chiral ou angle d'hélicité, noté  $\theta$  (figure I.2) : c'est l'angle compris entre le vecteur chiral,  $\overline{ch}$ , et les vecteurs de la maille élémentaire  $\overline{a1}$  et  $\overline{a2}$

La valeur de cet angle permet de distinguer 3 types de tubes :

- les nanotubes « zig-zag » pour lesquels  $\theta$  vaut  $0^\circ$
- les nanotubes « armchair » pour lesquels  $\theta$  vaut  $30^\circ$
- les nanotubes « chiraux » pour lesquels  $\theta$  est compris entre  $0^\circ$  et  $30^\circ$ .

Un nanotube est totalement défini par sa longueur, son diamètre et son angle chiral.

Ces deux dernières valeurs sont reliées par le vecteur chiral  $\overline{ch}$  qui résulte de la combinaison des vecteurs unitaires de la maille élémentaire du feuillet  $\overline{a1}$  et  $\overline{a2}$

$$\overline{ch} = n\overline{a1} + m\overline{a2} \quad (\text{I.1})$$

Les coefficients  $n$  et  $m$  sont connus sous le nom d'indices d'Hamada [7]



et permettent la caractérisation complète d'un nanotube. Ainsi, les indices sont du type (n,n) pour un nanotube zig-zag, (n,0) pour un nanotube armchair et (n,m) avec  $n = m$  et  $n, m = 0$  pour un nanotube chiral. Le rayon et l'angle chiral du nanotube peuvent être exprimés à partir des coefficients n et m grâce aux formules :

$$\text{Vecteur } \overline{Ch} : \quad \|\overline{Ch}\| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (\text{I.2})$$

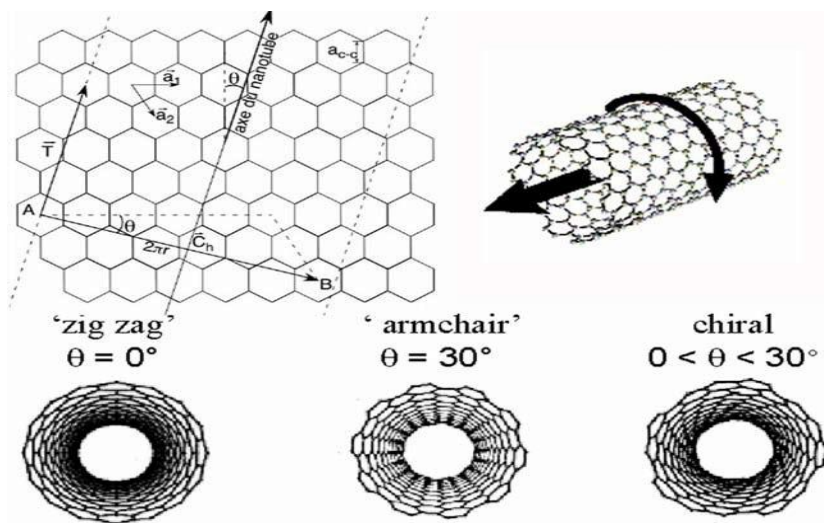
$$\text{Diamètre de tube : } d_t = \frac{\overline{Ch}}{\pi} = a \frac{\sqrt{3(n^2 + m^2 + nm)}}{\pi} \quad (\text{I.3})$$

avec  $a_{c-c} = 1,44 \text{ \AA}$  dans le cas du graphite

$$\text{Angle chiral: } \theta = \arctang \frac{3m}{m+2n} = \arccos \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad (\text{I.4})$$

avec a correspondant à la distance dans le plan entre les atomes de C ( $a = 1.44 \text{ \AA}$ ) ou de BN ( $a = 1.45 \text{ \AA}$ ).

nous le voyons sur la figure I.2



**Fig . I.2-** Schéma d'une feuille de graphène et des paramètres permettant de décrire la géométrie d'un nanotube. Schémas des différentes hélicités possibles pour un nanotube.

Il faut remarquer qu'il est possible de synthétiser tout type de nanotube de carbone monofeuillet alors que dans le cas des nanotubes de BN, les nanotubes monofeuillet de type zigzag sont préférentiellement synthétisés [8, 9, 10].

### **1.1.3 Description des nanotubes**

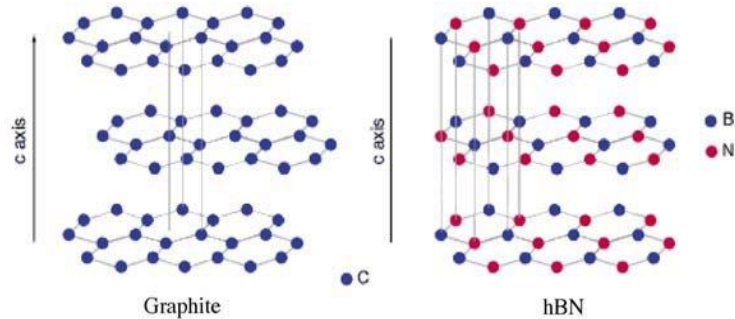
Les nanotubes peuvent être constitués de l'enroulement d'une (nanotubes monofeuillets) ou plusieurs (nanotubes multifeuillets) feuilles de graphène. La distance entre deux feuillets consécutifs sera égale à la distance entre plans dans le composé lamellaire de base (graphite ou nitrure de bore hexagonal), soit 3,44 °A pour les nanotubes de carbone. De plus, les nanotubes monofeuillets peuvent se présenter soit isolés, soit sous forme de fagots (ou faisceaux, bundles en anglais) organisés [195].

### **1.1.4 Les nanotubes de nitrure de bore**

#### **1.1.4.1 formes allotropiques de nitrure de bore**

Le nitrure de bore (BN) est un composé non naturel qui a été synthétisé pour la première fois en 1842 par Balmain [11, 12]. Le bore (n° atomique 5) et l'azote (n° atomique 7) étant situés de part et d'autre du carbone (n° atomique 6) dans la classification périodique, le nitrure de bore et le carbone sont isoélectroniques et leurs polymorphes sont similaires. Ainsi, le nitrure de bore existe sous quatre formes polymorphiques : le nitrure de bore hexagonal (équivalent du graphite), le nitrure de bore cubique (équivalent du diamant), le nitrure de bore wurztitique (équivalent du diamant hexagonal) et le nitrure de bore rhomboédrique.

Le nitrure de bore hexagonal est la phase stable la plus importante. Elle est semblable au graphite, et leurs paramètres cristallins sont très proches ( $a=0,25038$  nm et  $c=0,6661$ nm pour h-BN,  $a=0,2464$  nm et  $c=0,6738$  nm pour le graphite). L'alternance des atomes de bore et d'azote en lieu et place des atomes de carbone pour le graphite entraîne une spécificité du h-BN au sein duquel les hexagones sont empilés d'un feuillet à l'autre alors qu'ils sont décalés dans le graphite. En effet, dans le h-BN, chaque atome d'azote se superpose à un atome de bore et réciproquement, ce qui conduit à l'empilement des hexagones comme présenté sur la figure I.3.



**FIG. I.3** - Empilement des feuillets dans le graphite et le h-BN

Le h-BN est composé de feuillets d'hexagones de  $B_3N_3$  et sa géométrie est gouvernée par une hybridation  $sp^2$  [13]. A la périphérie des réseaux hexagonaux, on trouve des groupements NH et B(OH). La réelle formule brute du h-BN est par conséquent de la forme  $(NH)(BN)_x(BOH)$ . Au sein du réseau hexagonal, les liaisons entre les atomes de bore et d'azote consécutifs sont covalentes, et de longueur 1,45 °A. En revanche, les liaisons existant entre les différents feuillets sont nettement plus longues (3,44 °A) car de type Van der Waals.

Le h-BN est non toxique et transparent aux micro-ondes. Il est également moins sensible à l'oxydation que le graphite, puisque la température maximale d'utilisation de ce dernier en atmosphère oxydante est de 600°C [14] alors qu'elle est de 850 à 900°C pour le h-BN. A température ambiante, le h-BN est insoluble dans l'eau [15]. Enfin, contrairement au graphite qui est noir qu'il soit monocristallin ou non, le h-BN est transparent quand il est monocristallin et ne présente pas de défauts [16]. La couleur blanche et l'opacité généralement observées sont dues à l'existence de défauts structuraux ou d'impuretés.

– Les phases denses et stables à hautes pressions : le diamant et le BN cubique (c-BN,  $\alpha$ -BN ou z-BN). Elles présentent une hybridation  $sp^3$  (liaisons  $\sigma$ ) et cristallisent selon une maille de type blende (sulfure de zinc) dans le cas du c-BN : atomes de bore et d'azote tétracoordonnés avec des plans (111) de c-BN selon un empilement de trois

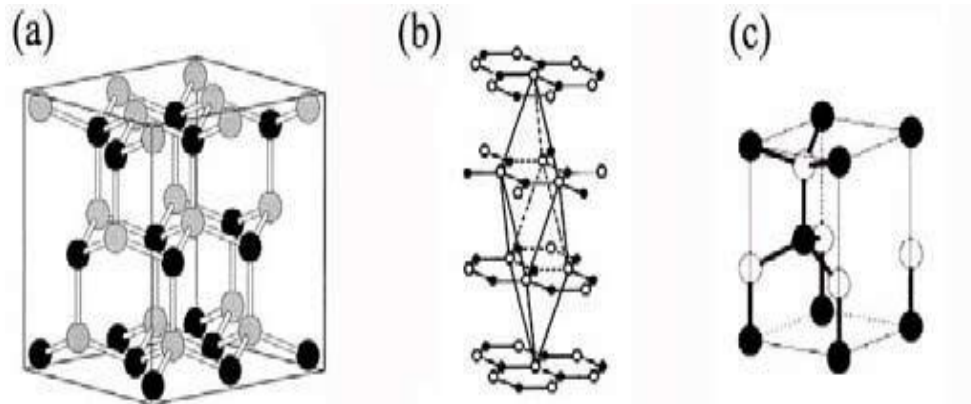
plans (ABCABC...). Ce dernier point a pour conséquence que leur groupe d'espace est différent (F43m pour le c-BN et Fd3m pour le diamant), comme le montre la figure I.4 (a). L'importance technologique et industrielle de cette phase cubique du BN mérite d'en détailler les propriétés.

En effet, les caractéristiques de cette phase, à savoir son grand gap indirect (6.4 eV) [17], sa grande dureté (deuxième matériau le plus dur après le diamant), sa bonne conductivité thermique et son inertie chimique font que ce matériau possède de multiples applications dans plusieurs domaines (l'optoélectronique, la microélectronique et la mécanique [18]).

Les méthodes de synthèse vont du dépôt en phase vapeur (CVD en anglais) [19] à la production à partir du h-BN par chauffage sous haute pression (2.5-7.5 GPa) et à haute température (1200-2000°C) en présence de métaux qui servent à la fois de solvants et de catalyseurs [20]. Néanmoins, signalons la difficulté rencontrée par toutes les équipes pour obtenir des phases pures de c-BN puisque des domaines de phase hexagonale peuvent se former lors de la synthèse [21].

En fait, les conditions de stabilité thermodynamique de la phase cubique ne sont pas clairement établies dans la littérature. D'après le diagramme de phase (P,T) de la figure I.5 (Vel et al. [22]), la phase cubique est stable à haute pression et à haute température comme son homologue, la structure diamant. Cependant, certains travaux théoriques mais aussi expérimentaux semblent indiquer qu'elle pourrait être stable à température et pression ambiantes [23, 24, 25].

– Les phases métastables à hautes pressions : le diamant hexagonal et le BN wurtzite (w-BN). Cette phase, dans le cas du BN, est structurellement identique à celle du c-BN (plans (111) formés par des atomes de bore et d'azote tétracoordonnés), mais cette fois l'empilement est de deux plans (AA'AA'...). Elle présente donc une hybridation également  $sp^3$ . Cette phase est uniquement stable à hautes pressions ( $\approx 10$  GPa) [26] et a été obtenue par compression statique à partir de h-BN, avec des températures inférieures à celles nécessaires pour la formation de c-BN [27].



**Fig. I.4** - Mailles élémentaires des différentes phases allotropiques du nitrure de bore : (a) cubique, (b) rhomboédrique et (c) wurtzite.

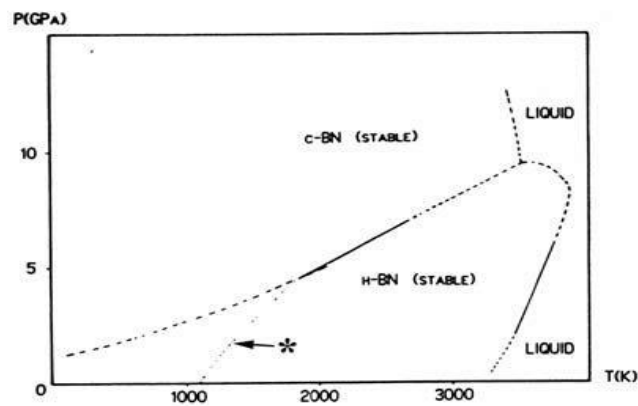
– Les phases rhomboédriques (r-C et r-BN) peuvent se voir comme une modification de la phase hexagonale (graphite et h-BN), avec un empilement de trois plans (ABCABC...), ce qui lui confère un groupe d'espace R3m [28]. L'hybridation de cette phase est  $sp^2$ , comme dans le cas du h-BN. Sa synthèse peut se faire par la réaction du bore avec de l'ammoniac à haute température et sous forte pression [26]. Notons également que les études réalisées sur cette phase sont peu nombreuses.

	<b>h-BN[6]</b>	<b>c-BN[35]</b>	<b>w-BN[35]</b>	<b>r-BN[34]</b>
<b>Paramètre de</b>	a = 0.25038	a = 0.3615	a = 0.2536	a = 0.2504
<b>Maille (nm)</b>	c = 0.661		c = 0.4199	c = 1.002
<b>Groupe d'espace</b>	P6 <sub>3</sub> /mmc (D <sub>6h</sub> )	F <sub>43m</sub> (T <sub>d</sub> )	F <sub>43m</sub> (T <sub>d</sub> )	R3m
<b>Densité (g / cm<sup>3</sup>)</b>	2.279	3.45	3.485	3.486
<b>Distance B-N (nm)</b>	0.1446 (*)	0.1565	0.1555	0.145 (*)

**Tab .I.1-** Récapitulatif des valeurs structurales des différents polymorphes cristallisés de nitrure de bore. (\*) Dans le même plan.

Il faut tenir compte également des trois phases désordonnées :

- Le BN amorphe (a-BN).
- La phase turbostratique (t-BN) est fondée sur un arrangement hexagonal des atomes dans le plan. Cependant, à l'inverse des phases h-BN et r-BN, il existe dans cette phase un désordre aléatoire des orientations des hexagones dans chacun des plans



**Fig. I.5** - Diagramme Pression/Température pour le nitrure de bore (phases cubique et hexagonale), d'après Vel et al. [20]. (\*) Cette ligne fine en pointillés provient des travaux présentés par [21, 22].

(0002) même si l'empilement de ces plans est bien défini. Ceci se traduit dans le diagramme de diffraction de RX par des taches étalées et diffuses [29] bien différentes de celles des deux autres phases (absence de l'ordre cristallographique à trois dimensions). Une autre caractéristique structurale de cette phase est l'augmentation de la distance entre plans,  $d_{0002}$ , par rapport au h- et r-BN.

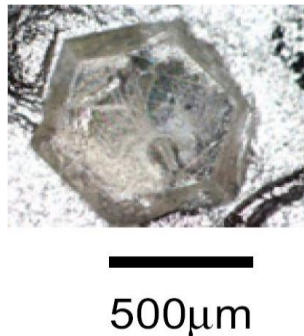
- La dernière de ces phases désordonnées est le BN *meso-hexagonal* (m-BN). C'est une phase intermédiaire entre les phases turbostratique et hexagonale, qui possède un ordre cristallin partiel à trois dimensions [29, 30].

Signalons aussi une autre différence entre les phases pures de carbone et celles de nitrure de bore : le caractère ionique de ce dernier. En effet, il est bien connu que les cristaux III-V sont des composés essentiellement covalents, avec une concentration

résiduelle d'excès de charge autour des cœurs des ions (partiellement ioniques). En tenant compte de la relation de Pauling [31] :

$$\text{Caract.ionique} = 1 - \exp [-1/4 (x_a - x_b)^2] \quad (\text{I.5})$$

où  $x_a$  et  $x_b$  sont les valeurs d'électronégativité des atomes mis en jeu. Etant donné que l'électronégativité du bore est égale à 2.0 et celle de l'azote est égale à 3.0, le caractère ionique des composés de BN est de 22 %. Ce point signe une différence structurale très importante entre le h-BN et le graphite.



**Fig. I.6-** Photographie d'un monocristal de h-BN synthétisé par la méthode de gradient de température [32].

#### I.1.4.2 Méthodes de synthèse

Jusqu'en 2004, seules quelques méthodes par voie chimique [33, 34, 35, 36] et par décomposition chimique en phase vapeur (CVD) [37, 38, 39, 40] étaient utilisées pour synthétiser des films ou des poudres de hBN de pureté et de cristallinité variables. En 2004, Watanabe et al. ont pour la première fois produit des monocristaux de h-BN transparents et de taille millimétrique (Figure I.6) par une méthode de gradient de température sur un mélange hBN/solvant [41]. Cette méthode avait d'abord été mise en place pour la croissance du c-BN [42] puis a été adaptée pour le hBN à partir du diagramme de phase c-BN/h-BN [43].

La synthèse de monocristaux de h-BN ou c-BN est toujours réalisée sous atmosphère inerte (atmosphère sèche d'azote) pour éviter toute contamination au dioxygène ou aux molécules d'eau de l'atmosphère. Un premier recuit de poudres

commerciales de h-BN est d'abord réalisé au delà de 2100 °C afin de diminuer la concentration initiale en oxygène.

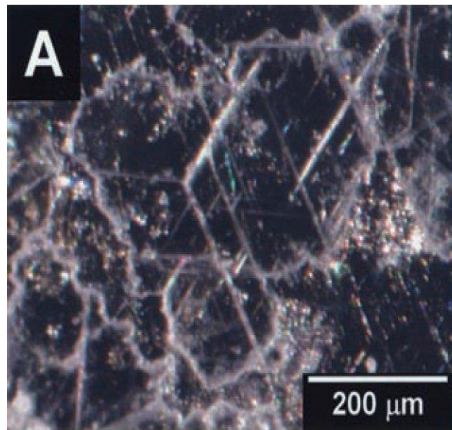
Les poudres résiduelles sont ensuite placées dans une capsule de molybdène (Mo) avec un solvant de  $Ba_3B_2N_4$ . L'ensemble est ensuite compressé entre 4 et 5 GPa et chauffé entre 1500 °C et 1650 °C pendant 20 à 80h.

Une deuxième méthode a ensuite été développée par la même équipe en se basant sur les travaux de Ishii et Sato [44], mais cette fois, à pression atmosphérique [45]. Cette technique consiste à placer des poudres de h-BN dans un creuset surmontées d'un solvant métallique : nickel (Ni) ou Ni-Mo. Etant donné que le bore est très soluble dans le nickel à haute température (30 % en masse à 1550 °C) et que l'azote se dissout mieux dans un mélange Ni-Mo, il est possible de recristalliser du h-BN à la surface d'un disque Ni- Mo après chauffage sous atmosphère d'azote entre 1350 °C et 1500 °C pendant 12 heures. C'est à ce jour la seule méthode d'épitaxie en phase liquide qui a permis de synthétiser des monocristaux de h-BN de l'ordre de plusieurs centaines de microns (Figure I.7). Très récemment, cette méthode a été renouvelée avec succès par la même équipe en utilisant un solvant métallique de Ni-Cr [46].

La dernière méthode de croissance récente produisant des monocristaux de h-BN de quelques centaines de microns a été publiée par Feigelson et al. [47]. Des monocristaux de h-BN ont été synthétisés par une technique de gradient de température en solution de sels de nitrure ( $Li_3N/BaF_2$ ) sur un cristal de BN pyrolytique (p-BN). Le point faible de cette technique par rapport à celles de l'équipe de Watanabe est que les cristaux de h-BN formés sont récoltés à la surface du cristal de p-BN et que le taux d'impuretés (carbone ou oxygène) n'est pas encore contrôlé.

Toutes les autres méthodes de synthèse ne permettent de produire à ce jour que du h-BN polycristallin de taille microscopique : la méthode par voie amide (réaction de l'oxyde de bore ou de l'acide borique avec des agents réducteurs en présence de composés azotés actifs à environ 900°C) [48], la réduction carbothermique (méthode par voie amide avec le carbone comme agent réducteur) [49], la CVD (dépôt d'un précurseur volatil à base de bore et d'azote sur un substrat amorphe ou cristallin) [38, 39, 40], la voie polymère (pyrolyse de précurseurs polymères borés) [50] ou d'autres voies à haute température [44, 51].





**Fig. I.7** - Micrographie d'un monocristal de h-BN synthétisé à pression atmosphérique [45].

Il est important de noter que les propriétés intrinsèques d'un matériau et notamment ses propriétés optiques ne peuvent être quantitativement interprétées que lorsque sa qualité cristalline et sa pureté sont connues et contrôlées. Dans le cas du h-BN, le contrôle de la synthèse et de la qualité du cristal formé n'ayant été possible qu'à partir de 2004, on comprend que ses propriétés optiques soient encore assez mal connues et peu étudiées.

### **I.1.4.3 Propriétés générales**

Du fait de sa structure en feuillets et de la faiblesse des liaisons BN entre les plans, le h-BN est un bon lubrifiant à la fois à basse et haute température (jusqu'à 900 C°) et même sous atmosphère oxydante. D'ailleurs, son utilisation en tant que lubrifiant est particulièrement intéressante dans les cas où le graphite est inutilisable du fait de sa bonne conductivité électrique ou de sa réactivité chimique. Cette propriété de lubrifiant se vérifie également sous vide, ce qui confère au h-BN un intérêt certain dans le domaine de l'espace. D'ailleurs, le h-BN peut être inclus dans des céramiques, des résines, des plastiques ou d'autres matériaux afin de leur donner des propriétés autolubrifiantes.

Le h-BN ayant une faible constante diélectrique ( $\epsilon_{//}=2.53$  et  $\epsilon_{\perp} = 4.4$  [52]) et étant isolant, il est utilisé en optoélectronique et en électronique en tant que substrat pour les semiconducteurs, comme hublot transparent aux microondes ou encore comme masque lithographique de rayons X. En ce qui concerne sa réactivité chimique, le h-BN est assez inerte chimiquement ce qui lui permet d'être couramment utilisé comme

creuset ou comme protection de ther-mocouple. Par ailleurs, le h-BN possède des qualités mécaniques remarquables, avec un module de traction élevé (20-35 GPa) et une résistance à la compression élevée (30-120 MPa) [50]. Les propriétés élastiques d'un monocristal de hBN synthétisé par l'équipe de Watanabe ont été mesurées très récemment [53].

#### **I.1.4.4 Synthèses des nanotubes de nitrure de bore**

La synthèse des nanotubes de BN peut se faire par le biais des méthodes que nous venons d'évoquer pour la production du h-BN et grâce à d'autres techniques qui ont servi pour l'obtention de nanotubes de carbone. Il s'agit de méthodes haute température (> 2000 °C) ou de méthodes basse / moyenne température (entre 300 et 2000 °C).

La synthèse des NTs de BN a attiré l'attention des scientifiques ces dernières années. Néanmoins, par rapport au nombre d'études réalisées sur la production de NTs de carbone, celui des NTs de BN est très faible. Nous avons répertorié, dans le tableau I.2, les synthèses les plus significatives et les résultats obtenus. Sur la Fig. I.8, nous montrons une sélection des NTs produits parmi les travaux de certaines des équipes citées précédemment, pour illustrer les différences structurales de ces tubes que nous avons soulignées.

En examinant les différents procédés de synthèse, nous remarquons l'influence de plusieurs paramètres (température, pression, nature des sources de bore et d'azote) sur la formation des NTs de BN, concrètement sur : leur structure cristalline (parfaitement cylindrique ou en forme de bambou), leur longueur et leurs diamètres. Ces paramètres dépendent fortement de la méthode de synthèse employée. Leur analyse à partir des travaux présentés dans la section précédente, nous permet de connaître les conditions nécessaires pour la production des tubes et nous fournit des indices importants pour la compréhension des mécanismes mis en jeu :

– *Sources de bore* : le bore peut provenir :

(1)- de l'oxyde de bore comme c'est le cas pour certaines synthèses CVD [54, 55, 56, 57, 58], pour quelques-unes qui suivent un mécanisme VLS [59, 60, 57, 61] et pour toutes les synthèses qui se font par la voie carbothermique [62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69].

(2)- de la décomposition du BN (hexagonal ou cubique) dans le cas de l'ablation/vaporisation laser [70, 71, 72, 73, 74], de la torche plasma [75] ou de certaines expériences d'arc électrique [76, 77].

(3)- de la décomposition de borures (d'hafnium, de zirconium, de lanthane) [78, 79], de bore [80] et de mélanges de poudres de bore et de borure [81, 82, 83], par arc électrique.

(4)- des poudres de bore, de h-BN ou de borures préalablement traités selon un processus de broyage avec des sphères métalliques ("ball milling") [84, 85, 86]

(5)- directement des poudres de bore ou de h-BN, dans les deux premières synthèses fondées sur un mécanisme VLS [87, 88].

(6)- des précurseurs composés du bore, dans quelques synthèses CVD [89, 90, 91, 92].

– *Sources d'azote* : dans la plupart des cas, l'apport d'azote se fait en phase gazeuse : ammoniac ou azote, à l'exception :

(1)- des synthèses qui font intervenir des réactions chimiques où il existe des composés contenant de l'azote [89, 90, 91, 92].

(2)- d'une seule synthèse parmi celles d'arc électrique [76] et dans celle par torche plasma [75], où l'azote provient directement de la décomposition du nitrure de bore.

– *Température* : la température dépend de la source de bore employée :

(1)- si le bore provient de la décomposition d'une cible en BN (arc électrique et vaporisation laser) ou d'un borure ou du bore (arc électrique), elle est supérieure à 2500°C.

(2)- dans le cas où le bore est sous forme d'oxyde et en phase vapeur, elle est comprise entre 1300 et 1700 °C.

(3)- une température proche de 1300 °C est atteinte chaque fois que la synthèse se fait par le mécanisme VLS ou par "ball milling" .

(4)- la température est comprise entre 400 et 1100°C, quand le bore provient des précurseurs volatils, comme dans certaines synthèses CVD

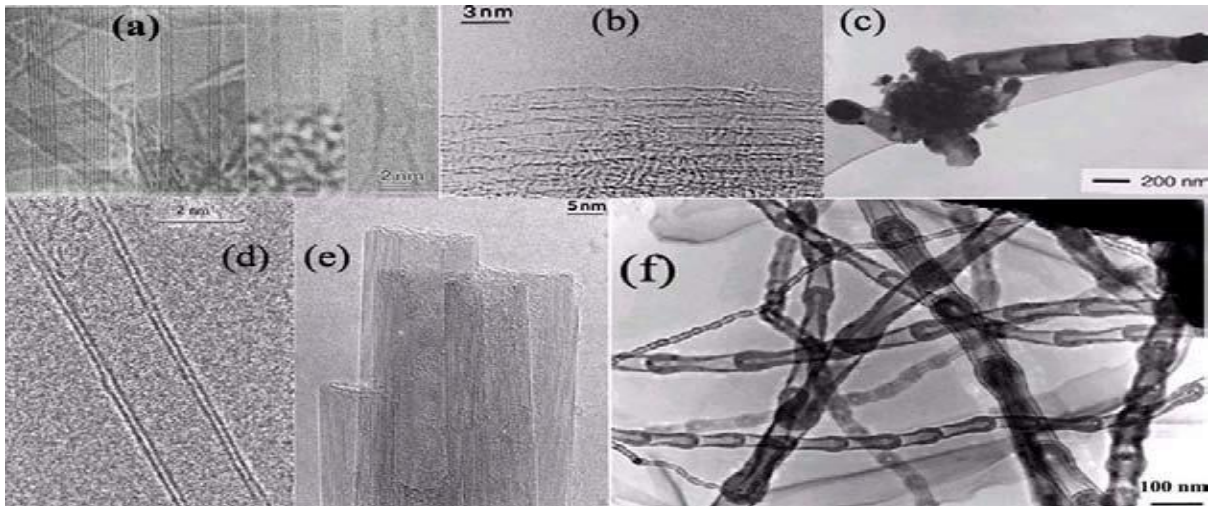
– *Particules catalytiques* : Contrairement au cas de la synthèse de NTs de carbone, où la participation des catalyseurs à la croissance des tubes est bien définie [93] et dont le rôle commence à être élucidé, dans le cas des NTs de BN, ces deux aspects ne sont pas encore assez bien connus. Les principaux catalyseurs employés ont été le fer, le cobalt, le nickel, l'aluminium, comme pour le cas des NTs de carbone. Notons que

l'utilisation de ces particules catalytiques entraîne un inconvénient de taille lorsqu'il s'agit de faire des études macroscopiques des produits bruts de synthèse. En effet, elles sont difficiles à séparer des tubes, d'où leur influence plus que probable sur ces mesures.

Procédé employé	Résultat
(1) A 1100 °C, décomposition de : Cs+B <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>3</sub> H <sub>3</sub> [89]	(1) Filaments tubulaires vides $\phi = 3 \mu\text{m}$ ; L = 50-100 $\mu\text{m}$
(2) A 1100°C, décomposition de : ZrB <sub>2</sub> +B <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +NH <sub>3</sub> (N <sub>2</sub> ) [94]	(2) Filaments : $\phi = 0.1 \mu\text{m}$ ; L = 1-10 $\mu\text{m}$
(3) Arc élec. : Anode W + h-BN et cathode Cu ; Gaz : He [76]	(3) 1 <sup>ère</sup> synth. BNNTs MW (7-9) avec particules de W; courts.
(4) Arc élec. : Deux électrodes HfB <sub>2</sub> N <sub>2</sub> à 700 mbar [78]	(4) Mélange SW (1 <sup>ère</sup> synth.) et MW $\phi \approx 2.5 \text{ nm}$ ; L > 200 nm
(5) Hautes Pressions(5-15 GPa) : $\mu$ -cristaux c-BN, chauffés par laser sous N <sub>2</sub> [70].	(5) Faible quantité MW (3-8 parois) et de faible longueur.
(6) A 1200 °C, sous N <sub>2</sub> , décomposition de : B amorph + Li dans creuset h-BN [87]	(6) NTs MW + Part Li $\phi \approx 3 \text{ nm}$ ; Coques vides.
(7) Réaction de Substitution : à 1500°C C(NTs)+B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> +N <sub>2</sub> [62]	(7) MWNTs BN et aussi B <sub>x</sub> C <sub>y</sub> N <sub>z</sub> $\phi$ et L $\approx$ C-NTs
(8) Ablation laser : cible (h-BN+Ni+Co) dans un four à 1200°C, flux 6= gaz [71]	(8) Mélange SW et MW, L < 0.1 $\mu\text{m}$ et particu. Ni et Co.
(9) Torche Plasma : Disque de BN compressé gaz plasma Ar-H <sub>2</sub> (100 Torr) [75]	(9) NTs multiparois $\phi = 5-20 \text{ nm}$ ; L > 300 nm
(10) Traitement $\geq 1000$ °C poudres broyées de B sous NH <sub>3</sub> [84]	(10) NTs multiparois $\phi = 25-150 \text{ nm}$
(11) CVD : Dépôt sur Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> précurseur B <sub>3</sub> N <sub>3</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub> , 750°C / 16 Torr [90]	(11) NTs dans moule d'alumine $\phi = 0.27-0.36 \mu\text{m}$ ; L $\approx 20 \mu\text{m}$
(12) Arc électrique électrod. riches B et avec mélange Ni et Co [80]	(12) Grande Quantité DW $\phi = 2-7 \text{ nm}$ ; Coques remplies.
(13) Traitement 1200-1500 °C sous Ar B+Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> +NH <sub>3</sub> [59]	(13) NTs multiparois $\phi = 7-20 \text{ nm}$ ; L > 1 $\mu\text{m}$
14) Vaporisation laser : cible h-BN sous N <sub>2</sub> [95]	(14) Grande quantité SW $\phi = 1-2 \text{ nm}$ ; L $\leq 1 \mu\text{m}$

**Tab. 1.2** – Récapitulatif des synthèses des NTs (et filaments) de BN les plus représentatives.  
 $\phi$  : diamètre et L : longueur.

De l'ensemble de ces informations, nous retenons pour notre travail de synthèse par vaporisation laser les renseignements sur la manière dont le bore et l'azote participent à la synthèse des NTs, à savoir, fondamentalement :



**Fig. I.8** – Différents NTs (mono et multiparois) provenant des groupes suivants : (a) Loiseau et al. [78] (arc électrique), (b) Golberg/Bando et al. [96] (réaction de substitution, monoparoi), (c) Chen et al. [85] ("ball milling"), (d) Zettl et al. [97] (arc électrique), (e) Golberg/Bando et al. [65] (réaction de substitution, multiparois) et (f) Ma/Bando et al. [98] (CVD).

1. **Bore** : par du bore atomique provenant de la décomposition du BN à des températures supérieures à 2500 °C et/ou par des vapeurs d'oxyde à des températures proches de 1500°C.
2. Quant aux sources d'**azote**, elles sont aussi majoritairement deux : atomique, ayant son origine, comme dans le cas du bore, dans la décomposition du BN, et moléculaire/atomique (plutôt cette dernière, aux température mises en jeu) provenant des gaz injectés dans la chambre de réaction (laser, arc électrique, four...).

Il est intéressant aussi de comparer les différentes méthodes pour se rendre compte des avantages et des inconvénients qu'elles présentent les unes par rapport aux autres:

- Les méthodes de haute température (arc électrique et vaporisation/ablation laser) fournissent principalement des NTs multiparois. Néanmoins, quelques expériences ont aussi produit des NTs monoparoi :

(1)- en faible quantité, comme dans les travaux de Loiseau et al. [78] et de Saito et al. [79] avec la méthode de l'arc électrique ou dans ceux de Golberg et al. [74] avec le procédé d'ablation laser.

(2)- en grande quantité, dans nos travaux de vaporisation laser. Notons les avantages de ces techniques : dans le cas de l'arc électrique, son faible coût et sa simplicité, et dans le cas du laser, la bonne qualité cristalline des produits synthétisés et son adéquation pour la réalisation d'études de croissance in-situ. De plus, ces méthodes réalisent la synthèse des NTs dans un temps assez court ( $< 2$  hrs). Les inconvénients de ces techniques sont : dans le cas de l'arc électrique, l'impossibilité de travailler en continu, ce qui limite la quantité de produit obtenu, et pour l'ablation/vaporisation laser, son coût élevé.

– Les méthodes de basse/moyenne température sont d'une application facile, peu coûteuse et avec une grande versatilité. Elles procurent des NTs essentiellement multiparois (sauf l'expérience réalisée par Golberg et al. [65]), avec des diamètres importants (entre quelques dizaines et une ou deux centaines de nanomètres) et avec des structures qui ne sont pas très bien cristallisées. Actuellement, leurs inconvénients sont liées au manque de qualité des produits obtenus, comme nous venons de l'évoquer, et dans certains cas (celui de "ball milling"), à la longueur du temps de préparation des poudres de départ.

#### **I.1.4.5 Propriétés des nanotubes BN et applications**

Les nanotubes de BN possèdent certaines propriétés (rigidité mécanique et grande conductivité thermique) proches de celles des nanotubes de carbone (tableau I.3) du fait de leur identité structurale. Cependant, les nanotubes de BN présentent des propriétés exclusives grâce à leur composition chimique. Effectivement, comme nous l'avons montré dans la section précédente, tous les composés de nitrure de bore sont des isolants.

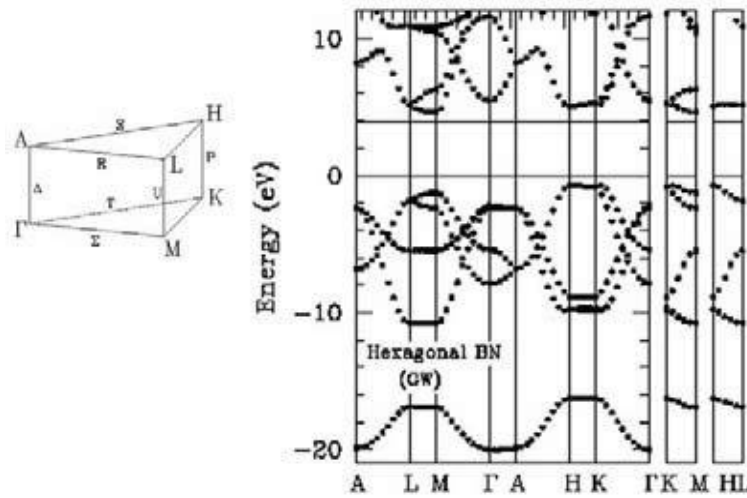
Caractéristiques/Propriétés	C-NTs	BN-NTs
<b>Electroniques</b>	Métalliques ou semiconducteurs [100, 101]	Isolants ,gap $\approx 5.5$ eV [99] (*) $\approx 5.8$ eV [102]
<b>Mécaniques</b> ( <i>Module de Young</i> )(**)	$\approx 1$ TPa [105]	$1.22 \pm 0.24$ TPa [103] 722 GPa [104]
<b>Stabilité Thermique / Résistance à l'Oxydation</b>	$\approx 400^\circ\text{C}$ [107, 106]	700 - $900^\circ\text{C}$ [106]

**Tab. I.3** – Comparaison des différentes propriétés, avec des valeurs expérimentales des deux sortes de NTs : carbone et BN. (\*) Valeur théorique (approche GW). (\*\*) Pour des NTs multiparois.

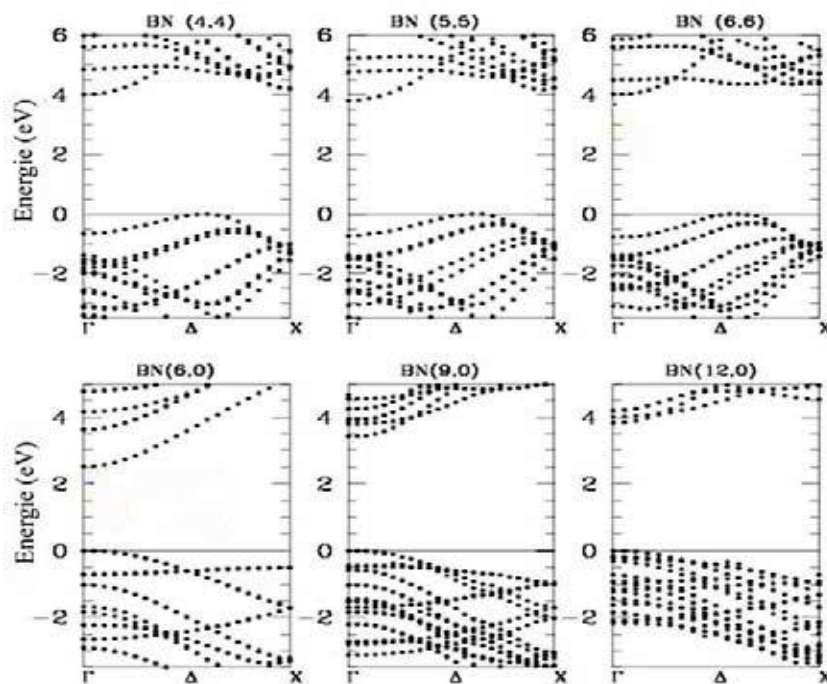
#### I.1.4.5.a Propriétés électroniques

Nous venons de signaler que les NTs de BN sont des isolants. Dans leurs travaux, Blase et al. ont établi la valeur de la bande interdite par des calculs de structure électronique, dans l'approximation GW, comme étant supérieure à 5.5 eV [108] pour des tubes de diamètre supérieur à  $9.5 \text{ \AA}$ . Ces auteurs ont montré que cette valeur est indépendante de l'hélicité et du nombre de parois des tubes. La Fig. I.9 illustre ce résultat. Elle présente la structure de bandes pour différents tubes : plusieurs diamètres et hélicités.

lorsque nous interpréterons les expériences de spectroscopie de pertes d'énergie dans la région des pertes proches.



**Fig. 1.9** – Structure de bandes pour le h-BN, obtenue par des calculs sous l’approche GW, d’après Blase et al. [109]. Les deux lignes horizontales correspondent à la largeur de la bande interdite calculée avec la LDA.



**Fig. 1.10** – Structures des bandes des différents tubes de nitrure de bore, calculées d’après Rubio et Blase [110, 99].

L’uniformité de la bande interdite peut se comprendre facilement à l’aide d’un modèle de repliement de zone. En effet, comme il est possible de le voir dans la



structure de bandes de la feuille de h-BN (Fig. I.10), les bandes sont assez plates dans la direction K- M (points entre lesquels s'établit le gap). Alors la valeur ne se verra pas affectée lors du repliement pour considérer le tube.

Dans d'autres travaux également théoriques, il a été établi que cette valeur de gap peut être modifiée en appliquant :

- (i) une déformation latérale au tube : Kim et al. [111], grâce à des calculs ab-initio (DFT-LDA) ont montré que pour un NT zig-zag (9,0), le gap peut varier entre 3.5 et 1 eV (valeurs LDA) en appliquant une déformation perpendiculaire à l'axe du tube supérieure à 10 GPa. Cette modulation du gap n'est pas observée dans le cas des NTs armchair.

En effet, Rubio et al. avaient remarqué, par des calculs de liaisons fortes, que la valeur du gap varie (diminue) plus rapidement dans le cas des tubes zig-zag que dans celui des armchair lorsque le diamètre diminue [110].

- (ii) Récemment, Khuo et al. ont signalé que l'application d'un champ électrique transversal ( $\approx 0.1 \text{ V}/\text{\AA}$ ) fait diminuer fortement la valeur du gap (2-3 eV) [112]. Ces auteurs expliquent que cet effet est dû au mélange des états des orbitales moléculaires dans le haut de la bande de valence (Highest Occupied Molecular Orbitals-HOMO) et, de son côté, le même phénomène se produit dans les états des orbitales moléculaires du bas de la bande de conduction (Lowest Unoccupied Molecular Orbitals-LUMO). Ces phénomènes entraînent une séparation spatiale des électrons-trous à travers l'axe du tube, ce qui serait à l'origine de la réduction du gap. Cette modulation de la bande interdite est plus importante quand le diamètre du tube considéré est grand. Notons que cet effet (modulation du gap via l'application d'un champ électrique transversal) a été aussi signalé dans le cas des NTs de carbone. Toutefois, pour les NTs de BN, cette modulation est plus accentuée et a des conséquences plus intéressantes en ce qui concerne les applications potentielles de ces NTs.

Il est intéressant de pouvoir moduler les propriétés électroniques des tubes de BN, par exemple, en les dopant avec du carbone. Dans ce sens, Meunier et al. [113] ont étudié, d'un point de vue théorique, ce type d'hétérostructures (jonctions de tubes de BN et de tubes de carbone). Ces auteurs ont avancé la possibilité de réaliser des dispositifs avec une large gamme de valeurs de gap, à la base de ces hétérojonctions

tubulaires. Ils ont trouvé également que ces structures présentaient des champs de polarisation spontanée qui pouvaient augmenter les propriétés d'émission de champ des NTs d'une façon importante. En effet, la présence d'un champ de polarisation peut être employée pour diminuer le travail de sortie des pointes BN/C, ce qui provoque une grande augmentation de l'émission (de l'ordre de 2 ordres de grandeur).

Du point de vue expérimental, la première mesure de transport électronique a été réalisée par Cumings et Zettl [114, 115] en 2001, dans un microscope électronique en transmission et sur des tubes majoritairement double parois (diamètre  $\approx 2.7$  nm). Ils ont observé que les NTs de BN, à faible tension ( $< 10$  V), sont de bons diélectriques et qu'ils ne montrent pas de grande résistance (dans ces valeurs), contrairement aux NTs de carbone. Mais, ils ont remarqué qu'à des tensions plus importantes, certains NTs de BN permettent au courant de passer, d'une manière réversible et non destructive. La limite de rupture se produit à une tension entre 12 et 25 V. Ils attribuent cette conduction du courant à l'existence de défauts dans les tubes ou à un dépôt amorphe qui les enrobe. Ces auteurs ont aussi étudié les possibilités d'émission de champ des NTs de BN. Ils ont trouvé que les NTs de BN montrent un champ d'émission stable, avec moins de bruit que dans le cas des NTs de carbone (ce bruit est attribué aux molécules de gaz absorbées à la surface des tubes).

Radosavljevic et al. [116] ont étudié les propriétés de transport des NTs monoparoi synthétisés à l'ONERA en les déposant entre deux électrodes en nickel. Ces auteurs ont confirmé que les NTs de BN sont semiconducteurs mais dopés p. Ils attribuent ce dopage à la présence de particules de bore à l'extrémité des tubes [95] ou à d'autres défauts des tubes. Ils ont également montré que le transport électronique est dominé par l'émission thermoionique au-dessus des barrières Schottky et non pas en les traversant par effet tunnel, comme c'est le cas des NTs de carbone.

Le microscope et la spectroscopie à effet tunnel (en anglais, STM et STS, respectivement) sont des techniques très bien adaptées pour sonder les propriétés électroniques des NTs, car il est alors possible d'accéder simultanément à la structure atomique et à la densité d'états [117]. Deux équipes sont parvenues à le faire dans le cas des NTs de BN, en 2003. La première, celle de Czerw et al. [118], a étudié des

NTs multiparois de grand diamètre (compris entre 5 et 20 nm), synthétisés par arc électrique et déposés sur un substrat en graphite. Les expériences STS indiquent une valeur du gap variant entre 4.5 et 4.8 eV et un travail de sortie des électrons (hauteur de la barrière tunnel) de  $6.3 \pm 0.7$  eV. La deuxième équipe, celle de Ishigami et al. [119], a étudié les tubes double parois (provenant de l'équipe Zettl) [80] déposés sur un substrat d'or. Leurs résultats sont ambigus car ils trouvent des valeurs de gap assez différentes, entre 3.8 et 8.7 eV; cette dernière étant la plus répandue parmi les mesures qu'ils ont effectuées. Ces auteurs considèrent qu'une valeur aussi élevée et inattendue oblige, pour son interprétation, à tenir compte de la résistance entre le NT et le substrat. Notons que ces deux groupes signalent également :

- (i) la difficulté de réaliser l'imagerie ou la spectroscopie avec le STM/STS sur des semiconducteurs à grand gap (comme dans le cas du BN) déposés sur des substrats (normalement métalliques).
- (ii) la difficulté d'interprétation de ces résultats à cause de l'influence du substrat ou des impuretés présentes à la surface du matériau à étudier [118, 119].

Notons que dans tous les cas, les résultats aussi bien théoriques qu'expérimentaux prouvent que les nanotubes de BN possèdent une valeur de bande interdite élevée, ce qui les rend très prometteurs pour des applications dans le domaine de l'opto-électronique.

#### **I.1.4.5.b Propriétés mécaniques**

Les bonnes qualités mécaniques du h-BN amènent à penser qu'il serait intéressant de les retrouver dans les NTs de BN. C'est effectivement le cas et elles s'y trouvent même augmentées.

Le premier travail d'étude de ces propriétés date de 1998. Chopra et Zettl [120] ont mesuré le module de Young des NTs biparois de BN en mesurant l'amplitude des vibrations thermiques dans un TEM à température ambiante. Ils ont trouvé une valeur de  $1.22 \pm 0.24$  TPa, soit un module de Young du même ordre de grandeur que celui des NTs de carbone et bien supérieur à celui du h-BN mesuré dans le plan.

Récemment, Suryavanshi et al. [121] ont mesuré une valeur d'élasticité qui varie entre 505 et 1031 GPa, avec une valeur moyenne de 722 GPa. Ces mesures ont été réalisées sur des NTs multiparois et avec la méthode des résonances électromagnétiques dans un TEM.

Du côté théorique, Hernández et al. [122] ont calculé, avec la méthode de liaisons fortes, le module de Young pour des NTs de BN et de carbone. Ils ont trouvé que celui-ci est toujours inférieur à celui des NTs de carbone et dépendant du diamètre des tubes. Dans le cas des NTs de BN, la valeur trouvée varie entre 0.837 et 0.912 TPa, pour des diamètres compris entre 0.81 et 2.08 nm.

Dumitrica et al. [123], à l'aide de la dynamique moléculaire et des calculs ab-initio dans la DFT, ont étudié les structures des dislocations qui peuvent naître dans les NTs sous tension importante. De même, ils ont remarqué que les NTs de BN possèdent une tension critique plus élevée que celui des NTs de carbone. Cela confirme les résultats de leurs travaux précédents, [124] où ils avaient montré que les NTs de BN sont plus résistants à la rupture que les NTs de carbone.

Notons également que même si les NTs sont très rigides dans la direction de l'axe du tube, ils sont extrêmement flexibles dans la direction perpendiculaire à celui-ci. Dans le cas des NTs de carbone, plusieurs travaux ont montré la facilité avec laquelle un nanotube peut se courber (même avec des angles très importants), se déformer et se tordre selon son axe. Ce point a son origine dans l'anisotropie structurale des phases lamellaires graphite et h-BN.

#### **I.1.4.5.c Propriétés électro-mécaniques**

Un aspect très intéressant des NTs de BN est leur caractère piézoélectrique. En effet, d'après les calculs récents de Mele et Kral [125] et ceux de Nakhmanson et al. [126], les NTs de BN sont d'excellents matériaux piézoélectriques légers. En particulier, Nakhmanson et al. ont montré, à l'aide de calculs ab-initio, que les NTs zig-zag et la plupart des NTs chiraux ne sont pas pyroélectriques, car les composantes

ioniques et électroniques de la polarisation s'annulent par effet de symétrie. Ils ont aussi observé que la rupture de cette symétrie, par exemple quand les tubes sont organisés en fagots ou par l'effet de distorsions élastiques, induit des champs de polarisation spontanée dans les tubes comparables à ceux des semiconducteurs de structure wurtzite (comme l'oxyde de zinc (w-ZnO)) et supérieurs à ceux des polymères polaires. De plus, étant donné que les propriétés mécaniques des tubes sont meilleures que celles de ces polymères, il est facile d'imaginer que les NTs de BN peuvent avoir des applications nanoelectromécaniques, comme actuateurs ou nanosenseurs.

#### **I.1.4.5.d Propriétés vibrationnelles**

L'étude des propriétés vibrationnelles des NTs de carbone a fourni des renseignements très importants (connaissance de la dispersion en diamètre, caractère métallique ou semiconducteur des tubes) par le biais de la spectroscopie Raman et en s'appuyant sur des calculs (de constantes de force, ab-initio). C'est pour cette raison que nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés vibrationnelles des NTs de BN). Remarquons que le nombre de travaux réalisés, aussi bien théoriques qu'expérimentaux, est beaucoup moins important dans le cas des NTs de BN que dans celui des NTs de carbone. Citons du côté théorique, les travaux suivants :

- (i) Sanchez-Portal et E. Hernández [127] ont calculés avec une méthode de liaisons fortes les modes de phonon des NTs de BN.
- (ii) Pour calculer également les modes de phonon, Popov [128] a employé un modèle semi-empirique, "Valence-Shell". Il a aussi simulé les spectres Raman des NTs à l'aide d'un modèle de polarisabilité de la liaison.
- (iii) Xiao et al. [129], ayant comme but le calcul de la chaleur spécifique des tubes, ont étudié les courbes de dispersion de phonons et la densité d'états vibrationnels, en employant un modèle de constantes de force.

### I.1.4.5.e Propriétés chimiques

Comme nous l'avons vu précédemment, le h-BN est un matériau stable chimiquement et résistant à l'oxydation jusqu'à des températures proches de 900°C [30]. On peut s'attendre alors à ce que les nanotubes de nitrure de bore se comportent de façon semblable. Effectivement, Chen et al. [130] ont montré récemment que les NTs multiparois sont stables à des températures proches de 700°C mais qu'en revanche, ils s'endommagent fortement à 900°C sous air, avec en particulier une ouverture de leurs extrémités.

*Remplissage des tubes* : le nitrure de bore en général présente une excellente protection chimique et une très bonne isolation électrique et thermique et l'on peut penser que ces propriétés se transposent aux NTs. Il est alors envisageable d'utiliser ces derniers comme cages protectrices d'éléments ou de composés placés à l'intérieur. Dans cette voie, plusieurs groupes sont parvenus à synthétiser des NTs remplis (multiparois dans tous les cas) ou à les remplir après leur synthèse avec des fullerènes ("peapods") [131] ou avec des composés cristallins :

- (1) - le carbure de silicium [64].
- (2) - le cobalt et le fer-nickel [132].
- (3) - l'oxyde de magnésium [133].
- (4) - le borate d'aluminium [134].
- (5) - le borure de calcium [135].

*Le stockage de l'hydrogène* : les matériaux nanostructurés, et plus concrètement les NTs, sont de bons candidats car ils présentent l'avantage d'avoir des surfaces spécifiques importantes et une structure hautement poreuse. Expérimentalement, Ma et al. [98] ont étudié l'adsorption de l'hydrogène dans les NTs de BN. Ils rappellent que des travaux faits sur des NTs monoparois de carbone ont montré que les NTs semiconducteurs permettaient probablement une meilleure adsorption de l'hydrogène. Etant donné la difficulté actuelle à faire le tri entre NTs semiconducteurs et NTs métalliques de carbone, l'utilisation des NTs de BN, qui sont tous des isolants avec une grande stabilité chimique et thermique, paraît très prometteuse. Ma et al. ont fondé leur étude sur deux sortes de NTs de BN : les multiparois bien cristallisés et les multiparois de structure bambou. Ils ont observé que les NTs peuvent adsorber entre 1.8 et 2.6 % en poids d'hydrogène à température ambiante et à une pression proche

de 10 MPa. Ces auteurs ont conclu que l'hydrogène était chimisorbé. Jhi et al. [136] ont montré que les énergies de liaison des NTs de BN sont 40 % supérieures à celles des NTs de carbone, du fait de la polarité de la liaison B-N. Ceci permet donc d'envisager que les NTs de nitrure de bore pourraient adsorber une quantité plus importante d'hydrogène que celle adsorbée par les tubes de carbone. Récemment, Wu et al. [137] ont étudié, par des calculs ab-initio (DFT), l'influence d'une déformation radiale des NTs de BN d'hélicité zig-zag sur l'adsorption chimique de l'hydrogène. Ils ont observé que si cette déformation est faible, l'adsorption se fait sur des atomes de bore et entraîne la création d'états accepteur (dopage type p) ; tandis que si elle est plus importante, l'hydrogène préfère être adsorbé par des atomes d'azote, ce qui a pour conséquence un dopage de type n. Ils envisagent donc la possibilité d'utiliser l'adsorption de l'hydrogène et l'application d'une déformation sur les tubes, pour l'application des NTs de BN dans des dispositifs électroniques (modulation du gap).

#### **I.1.4.5.f Propriétés thermiques**

Dans la section consacrée au h-BN, nous avons montré que ce matériau a des propriétés thermiques assez remarquables. Il possède en effet une conductivité thermique et une chaleur spécifique importantes. Les travaux théoriques de Xiao et al. [129], à partir d'un modèle de constantes de force (présenté précédemment), confirment que la chaleur spécifique des tubes est élevée. Ces auteurs ont trouvé une expression qui permet d'établir la chaleur spécifique (CV) à 300 K d'un NT donné (valeurs des indices d'Hamada (n,m)). Ils prédisent également, en considérant le CV des NTs de BN, que leur conductivité est sûrement élevée.

Il est important de connaître le comportement thermique des NTs. Moon et al. [138] l'ont étudié à l'aide des calculs de dynamique moléculaire, avec des températures entre 1000 K et 5500 K. Ils ont observé que la désintégration des tubes dépend de leur hélicité : les NTs zig-zag se décomposent à des températures entre 3700 et 4400 K, tandis que les tubes armchair le font à des températures entre 4100 et 4600 K.

## I.1.5 Les nanotubes de carbone

### I.1.5.1 Le carbone

Élément fondamental de la vie, est un atome capable de se lier d'une manière variée à un grand nombre d'atome différents, ce qui lui permet d'offrir des possibilités de synthèse multiples. Cette versatilité est due à sa structure électronique particulière [ $1s^2-2s^2-2p^2$ ]. Ses orbitales atomiques sont capables de s'hybrider avec d'autres atomes de carbone ou des hétéroatomes, pour former des orbitales moléculaires de type  $sp^1$ ,  $sp^2$  ou  $sp^3$ , ce qui confère au carbone un caractère bi-, tri- ou tétravalent. Il est donc possible de rencontrer des structures carbonées monodimensionnelles ou tridimensionnelles. La seule forme thermodynamiquement stable du carbone est le graphite hexagonal. Les autres formes allotropiques du carbone sont métastables dans les conditions normales de température et de pression.

Les formes traditionnelles du carbone ont été récemment découvertes, tels que les fullerènes, les nanotubes multifeuillets, les nanotubes monofeuillets [139].

### I.1.5.2 Les formes traditionnelles du carbone

#### I.1.5.2.a Le graphite

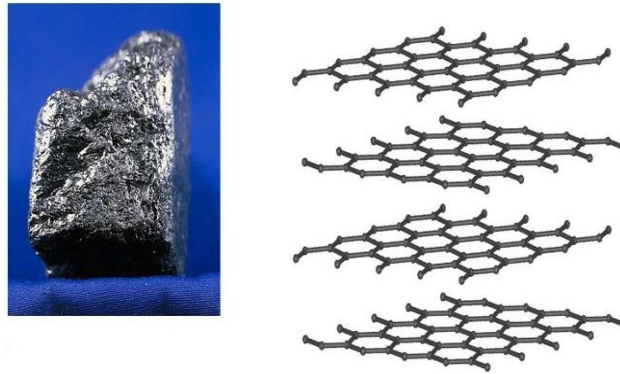
Le graphite présente une structure lamellaire constituée d'un empilement de feuillets. Chaque feuillet, ou plan de graphène, est constitué d'atomes de carbone en état d'hybridation  $sp^2$ , formant un réseau hexagonal de paramètre de maille 0,243 nm, la longueur de liaison C-C étant de 0,142 nm. Il existe deux façons d'empiler les plans de graphène sur eux-mêmes, résultant en deux formes cristallines différentes de graphite.

La forme cristalline stable est le graphite hexagonal [140]. Les plans de graphène sont empilés, comme sur la (figure I.11). La distance inter-feuillets est de 0,335 nm.

L'autre forme cristalline possible est le graphite rhomboédrique, phase métastable du graphite hexagonal. Les plans de graphène sont ici aussi empilés, mais chaque plan est décalé d'une longueur de liaison par 0,335 nm.



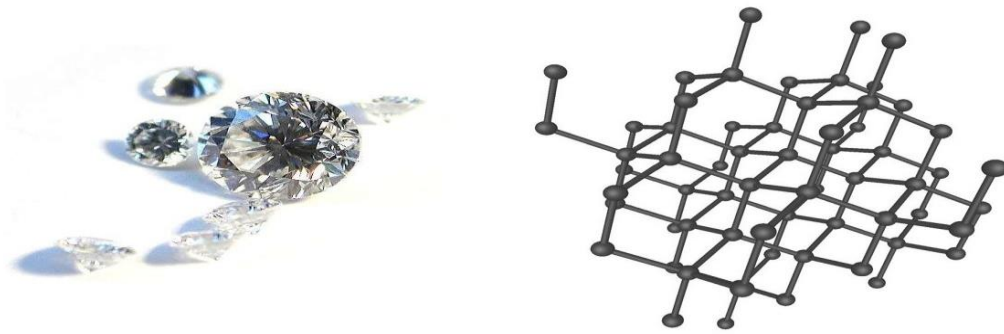
Le graphite se rencontre rarement sous la forme d'un monocristal, bien que la croissance de monocristaux macroscopiques soit possible. Le graphite courant, celui des mines de rayon, un polycristal, constitué de cristallites de graphite hexagonal orienté aléatoirement.



**Fig. I.11** - structure du graphite

### **I.1.5.2.b Le diamant**

Le diamant est une forme allotropique tridimensionnelle du carbone. Dans le diamant, les atomes de carbone sont en état d'hybridation  $sp^3$ , et donc tétravalents. Il existe plusieurs structures cristallines du diamant [141], comme le diamant hexagonal, mais la structure la plus courante est le loin le diamant cubique (figure I.12). La maille de cette structure est de type cubique faces centrées, avec un paramètre de maille de 0,356 nm, et une distance interatomique de 0,154 nm.



**Fig. I.12** - structure du diamant.

### **I.1.5.3 Les nouvelles formes de carbone**

#### **I.1.5.3.a Fullerènes et dérivés**

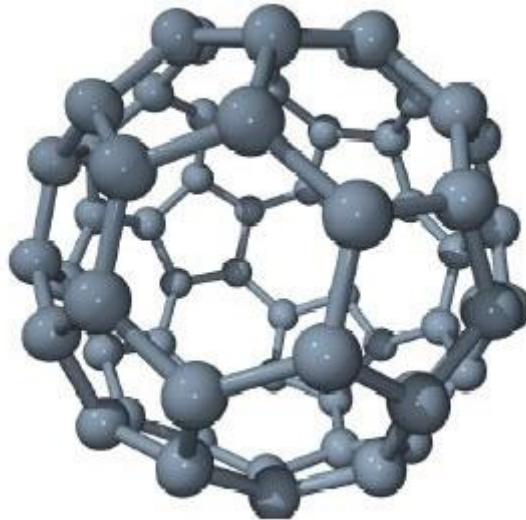
L'élément principal du graphite, et également point de départ pour la construction de nouvelles nanostructures carbonées, est le plan de graphène, que l'on peut se représenter comme une feuille plane pavée d'hexagones. Il est possible de briser virtuellement la planéité de la feuille de graphène en insérant des défauts dans la structure, de type pentagone ou heptagone [142]. L'ajout d'un pentagone dans un plan d'hexagones crée une courbure positive. L'ajout d'un heptagone créera, dans le même plan, une courbure négative. La courbure créée par chaque type de défaut s'annule, et une feuille de graphène dans laquelle on aurait inséré un pentagone et un heptagone resterait globalement plan.

En 1985, Curl, krotto, smalley [143], ont réussi à isoler une forme majoritaire constituée de 60 atomes de carbone. Cette molécule, refermée sur elle-même comme une cage, à la forme d'un icosaèdre tronqué dont tous les sommets sont occupés par des atomes de carbone. Sa structure est alors constituée de 12 pentagones et de 20 hexagones (figure I.13).

Cette nouvelle molécule de 60 atomes de carbone, ou  $C_{60}$ , a été appelée buckminster fullerène, par analogie avec les dômes géodésiques de l'architecte R. Buckminster Fuller. Depuis, le nom a évolué, et nous nous référons maintenant à cette molécule en tant que fullerène, ou plus simplement  $C_{60}$ . Le fullerène  $C_{60}$  est le représentant le plus connu de la famille des fullerènes, molécules « cages » de plus de

60 atomes de carbone [140]. Les fullerènes doivent obéir à de fortes conditions de stabilité chimique ; toutes les  $C_{60}$  et  $C_{70}$ , mais il existe également les  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{82}$ ,  $C_{84}$ ...

Depuis leur synthèse initiale par ablation laser, les moyens de production de fullerènes ont progressé. En 1990, Krätschmer réussit la première synthèse à grande échelle de fullerènes par la sublimation d'une électrode en graphite par arc électrique [144]. Aujourd'hui des méthodes de synthèse du  $C_{60}$  par voie organique existent, ouvrant la voie à une production de masse des fullerènes [145].



**Fig. I.13** - Fullerène  $C_{60}$

### **I.1.5.3.b Différents types de nanotube de carbone :**

On distingue deux types de nanotubes :

- Nanotubes monofeuillets (Single Walled Nanotubes),(SWNT)
- Nanotubes multifeuillets (Multi Walled Nanotubes),(MWNT)

### **I.1.5.3.b.1 Nanotubes monofeuillets (SWNT)**

Les nanotubes de carbone monofeuillet ont été découverts en parallèle par Béthune [146] et Lijima [147] en 1993.

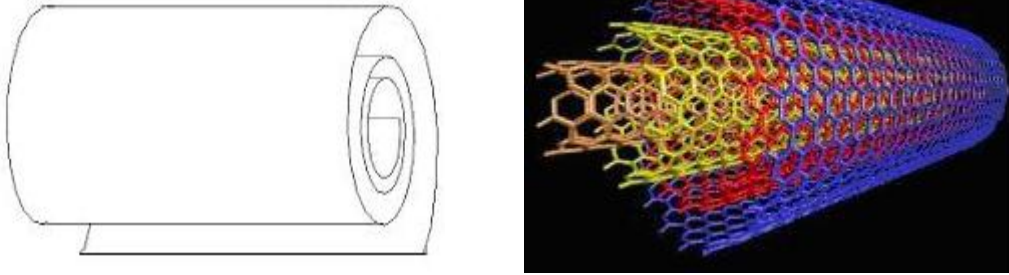
Les nanotubes (SWNT) sont constitués d'une seule paroi, la structure peut être représentée par une feuille de graphène enroulé sur elle-même et fermé à ses extrémités par une demi-sphère. La façon dont le feuillet de graphène est replié sur lui-même définit un paramètre, appelé « hélicité », qui caractérise la structure du nanotube, cette dernière permet de caractériser les différents types de nanotubes existants.

### **I.1.5.3.b.2 Nanotubes multifeuillets (MWNT) :**

Les nanotubes de carbone multifeuillets sont constitués de plusieurs feuillets de graphène enroulés les uns des autres. Il existe deux modèles :

- 1- Le modèle « parchemin ou bien spiral », se présente sous la forme d'un seul feuillet de graphène enroulé sur lui-même, comme une feuille de papier.
- 2- Le modèle dit de la « poupée russe », les plans de graphène sont arrangés en cylindres concentriques.

La structure des nanotubes multifeuillets de type poupée russe décrite précédemment est communément admise, mais ce n'est pas la seule structure possible. Ainsi, certaines études expérimentales [148] laissent envisager que les nanotubes multifeuillets pourraient avoir une structure de type rouleau de parchemin. D'autres études [149] suggèrent, surtout dans le cas des gros nanotubes, que les deux types de structure coexistent au sein des tubes multifeuillets, les tubes petit diamètre, au centre, présentant une structure de type poupée russe, tandis que les tubes extérieurs possèdent une structure plus défectueuse de type rouleau de parchemin. Enfin, une étude postérieure [150] montre que la structure de type poupée russe est la plus fréquemment rencontrée, les nanotubes ne croissant selon le type rouleau de parchemin que dans des conditions particulières.



**Fig. I.14** - le modèle parchemin et le modèle de la poupée russe

#### **I.1.5.4 Les méthodes de synthèses**

Depuis la découverte des nanotubes de carbone, de nombreux efforts ont été déployés pour améliorer leur synthèse. Les premiers nanotubes de carbone ont été produits par une décharge électrique en utilisant des électrodes en graphite dans un environnement contenant un gaz inerte. Cette méthode, d'un coût relativement peu élevé, a permis de produire d'importantes quantités de nanotubes. Cependant, elle produit également des impuretés telles que du carbone amorphe, sans aucun contrôle précis de la longueur et du rayon des nanotubes [151]. Les nanotubes de carbone peuvent également être synthétisés par une technique d'ablation laser produisant des nanotubes de haute qualité mais avec un rendement moins important. Une méthode simple de synthèse des nanotubes de carbone est réalisée par un dépôt chimique en phase vapeur (CVD : Chemical Vapor Deposition) à une forte température, typiquement supérieure à 700°C [152]. La production des nanotubes de carbone est assurée par des gaz d'hydrocarbure décomposés sur des surfaces catalytiques. Ce processus CVD permet de contrôler précisément la localisation de la croissance des nanotubes en utilisant des catalyseurs calibrés [153]. Ce procédé peut aussi être utilisé à de plus basses températures pour faire croître des nanostructures en carbone sur des surfaces recouvertes de catalyseur.

La différence majeure entre la production des nanotubes multiparois et des nanotubes monoparois est la nécessité d'utiliser un catalyseur, allié à un gaz carboné, le tout à une température adaptée afin d'obtenir la forme monoparoi des nanotubes de carbone. Il existe plusieurs enjeux dans la production des nanotubes de carbone monoparoi. Tout d'abord, il faut avoir un contrôle de la distribution en diamètre et de

la chiralité des échantillons, la chiralité représentant la façon dont la feuille de graphène est enroulée. De plus, selon l'utilisation souhaitée, il peut s'avérer nécessaire d'avoir un contrôle sur la « pureté » des échantillons. Enfin, en ce qui concerne les éventuelles applications industrielles, la production de nanotubes en grande quantité est la première étape à réaliser.

#### **I.1.5.4.a Méthode de l'arc électrique**

La technique de l'arc électrique est un procédé de synthèse haute température. Cette technique a permis de synthétiser les fullerènes en grande quantité [154], et de produire les premiers nanotubes multifeuillets identifiés par S. Iijima [155].

Cette technique est basée sur l'évaporation du graphite par un arc électrique, amorcé entre deux électrodes en graphite. Un plasma chaud (environ 6000 K) est formé et maintenu entre ces deux électrodes, l'anode étant progressivement sublimée. Les espèces carbonées sublimées dans le plasma vont se recombinaer à l'extérieur, et les produits formés vont se déposer sur les parois du réacteur. Les conditions de température à l'intérieur de l'enceinte sont très importantes pour la qualité et la quantité des nanotubes formés. La température est contrôlée en utilisant un gaz inerte (He, Ar...) à une certaine pression. Un collecteur refroidi par eau peut également être utilisé, suivant la géométrie du réacteur employé.

La synthèse de nanotubes de carbone monofeuillet nécessite l'emploi d'une anode en graphite .

Contenant également des catalyseurs métalliques. Ces catalyseurs vont être sublimés avec le graphite lors de la création du plasma, et vont permettre aux fagots de nanotubes de croître [146, 147].

Les catalyseurs les plus employés sont Ni, Fe, Co, Pt, Pd, Rh, Y, La, Lu... À l'issue de la synthèse, la proportion la plus importante de nanotubes monofeuillets se retrouve dans une zone appelée collerette, autour de la cathode, qui présente un aspect spongieux.

Notons qu'en 1997, C. Journet et al. ont amélioré la technique de l'arc électrique en employant un mélange de catalyseur Ni/Y [156,157]. Ce mélange a permis

d'obtenir des rendements de synthèse élevés, ce qui a ouvert la voie à la production de masse des nanotubes monofeuillets.

Aujourd'hui, un certain nombre de sociétés (NANOLEDGE [158] et MER Inc. [159] entre autres) commercialisent des nanotubes produits par cette technique.

#### **1.1.5.4.b Méthode d'ablation laser**

La technique de synthèse par ablation laser est la méthode qui a permis à Kroto et Smalley de découvrir les fullerènes en 1985. Cette technique repose sur l'évaporation d'un disque de graphite par irradiation laser, la cible étant placée dans un four à 1200°C [160]. Comme dans le cas de la synthèse par arc électrique, il est nécessaire d'utiliser un catalyseur métallique mélangé à la cible en graphite pour former des nanotubes monofeuillets.

Cette technique est complexe dans sa mise en œuvre car elle repose sur l'utilisation de deux impulsions lasers successives de fréquences différentes. Une méthode de synthèse par ablation laser plus simple a également été développée [161]. Cette méthode utilise un laser CO2 continu émettant à 10,6  $\mu\text{m}$  à température ambiante [139].

#### **1.1.5.4.c Méthode de dépôt chimique en phase vapeur**

La synthèse de nanotubes de carbone par la méthode de dépôt chimique en phase vapeur (abrégée en **CVD** pour Chemical Vapor Deposition) a été effectuée pour la première fois par Endo et al. [162]. Dans cette méthode, des hydrocarbures ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$ ...) et de l'hydrogène sont mis en présence de catalyseurs métalliques (Fe, Co, Ni...), le tout dans un four porté à haute température ( $> 700\text{C}$ ). Les nanotubes se forment alors sur les plots de catalyseurs. L'un des avantages de cette méthode est que les nanotubes se forment de façon continue (contrairement à la méthode d'ablation laser par exemple). Nous pouvons espérer trouver des conditions expérimentales permettant de fabriquer des nanotubes purs avec un contrôle parfait du diamètre et de la chiralité. Cependant, cela est encore loin d'être la réalité. Un avantage de cette méthode est que l'on peut faire croître les nanotubes à des endroits prédéterminés. Cela peut s'avérer très intéressant pour toutes les applications en nano électronique,

par exemple, pour fabriquer des matrices de transistors à base de nanotubes de carbone. Il existe également une technique de synthèse de forêts de SWNT par CVD assistée avec de l'eau qui supprime le carbone amorphe et permet ainsi une croissance non limitée : les SWNT ainsi créés peuvent atteindre une hauteur de plus de 2 cm ! De plus, il est possible d'aligner les nanotubes entre eux, perpendiculairement à la surface. Nous obtenons alors des « pelouses » de nanotubes. Cette propriété est très intéressante pour toutes les utilisations des propriétés d'émission de champ des nanotubes. En revanche, un inconvénient de cette méthode est qu'elle ne permet pas, pour le moment, de fabriquer de grandes quantités de nanotubes monoparois. En effet, si la production de nanotubes de carbone multiparois est relativement facile, celle de nanotubes de carbone monoparois est difficile.

### **I.1.5.5 Les propriétés des nanotubes**

#### **I.1.5.5.a Les propriétés mécaniques**

Des études théoriques puis expérimentales ont montré que les NTC possèdent d'excellentes caractéristiques mécaniques. Le module d'Young d'un tube multi-feuillets a été calculé [163] comme étant jusqu'à 1,4 fois plus important que celui du graphite (environ 1TPa) et des mesures ont été réalisées à partir de la fréquence de vibration thermique de NTC dans un microscope électronique en transmission, conduisant à des valeurs comprises entre 0,4 TPa et 3,7 TPa [164]. La valeur moyenne est de 1,8 TPa, ce qui est bien supérieur aux fibres de carbone commerciales (de l'ordre de 800 GPa). Une étude plus récente réalisée par Wong et al. [165] à l'aide d'un microscope à force atomique a permis de mesurer un module de Young d'environ 1,28 TPa, indépendamment du diamètre du tube.

Malgré leur grande rigidité, les nanotubes de carbone se plient au-delà d'une certaine contrainte : l'observation directe en haute résolution au microscope électronique en transmission (MET) met immédiatement en évidence leur extraordinaire flexibilité [166]. Par exemple la courbure semble en effet entièrement réversible jusqu'à un angle critique qui atteint  $110^\circ$  pour un tube monofeuillet [167].

Les nanotubes exhibent donc des propriétés mécaniques uniques. Leur grande flexibilité associée à un module d'Young élevé leur confèrent un comportement que certains n'hésitent pas à décrire comme étant un comportement super élastique. Au



niveau des NEMS (nano electromechanical system ou système électromécanique nanométrique) les nanotubes de carbone permettent d'obtenir des systèmes non seulement résistants, donc présentant d'excellentes durées de vie, mais aussi facilement actionnables. Ce sont donc vraiment des candidats idéaux pour ce type de fonctions électromécaniques. Toutefois, cela nécessite que trois types de contraintes soient remplis :

- Prédire le comportement d'un nanotube en fonction de ces paramètres géométriques afin de concevoir le composant idéal pour telles ou telles applications,
- Sélectionner les nanotubes en fonction de leur diamètre et de leur longueur pour l'application requise,
- Positionner de manière précise ces nanotubes dans le système en question.

#### **I.1.5.5.b Les propriétés électriques**

Tout comme les propriétés mécaniques, les nanotubes de carbone possèdent des propriétés électriques très intéressantes pour des applications électriques.

En premier lieu, il faut différencier les propriétés électriques que possèdent les nanotubes en fonction de leur type. En effet, en fonction de l'enroulement du nanotube monofeuillet (de son vecteur de chiralité) ce nanotube sera métallique ou semi conducteur.

Toutefois il est à noter que les nanotubes possédant plusieurs parois auront beaucoup plus de probabilité d'avoir un comportement métallique. En effet, il a été démontré [168] que la bande de valence d'un nanotube de carbone suivait une relation inversement proportionnelle à son diamètre (une bande de valence nulle entraînant un comportement au niveau du nanotube de carbone de type métallique). Des mesures réalisées sous champ magnétique ont été réalisées par M. Sagnes et al. Afin d'estimer le comportement de nanotubes multi feuillets [169]. De ces expériences, a été déduit qu'il existe 75% de probabilité d'avoir un nanotube de carbone multi feuillets métalliques.

En ce qui concerne les nanotubes mono feuillet, une règle sur le vecteur chiral a été établie afin de savoir quelles sont propriétés électriques du nanotube de carbone correspondant.

Cette règle estime que si le couple  $(m, n)$  satisfait une relation telle que si  $n-m$  est un multiple de 3 (0 compris) le nanotube aura un caractère métallique [170]. On estime donc qu'un tiers des nanotubes mono feuillet produits sont métalliques. Les nanotubes armchair seront donc métalliques au vu de leur bande de valence. Les autres nanotubes, zig-zag et chiraux, seront eux soit semi conducteurs, soit métalliques en fonction de la relation donnée plus haut. Toutefois dans le cas où  $n \neq m$  avec  $n-m$  multiple de 3, les nanotubes auront une bande de valence plutôt réduite par rapport à celle des nanotubes armchair, ils ont alors un caractère dénommé semi métallique.

Une caractéristique est la densité de courant maximale des nanotubes métalliques, celle-ci a été estimée et mesurée à plus 1000 fois celle du cuivre. Elle est en effet de l'ordre de  $10^9 \text{A.cm}^{-2}$  pour les NTCs ce qui est mille fois plus élevé que pour les métaux usuels ( $10^6 \text{A.cm}^{-2}$ ) [170].

Concernant les nanotubes mono feuillet semi conducteurs une performance en rupture correspond à la mobilité électronique. En effet, ces derniers peuvent être vus comme des fils unidimensionnels et en leur sein les électrons confinés se propagent sans dispersion ce qui leur confère ce qu'on appelle une mobilité balistique. Cette qualité confère aux nanotubes semi conducteurs une place importante dans le monde de l'électronique, notamment dans la réalisation de transistor à grand fréquence de fonctionnement.

Toutefois les nanotubes possèdent une contrainte assez lourde : leur résistance de contact.

En effet, cette résistance dépend de la bande de valence du nanotube et peut être calculée par la relation suivante [171] :

$$R = \left( \frac{\hbar}{4e^2} \right) \frac{1}{\lambda}$$

Dans cette relation le premier terme  $(\hbar/4e^2)$  représente la résistance quantique des nanotubes (6.5 k $\Omega$ ) et  $\lambda$  le parcours libre moyen, qui correspond à la distance de parcours balistique des électrons qui varie selon la longueur et le diamètre des nanotubes.

On obtient donc des valeurs de résistances de contact allant de 6 à 100k $\Omega$  [171], ce qui est un problème majeur dans l'intégration de système pour lesquels les pertes (dont celles par les résistances) sont critiques. Une solution que nous allons utiliser afin de palier à ce problème majeur est l'utilisation de réseau de nanotubes. Un réseau de nanotubes permettra alors de connecter des nanotubes en parallèle et donc d'obtenir une résistance de contact équivalente à celle d'un nanotube divisée par le nombre de NTC.

Par exemple si l'on arrive à placer sur une même ligne un million de nanotubes, un calcul simple nous permet de trouver une résistance de contact équivalente à 0.1 $\Omega$  dans le pire de cas (c'est-à-dire 100k $\Omega$  par NTC). Dans ce cas, les nanotubes deviennent de très bons candidats pour des applications hyperfréquences où l'on veut que les pertes, notamment ohmiques, soient les plus faibles possibles.

### **I.1.5.5.c Les propriétés thermiques**

Le diamant (à base de carbone) présente la conductivité thermique la plus élevée de tous les matériaux connus à ce jour (environ 10<sup>3</sup> W.m<sup>-1</sup>.k<sup>-1</sup> à 300 K). Un plan de graphène possède une conductivité comparable. La structure particulière des nanotubes permet de penser que leur conductivité doit également être importante le long de l'axe du nanotube.

La mesure des propriétés thermiques d'un nano-objet comme le nanotube est délicate. Cependant, quelques études expérimentales ont permis de mesurer la conductivité thermique de nanotubes multi feuillets. Leur conductivité est grande (de 600 à 2000 W.m<sup>-1</sup>.k<sup>-1</sup>) [172], mais significativement plus faible que celle du graphite. Ces résultats sont a priori décevants, mais ils peuvent s'expliquer en considérant le fait que, bien que tous les feuillets puissent participer à la conduction thermique, seul le feuillet externe a été utilisé pour les mesures ; ces considérations permettent donc d'estimer la conduction d'un tube mono feuillet au même ordre de grandeur que celle du graphite.

### **I.1.5.5.d Les propriétés optiques**

L'électroluminescence est une émission de lumière qui résulte de l'action d'un champ électrique.

Des chercheurs d'IBM ont indiqué avoir réussi à faire émettre de la lumière infra-rouge par des nanotubes de carbone. Les nanotubes non dopés et soumis à un champ électrique généré par une grille peuvent conduire le courant par l'intermédiaire d'électrons (tension de grille négative) ou de trou (tension de grille positive).

#### **I.1.5.5.e Les propriétés d'émission de champ**

Le champ est l'expression des forces qui résulteraient de l'action à distance de particules électriquement chargées sur une particule test, divisée par la valeur de la charge de cette particule test, de même que le champ gravitationnel par exemple résulte de l'action de particules dotées de masse.

Les nanotubes peuvent présenter une longueur extrêmement grande devant leur diamètre. Lorsqu'ils sont soumis à un champ électrique, ils présentent un très fort effet de pointe, principe du paratonnerre. Avec des tensions relativement faibles, on peut générer à leurs extrémités des champs électriques énormes, capable d'arracher les électrons de la matière et de les émettre vers l'extérieur.

Cette émission est extrêmement localisée 'à l'extrémité du tube ' et peut donc servir à envoyer des électrons sur un endroit bien précis, un petit élément de matériau phosphorescent qui constituera le pixel d'un écran plat par exemple. Le matériau phosphorescent évacue l'énergie reçue sous forme de lumière (même principe que les écrans de tubes cathodiques).

L'exploitation de cette propriété a déjà permis de réaliser des prototypes d'écrans plats à nanotubes (Samsung et Motorola).

#### **I.1.5.6 Applications des nanotubes de carbone**

Leur dimension nanométrique et leurs propriétés spécifiques font des nanotubes de carbone des matériaux très intéressants du point de vue des applications.

Ce sont des candidats potentiels pour l'électronique moléculaire. Des hétérojonctions ont déjà été réalisées au sein d'un nanotube ou en couplant deux nanotubes (l'un métallique et l'autre semi-conducteur). Il a aussi été montré qu'ils se comportent comme des transistors à un électron.

De par leur très important facteur de forme, ils sont d'excellents émetteurs d'électrons sous faible champ. Cela intéresse particulièrement l'industrie des écrans plats.

Ils peuvent stocker une quantité importante d'hydrogène et intéressent donc l'industrie des batteries [173].

Les propriétés mécaniques des nanotubes de carbone sont également utilisées pour réaliser des NEMS (Nano Electro Mechanical Systems). Citons par exemple les RAM (Random Access Memory) [174], les vérins de rotation [175], les nanoleviers avec feedback [176], les actionneurs photomécaniques [177], les électrodes transparents résonnantes, les LED flexibles et autres [178].

En outre, les nanotubes sont d'excellents matériaux pour le renforcement de matrices polymères par exemple. Ils seraient également susceptibles d'être employés comme muscles artificiels. Ils peuvent aussi être utilisés pour des composites à haute valeur ajoutée, comme par exemple les articles de sport, la défense, l'aéronautique. Il existe d'ailleurs déjà des prototypes utilisés par des sportifs de haut niveau (cyclistes utilisant des vélos dont le cadre est un matériau composite contenant des nanotubes, joueurs de tennis utilisant des raquettes à base de nanotubes de carbone, joueurs de hockey utilisant des crosses dopées en nanotubes de carbone. . . ).

## **I.2 Les matériaux FGM**

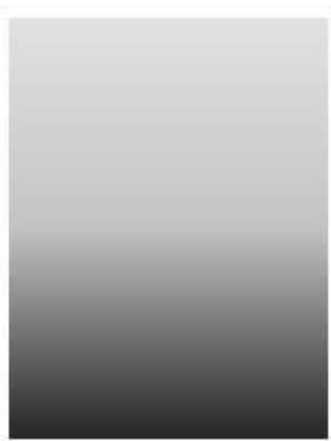
### **I.2.1 Introduction**

Les matériaux à gradient fonctionnel (**F**unctionnally **G**raded **M**aterials : FGM) ou les matériaux fonctionnellement gradués sont une nouvelle classe de matériaux composites dont la microstructure et la composition varient graduellement et continûment avec la position de manière à optimiser les performances mécaniques et thermiques de la structure qu'ils constituent. Ils sont considérés comme des matériaux intelligents dont les fonctions désirées sont intégrées, dès la conception, au cœur même de la matière. A chaque interface, le matériau est choisi selon les applications spécifiques et les charges environnementales. Ces matériaux possèdent de multiples avantages qui peuvent les rendre attractifs du point de vue de leur potentiel d'application. Il peut s'agir de l'amélioration de la rigidité, de la tenue à la fatigue, de la résistance à la corrosion ou de la conductivité thermique en plus d'avoir une gradation des propriétés permettant ainsi d'augmenter ou de

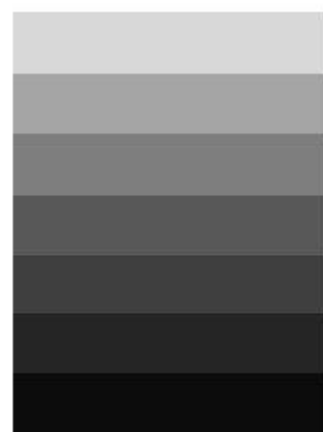
moduler des performances telles que la réduction des contraintes locales [179, 180] ou encore l'amélioration du transfert de chaleur [181]. Ce nouveau concept marque le commencement d'une révolution dans les domaines de la science et de la mécanique des matériaux. L'intérêt particulier et grandissant envers les matériaux à gradient fonctionnel, pensés et conçus pour la première fois au Japon, est mis en évidence par les innombrables conférences et publications de qualité dédiées à l'analyse, la conception et la fabrication de ces matériaux.

### I.2.2 Concept des matériaux fonctionnellement gradués

Les matériaux à gradient fonctionnel sont une nouvelle classe de matériaux composites dont les propriétés thermomécaniques varient selon une loi de fonction continue (figure I.15) ou discrète (figure I.16) à travers l'épaisseur [182]. Grâce à la structure spéciale de ces matériaux, il est possible d'éviter les concentrations de contraintes au niveau des interfaces (provoquant le délaminage) et d'améliorer les propriétés mécaniques et thermiques des pièces par association de matériaux. Ces matériaux sont de plus en plus utilisés dans les industries aéronautiques, aérospatiale, biomécanique, automobile et dans bien d'autres applications technologiques.



**Fig. I.15** -Variation continue des propriétés



**Fig. I.16** -Variation discrète des propriétés

La variation continue des propriétés (figures I.17 et I.18) trouve son application

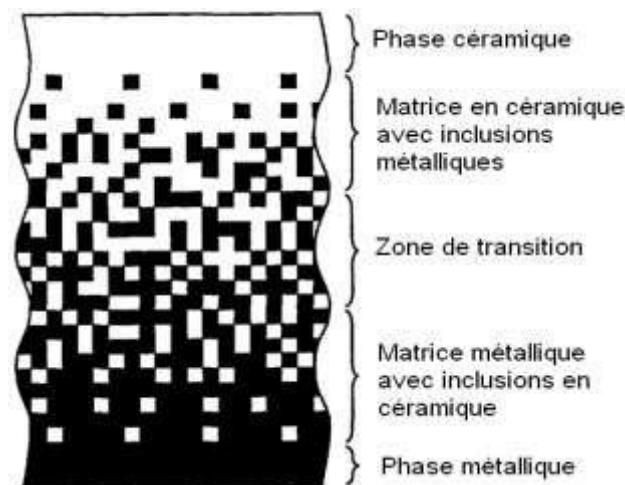
lorsque, par exemple, la face supérieure est exposée à une haute température alors que la face inférieure est exposée à une basse température. Dans ce cas, la face supérieure est à 100% céramique et la face inférieure est à 100% métal, avec une transition graduelle entre les deux. L'utilisation de la céramique n'est pas fortuite. Ce matériau est choisi grâce à ses caractéristiques exceptionnelles qui sont énumérées comme suit:

- faible réactivité chimique, bonne tenue à la corrosion ;
- haute température de fusion ou de décomposition ;
- haut module d'élasticité et haute dureté ;
- charge à la rupture élevée ;
- bas coefficient de frottement, bonne résistance à l'usure ;
- conservation des propriétés à haute température ;
- faible coefficient de dilatation thermique (donc bonne résistance aux chocs thermiques) ;
- faible conductivité thermique (donc bonne résistance à la température).

Cependant, les céramiques sont réputées être fragiles et très vulnérables aux défauts de petites tailles.

Les caractéristiques du métal sont données comme suit :

- Bonne résistance mécanique ;
- Conductivité thermique élevée,
- Très bonne ténacité.



**Fig. I.17** - Variation continue de la microstructure (schématisée)



**Fig. I.18** -Variation continue de la microstructure  
(photo)

En ajustant la microstructure de transition d'une façon appropriée, il est possible d'obtenir une distribution optimale de la température, de la déformation et des contraintes. Cette possibilité d'ajustement est demandée lors de la conception des structures thermiques aéronautiques et spatiales (moteurs, tuyères, revêtements thermiques, etc.). Ce concept a aussi été utilisé pour améliorer la résistance à la fatigue thermique et la durée de vie des revêtements pare-feu [183, 184].

La plupart des « FGM » sont constitués de céramique et de métal dont les propriétés mécaniques sont comparées dans le tableau I.4.

La face à haute température	Céramique	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bonne résistance thermique.</li> <li>- Bonne résistance à l'oxydation.</li> <li>- Faible conductivité thermique.</li> </ul>
Continuité du matériau d'un point à l'autre « couches intermédiaires »	Céramique-métal	<ul style="list-style-type: none"> <li>-Élimination des problèmes à l'interface.</li> <li>-Relaxer les contraintes thermiques.</li> </ul>
La face à basse température	Métal	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bonne résistance mécanique.</li> <li>- Conductivité thermique élevée.</li> <li>- Très bonne ténacité.</li> </ul>

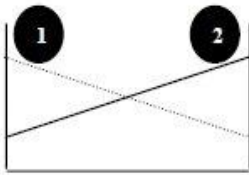
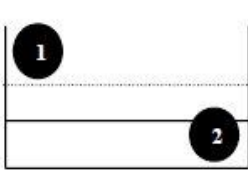
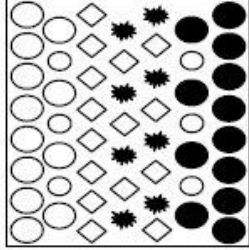
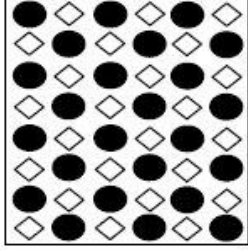
**Tab. I.4** -comparaison entre les propriétés de la céramique et du métal.



### I.2.3 Comparaison des matériaux types FGM et les matériaux composites traditionnels

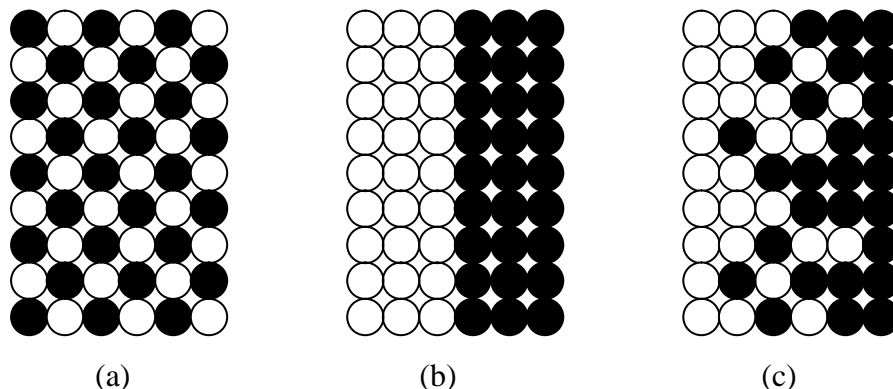
Généralement, les F.G.M sont des matériaux constitués de plusieurs couches contenant des composants différents tels que les céramiques et les métaux. Ils sont donc des composites présentant des caractéristiques macroscopiquement inhomogènes. Le changement continu dans la composition et donc dans la microstructure du matériau distingue les F.G.M des matériaux composites conventionnels comme illustré sur la (figure I.19) [185]. Il en résulte un gradient qui déterminera les propriétés matérielles des FGM. Dans certains cas, on peut avoir un FGM constitué d'un même matériau mais de microstructure différente [186].

Le concept FGM peut être appliqué dans divers domaines pour des usages structuraux et fonctionnels. Au Japon, plusieurs programmes ont été conduits au cours des années 80 et 90 afin de développer l'architecture des FGM, et d'étudier également ces matériaux pour les applications de hautes températures (par exemple, éléments pour navettes spatial hypersonique) ainsi que pour des applications fonctionnelles (par exemple, convertisseurs thermoélectriques et thermo-ioniques). Ces programmes ont conduit au développement de la conception architecturale du FGM et de ces perspectives.

<b>Propriétés</b>	<p>1 Résistance mécanique</p> <p>2 Conductivité thermique</p>		
<b>Structure</b>	<p>Eléments constitutants:</p> <p>céramique ○</p> <p>métal ●</p> <p>microporosité ○</p> <p>fibre ◇</p>		
<b>Matériaux</b>	<b>exemple</b>	<b>FGM</b>	<b>NON-FGM</b>

**Fig. I.19** - Caractéristiques des matériaux composites FGM en comparaison avec les matériaux composites conventionnels [185].

Yoshihisa a établi un modèle simple illustrant les différences entre les matériaux à gradient de propriétés (FGM) et les matériaux plus conventionnels (voir figure I-20) [187]. Le matériau plan composé a une caractéristique plane, et le matériau relié a une frontière sur l'interface de deux matériaux. Les FGM ont d'excellentes caractéristiques qui diffèrent de ceux des matériaux plans composés et reliés. Par conséquent, les FGM attirent l'attention en terme de leur application dans les domaines industriels puisqu'ils ont une double propriété des deux matières premières qui sont mélangées ensemble, et la distribution composante est graduée sans interruption. Par exemple, l'un des FGM qui se compose du métal et de la céramique a la caractéristique de la conductivité thermique et de la force métallique dans le côté en métal et la résistivité aux hautes températures dans le côté en céramique.



(a) Matériau plan composé (a), Matériau relié (b), Matériau fonctionnellement gradué (c)

**Fig. I.20** - La distribution composante des matériaux [186].

#### **I.2.4 Lois régissant la variation des propriétés matérielles des plaques FGM**

Les matériaux à gradient fonctionnel « FGM » consistent en l'association de deux ou plusieurs matériaux aux propriétés structurales et fonctionnelles différentes avec une transition idéalement continue de la composition, de la structure et de la distribution des porosités entre ces matériaux de manière à optimiser les performances de la structure qu'ils constituent.

Les caractéristiques les plus distinctes des matériaux FGM sont leurs microstructures non-uniformes avec des macro-propriétés graduées dans l'espace. Un des paramètres clé à déterminer lors de la fabrication de ces matériaux est la composition multiphase à travers l'épaisseur.

La dépendance des propriétés de la position se traduit par la prise en compte de la loi des mélanges correspondant au modèle de Voigt [188].

$$P = \sum_{i=1}^n P_i V_i \quad (\text{I.6})$$

Avec  $P_i$  et  $V_i$  sont respectivement la propriété mécanique et la fraction volumique du constituant  $i$ , avec :

$$\sum_{i=1}^n V_i = 1 \quad (\text{I.7})$$

Dans la pratique, la plupart des structures FGM sont à deux constituants : de la céramique et du métal inoxydable en général. Dans ce cas, la loi de Voigt se réduit à :

$$P = P_1 V_1 + P_2 V_2 \quad (\text{I.8})$$

Avec :  $V_1 + V_2 = 1 \quad (\text{I.9})$

Un FGM peut être définie par la variation des fractions de volume. La plupart des chercheurs emploient la fonction de puissance, la fonction exponentielle, ou la fonction sigmoïde pour décrire les fractions de volume. Les liaisons entre les particules doivent être assez dures à l'intérieur pour résister à la rupture, et également assez dures à l'extérieur pour empêcher l'usure.

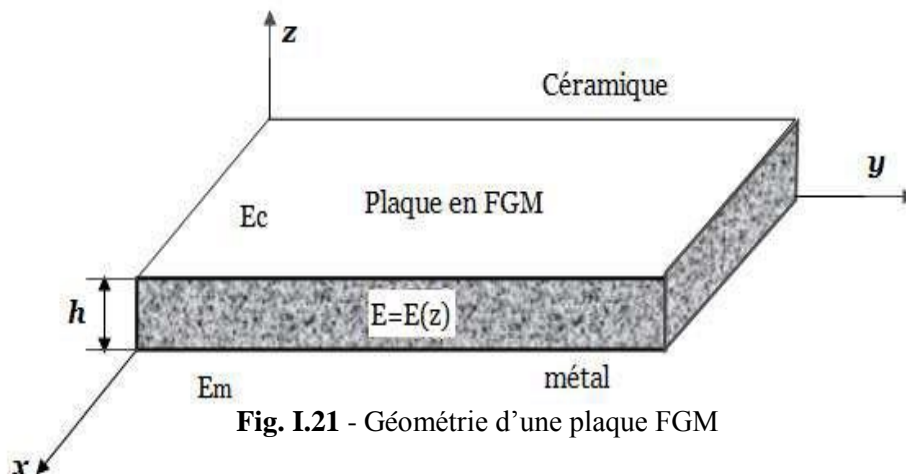


Fig. I.21 - Géométrie d'une plaque FGM

Les coordonnées  $x$  et  $y$  définissent le plan de la plaque, tandis que l'axe  $z$  est perpendiculaire à la surface moyenne de la plaque et dans la direction de l'épaisseur. Les propriétés du matériau dont le module de Young et le coefficient de Poisson sur les faces supérieures et inférieures sont différentes. Ils varient de façon continue, suivant l'épaisseur (l'axe  $z$ ) soit :  $E = E(z)$  et  $\nu = \nu(z)$ .

Jin et Batra indiquent que l'effet du coefficient de poisson sur les déformations est négligeable comparativement à celui du module de Young [189]. Par conséquent, le coefficient de Poisson peut être supposé comme constant. Cependant, Le module de Young dans la direction de l'épaisseur de la plaque FGM varie en fonction de la loi de puissance (P-FGM), la fonction exponentielle (E-FGM) ou avec la fonction sigmoïde (S-FGM).

#### I.2.4.1 Les propriétés matérielles de la plaque P-FGM :

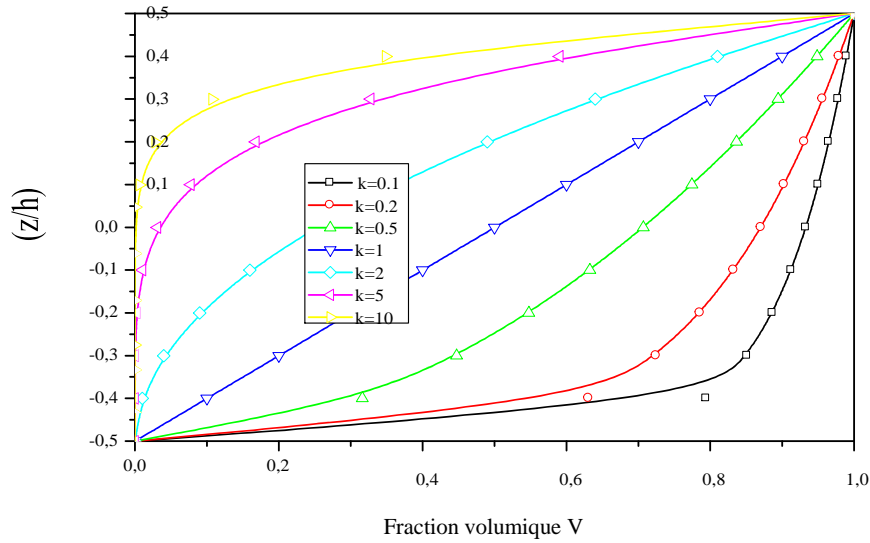
La fraction volumique de la classe P-FGM obéit à une fonction en loi de puissance comme suit :

$$V(z) = \left( \frac{z + h/2}{h} \right)^k \quad (\text{I.10})$$

Où  $k$  est un paramètre matériels et  $h$  est l'épaisseur de la plaque. Une fois la fraction volumique locale  $V(z)$  à été définie, les propriétés matérielles d'une plaque P-FGM peuvent être déterminées par la loi des mélanges [190]:

$$E(z) = E_m + (E_c - E_m)V(z) \quad (\text{I.11})$$

Où  $E_m$  et  $E_c$  sont respectivement les modules de Young de la surface inférieure ( $z = -h/2$ ) et de la surface supérieure ( $z = h/2$ ) de la plaque FGM. La variation du module de Young dans la direction d'épaisseur de la plaque P-FGM est représentée sur la figure I.21. Il apparaît clairement que la fraction volumique change rapidement près de surface inférieure pour  $k < 1$ , et augmenté rapidement près de la surface supérieure pour  $k > 1$ .



**Fig. I.22** - Variation de la fraction volumique dans une plaque P-FGM [193]

### I.2.4.2 Les propriétés matérielles de la plaque S-FGM

chi et Chung ont défini la fraction de volume de la plaque FGM en utilisant deux fonctions de loi de puissance pour assurer une bonne distribution des contraintes parmi toutes les interfaces [191]. Les deux fonctions de loi de puissance sont définis par :

$$V_1(z) = \frac{1}{2} \left( \frac{h/2 + z}{h/2} \right)^k \text{ pour } -h/2 \leq z \leq 0 \quad (\text{I.12})$$

$$V_2(z) = 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{h/2 - z}{h/2} \right)^k \text{ pour } 0 \leq z \leq h/2 \quad (\text{I.13})$$

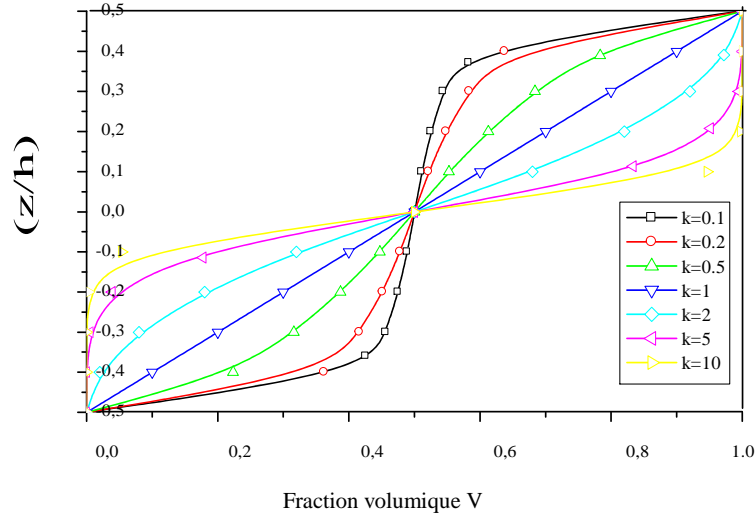
En utilisant la loi des mélanges, le module de Young de la plaque S-FGM peut être calculé par :

$$V_1(z)E_1 + [1 - V_1(z)]E_2 \text{ pour } -h/2 \leq z \leq 0 \quad (\text{I.14a})$$

$$V_2(z)E_1 + [1 - V_2(z)]E_2 \text{ pour } 0 \leq z \leq h/2 \quad (\text{I.14b})$$

La figure I.22 montre que la variation de la fraction volumique définie par les

équations (I.14a) et (I.14b) représente les distributions sigmoïdes, et cette plaque FGM est appelée (Plaque S-FGM).



**Fig. I.23** -Variation de la fraction volumique dans une plaque S-FGM [193]

### I.2.4.3 Les propriétés matérielles de la plaque E-FGM :

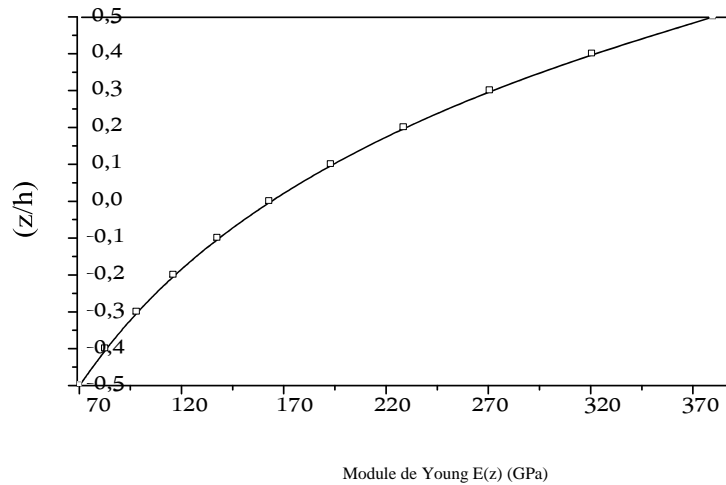
Pour décrire les propriétés matérielles des matériaux FGM, la plupart des chercheurs utilisent la fonction exponentielle qui s'écrit sous la forme [192].

$$E(z) = E_2 e^{B(z+h/2)} \quad (\text{I.15})$$

avec:

$$B = \frac{1}{h} \ln \left( \frac{E_1}{E_2} \right) \quad (\text{I.16})$$

La variation du module de Young à travers l'épaisseur de la plaque E-FGM est représentée sur la figure I.23.



**Fig. I.24** - Variation de la fraction volumique dans une plaque E-FGM [193]

### **I.2.5 Domaines d'applications des matériaux fonctionnellement gradués**

Le concept des matériaux fonctionnellement gradués est applicable dans des nombreux domaines, comme il est illustré dans la tableau I.5 Il a été initialement conçu pour l'industrie de l'aéronautique, où les FGM ont fournis deux propriétés contradictoires telles que la conductivité et l'isolation thermique et dans un matériau. Actuellement, ils permettent la production des matériaux légers, forts et durables, et ils sont applicables dans un large intervalle des domaines tels que les matériaux de construction, matériaux de conversion d'énergie, nucléaire et semi-conducteurs.

<b>Domaines</b>	<b>Applications</b>
<b>Aérospatial</b>	Composants de moteur-fusée, corps des avions spatiaux
<b>Ingénierie</b>	Outils de coupe éléments de moteur
<b>L'énergie nucléaire</b>	Composants des, réacteurs nucléaires, pastilles de combustible
<b>Optiques</b>	Fibres optiques, lentilles
<b>Matières biologiques</b>	Implants, peau artificielle
<b>Chimique</b>	L'échangeur de chaleur, tube de chaleur, récipient de réaction
<b>Électronique</b>	Semi-conducteur à bande graduée
<b>Conversion d'énergie</b>	Générateur thermoélectrique, Convertisseur thermoïonique Pile à combustible
<b>Produits</b>	Matériaux de constructions, Corps de voiture, Verres de fenêtre

**Tab. I.5** - Les principaux domaines d'application des FGM.



## Bibliographies

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brian, R.F. Curl, and R.E. Smalley. C(60) : Buckminsterfullerene. *Nature*, 318 :6042, 1985.
- [2] S. Iijima. Helical Microtubules of Graphitic Carbon. *Nature*, 354 :56, 1991.
- [3] R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, editors. Physical properties of Carbon nanotubes. Imperial College Press, London, 1998.
- [4] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and Ph. Avouris, editors. Carbon nanotubes : synthesis, structure, properties, and applications. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [5] S. Iijima. Microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 354 :56, 1991.
- [6] A. Loiseau ; P. Launois ; P. Petit ; S. Roche ; J.-P. Salvetat. Understanding carbon nanotubes : from basics to applications. Springer, Berlin, 2006.
- [7] R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, editors. Physical properties of Carbon nanotubes. Imperial College Press, London, 1998.
- [8] R. Ma; Y. Bando ; T. Sato ; K. Kurashima. Thin boron nitride nanotubes with unusual large inner diameters. *Chem. Phys. Lett.*, 350 :434, 2001.
- [9] R. S. Lee ; J. Gavillet ; M. Lamy de la Chapelle ; A. Loiseau ; J.-L. Cochon ; D. Pigache ; J. Thibault ; F. Willaime. Catalyst-free synthesis of boron nitride single-wall nanotubes with a preferred zig-zag con\_figuration. *Phys. Rev. B*, 64 :121405, 2001.
- [10] R. Arenal ; M. Kociak ; A. Loiseau ; D.-J. Miller. Determination of chiral indices of individual single- and double-walled boron nitride nanotubes by electron diffraccon. *Appl. Phys. Lett.*, 89 :073104, 2006.
- [11] Balmain W.H. *Phil. Mag.* 1842 21, 170.
- [12] Balmain W.H. « Bemerkungen über die Bildung von Verbindungen des Bors und Siliciums mit Stickstoff und gewissen Metallen »*J. Prakt. Chem.* 1842 27, 422.
- [13] Hubàcek M., Ueki M., Sato T., Brozek V. « High-temperature behaviour of hexagonal boron nitride »*Thermochim. Acta* 1996 282/283, 359.
- [14] Economy J., Lin R.Y. « Boron nitride fibers in boron and refractory borides »Ed : Matkovich, V.I., Springer, Berlin, 1977.
- [15] Metals and Ceramics Information center « Engineering property data on selected ceramics, Volume I : Nitrides », Columbus Ohio, 1976.
- [16] Paine R.T., Narula C.K. « Synthetic routes to BN »*Chem. Rev.* 1990 90, 73.
- [17] R.M. Chrenko. Ultraviolet and infrared spectra of cubic boron nitride. *Solid State Comm.*, 14 :511, 1974.
- [18] T.K. Paul, P. Bhattacharya, and D.N. Bose. Characterization of pulsed laser deposited boron nitride thin films on InP . *Appl. Phys. Lett.*, 56 :2648, 1990.
- [19] B. Rother, H.D. Zscheile, C. Weissmantel, C. Heiser, G. Holzhüter, G. Leonhardt, and P. Reich. Preparation and characterization of ion-plated boron nitride. *Thin Solid Films*, 142 :83, 1986.
- [20] B.P. Singh, G. Nover, and G. Will. High pressure phase transformations of cubic boron nitride from amorphous boron nitride using magnesium boron nitride as the catalyst. *J ; Crys. Growth*, 152 :143, 1995.

- [21] G. Kern, G. Kresse, and J. Hafner. Ab Initio Calculations of the Lattice Dynamics and Phase Diagram of Boron Nitride. *Phys. Rev. B*, 59 :8551, 1999.
- [22] L. Vel, G. Demazeau, and J. Etourneau. c-BN : synthesis, physicochemical properties and applications. *Materials science and engineering*, B10 :149, 1991.
- [23] S. Bohr, R. Haubner, and B. Lux. Comparative aspects of c-BN and diamond CVD. *Diamond and Related Materials*, 4 :714, 1995.
- [24] H. Sachdev, R. Haubner, H. N'oth, and B. Lux. Investigation of the c-BN/h-BN phase transformation at normal pressure. *Diamond and Related Materials*, 6 :286, 1997.
- [25] A. Janotti, S.-H. Wei, and D.J. Singh. First-principles study of stability of BN and C. *Phys. Rev. B*, 64 :174107, 2001.
- [26] V.L Solozhenko. . *J. Hard Mater.*, 6 :51, 1995.
- [27] T. Soma, A. Sawaoka, and S. Saito. Characterization of wurtzite type boron nitride synthesized by shock compression. *Mater. Res. Bull.*, 9 :755, 1974.
- [28] T. Kuzuba, T. Sato, T. Ishii, and T. Arai. Interlayer binding of the h-BN in rigid layer approximation. *Phys. Rev. B*, 32 :1230, 1985.
- [29] Y.-N. Xu and W.Y. Ching. Calculation of ground-state and optical properties of BN in the hexagonal, cubic and wurtzite structures. *Phys. Rev. B*, 44 :7787, 1991.
- [30] M. Hubacek, M. Ueki, T. Sato, and V. Broiek. High-temperature behaviour of hexagonal boron nitride. *Thermochim. Acta*, 282/283 :359, 1996.
- [31] P. Atkins and J. de Paula. *Physical Chemistry*. Oxford Press, New-York (US), 2002.
- [32] T. Taniguchi ; K. Watanabe. Synthesis of high purity boron nitride single crystals under high pressure by using Ba-BN solvent. *J. Cryst. Growth*, 303 :525, 2007.
- [33] J. Thomas Jr. ; N. E. Weston ; T. E. O'Connor. Turbostratic boron nitride, thermal transformation to ordered-layerlattice boron nitride. *J. Am. Chem. Soc.*, 84 :4619, 1963.
- [34] X. Hao ; M. Yu ; D. Cui ; X. Xu ; Q. Wang ; M. Jiang. The effect of temperature on the synthesis of BN nanocrystals. *J. Cryst. Growth*, 241 :124, 2002.
- [35] X. Hao ; Y. Wu ; J. Zhan ; X. Xu ; M. Jiang. Hydrothermal growth of boron nitride microcrystals. *Cryst. Res. Technol.*, 40 :654, 2005.
- [36] L. L. Sartinska ; A. A. Frolov ; A. Yu. Koval' ; N. A. Danilenko ; I. I. Timfeeva ; B. M. Rud'. Transformation of fine-grained graphite-like boron nitride induced by concentrated light energy. *Mater. Chem. and Phys.*, 109 :20, 2008.
- [37] Synthesis and properties of boron nitride. *Mater. Sci. Forum*, 54-55, 1990.
- [38] S. Zhang ; G. Chen ; B. Wang ; D. Zhang ; H. Yan. Growth of oriented BN films prepared by electron cyclotron resonance CVD. *J. Cryst. Growth*, 223 :545, 2001.
- [39] D. J. Qiu. Investigation on the microstructure and optical properties of c-axis oriented nanocrystalline hexagonal BN films fabricated by hor filament chemical vapor deposition. *Thin Solid Films*, 484 :90, 2005.
- [40] A. B. Preobrajenski ; S. A. Krasnikov ; A. S. Vinogradov ; M. L. Ng ; T. Kaambre ; A. A. Cafolla ; N. Martensson. Adsorption-induced gap states of h-BN on metal surfaces. *Phys. Rev. B*, 77 :085421, 2008.

- [41] K. Watanabe ; T. Taniguchi ; H. Kanda. Direct-bandgap properties and evidence for ultraviolet lasing of hexagonal boron nitride single crystal. *Nat. Mater.*, 3 :404, 2004.
- [42] T. Taniguchi ; S. Yamoka. Spontaneous nucleation of cubic boron nitride single crystal by temperature gradient method under high pressure. *J. Cryst. Growth*, 222 :549, 2001.
- [43] O. Fukunaga. The equilibrium phase boundary between hexagonal and cubic boron nitride. *Diamond Relat. Mater.*, 9 :7, 2000.
- [44] T. Ishii ; T. Sato. Growth of single crystals of h-BN. *J. Cryst. Growth*, 61 :689, 1983.
- [45] Y. Kubota ; K. Watanabe ; O. Tsuda ; T. Taniguchi. Deep ultraviolet light-emitting hexagonal boron nitride synthesized at atmospheric pressure. *Science*, 317 :932, 2007.
- [46] Y. Kubota ; K. Watanabe ; O. Tsuda ; T. Taniguchi. Hexagonal boron nitride single crystal growth at atmospheric pressure using Ni-Cr solvent. *Chem. Mater.*, 2008.
- [47] B. N. Feigelson ; R. M. Frazier ; M. Twigg. III-Nitride crystal growth from nitride-salt solution. *J. Cryst. Growth*, 305 :399, 2007.
- [48] M. Hubacek ; M. Ueki ; T. Sato ; V. Broiek. High temperature behaviour of hexagonal boron nitride. *Thermochim. Acta*, 282 :359, 1996.
- [49] A. Aydogdu ; N. Sevinc. Carbothermic formation of boron nitride. *J. Eur. Ceram. Soc.*, 23 :3153, 2003.
- [50] R. T. Paine ; C. K. Narula. Synthetic routes to BN. *Chem. Rev.*, 90 :73, 1990.
- [51] L. Shi ; Y. Gu ; L. Chen ; Y. Qian ; Z. Zhang ; J. Ma. Synthesis and morphology control of nanocrystalline BN. *Journal of Solid State Chemistry*, 177 :721, 2004.
- [52] B. Arnaud ; S. Lebègue ; P. Rabiller ; M. Alouani. Huge excitonic effects in layered boron nitride. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :026402, 2006.
- [53] A. Bosak ; J. Serrano ; M. Krisch ; K. Watanabe ; T. Taniguchi ; H. Kanda. Elasticity of hexagonal boron nitride : Inelastic X-ray scattering measurements. *Phys. Rev. B*, 73 :041402, 2006.
- [54] R. Ma, Y. Bando, and T. Sato. CVD synthesis of BN-NTs without metal catalysts. *Chem. Phys. Lett.*, 337 :61, 2001.
- [55] R. Ma, Y. Bando, T. Sato, and K. Kurashima. Growth, morphology and structure of BNNTs. *Chem. Mater.*, 13 :2965, 2001.
- [56] R. Ma, Y. Bando, T. Sato, and K. Kurashima. Thin boron nitride NTs with unusual large inner diameters. *Chem. Phys. Lett.*, 350 :434, 2001.
- [57] C.C. Tang, Y. Bando, T. Sato, and K. Kurashima. A novel precursor for synthesis of pure BN-NTs. *Chem. Comm.*, 12 :1290, 2002.
- [58] C.C. Tang, Y. Bando, and D. Golberg. MW BN-NTs synthesized by carbon-free method. *J. Solid State Chem.*, 177 :2670, 2004.
- [59] C.C. Tang, M. Lamy de la Chapelle, P. Li, Y.M. Liu, H.Y. Dang, and S.S. Fan. Catalytic growth of NT and nanobamboo structures of BN. *Chem. Phys. Lett.*, 342 :492, 2001.

- [60] C.C. Tang, S.S. Fan, P. Li, Y.M. Liu, and H.Y. Dang. Synthesis of BN in tubular form. *Mater. Letters*, 51 :315, 2001.
- [61] S.Y. Bae, H.W. Seo, J. Park, Y.S. Choi, J.C. Park, and S.Y. Lee. BN NTs synthesized in the temperature range 1000-1200°C. *Chem. Phys. Lett.*, 374 :534, 2003.
- [62] W. Han, Y. Bando, K. Kurashima, and T. Sato. Synthesis of BN-NTs from C-NTs by a substitution reaction. *Appl. Phys. Lett.*, 73 :3085, 1998.
- [63] D.-F. Lii, J.-L. Huang, L.-J. Tsui, and S.-M. Lee. Formation of BN films on carbon fibers by dip-coating. *Surf. and Coatings Technology*, 150 :269, 2002.
- [64] W. Han, P. Redlich, F. Ernst, and M. Rühle. Synthesizing BNNTs filled with SiC nanowires by using CNTs as templates. *Appl. Phys. Lett.*, 75 :1875, 1999.
- [65] D. Golberg, Y. Bando, W. Han, K. Kurashima, and T. Sato. SW B-doped carbon, B/N- doped carbon and BN NTs synthesized from SW-CNTs trough a substitution reaction. *Chem. Phys. Lett.*, 308 :337, 1999.
- [66] Y. Bando, D. Golberg, M. Mitome, K. Kurashima, and T. Sato. C to BN conversion MWNTs as revealed by energyfiltering TEM. *Chem. Phys. Lett.*, 346 :29, 2001.
- [144] R.T. Paine and C.K. Narula. Synthetic routes to BN. *Chem. Rev.*, 90 :73, 1990.
- [67] F.L. Deepak, C.P. Vinod, K. Mukhopadhyay, A. Govindaraj, and C.N.R. Rao. BN-Nts and nanowires. *Chem. Phys. Lett.*, 353 :345, 2002.
- [68] E. Borowiak-Palen, T. Pichler, G.G. Fuentes, B. Bendjemil, X. Liu, A. Graff, G. Behr, R.J. Kalenczuk, M. Knupferand, and J. Fink. Infrared response of multiwall boron nitride nanotubes. *Chemical Communication*, :82, 2003.
- [69] G.G. Fuentes, E. Borowiak-Palen, T. Pichler, X. Liu, A. Graff, G. Behr, R.J. Kalenczuk, and M. Knupferand J. Fink. Electronic structure of multiwall boron nitride nanotubes. *Phys. Rev. B*, 67 :35429, 2003.
- [70] D. Golberg, Y. Bando, M. Eremets, K. Takemura, K. Kurashima, and H. Yusa. NTs in BN laser heated at high pressure. *Appl. Phys. Lett.*, 69 :2045, 1996.
- [71] D.P. Yu, X.S. Sun, C.S. Lee, I. Bello, S.T. Lee, H.D. Gu, K.M. Leung, G.W. Zhou, Z.F. Dong, and Z. Zhang. Synthesis of boron nitride nanotubes by means of excimer laser ablation at high temperature. *Appl. Phys. Lett.*, 72 :1966, 1998.
- [72] G.W. Zhou, Z. Zhang, Z.G. Bai, and D.P. Yu. Catalyst effects on formation of boron nitride nano-tubules synthesized by laser ablation. *Solid State Comm.*, 109 :555, 1999.
- [73] T. Laude, Y. Matsui, A. Marraud, and B. Jouffrey. Long ropes of boron nitride nanotubes grown by a continuous laser heating. *Appl. Phys. Lett.*, 76 :3239, 2000.
- [74] D. Golberg, A. Rode, Y. Bando, M. Mitome, E. Gamaly, and B. Luther-Davies. Boron nitride nanostructures formed by ultra-high-repetition rate laser ablation. *Diamond and related materials*, 12 :1269, 2003.
- [75] Y. Shimizu, Y. Moriyoshi, S. Komatsu, T. Ikegami, T. Ishigaki, T. Sato, and Y. Bando. BN-NTs, webs, and coexisting amorphous phase formed by the plasma jet method. *Thin Solid Films*, 316 :178, 1998.

- [76] N.G. Chopra, R.J. Luyken, K. Cherrey, V.H. Crespi, M.L. Cohen, S.G. Louie, and A. Zettl. Boron nitride nanotubes. *Science*, 69 :996, 1995.
- [77] M. Terrones, D. Srivastava, H. Terrones, J.P. Zhang, S. Ramos, J.P. Hare, R. Castillo, K. Prasad, A.K. Cheethan, H.W. Kroto, and D.R.M. Walton. Metal particle catalysed production of nanoscale BN structures. *Chem. Phys. Lett.*, 259 :568, 1996.
- [78] A. Loiseau, F. Willaime, N. Demoncey, G. Hug, and H. Pascard. Boron Nitride Nanotubes with Reduced Numbers of Layers Synthesized by Arc Discharge. *Phys. Rev. Lett.*, 76 :4737, 1996.
- [79] Y. Saito, M. Maida, and T. Matsumoto. Structures of BN-NTs with single-layer and multilayers produced by arc discharge. *J. Appl. Phys.*, 38 :159, 1999.
- [80] J. Cumings and A. Zettl. Mass-production of BN double-wall NTs and nanococoons. *Chem. Phys. Lett.*, 316 :211, 2000.
- [81] M. Kuno, T. Oku, and K. Suganuma. Synthesis of BN-NTs and nanocapsules with LaB<sub>6</sub>. *Diam. Relat. Mater.*, 10 :1231, 2001.
- [82] T. Oku. Synthesis and atomic structures of BN-NTs. *Physica B*, 323 :357, 2002.
- [83] T. Oku and M. Kuno. Synthesis, argon/hydrogen storage and magnetic properties of BN-NTs and nanocapsules. *Diam. Relat. Mater.*, 12 :840, 2003.
- [84] Y. Chen, J.F. Gerald, J.S. Williams, and S. Bulcock. Synthesis of BNNTs at low temperatures using reactive ball milling. *Chem. Phys. Lett.*, 299 :260, 1999.
- [85] Y. Chen, L.T. Chadderton, J.F. Gerald, and J.S. Williams. A solid-state process for formation of BNNTs. *Appl. Phys. Lett.*, 74 :2960, 1999.
- [86] Y. Chen, L.T. Chadderton, J.S. Williams, and J.F. Gerald. Solid-state formation of C- and BN-NTs. *Mater. Science Forum*, 343-346 :63, 1999.
- [87] M. Terauchi, M. Tanaka, H. Matsuda, M. Takeda, and K. Kimura. Helical Nts of h-BN. *J. Electr. Microsc.*, 1 :75, 1997.
- [88] M. Terauchi, M. Tanaka, K. Suzuki, A. Ogino, and K. Kimura. Production of zigzag-type BN nanotubes and BN cones by thermal annealing. *Chem. Phys. Lett.*, 324 :359, 2000.
- [89] E.J.M. Hamilton, S.E. Dolan, C.M. Mann, H.O. Colijn, C.A. McDonald, and S.G. Shore. Preparation of amorphous BN and its conversion to a turbostratic, tubular form. *Science*, 260 :659, 1993.
- [90] K.B. Shelimov and M. Moskovits. Composite nanostructures based on template-grown BN-NTs. *Chem. Mater.*, 12 :250, 2000.
- [91] O.R. Lourie, C.R. Jones, B.M. Bartlett, P.C. Gibbons, R.S. Ruoff, and W.E. Buhro. CVD growth of BN-NTs. *Chem. Mater.*, 12 :1808, 2000.
- [92] X. Chen, X. Wang, J. Liu, Z. Wang, and Y. Qian. A reduction-nitridation route to BNNTs. *Appl. Phys. A*, :Version en ligne (29/07/2004), 2004.
- [93] J. Gavillet. PhD thesis, Université Paris VI, Paris, 2001.
- [94] P. Gleize, M.C. Schouler, P. Gadelle, and M. Caillet. Growth of tubular BN filaments. *J. Mater. Sci.*, 29 :1575, 1994.
- [95] R.S. Lee, J. Gavillet, M. Lamy de la Chapelle, A. Loiseau, J.-L. Cochon, D. Pigache, J. Thibault, and F. Willaime.

Catalyst-free of BN SWNTs with a preferred zig-zag configuration. *Phys. Rev. B*, 64 :R121405, 2001

[96] D. Golberg and Y. Bando. Unique morphology of BNNTs. *Appl. Phys. Lett.*, 79 :415, 2001.

[97] B.G. Demczyk, J. Cumings, A. Zettl, and R.O. Ritchie. Structure of boron nitride nanotubes. *Appl. Phys. Lett.*, 78 :2772, 2001.

[98] R. Ma, Y. Bando, H. Zhu, T. Sato, C. Xu, and D. Wu. Hydrogen uptake in BNNTs at room temperature. *JACS*, 124 :7672, 2002.

[99] X. Blase, A. Rubio, S.G. Louie, and M.L. Cohen. Stability and band gap constancy of BN nanotubes. *Europhysics Lett.*, 28 :335, 1994.

[100] R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, editors. *Physical properties of Carbon nanotubes*. Imperial College Press, London, 1998.

[101] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and Ph. Avouris, editors. *Carbon nanotubes : synthesis, structure, properties, and applications*. Springer-Verlag, Berlin, 2001.

[102] R. Arenal, O. Stephan, M. Kociak, D. Taverna, C. Colliex, A. Rubio, and A. Loiseau. Low-Loss EELS measurements on BNNTs. *In preparation*, 2004.

[103] N.G. Chopra and A. Zettl. Measurement of the elastic modulus of a multi-wall BN-NT. *Solid State Comm.*, 105 :297, 1998.

[104] A.P. Suryavanshi, M.-F. Yu, J. Wen, C.C. Tang, and Y. Bando. Elastic modulus and resonance behaviour of BN-NTs. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :2527, 2004.

[105] L. Vaccarini, C. Goze, L. Henrard, E. Hernandez, P. Bernier, and A. Rubio. Mechanical and electronic properties of C and BN-NTs. *Carbon*, 38 :1681, 2000.

[106] Y. Chen, J. Zou, S.J. Campbell, and G. Le Caer. BN-NTs : pronounced resistance to oxidation. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :2430, 2004.

[107] P.M. Ajayan, T.W. Ebbesen, T. Ixhishashi, S. Iijima, K. Tanigaki, and H. Hiura. Opening CNTs with oxygen and implications for filling. *Nature*, 362 :522, 1993.

[108] X. Blase, A. Rubio, S.G. Louie, and M.L. Cohen. Stability and band gap constancy of BN nanotubes. *Europhysics Lett.*, 28 :335, 1994.

[109] X. Blase, A. Rubio, S.G. Louie, and M.L. Cohen. Quasiparticle band structure of bulk hexagonal BN and related systems. *Phys. Rev. B*, 51 :6868, 1995.

[110] A. Rubio, J.L. Corkill, and M.L. Cohen. Theory of graphitic boron nitride nanotubes. *Phys. Rev. B*, 49 :5081, 1994.

[111] Y.-H. Kim, K.J. Chang, and S.G. Louie. Electronic structure of radially deformed BN and BC<sub>3</sub> NTs. *Phys. Rev. B*, 63 :205408, 2001.

[112] K.H. Khoo, M.S.C. Mazzoni, and S.G. Louie. Tuning the electronic properties of BN NTs with transverse electric fields : A giant Stark effect. *Phys. Rev. B*, 69 :201401, 2004.

[113] V. Meunier, C. Roland, J. Bernholc, and M. Buongiorno Nardelli. Electronic and field emission properties of BN/C NT superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, 81 :46, 2002.

[114] J. Cumings and A. Zettl. Field emission properties of BN-NTs. *AIP conference Proceedings : Electronic Properties of Molecular Nanostructures*, :577, 2001.

- [115] J. Cumings and A. Zettl. Field emission and current-voltage properties of BN-NTs. *Solid State Comm.*, 129 :661, 2004.
- [116] M. Radosavljevic, J. Appenzeller, V. Derycke, R. Martel, P. Avouris, A. Loiseau, J.-L. Cochon, and D. Pigache. Electronic structure of atomically resolved C-NTs. *Appl. Phys. Lett.*, 82 :4131, 2003.
- [117] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and Ph. Avouris, editors. *Carbon nanotubes : synthesis, structure, properties, and applications*. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [118] R. Czerw, S. Webster, D.L. Carroll, S.M.C Vieira, P.R. Birkett, C.A. Rego, and S. Roth. Tunneling microscopy and spectroscopy of multiwalled BN-NTs. *Appl. Phys. Lett.*, 83 :1617, 2003.
- [119] M. Ishigami, S. Aloni, and A. Zettl. STM and STS of BN-NTs. *AIP conference Proceedings : Electronic Properties of Molecular Nanostructures*, 685 :389, 2003.
- [120] N.G. Chopra and A. Zettl. Measurement of the elastic modulus of a multi-wall BN-NT. *Solid State Comm.*, 105 :297, 1998.
- [121] A.P. Suryavanshi, M.-F. Yu, J. Wen, C.C. Tang, and Y. Bando. Elastic modulus and resonance behaviour of BN-NTs. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :2527, 2004
- [122] E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, and A. Rubio. Elastic properties of C and BxCyNz composite. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :4502, 1998.
- [123] T. Dumitrica, H. Bettinger, G.E. Scuseria, and B. Yakobson. Thermodynamics of yield in BN-NTs. *Phys. Rev. B*, 68 :085412, 2003.
- [124] H.F. Bettinger, T. Dumitrica, G.E. Scuseria, and B.I. Yakobson. Mechanically induced defects and strength of BNNTs. *Phys. Rev. B*, 65 :041406, 2002.
- [125] E.J. Mele and P. Kral. Electric polarization of heteropolar NTs as a geometric phase . *Phys. Rev. Lett.*, 88 :056803, 2002.
- [126] S.M. Nakhmanson, A. Calzolari, V. Meunier, J. Bernholc, and M. Buongiorno Nardelli. Spontaneous polarization and piezoelectricity in BN-NTs. *Phys. Rev. B*, 67 :235406, 2003.
- [127] D. Sanchez-Portal and E. Hernandez. Vibrational properties of single-wall nanotubes and monolayers of hexagonal BN. *Phys. Rev. B*, 66 :235415, 2002.
- [128] V.N. Popov. Lattice dynamics of SW-BNNTs. *Phys. Rev. B*, 67 :085408, 2003..
- [129] Y. Xiao, X.H. Yan, J. Xiang, Y.L. Mao, and Y. Zhang. Specific heat of single-walled BN-NTs. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :4626, 2004.
- [130] Y. Chen, J. Zou, S.J. Campbell, and G. Le Caer. BN-NTs : pronounced resistance to oxidation. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :2430, 2004.
- [131] W. Mickelson, S. Aloni, W.-Q. Han, J. Cumings, and A. Zettl. Packing C60 in BN-NTs. *Science*, 300 :467, 2003.
- [132] Y. Bando, K. Ogawa, and D. Golberg. Insulating nanocables : invar Fe-Ni alloy nanorods inside BNNTs. *Chem. Phys. Lett.*, 347 :349, 2001.
- [133] D. Golberg, Y. Bando, K. Fushimi, M. Mitome, L. Bourgeois, and C.-C. Tang. Nanoscale oxygen generators : MgO<sub>2</sub>-based fillings of BNNTs. *J. Phys. Chem.*, 107 :8726, 2003.
- [134] Y.-C. Zhu, Y. Bando, and R.-Z. Ma. Aluminium borate-BN nanocables. *Adv. Mater.*, 15 :1377, 2003.

- [135] R. Arenal, J.L. Cochon, O. Stephan, and A. Loiseau. MWBNNTs fillings by CaB<sub>6</sub>. , En préparation.
- [136] S.-H. Jhi and Y.-K. Kwon. Hydrogen adsorption on BN-NTs : a path to room-temperature hydrogen storage. *Phys. Rev. B*, 69 :245407, 2004.
- [137] X. Wu, J. Yang, J.G. Hou, and Q. Zhu. Deformation-induced site selectivity for hydrogen adsorption on BN-NTs. *Phys. Rev. B*, 69 :153411, 2004.
- [138] W.H. Moon and H.J. Hwang. Molecular-dynamics simulation of structure and thermal behaviour of BN-NTs. *Nanotechnology*, 15 :431, 2004.
- [139] Izard Nicolas, Nanotubes de carbone : systèmes pour la limitation optique, Thèse de Doctorat, Université Montpellier II (2004)
- [140] B. Park, J.W. Shim, H.J. Choi, Park Y.W. *Synthetic Metals*, 56:3258 (1993).
- [141] M.T. Yin et M.L. Cohen, *Physical Review Letter*, 50:2006 (1983).
- [142] Daedulus. *New Scientist* (1966).
- [143] H.W. Kroto Heath, J.R., S.C O'Brien, R.F. Curl et R.E. Smalley *Nature*, 318 :162 (1985).
- [144] W. Krätschmer, L.D. Lamb, K. Fostiropoulos et D.R. Huffman *Nature*, 347 :354 (1990).
- [145] L.T.Scott, M.M. Boorum, B.J. McMahon, S. Hagen, J. Mack, J. Blank, H. Wegner et A. Meijere, *Science*, 295 :1500 (2002)
- [146] D.S. Bethune, C.H. Kiang, M.S. de Vries, G. Gorman, J. Vasquez et R. Beyers. *Nature*, 363 :605 (1993).
- [147] S. Iijima et T. Ichihashi. *Nature*, 363 :603 (1993).
- [148] O. Zhou, R.M. Fleming, D.W. Murphy, C.H. Chen, R.C. Haddon, A.P. Ramirez et S.H. Glarum. *Science*, 263 :1744 (1994).
- [149] S. Amelinckx, D. Bernaerts, X.B. Zhang, G. Van Tendeloo et J. Van Landuyt. *Science*, 267 :1334 (1995).
- [150] W. Ruland, A.K. Schaper, H. Hou et A. Greiner. *Carbon*, 41 :423 (2003).
- [151] P.M. Ajayan, T.W. Ebbesen, *Rep. Prog. Phys.* 60, 1025-1062 (1997).
- [152] W.Z. Li, S.S. Xie, L.X. Qian, B.H. Chang, B.S. Zou, W.Y. Zhou, R.A. Zhao, et G. Wang, *Science* 274, 1701 (1996)
- [153] H. Dai, A.G. Rinsler, P. Nikolaev, A. Thess, D.T. Colbert, R. Smalley, *Chem. Phys. Lett.* 260, 471-475 (1996)
- [154] W. Krätschmer, L.D. Lamb, K. Fostiropoulos et D.R. Hu\_man .*Nature*, 347 :354 (1990).
- [155] S. Iijima. *Nature*, 354 :56 (1991).
- [156] C. Journet, W.K. Maser, P. Bernier, A. Loiseau, M. Lamy de la Chapelle, S. Lefrant, P. Deniard, R. Lee et J.E. Fischer. *Nature*, 388 :756 (1997).



- [157] Journet Catherine. La production de nanotubes de carbone. Thèse de Doctorat, Université Montpellier II (1998).
- [158] [http : //www.nanoledge.com](http://www.nanoledge.com).
- [159] [http : //www.opus1.com/~mercorp](http://www.opus1.com/~mercorp).
- [160] A. Thess, R. Lee, P. Nikolaev, H. Dai, P. Petit, J. Robert, C. Xu, Y. Hee Lee, S. Gon Kim, A.G. Rinzler, D.T. Colbert, G.E. Scuseria, D. Tomanek, J.E. Fischer et R.E. Smalley. *Science*, 273 :483 (1996).
- [161] W.K. Maser, E. Mu Noz, A.M. Benito, M.T. Martínez, G.F. de la Fuente, Y. Maniette, E. Anglaret et J.L. Sauvajol, *Chemical Physics Letters*, 292 :587-593 (1998).
- [162] M. Endo et al. *Carbon*, 33 :873, 1995.
- [163] S. B. Sinnott, C. T. White, “Properties of Novel Fullerene Tubule Structures: A Computational Study”, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 359, p 241-246, 1995.
- [164] M. M. J. Treacy, T. W. Ebbesen, “Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes”, *Nature (London)*, 381, p 678-680, 1996.
- [165] E. W. Wong, P. E. Sheehan, “Nanobeam Mechanics: Elasticity, Strength, and Toughness of Nanorods and Nanotubes”, *Science*, 277, 199), p 1971-1975.
- [166] J. F. Després, E. Daguerre, « Flexibility of graphene layers in carbon nanotubes”, *Carbon*, 33, p 87-92, 1995.
- [167] S. Iijima, Ch. Brabec, “Structural flexibility of carbon nanotubes”, *J. Phys. Chem.*, 104, p 2089-2092, 1996.
- [168] J. XU, “Nanotube Electronics: Non-CMOS Routes”, *PROCEEDINGS OF THE IEEE*, VOL. 91, NO. 11, NOVEMBER p 1819 -1829, 2003.
- [169] M. Sagnes, B. Raquet, B. Lassagne, J. M. Broto, E. Flahaut, CH. Laurent, Th. Ondarçuhu, F. Carcenac, and Ch. Vieu, “Probing the electronic properties of individual carbon nanotube in 35T pulsed magnetic field”, *Chem. Phys. Lett.* 372, 733, 2003.
- [170] M. Dragoman, D. Dragoman, “Nanoelectronics principles and devices”, Artech house, 2006.
- [171] A. Raychowdury, K. Roy, “A circuit model for NTC interconnects: comparative study with Cu interconnects for scaled technology”, *Computer aided design*, p 237-240, 2004.
- [172] J. Che, T. Cagin, “Thermal conductivity of Carbon nanotubes”, Seventh Foresight Conference on Molecular Nanotechnology.
- [173] Decossas Sébastien, *Nanotribologie par Microscopie de Force Atomique (AFM) sur des nanotubes de carbone*, Thèse de Doctorat, Université Grenoble I - Joseph Fourier (2001).
- [174] Wong Kang et al., *Physica E* 27 332-340 (2005).
- [175] Fennimore et al., *Nature* 424 408-410 (2003).

- [176] Changhong Ke et al., *Applied Physics Letters* 85, 4 681-683 (2004)
- [177] Lu et al., *Nanotechnology* 18 065501 (2007).
- [178] Zhang Mei et al., *Science* 309, 1215-1219 (2005).
- [179] M. Miyamoto, W.A. Kaysser, B.H. Rabin et al., "Functionally Graded Materials Design". Processing and Applications, (1999).
- [180] S. Suresh, A. Mortensen, "Fundamentals of Functionally Graded Materials", (IOM Communications Ltd., London) (1998).
- [181] A. Öchsner, G.E. Murch, et, M.J.S. de Lemos. "Cellular and Porous Materials", WILEY-VCH, 398-417,(2008).
- [182] T. Hirai, "Functional gradient materials", *Processing of ceramics - Part 2*, Weinheim, Germany: VCH Verlagsgesellschaft mbH Publishers; p.293–341,(1996).
- [183] Jian. C.Y., Hashida. T, Takahashi. H and Saito. M. (1995), "Thermal shock and fatigue resistance evaluation of functionally graded coatings for gas turbine blades by laserheating method", *Composites Engineering*, 879–889,(1995).
- [184] Kawasaki. A and Watanabe. R, "Evaluation of thermo mechanical performance for thermal barrier type of sintered functionally graded materials", *Composites Part B, Engineering*, 29–35, (1997).
- [185] M. Koizumi, "FGM activities in Japan", department of materials chemistry. Ryukoku University, Ohtsu, 520-21 Japan, (1996).
- [186] Boch. P Chartier . Huttepain. M Tapa "casting of  $AL_2O_2/ZrO_2$  laminated composites, (1986) ".
- [187] Yoshihisa Uchida, " Properties of functionally graded materials, Manufactured by Progressive Lamination Method for Applications", 39-51-B, Vol. 39-B,(2004).
- [188] H.-S. Shen, "Functionally Graded Materials - Nonlinear Analysis of Plates and Shells", New York: CRC Press, Taylor & Francis Group, (2009).
- [189] Jin. Z. H, Batra. R. C, *Journal of Thermal Stresses* 19, 317–339, (1996).
- [190] Bao. G, Wang. L, "Multiple cracking in functionally graded ceramic/metalcoatings", *Int. J; Solids Structures*; 32 (19): 2853–2871, (1995).
- [191] Chi. Shyang-ho, Chung Yen-Ling , "Cracking in coating-substrate composites of multi-layered and sigmoid FGM coatings". *Engineering Fracture Mechanics*; 70 (10), 1227–1243, (2003).
- [192] Delale. F, Erdogan. F, "The crack problem for a non homogeneous plane". *ASME Journal of Applied Mechanics*; 50 (3): 609-614, (1983).
- [193] Bachir Bouiadjra. R, "contribution à l'étude de la stabilité des plaques épaisses en composite sur fondations élastiques". Thèse de Doctorat, universités d'Oran Mohamed Boudiaf, (2015).

[194] Arenal de la Concha. R, "synthèse de nanotubes de nitrure de bore". Thèse de Doctorat, universités Orsay- Paris sud XI, (2005).

[195] Aude. M, "Manipulation et fonctionnalisation de nanotube: application aux nanotubes de nitrure de bore ". Thèse de Doctorat, universités Paris sud XI, (2007).

## **Chapitre II**

Les modèles théoriques des milieux continus

## II.1 Introduction

L'étude et l'analyse des vibrations ont pris, au cours des dernières années, un essor considérable en raison du développement de techniques plus en plus sophistiquées et de besoins les plus variés dans différents domaines : mécanique (transports, machines...), acoustique, optique, transmission, etc.

Les préoccupations actuelles peuvent être, très schématiquement, divisées en trois catégories.

La paternité de la théorie des milieux continus est attribuée à Galilée, mais des études récentes indiquent que Léonard de Vinci l'aurait précédé. De Vinci avait supposé que la déformation variait de manière linéaire en s'éloignant de la surface neutre, le coefficient de proportionnalité étant la courbure, mais il ne put finaliser ses calculs car il n'avait pas imaginé la loi de Hooke.

De son côté, Galilée était parti sur une hypothèse incorrecte (il supposait que la contrainte était répartie uniformément en flexion), et c'est Antoine Parent qui obtient la distribution correcte.

Ce sont Leonhard Euler et Jacques Bernoulli qui émirent la première théorie utile vers 1750, alors que Daniel Bernoulli, le neveu du précédent, écrivit l'équation différentielle pour l'analyse vibratoire. À cette époque, le génie mécanique n'était pas considéré comme une science, et on ne considérait pas que les travaux d'une académie des mathématiques puissent avoir des applications pratiques.

Les préoccupations actuelles peuvent être, très schématiquement, divisées en trois catégories.

La première théorique a trait au calcul dynamique des structures en tant que prolongement de la résistance des matériaux et de la mécanique des milieux continus. S'il est possible dans les cas simples, c'est-à-dire pour un nombre restreint de problème, de calculer le comportement de celles-ci et leur isolation pour limiter les nuisances, dans la majorité des cas, les méthodes analytiques deviennent insuffisantes pour obtenir, par exemple, les fréquences de résonance d'ordre élevé de systèmes continus. Ainsi le calcul des premiers modes propres d'un matériau d'axe rectiligne, de section constante, encastrée à une extrémité, libre à l'autre, ne pose pas la moindre difficulté ; par contre, si on lui associe une ou plusieurs autres matériaux de directions et de sections différentes, les solutions deviennent quasi impossibles à trouver. Et pourtant, dans de nombreux cas, il faut absolument connaître ces

fréquences car, pour raisons économie de matière, les constructions sont de plus légères donc appelées à vibrer pour de basses fréquences, en générale situées dans des zones dangereuses pour la structure ou son environnement.

La deuxième concerne une aide extrêmement précieuse, bien que relativement récente, apporté aux bureaux d'études par la mise sur le marché d'ordinateurs et de micro-ordinateurs associés à des progiciels très performants fondés sur la méthode des éléments finis, d'un cout non prohibitif, rendant la partie calcul aisée. Si dans la plupart des cas les résultats sont valables, la plus grande prudence doit être de rigueur lors de l'exploitation des résultats, certains progiciels estompant, par exemple, des modes propres intermédiaires. Cela amène à tempérer, lors de la prise en main de l'outil informatique, l'ardeur des novices pour ces méthodes séduisantes de calcul, si elles permettent de prévoir le comportement de structures impossibles à envisager avec la seule aide de la calculatrice, l'opérateur doit rester extrêmement vigilant et critique vis-à-vis des valeurs affichées à l'écran, d'autant plus qu'il n'a pas eu à intervenir, une fois la modélisation terminée, le déroulement du programme étant complètement aveugle. Dans certaines circonstances, cette stratégie du presse- bouton peu réserver de bien désagréables surprises.

La dernière est d'ordre expérimental : en effet, certains progiciels calculent les modes propres d'ordre élevé avec des erreurs intolérables, aussi l'ultime recours reste l'expérimentation ; la mesure réclame, elle aussi, de multiples connaissances et une extrême rigueur. Il ne suffit plus de brancher, étalonner et lire sur un écran.

## II-2 Le milieu continu

Si l'on regarde la matière sous l'échelle nanoscopique, la matière est granulaire, faite d'atomes. Mais à l'œil nu (donc en se plaçant à notre échelle), un objet solide semble continu, c'est-à-dire que ses propriétés semblent varier progressivement.

L'hypothèse des milieux continus consiste à considérer des milieux dont les propriétés caractéristiques, c'est-à-dire celles qui nous intéressent – densité, élasticité, etc.- sont continues.

Alors le modèle de continuum est basé sur les modèles traditionnels de technologie tels que des nanomatériaux.

Une fois appliqué aux nanotubes, ce modèle traite les molécules comme matériel continu avec une géométrie définie et des propriétés matérielles isotropes (par exemple module de Young).

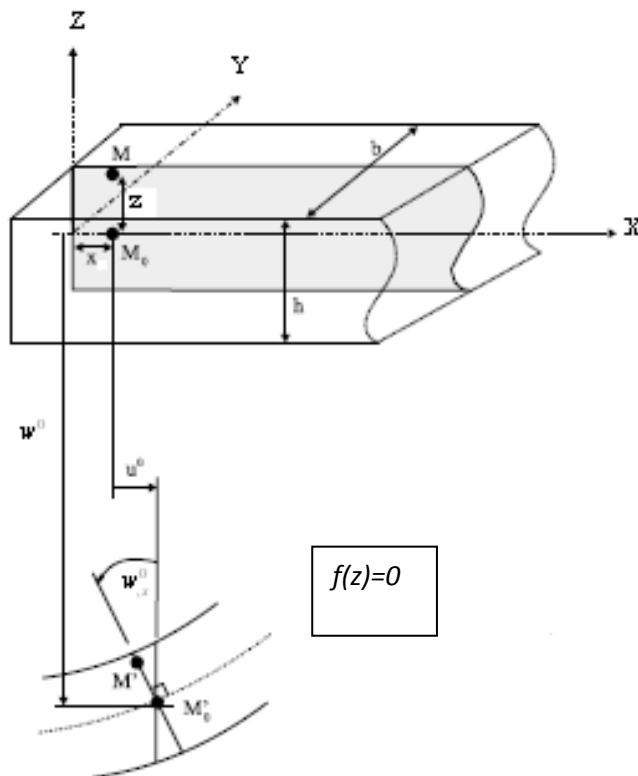
Pour simplifier les essais on admet que les matériaux ont les mêmes propriétés mécaniques en tous points (homogènes) et dans toutes les directions (isotropes).

## II.3 Théories mathématiques

### II.3.1 La théorie d'Euler Bernoulli

La théorie d'Euler-Bernoulli, est un modèle utilisé dans le domaine de la résistance des matériaux.

Dans cette approche, le nombre d'équations ne dépend pas du nombre de couches puisque le matériau multicouche est homogénéisé, donc considérée comme une seule couche.



**Fig. II.1-** Cinématique d'Euler Bernoulli [8]

Dans cette théorie, les modèles sont basés sur une distribution linéaire des déplacements suivant l'épaisseur du matériau. L'hypothèse dans cette théorie :

- Après déformation, les déformations dues au cisaillement transversal sont négligées (pas de cisaillement sur la hauteur du matériau).
- La section transversale reste perpendiculaire à la ligne moyenne de matériaux et la section plane reste plane.
- La fonction  $f(z)$  qui décrit la répartition de déplacement suivant l'épaisseur du matériaux est nulle.

$$f(z)=0 \quad (\text{II.1})$$

Pour le cas des matériau élancées et d'après la théorie classique, le déplacement d'un point M est donné par les deux composantes suivantes :

$$U(M) = \begin{cases} u(x,z) = u_0(x) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} \\ w(x,z) = w_0(x) \end{cases} \quad (\text{II.2})$$

$u(x,z)$ : C'est le déplacement suivant X.

$w(x,z)$ : C'est le déplacement dans la direction de Z.

La rotation de l'axe Y, provoquée par la flexion est tel que :

$$\frac{\partial w_0(x)}{\partial x} = \frac{\partial w_0}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial x} \quad (\text{II.3})$$

Ou  $u_0(x)$  et  $w_0(x)$  sont les composantes de déplacement au milieu de la section et sur la ligne moyenne de nanomatériaux, respectivement le long des axes X et Z.

$$\gamma_{xz}(x) = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.4})$$

Cela veut dire que la distorsion est nulle et par conséquent la contrainte de cisaillement est nulle puisque,

$$\tau_{xz} = G_{xz} \gamma_{xz} = 0 \quad (\text{II.5})$$

« Cette théorie ne tient pas en compte le cisaillement ».



### II-3.2 La théorie de Timoshenko

La théorie de Timoshenko a été développée par le scientifique ukrainien Stephen Timoshenko au début du 20<sup>ème</sup> siècle.

Le modèle prend en compte les effets de déformation, de cisaillement, de rotation et l'inertie. Ce qui convient pour décrire le comportement d'un matériau court, elle est basée sur le principe, qu'après déformation la section plane reste plane mais elle perd sa perpendicularité par rapport à la ligne moyenne de matériaux (figure II.2). Ceci est dû au cisaillement transversal, découvert par Timoshenko, sur l'épaisseur de matériaux.

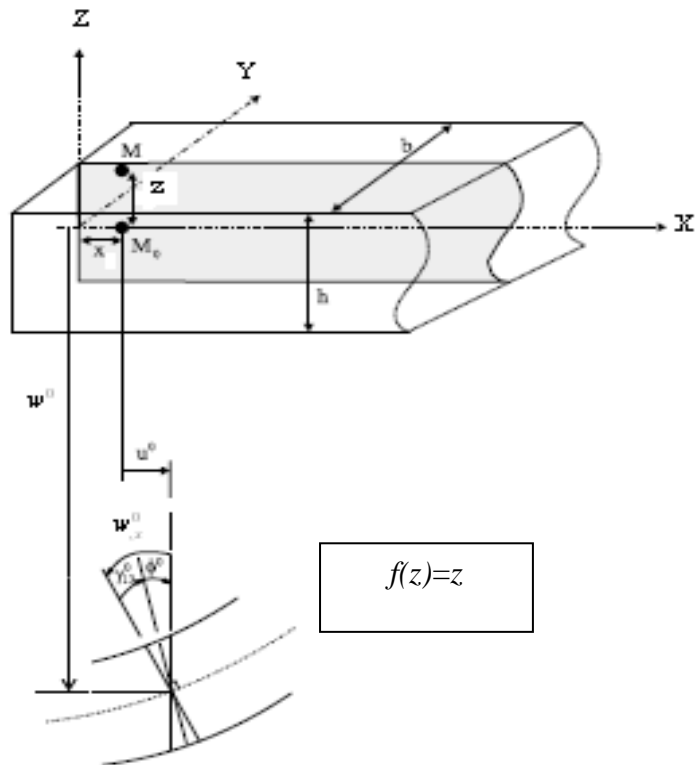
Cette théorie est analogue à la théorie de "Reissner-Mindlin"[1, 2] dans le cas des matériaux épais. Dans ce cas, la fonction  $f(z)$  est égale à  $z$ .

$$f(z)=z \quad (\text{II.6})$$

Il existe un cisaillement uniforme et les déformations dues au cisaillement transversal ne sont pas négligées. Le champ de déplacement d'après Timoshenko s'écrit comme suit :

$$U(M) = \begin{cases} u(x,z) = u_0(x) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + z \varphi_0(x) \\ w(x,z) = w_0(x) \end{cases} \quad (\text{II.7})$$

Où  $\varphi_0(x)$  : est la rotation de la section mesurée sur la ligne moyenne de matériau.



**Fig. II.2** - Cinématique de Timoshenko [8]

Par définition, la distorsion est donnée par la relation suivante

$$\gamma_{xz}(x) = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + \varphi_0(x) + \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} \tag{II.8}$$

$$\gamma_{xz}(x) = \varphi_0(x)$$

Sachant que la contrainte de cisaillement est égale

$$\tau_{xz} = G_{xz} \gamma_{xz} = G_{xz} \varphi_0 \tag{II.9}$$

$G_{xz}$  : est le module de cisaillement transversal qui est supposé constant.

Avec cette théorie, les contraintes tangentielles de cisaillement sont constantes et uniformes sur toute l'épaisseur du matériau, cela veut dire qu'elles existent même sur les bords supérieurs et inférieurs de matériaux et pourtant il n'ya aucun chargement qui induit le cisaillement.

Cette contradiction mène à introduire des coefficients de correction pour mieux considérer le cisaillement transversal. Ces coefficients correcteurs notés "k" dépendent de la forme géométrique de matériaux considérée (par exemple, pour un matériau de section rectangulaire  $k=5/6$ ).

La non nullité des contraintes tangentielles sur les bords extrêmes du matériau et l'introduction des coefficients de correction de cisaillement ont menés d'autres chercheurs à essayer de trouver une autre théorie pouvant tenir compte de ces facteurs, c'est « la théorie d'ordre élevé ».

### **II.3.3 La théorie d'ordre élevé**

La théorie d'ordre élevé est basée sur une distribution non linéaire des champs de déplacement selon l'épaisseur du matériau. Elle est plus précise que la théorie du premier ordre puisqu'elle introduit une fonction qui tient compte du phénomène « gauchissement ».

Par définition : le gauchissement apparaît lorsque la section transversale du matériau perd sa planéité (figure II.3). La fonction  $f(z)$  représente le gauchissement et sa dérivée  $f'(z)$  le cisaillement.

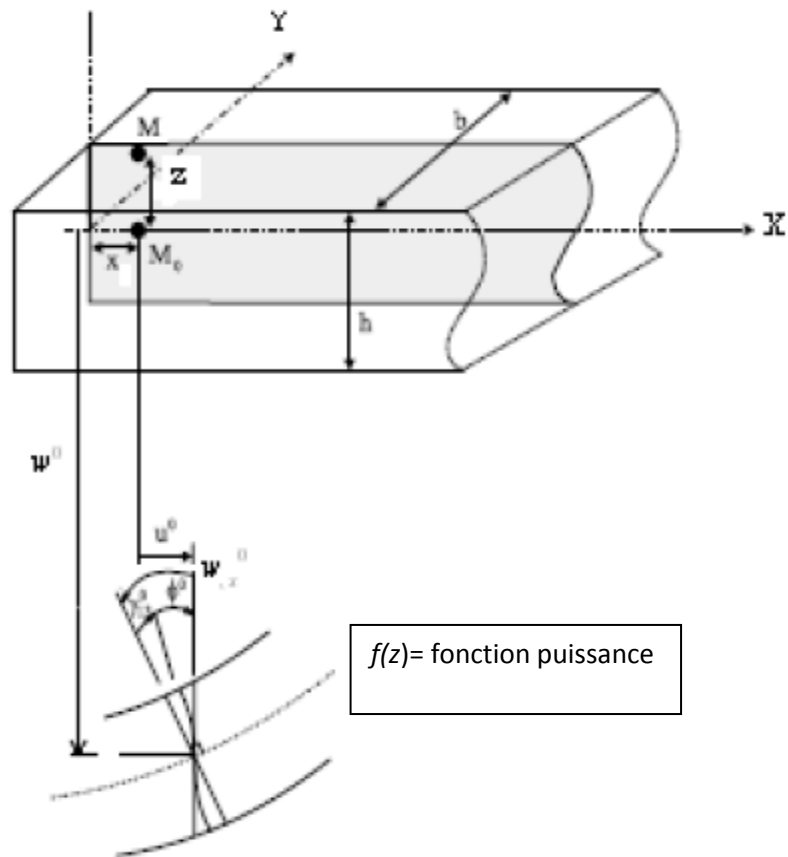


Fig. II.3 cinématique de la théorie d'ordre élevé [8]

Dans ce cas, le champ de déplacement devient :

$$U(M) = \begin{cases} u(x, z) = u_0(x) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + f(z)\varphi_0(x) \\ w(x, z) = w_0(x) \end{cases} \quad (\text{II.10})$$

$$\gamma_{xz}(x) = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + f'(z)\varphi_0(x) + \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} \quad (\text{II.11})$$

$$\gamma_{xz}(x) = f'(z)\varphi_0(x)$$

Pour que les contraintes tangentielles soient nulles sur les bords extrêmes du matériaux, on doit avoir :

$$f'(z) = f'\left(+\frac{h}{2}, -\frac{h}{2}\right) = 0 \quad (\text{II.12})$$

C'est la condition qui nous permet d'avoir une répartition parabolique des contraintes de cisaillement sur l'épaisseur du matériau d'une part et de choisir correctement des fonctions cubiques qui répondent à la condition (II.12).

Selon l'expression de la fonction de gauchissement  $f(z)$ , quelques modèles sont présentés dans la littérature des matériaux en FGM.

- Le modèle Euler-Bernoulli (la théorie classiques) ETB

$$f(z)=0 \quad (\text{II.13})$$

- Le modèle de Timoshenko ou bien la théorie du premier ordre FSDT

$$f(z)=z \quad (\text{II.14})$$

- Le modèle d'ordre élevé, avec l'approche de Levinson [3], Murthy [4] et Reddy [5]

$$f(z) = \frac{5z}{4} \left(1 - \frac{4z^2}{3h^2}\right) \quad (\text{II.15})$$

- Le modèle exponentiel proposé par Afaq et al [6]

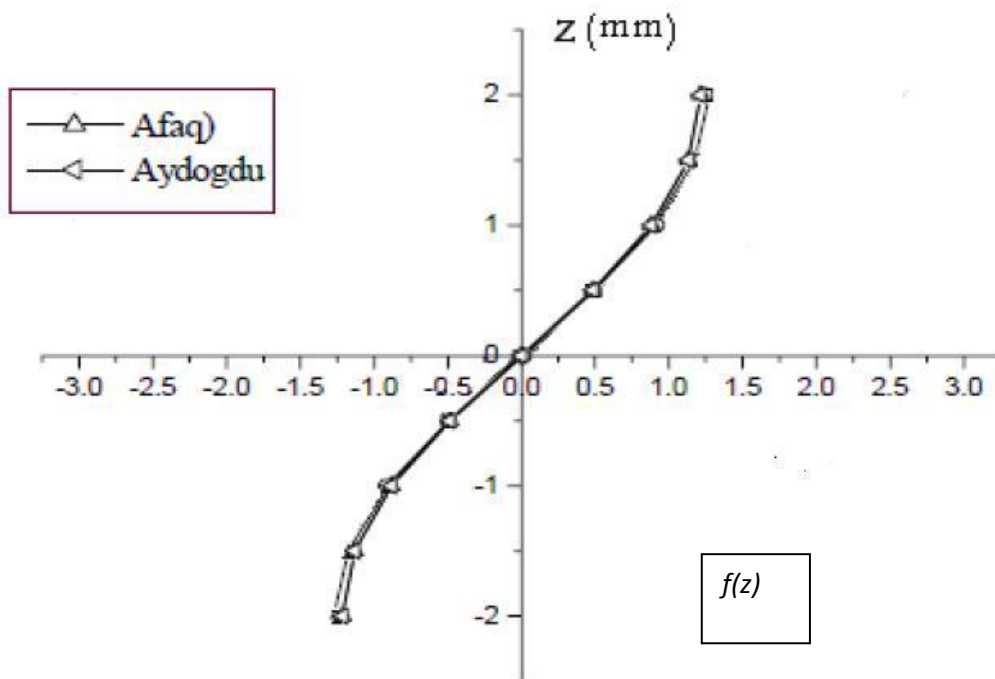
$$f(z) = z e^{-2\left(\frac{z}{h}\right)^2} \quad (\text{II.16})$$

- Le modèle d'Aydogdu [7]

$$f(z) = z \alpha^{\frac{-2\left(\frac{z}{h}\right)^2}{\ln \alpha}} \quad (\text{II.17})$$

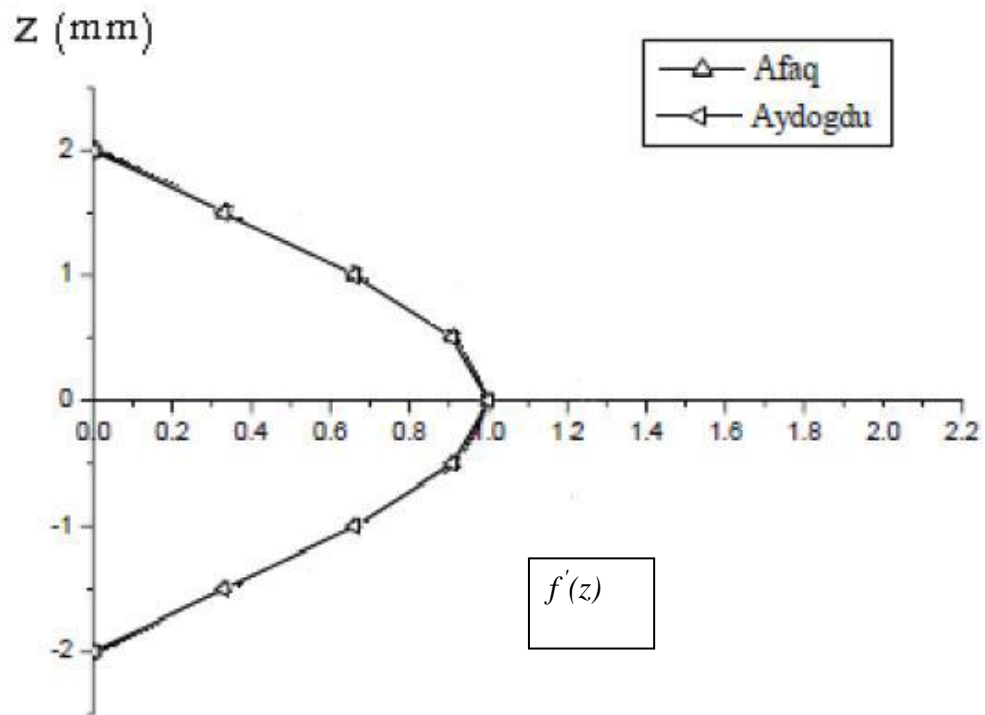
Avec,  $h$  étant l'épaisseur du matériau.

Le choix de la fonction exponentielle permet un développement en puissance pair et impair de la variable  $z$ .



**Fig. II.4** -Variation de la fonction de gauchissement  $f(z)$  des modèles d'Afaq et Aydogdu en fonction de l'épaisseur [6,7]

La figure ci-dessus, illustre la variation de la fonction de gauchissement des modèles d'Afaq et Aydogdu en fonction de l'épaisseur du matériau. Cette fonction est symétrique par rapport au plan moyen du matériau. Les deux modèles convergent et donnent les mêmes résultats.



**Fig. II.5** - variation de la fonction de cisaillement  $f'(z)$  des modèles d'Afaq et Aydogdu en fonction de l'épaisseur [6,7]

La figure II.5, montre la variation de la fonction de gauchissement  $f'(z)$  des modèles d'Afaq et Aydogdu en fonction de l'épaisseur du matériau. Cette fonction est aussi symétrique par rapport au plan moyen du matériau et les deux modèles précités convergent toujours vers les mêmes résultats.

## Bibliographies

- [1] E. Reissner, "A consistment treatment of transverse shear deformations in laminated anisotropic plates". *AIAA J*;10(5):716–8 (1972).
- [2] R.D. Mindlin, "Influence of rotary inertia and shear on flexural motions of isotropic, elastic plates". *Journal of Applied Mechanics*. vol. 18, pages 31-38 (1951).
- [3] J.N. Reddy, "A simple higher-order theory for laminated composite plates", *Journal of Applied Mechanics*. 51 (4): 745-752 (1984).
- [4] M. Levinson, "An accurate simple theory of the statics and dynamics of elastic plates", *Mechanics Research Communications*, 343–350 (1980).
- [5] M.V.V. Murthy, "An improved transverse shear deformation theory for laminated anisotropic plate. Rapport technique", NASA (1981).
- [6] K.S. Afaq, " Développement d'un nouveau modèle pour les structures composites multicouches et sandwichs avec prise en compte du cisaillement transverse et des effets de bord". PhD thesis, Université Toulouse III - Paul Sabatier (2003).
- [7] M. Aydogdu, "A new shear deformation theory for laminated composite plates", *Composite Structures*, 94–101 (2009).
- [8] L. Dufort, S. Drapier, M. Grédiac, Closed-form solution for the cross-section warping in short beams under three point bending. *Compos. Struct.* 52(2) 233-246. doi:10.1016/S0263-8223(00)00171-9, (2001) .



## Chapitre III

### Modèle nonlocal appliqué aux nouveaux matériaux

### III.1 Modèle non local avec effet d'épaisseur

#### III.1.1 Cinématique

En se basant sur l'hypothèse que la contrainte transversale de cisaillement disparaît sur les surfaces supérieure et inférieure des matériaux et elle n'est pas nulle ailleurs.

Le champ déplacement dans la théorie des cisaillements hyperboliques est considéré comme suite [1] :

$$\begin{aligned}
 u(x, z, t) &= -z \frac{\partial w_0}{\partial x} + f(z) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\
 v(x, z, t) &= 0 \\
 w(x, z, t) &= w_0(x, t) + g(z) \varphi(x, t)
 \end{aligned} \tag{III.1}$$

Où :

$w_0$ , est le déplacement de la surface médiane le long de l'axe  $z$ ;

$\varphi$  le déplacement supplémentaire qu'explique l'effet de la contrainte normale (effet de l'épaisseur).

Dans ce travail, les fonctions de forme  $f(z)$  et  $g(z)$  sont prises sur la base de la fonction hyperbolique proposée par Zenkour [2] :

$$f(z) = h \sinh\left(\frac{z}{h}\right) - \left(\frac{4z^3}{3h^2}\right) \cosh\left(\frac{1}{2}\right), \text{ et } g(z) = \frac{1}{12} f'(z) \tag{III.2}$$

Les relations de déformations associées au champ de déplacement dans l'équation (III.1) sont:

$$\varepsilon_x = z k_x + f(z) \eta_x \tag{III.3a}$$

$$\gamma_{xz} = [f'(z) + g(z)]\gamma_{xz}^0 \quad (\text{III.3b})$$

$$\varepsilon_z = g'(z)\varepsilon_z^0 \quad (\text{III.3c})$$

Où le premier désigne une différenciation par rapport à  $z$  et  $k_x$ ,  $\eta_x$ ,  $\gamma_{xz}^0$ ,  $\varepsilon_z^0$  sont définis

$$k_x = -\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \eta_x = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}, \gamma_{xz}^0 = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \varepsilon_z^0 = \varphi \quad (\text{III.4})$$

### III.1.2 Equations de mouvement

Le principe d'Hamilton est utilisé pour déterminer les équations du mouvement

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta U + \delta V - \delta K) dt = 0 \quad (\text{III.5})$$

Où :

$U$ ,  $K$  et  $V$  représentent l'énergie de déformation, l'énergie cinétique et le travail effectué par des forces externes, respectivement.

La variation de l'énergie de déformation peut être exprimée par:

$$\begin{aligned} \delta U &= \int_0^L \int_{-h/2}^{h/2} (\sigma_x \delta \varepsilon_x + \sigma_z \delta \varepsilon_z + \tau_{xz} \delta \gamma_{xz}) dz dx \\ &= \int_0^L \left( N \frac{d\delta u_0}{dx} - M \frac{d^2 \delta w_0}{dx^2} - P \frac{d^2 \delta \varphi}{dx^2} + N_z \delta \varphi + Q \frac{d\delta \varphi}{dx} \right) dx \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

Où :

$M$ ,  $P$ ,  $N_z$  et  $Q$  sont les forces de cisaillement résultants définis comme :

$$(M, P) = \int_{-h/2}^{h/2} (1, z, f(z)) \sigma_x dz, \quad N_z = \int_{-h/2}^{h/2} \sigma_z g'(z) dz, \quad \text{et} \quad Q = \int_{-h/2}^{h/2} \tau_{xz} [f'(z) + g(z)] dz \quad (\text{III.7})$$

La variation du travail effectué par des charges extérieurement transversales  $q$  peut être exprimée comme

$$\delta V = -\int_0^L q \delta w dx \quad (\text{III.8})$$

La variation de l'énergie cinétique est obtenue comme suit:

$$\begin{aligned} \delta K &= \int_0^L \int_{-h/2}^{h/2} \rho(z) [\dot{u} \delta \dot{u} + \dot{w} \delta \dot{w}] dz dx \\ &= \int_0^L \left\{ I_0 \dot{w}_0 \delta \dot{w}_0 + J_0 [\dot{w}_0 \delta \dot{\varphi} + \dot{\varphi} \delta \dot{w}_0] \right. \\ &\quad \left. + I_2 \frac{d\dot{w}_0}{dx} \frac{d\delta \dot{w}_0}{dx} - J_2 \left( \frac{d\dot{w}_0}{dx} \frac{d\delta}{dx} + \frac{d\dot{\varphi}}{dx} \frac{d\delta \dot{w}_0}{dx} \right) + K_0 \dot{\varphi} \delta \dot{\varphi} + K_2 \frac{d\dot{\varphi}}{dx} \frac{d\delta \dot{\varphi}}{dx} \right\} dx \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

Où:

$(I_i, J_i, K_i)$  sont des inerties de masse définies comme :

$$(I_0, I_2) = \int_{-h/2}^{h/2} (1, z^2) \rho(z) dz \quad (\text{III.10a})$$

$$(J_0, J_2) = \int_{-h/2}^{h/2} (g, zf) \rho(z) dz \quad (\text{III.10b})$$

$$(K_0, K_2) = \int_{-h/2}^{h/2} (g^2, f^2) \rho(z) dz \quad (\text{III.10c})$$

Substituant les expressions pour  $\delta U$ ,  $\delta V$  et  $\delta K$  par les équations (III.6), (III.8), et (III.9) dans l'équation (III.5) et en intégrant par parties, et en collecte les coefficients  $\delta w_0$  et  $\delta \varphi$ .

Les équations de mouvement suivantes sont obtenues:

$$\delta w_0 : \frac{d^2 M}{dx^2} + q = I_0 \ddot{w}_0 + J_0 \ddot{\varphi} - I_2 \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} + J_2 \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} \quad (\text{III.11a})$$

$$\delta \varphi : \frac{d^2 P}{dx^2} - \frac{dQ}{dx} + N_z = -J_0 \ddot{w}_0 - J_2 \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} - K_0 \ddot{\varphi} + K_2 \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} \quad (\text{III.11b})$$

### III.1.3 Relations Initiales :

La théorie non locale considère que la contrainte en un point est liée non seulement à la déformation de ce point mais aussi aux autres points du corps. D'après Eringen [ 3, 4], la contrainte non locale  $\sigma$  en un point est exprimée comme :

$$(1 - \mu \nabla^2) \sigma = t \quad (\text{III.12})$$

Où :

$\nabla^2$  est l'opérateur Laplacien.

$t = e_0 a$  est le paramètre d'effet d'échelle.

$e_0$  est une constante du matériau définie expérimentalement, et  $a$  est une longueur caractéristique interne (par exemple, paramètre de réseau, diamètre moléculaire, distance granulaire).

Pour un élément nanomatériaux unidimensionnel avec des effets de l'épaisseur considérants, l'équation constitutive non locale, Eq. (III.12), peut être représenté par :

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) \sigma_x = Q_{11} \varepsilon_x + Q_{13} \varepsilon_z \quad (\text{III.13a})$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) \tau_{xz} = Q_{55} \gamma_{xz} \quad (\text{III.13b})$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) \sigma_z = Q_{13} \varepsilon_x + Q_{33} \varepsilon_z \quad (\text{III.13c})$$

La transformation des contraintes locales définies dans l'équation (III.7), au domaine non local en utilisant l'opérateur différentiel d'Eringen, les Eq. (13), on obtient :

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) M = -D \frac{d^2 w}{dx^2} + D_s \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + D_{st} \varphi \quad (\text{III.14a})$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) P = -D_s \frac{d^2 w}{dx^2} + H_s \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + H_{st} \varphi \quad (\text{III.14b})$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) Q = A_s \frac{d\varphi}{dx} \quad (\text{III.14c})$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) N_z = -D_{st} \frac{d^2 w}{dx^2} + H_{st} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + F_{st} \varphi \quad (\text{III.14d})$$

Où

$$(D, D_s, H_s, F_{st}) = \int_A (z^2, z f, f^2, (g')^2) Q_{11} dA,$$

$$A_s = \int_A g^2 Q_{55} dA, \quad (D_{st}, H_{st}) = \int_A g'(z, f) Q_{13} dA, \quad (\text{III.15})$$

En remplaçant l'équation (III.14) dans l'équation (III.11), les équations non locales du mouvement peuvent être exprimées en termes de déplacements ( $w_0, \varphi$ ) comme :

$$\begin{aligned}
& -D \frac{\partial^4 w_0}{\partial x^4} + D_s \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + D_{st} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + q - \mu \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = I_0 \left( \ddot{w}_0 - \mu \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} \right) - I_2 \left( \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} - \mu \frac{d^4 \ddot{w}_0}{dx^4} \right) \\
& + J_0 \left( \ddot{\varphi} - \mu \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} \right) + J_2 \left( \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} - \mu \frac{d^4 \ddot{\varphi}}{dx^4} \right) \tag{III.16a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -D_s \frac{\partial^4 w_0}{\partial x^4} - D_{st} \frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2} + H_s \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + 2H_{st} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - A_s \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + Fst\varphi = -J_2 \left( \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} - \mu \frac{d^4 \ddot{w}_0}{dx^4} \right) \\
& - J_0 \left( \ddot{w}_0 - \mu \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} \right) + K_2 \left( \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} - \mu \frac{d^4 \ddot{\varphi}}{dx^4} \right) - K_0 \left( \ddot{\varphi} - \mu \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} \right) \tag{III.16b}
\end{aligned}$$

### III.1.4 Solution analytique pour un simple appuyé

Dans cette étude, les solutions analytiques sont données pour des nanomatériaux isotropes par un simple appuyés dans la flexion et la vibration sont libre.

Le champ de déplacement suivant satisfait aux conditions aux limites et aux équations de mouvements.

$$\begin{Bmatrix} w_0 \\ \varphi \end{Bmatrix} = \sum_{n=1}^{\infty} \begin{Bmatrix} W_n e^{i\omega t} \sin \beta x \\ \phi_n e^{i\omega t} \sin \beta x \end{Bmatrix} \tag{III.17}$$

Où :

$W_n$  et  $\phi_n$  sont des paramètres arbitraires à déterminer.

$\omega$  est la fréquence propre associée avec nième mode propre.

Et  $\beta = \frac{n\pi}{L}$ . La charge transversale  $q$  est développée dans la série de Fourier comme :

$$q(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n \sin(\beta x), \quad Q_n = \frac{2}{L} \int_0^L q(x) \sin(\beta x) dx \tag{III.18}$$

Les coefficients de Fourier associés à certaines charges sont donnés :

$$Q_n = q_0, \quad n = 1 \text{ pour une charge sinusoïdale,} \quad (\text{III.19a})$$

$$Q_n = \frac{4q_0}{n\pi}, \quad n = 1,3,5 \dots \text{ pour une charge uniforme,} \quad (\text{III.19b})$$

$$Q_n = \frac{2q_0}{L} \sin \frac{n\pi}{2}, \quad n = 1,2,3 \dots \text{ pour un point de charge } Q_0. \quad (\text{III.19c})$$

Substituant les expansions de  $w_0$ ,  $\varphi$ , et  $q$  des (III.17) et (III.18) dans l'équation (III.16), on obtient les solutions suivantes :

$$\left( \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{22} \end{bmatrix} - \lambda \omega^2 \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{12} & m_{22} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} W_n \\ \phi_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} Q_n \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{III.20})$$

Où :

$$\begin{aligned} S_{11} &= D\beta^4, S_{12} = -D_s\beta^4 + D_{st}\beta^2, S_{22} = H_s\beta^4 - 2H_{st}\beta^2 + A_s\beta^2 + F_{st}, \lambda = 1 + \mu\beta^2 \\ m_{11} &= I_0 + I_2\beta^2, m_{12} = J_0 - J_2\beta^2, m_{22} = K_0 + K_2\beta^2. \end{aligned} \quad (\text{III.21})$$



### **Bibliographies**

[1] M. Bourada, A. Kaci, M.S.A. Houari, A. Tounsi, “A new simple shear and normal deformations theory for functionally graded beams”, *Steel and Composite Structures*, 18(2), 409 – 423,(2015).

[2] A.M. Zenkour, “A simple four-unknown refined theory for bending analysis of functionally graded plates”, *Applied Mathematical Modelling*, 37, 9041 – 9051,(2013) .

[3] AC. Eringen, "Nonlocal polar elastic continua", *International Journal of Engineering Science*, 10, 1-16, (1972).

[4] AC. Eringen "On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves", *Journal of Applied Physics*, 54, 4703-4710, (1983).

# Chapitre IV

## Résultats et discussions

## IV.1 Résultats

Ce chapitre décrit l'influence de l'épaisseur sur les nanomatériaux, de l'effet de non-localité et les variations des rapports des déflexions et les fréquences naturelles du nanomatériau. Les résultats obtenus sont comparés avec ceux prédits en utilisant la théorie d'Euler-Bernoulli (EBT), la théorie de Timoshenko (TBT), la théorie de Reddy (RBT) et le modèle de Berrabah et al.[1] pour une large gamme de paramètres non locaux et Élasticité. Pour tous les calculs, le facteur de correction de cisaillement et le coefficient de Poisson sont respectivement  $5/6$  et  $0,3$ . La longueur de nanomatériaux  $L$  est supposée être de  $10$  nm. Wang [2] propose une estimation du paramètre d'échelle non local  $0 \leq e_0 a \leq 2$  nm pour les nanotubes de carbone mono paroi (SWCNT). Par conséquent, dans ce travail, le paramètre non local est pris comme  $\mu = (e_0 a)^2 = 0, 1, 2, 3, \text{ et } 4$  nm pour examiner les effets non locaux sur les réponses des nanomatériaux.

Pour ces raisons on utilise les quantités non dimensionnelles suivantes :

- $\bar{w} = 100w \frac{EI}{q_0 L^4}$  pour une charge uniforme;
- $\bar{\omega} = \omega L^2 \sqrt{\frac{I_0}{EI}}$  paramètre de fréquence;

**Tableau IV.1:** Flexion centrale maximale non dimensionnelle  $\bar{w}$  sous une charge uniforme pour des nanomatériaux par des appuyés simple.

$L/h$	$\mu (nm^2)$	EBT	TBT	RBT	SBT ( $\varepsilon_z = 0$ )	Tounsi et al (2013a) ( $\varepsilon_z \neq 0$ )	Present ( $\varepsilon_z \neq 0$ )
5	0	1.3021	1.4321	1.4320	1.4317	1.4185	1.4138
	1	1.4271	1.5674	1.5673	1.5671	1.5529	1.5476
	2	1.5521	1.7028	1.7027	1.7025	1.6872	1.6814
	3	1.6771	1.8381	1.8381	1.8379	1.8215	1.8152
	4	1.8021	1.9734	1.9735	1.9733	1.9559	1.9490
10	0	1.3021	1.3346	1.3346	1.3345	1.3299	1.3270
	1	1.4271	1.4622	1.4622	1.4621	1.4571	1.4539
	2	1.5521	1.5898	1.5898	1.5897	1.5843	1.5809
	3	1.6771	1.7173	1.7174	1.7173	1.7115	1.7078
	4	1.8021	1.8449	1.8450	1.8449	1.8387	1.8347
20	0	1.3021	1.3102	1.3102	1.3102	1.3077	1.3077
	1	1.4271	1.4359	1.4359	1.4358	1.4331	1.4332
	2	1.5521	1.5615	1.5615	1.5615	1.5585	1.5586
	3	1.6771	1.6871	1.6872	1.6871	1.6839	1.6841
	4	1.8021	1.8128	1.8128	1.8128	1.8093	1.8095
100	0	1.3021	1.3024	1.3024	1.3024	1.3005	1.3023
	1	1.4271	1.4274	1.4274	1.4274	1.4254	1.4273
	2	1.5521	1.5525	1.5525	1.5525	1.5502	1.5523
	3	1.6771	1.6775	1.6775	1.6775	1.6751	1.6773
	4	1.8021	1.8025	1.8025	1.8025	1.7999	1.8024

**Tableau IV. 2:** Fréquence fondamentale non dimensionnelle  $\bar{\omega}$  du nanomatériau par des appuyés simple

$L/h$	$\mu (nm^2)$	EBT	TBT	RBT	SBT ( $\varepsilon_z = 0$ )	Tounsi et al (2013a) ( $\varepsilon_z \neq 0$ )	Present ( $\varepsilon_z \neq 0$ )
5	0	9.7112	9.2740	9.2745	9.2752	9.2993	9.3211
	1	9.2647	8.8477	8.8482	8.8488	8.8718	8.8926
	2	8.8747	8.4752	8.4757	8.4763	8.4983	8.5182
	3	8.5301	8.1461	8.1466	8.1472	8.1683	8.1874
	4	8.2228	7.8526	7.8530	7.8536	7.8740	7.8925
10	0	9.8293	9.7075	9.7075	9.7077	9.7197	9.7307
	1	9.3774	9.2612	9.2612	9.2614	9.2728	9.2834
	2	8.9826	8.8713	8.8714	8.8715	8.8825	8.8926
	3	8.6338	8.5269	8.5269	8.5271	8.5376	8.5473
	4	8.3228	8.2196	8.2197	8.2198	8.2300	8.2393
20	0	9.8595	9.8281	9.8281	9.8282	9.8365	9.8358
	1	9.4062	9.3763	9.3763	9.3764	9.3843	9.3837
	2	9.0102	8.9816	8.9816	8.9816	8.9892	8.9886
	3	8.6604	8.6328	8.6328	8.6329	8.6402	8.6396
	4	8.3483	8.3218	8.3218	8.3218	8.3289	8.3283
100	0	9.8692	9.8679	9.8679	9.8679	9.8750	9.8749
	1	9.4155	9.4143	9.4143	9.4143	9.4211	9.4210
	2	9.0191	9.0180	9.0180	9.0180	9.0245	9.0244
	3	8.6689	8.6678	8.6678	8.6678	8.6740	8.6739
	4	8.3566	8.3555	8.3555	8.3555	8.3615	8.3614

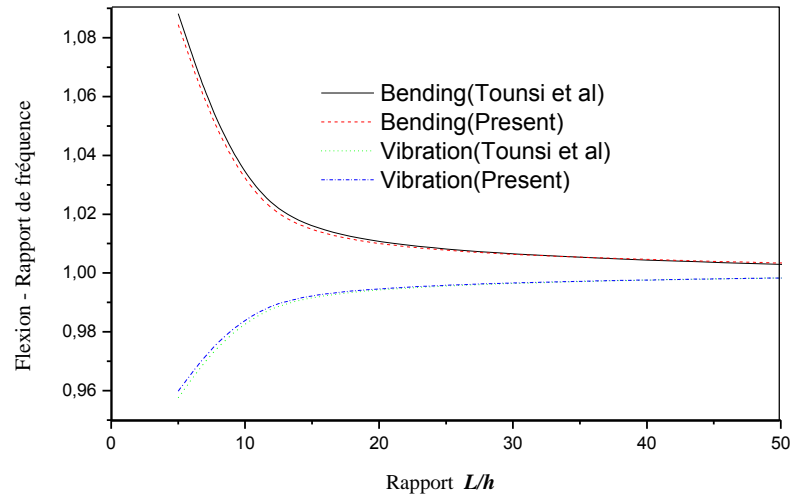
**Tableau IV.3:** Les trois premières fréquences non dimensionnelle  $\bar{\omega}$  du nanomatériau par des appuyés simple avec ( $L/h=5$ ).

Modes (n)	$\mu (nm^2)$	EBT	TBT	RBT	SBT ( $\varepsilon_z = 0$ )	Tounsi et al (2013a) ( $\varepsilon_z \neq 0$ )	Present ( $\varepsilon_z \neq 0$ )
1	0	9.7112	9.2740	9.2745	9.2752	9.2993	9.3211
	1	9.2647	8.8477	8.8482	8.8488	8.8718	8.8926
	2	8.8747	8.4752	8.4757	8.4763	8.4983	8.5182
	3	8.5301	8.1461	8.1466	8.1472	8.1683	8.1874
	4	8.2228	7.8526	7.8530	7.8536	7.8740	7.8925
2	0	37.1120	32.1665	32.1847	32.1948	32.3947	32.4491
	1	31.4239	27.2364	27.2519	27.2604	27.4297	27.4757
	2	27.7422	24.0453	24.0589	24.0664	24.2159	24.2565
	3	25.1104	21.7642	21.7765	21.7833	21.9186	21.9554
	4	23.1088	20.0293	20.0407	20.0470	20.1714	20.2053
3	0	78.0234	61.4581	61.5746	61.6192	62.1977	62.1968
	1	56.7798	44.7247	44.8095	44.8420	45.2629	45.2623
	2	46.8246	36.8831	36.9531	36.9798	37.3270	37.3265
	3	40.7568	32.1036	32.1645	32.1878	32.4900	32.4895
	4	36.5657	28.8023	28.8569	28.8778	29.1489	29.1485

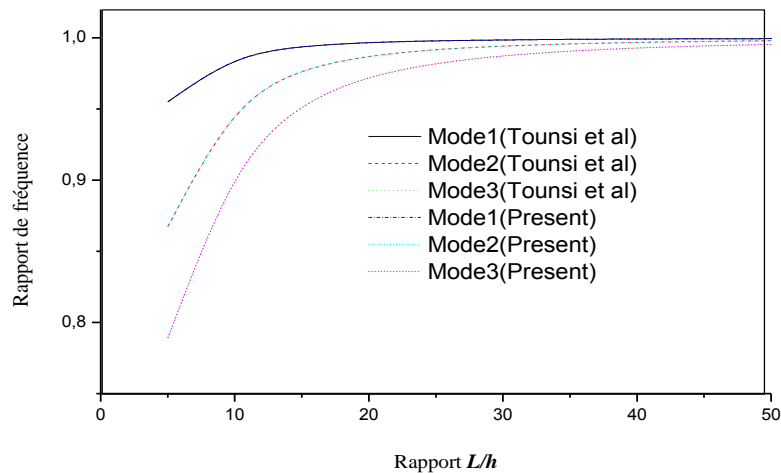
Le tableau 1 illustre la variation des flexions maximales non dimensionnelles par rapport aux paramètres d'échelle non locaux, aux théories proposées et aux rapports  $L/h$ . Un nanomatériau par appuyé simple soumis à une charge uniforme est considéré dans cet exemple et les valeurs calculées sont obtenues en utilisant 100 termes en série dans les équations (III.17) et (III.18). Les résultats prédits sont comparés à ceux donnés par la théorie d'Euler-Bernoulli (EBT), la théorie de Timoshenko (TBT), la théorie de Reddy (RBT), la théorie sinusoidale (SBT) de Berrabah et al.[1] et la théorie développée par Tounsi et al. [3]. Pour toutes les théories, on note que la flexion augmente quand le paramètre de l'échelle non locale augmente à un rapport ( $L/h$ ). De plus, pour le rapport élevé ( $L/h = 100$ ), toutes les théories sont approximativement identiques dans la prédiction de la flexion, ce qui confirme la précision du modèle simple d'Euler-Bernoulli

dans le cas des nanomatériaux minces à l'échelle nanométrique. Toutefois, l'écart entre EBT et d'autres théories ne sont pas visible pour un nanomatériau moyennement épaisse ( $L/h = 10$ ). D'autre part, les résultats prévus en utilisant le TBT coïncident avec ceux obtenus en utilisant les théories d'ordre supérieur suggérant la précision du modèle TBT pour les nanomatériaux épais. On peut voir que les résultats de TBT, RBT et SBT en négligent l'effet de l'épaisseur ( $\varepsilon_z = 0$ ) sont légèrement surestimés en comparaison avec ceux de la théorie actuelle ( $\varepsilon_z \neq 0$ ). Cet effet est plus prononcé sur les nanomatériaux épais ( $L/h = 5$ ). Notons que le modèle actuel n'a que trois inconnues comme dans le cas du TBT, du RBT et du SBT, alors que le nombre d'inconnues en trois Dimension (Tounsi et al.) [3] est de quatre. En outre, la présente théorie ne nécessite pas de coefficients de correction de cisaillement comme dans le cas du TBT.

Les fréquences non dimensionnelle  $\bar{\omega}$  d'un nanomatériau par des appuyés simple sont présentés dans les tableaux 2 et 3 pour différentes valeurs de paramètre d'échelle et quatre valeurs différentes de rapport d'élancement ( $L/h = 5, 10, 20, 100$ ) basé sur la solution analytique de Navier. On peut conclure à partir de ces résultats qu'une augmentation du paramètre non local donne une diminution de la fréquence. De plus, en augmentant le rapport ( $L/h$ ), il peut être indiqué que le facteur de non-localité a une influence remarquable sur la fréquence et surtout au niveau des modes de vibration plus élevés (voir tableau 3). Nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus par Berrabah et al. [1] pour EBT, TBT, RBT et SBT. Cependant, on peut constater que, l'utilisation de l'effet d'épaisseur (c.à.d.,  $\varepsilon_z \neq 0$ ) conduit à une légère augmentation de la fréquence.



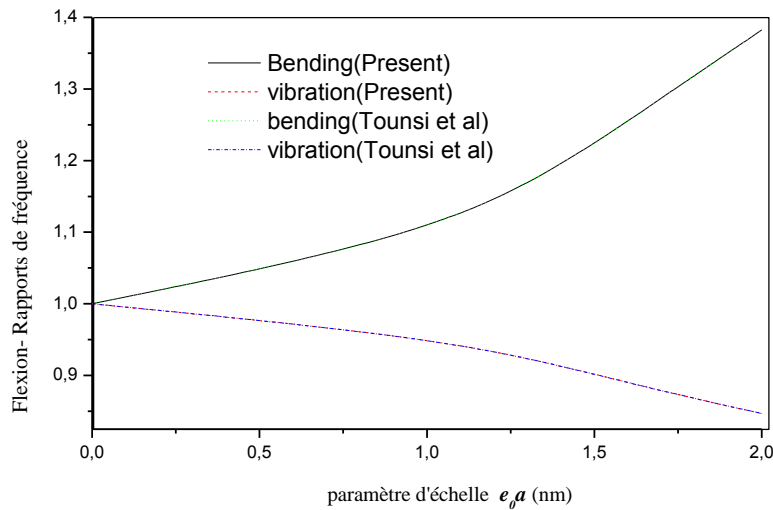
**Fig IV.1** Effet du rapport ( $L/h$ ) sur la flexion, et les rapports des fréquences fondamentaux pour un nanomatériau par des appuyés simple avec  $e_0 a = 1 \text{ nm}$ .



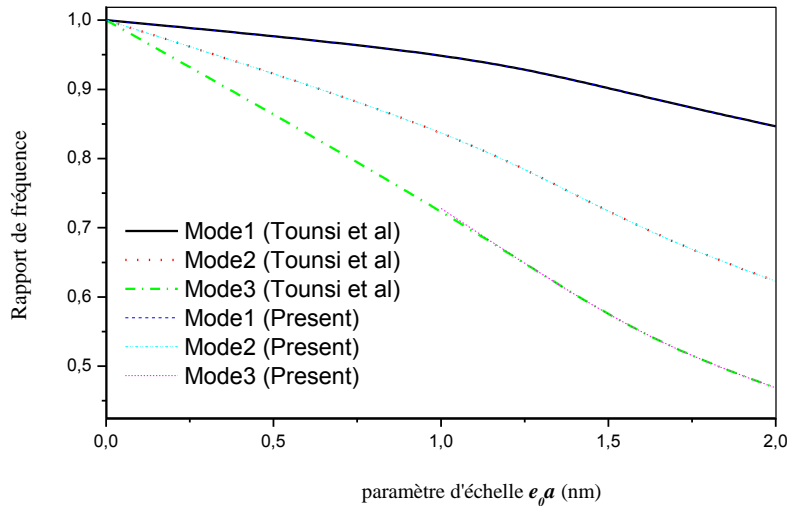
**Fig IV. 2** Effet du rapport ( $L/h$ ) sur les rapports de fréquence plus élevés pour un nanomatériau par des appuyés simple avec  $e_0 a = 1 \text{ nm}$ .



La figure IV.1 montre la variation de la flexion et les rapports de fréquence de nanomatériau avec le rapport  $(L/h)$ . Dans cet exemple, la flexion et les rapports de fréquence sont définies comme ceux calculés par la formulation présente des concordance calculées par EBT où l'effet de la déformation de cisaillement est négligeable. On peut observer dans cette figure, l'influence du rapport  $(L/h)$  est de la diminution des fréquences naturelles et augmentation des flexions, et cet effet est influent pour les nanomatériaux épais à des modes de vibration plus élevés (voir Fig. IV.2). Ceci démontre que l'effet du rapport  $(L/h)$  résulte de la réduction de la rigidité du nanomatériaux. On peut également conclure de la figure IV. 1 que le présent modèle non local est capable de produire des résultats plus précis par rapport à la théorie non locale développée par Tounsi et al. [3] avec un grand nombre d'inconnues.



**Fig IV.3** Effet du paramètre d'échelle sur la flexion, et les rapports de fréquence fondamentale pour un nanomatériau par des appuyés simple avec  $L/h = 10$ .



**Fig IV.4** Effet du paramètre d'échelle sur les rapports de fréquence plus élevés pour un nanomatériau par des appuyés simple avec  $L/h = 5$  .

L'influence du paramètre d'échelle non locale sur les comportements de flexion et de vibration du nanomatériau est illustrée à la Fig.IV.3. Les rapports de déplacement transversal et de fréquence sont définis comme les rapports de ceux calculés par la théorie non locale aux concordances calculées par la théorie locale (c.à.d.,  $\mu = 0$ ). Cette figure montre une variation non linéaire des réponses de flexion et de vibration avec le paramètre d'échelle non local. On peut observer que le rapport de déplacement transversal est supérieur à l'unité, alors que les rapports de fréquence sont plus petits que l'unité. Cela signifie que la théorie locale sous-estime les déplacements transversaux et surestime les fréquences des nanomatériaux par rapport à celles non locales. Ceci est dû au fait que le modèle nanomatériaux local est incapable de considérer l'influence à petite échelle des nanomatériaux. La différence entre les modèles local et non local est particulièrement importante pour les modes supérieurs (voir Fig. IV .4).

### **Bibliographies**

- [1] H.M. Berrabah, A. Tounsi, A. Semmah, E.A. Adda Bedia, “Comparison of various refined nonlocal beam theories for bending, vibration and buckling analysis of nanobeams“, *Structural Engineering and Mechanics*, 48(3), 351 – 365 (2013).
- [2] Q.Wang, “Wave propagation in carbon nanotubes via nonlocal continuum mechanics.”, *J. Appl. Phys.* 98, 124301 (2005).
- [3] A.Tounsi, S. Benguediab, M.S.A. Houari, A. Semmah, “A new nonlocal beam theory with thickness stretching effect for nanobeams”, *International Journal of Nanoscience*, 12, 1350025 (2013a).

# Conclusion générale

## Conclusion générale

Les nanostructures représentent un domaine de recherche très vaste où des applications importantes permettent de modifier les dispositions de leurs compositions ainsi que leur architecture pour obtenir certains types de matériaux spécifiques à la technologie des nanosciences. La conception et l'élaboration de ces matériaux nécessitent le développement d'outils d'analyse adaptés à leurs propres caractéristiques géométriques et structurales.

Notre travail comporte deux volets :

Première partie, nous avons défini les nouveaux matériaux comme par exemple : les nanotubes de nitrure de bore, les nanotubes de carbone, matériaux fonctionnellement gradués avec leur caractéristique technologique, leur développement, leurs propriétés, leurs méthodes de synthèses et leurs domaines d'application, ensuite les développements sur les modèles théoriques des milieux continus ( la théorie d'Euler-Bernoulli , la théorie de Timoshenko et la théorie d'ordre supérieur).

Deuxième partie, on a présenté un développement mathématique pour le modèle nonlocal appliqué aux nouveaux matériaux basé sur la théorie d'ordre élevé à deux variables.

Cette nouvelle théorie non locale de déformation de cisaillement hyperbolique est proposée pour la flexion et le comportement dynamique des nanomatériaux. La présente théorie est capable de considérer les influences à petite échelle, de déformation au cisaillement de l'épaisseur des matériaux nanométriques, et respecte les conditions limites nulles de traction sur les surfaces supérieure et inférieure du matériau nanométrique sans utiliser le coefficient de correction de cisaillement. A partir de la théorie de l'élasticité d'Eringen, les équations non locales du mouvement sont obtenues selon la théorie raffinée de déformation de cisaillement à deux variables, et ensuite résolues par une solution analytique exacte. Les résultats montrent que l'incorporation de l'influence de l'épaisseur rend plus rigide le matériau

nanométrique et entraîne donc une diminution du déplacement transversal et une augmentation de la fréquence. Cependant, on remarque que le paramètre non local et les influences de la déformation de cisaillement conduit à une augmentation des déplacements transversaux et à une réduction des fréquences naturelles des matériaux nanométriques.

## A new refined nonlocal beam theory accounting for effect of thickness stretching in nanoscale beams

Boumediene Kheroubi<sup>1</sup>, Abdelnour Benzair<sup>1,3</sup>, Abdelouahed Tounsi<sup>\*1,2,3</sup>  
and Abdelwahed Semmah<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi-échelle, Université de Sidi Bel Abbés,  
Département de Physique, BP 89 Cité Ben M'hidi, 22000 Sidi Bel Abbés, Algeria

<sup>2</sup>Material and Hydrology Laboratory, University of Sidi Bel Abbes, Faculty of Technology,  
Civil Engineering Department, Algeria

<sup>3</sup>Algerian National Thematic Agency of Research in Science and Technology (ATRST), Algeria

(Received February 25, 2016, Revised October 27, 2016, Accepted October 28, 2016)

**Abstract.** In this paper, a simple and refined nonlocal hyperbolic higher-order beam theory is proposed for bending and vibration response of nanoscale beams. The present formulation incorporates the nonlocal scale parameter which can capture the small scale effect, and it considers both shear deformation and thickness stretching effects by a hyperbolic variation of all displacements across the thickness without employing shear correction factor. The highlight of this formulation is that, in addition to modeling the displacement field with only two unknowns, the thickness stretching effect ( $\varepsilon_z \neq 0$ ) is also included in the present model. By utilizing the Hamilton's principle and the nonlocal differential constitutive relations of Eringen, the equations of motion of the nanoscale beam are reformulated. Verification studies demonstrate that the developed theory is not only more accurate than the refined nonlocal beam theory, but also comparable with the higher-order shear deformation theories which contain more number of unknowns. The theoretical formulation proposed herein may serve as a reference for nonlocal theories as applied to the static and dynamic responses of complex-nanobeam-system such as complex carbon nanotube system.

**Keywords:** nonlocal theory; stretching effect; nanobeam

### 1. Introduction

Recent experimental results have demonstrated a significant size influence in mechanical characteristics when the dimensions of the structure become small. The local continuum models lack the capability of capturing such effects since they do not incorporate any internal length scale. Thus, these models are expected to fail when the structure size becomes comparable with the internal length scale(s) of the material. This motivated many authors to propose beam/plate theories based on size-dependent continuum models which consider the small scale influences. The nonlocal elasticity theory developed by Eringen (1972, 1983) is one of the promising size-dependent continuum models. Contrary to the local continuum models which suppose that the stress at a point is a function of strain at that point, the non-classical elasticity theory considers that

---

\*Corresponding author, Professor, E-mail: [tou\\_abdel@yahoo.com](mailto:tou_abdel@yahoo.com)

the stress at a point is a function of strains at all points in the continuum. Thus, the small scale parameter is introduced through the employment of constitutive equations.

Based on the nonlocal elasticity model, a number of articles have been published in the recent last years, attempting to propose nonlocal beam/plate models and use them to investigate the bending (Duan and Wang 2007, Lu, Zhang *et al.* 2007, Reddy and Pang 2008, Aghababaei and Reddy 2009, Reddy 2010, Berrabah, Tounsi *et al.* 2013, Tounsi, Benguediab *et al.* 2013a, Larbi Chaht, Kaci *et al.* 2015), buckling (Pradhan 2009, Murmu and Pradhan 2009a, Pradhan and Murmu 2009, Pradhan and Phadikar 2010, Amara, Tounsi *et al.* 2010, Tounsi, Semmah *et al.* 2013b, Tounsi, Benguediab *et al.* 2013c, Benguediab, Tounsi *et al.* 2014, Larbi Chaht, Kaci *et al.* 2015, Semmah, Tounsi *et al.* 2015), and vibration (Pradhan and Phadikar 2009ab; Murmu and Pradhan 2009b,c,d, Wang, Murmu *et al.* 2011, Pradhan and Kumar 2011, Pradhan and Sahu 2010, Zemri, Houari *et al.* 2015, Belkorissat, Houari *et al.* 2015, Chemi, Heireche *et al.* 2015) behaviors of nanoplates/nanobeams.

In recent years, researchers proposed some shear deformation theories to study bending, buckling and vibration behaviors of structures (Bellifa, Benrahou *et al.* 2016, Tounsi, Houari *et al.* 2016, Bourada, Amara *et al.* 2016, Houari, Tounsi *et al.* 2016, Ait Yahia, Ait Atmane *et al.* 2015, Ait Amar Meziane, Abdelaziz *et al.* 2014, Zidi, Tounsi *et al.* 2014, Boudarba, Houari *et al.* 2013, Tounsi, Houari *et al.* 2013d). In addition, the stretching thickness effect was studied by several authors to show its importance on mechanical behavior of structures (Bennoun, Houari *et al.* 2016, Bourada, Kaci *et al.* 2015, Hamidi, Houari *et al.* 2015, Belabed, Houari *et al.* 2014, Hebali, Tounsi *et al.* 2014). Recently, many papers have been published concerning with analysis of nanostructures. Among them, Ahouel, Houari *et al.* (2016) examined size-dependent mechanical response of functionally graded trigonometric shear deformable nanobeams including neutral surface position concept. Ebrahimi and Barati (2016) presented an exact solution for buckling analysis of embedded piezoelectromagnetically actuated nanoscale beams. Bounouara, Benrahou *et al.* (2016) developed a nonlocal zeroth-order shear deformation theory for free vibration of functionally graded nanoscale plates resting on elastic foundation. Eltaher, Khater *et al.* (2016) investigated the static stability of nonlocal nanobeams using higher-order beam theories.

In the present work, an analytical solution to the bending and vibration analyses of nanoscale beams is presented by proposing a novel nonlocal shear and normal deformation beam theory, which is compared with the predictions of other theories available in the literature. Just two unknown displacement functions are employed in the present model against four or more unknown displacement functions utilized in the corresponding ones. The effects due to small scale, transverse shear and thickness stretching are all included. The small scale influence is considered by utilizing the nonlocal constitutive relations of Eringen, while the shear and normal deformations effects are captured using the hyperbolic shear deformation theory (Zenkour 2013, Bourada *et al.* 2015). Based on the nonlocal constitutive relations of Eringen, equations of motion of nanoscale beams are obtained by employing Hamilton's principle. Analytical solutions for deflection and natural frequency are presented for simply supported nanoscale beams, and the obtained results are compared with the existing solutions to check the accuracy of the present formulation.

## **2. Nonlocal beam model with thickness stretching effect**

### *2.1 Kinematics*



The displacement field of the hyperbolic shear deformation theory is proposed based on the supposition that the transverse shear stress vanishes on the top and bottom surfaces of the beam and is nonzero elsewhere. The displacement field is considered as (Bourada, Kaci *et al.* 2015)

$$\begin{aligned} u(x, z, t) &= -z \frac{\partial w_0}{\partial x} + f(z) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ v(x, z, t) &= 0 \\ w(x, z, t) &= w_0(x, t) + g(z) \varphi(x, t) \end{aligned} \tag{1}$$

where,  $w_0$  is the displacement of the middle surface along the axis  $z$ ; and the additional displacement  $\varphi$  accounts for the effect of normal stress (thickness stretching effect). In this work, the shape functions  $f(z)$  and  $g(z)$  are taken based on the hyperbolic function proposed by Zenkour (2013)

$$f(z) = h \sinh\left(\frac{z}{h}\right) - \left(\frac{4z^3}{3h^2}\right) \cosh\left(\frac{1}{2}\right), \text{ and } g(z) = \frac{1}{12} f'(z) \tag{2}$$

The linear strain relations associated with the displacement field in Eq. (1) are

$$\varepsilon_x = z k_x + f(z) \eta_x \tag{3a}$$

$$\gamma_{xz} = [f'(z) + g(z)] \gamma_{xz}^0 \tag{3b}$$

$$\varepsilon_z = g'(z) \varepsilon_z^0 \tag{3c}$$

where the prime denotes differentiation with respect to  $z$  and,  $k_x, \eta_x, \gamma_{xz}^0, \varepsilon_z^0$  are be defined

$$k_x = -\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \eta_x = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}, \gamma_{xz}^0 = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \varepsilon_z^0 = \varphi \tag{4}$$

### 2.2 Equations of motion

Hamilton's principle is employed to determine the equations of motion

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta U + \delta V - \delta K) dt = 0 \tag{5}$$

where  $U, K$  and  $V$  represent the strain energy, kinetic energy and the work done by external forces, respectively.

The variation of the strain energy can be expressed as

$$\begin{aligned} \delta U &= \int_0^L \int_{-h/2}^{h/2} (\sigma_x \delta \varepsilon_x + \sigma_z \delta \varepsilon_z + \tau_{xz} \delta \gamma_{xz}) dz dx \\ &= \int_0^L \left( N \frac{d\delta u_0}{dx} - M \frac{d^2 \delta w_0}{dx^2} - P \frac{d^2 \delta \varphi}{dx^2} + N_z \delta \varphi + Q \frac{d\delta \varphi}{dx} \right) dx \end{aligned} \tag{6}$$

where  $M, P, N_z$  and  $Q$  are the stress resultants defined as

$$(M, P) = \int_{-h/2}^{h/2} (1, z, f(z)) \sigma_x dz, \quad N_z = \int_{-h/2}^{h/2} \sigma_z g'(z) dz, \quad \text{and} \quad Q = \int_{-h/2}^{h/2} \tau_{xz} [f'(z) + g(z)] dz \quad (7)$$

The variation of work done by externally transverse loads  $q$  can be expressed as

$$\delta V = - \int_0^L q \delta w dx \quad (8)$$

The variation of the kinetic energy is obtained as

$$\begin{aligned} \delta K &= \int_0^L \int_{-h/2}^{h/2} \rho(z) [\dot{u} \delta \dot{u} + \dot{w} \delta \dot{w}] dz dx \\ &= \int_0^L \left\{ I_0 \dot{w}_0 \delta \dot{w}_0 + J_0 [\dot{w}_0 \delta \dot{\phi} + \dot{\phi} \delta \dot{w}_0] \right. \\ &\quad \left. + I_2 \frac{d\dot{w}_0}{dx} \frac{d\delta \dot{w}_0}{dx} - J_2 \left( \frac{d\dot{w}_0}{dx} \frac{d\delta}{dx} + \frac{d\dot{\phi}}{dx} \frac{d\delta \dot{w}_0}{dx} \right) + K_0 \dot{\phi} \delta \dot{\phi} + K_2 \frac{d\dot{\phi}}{dx} \frac{d\delta \dot{\phi}}{dx} \right\} dx \end{aligned} \quad (9)$$

Where dot-superscript convention indicates the differentiation with respect to the time variable  $t$ ; and  $(I_i, J_i, K_i)$  are mass inertias defined as

$$(I_0, I_2) = \int_{-h/2}^{h/2} (1, z^2) \rho(z) dz \quad (10a)$$

$$(J_0, J_2) = \int_{-h/2}^{h/2} (g, zf) \rho(z) dz \quad (10b)$$

$$(K_0, K_2) = \int_{-h/2}^{h/2} (g^2, f^2) \rho(z) dz \quad (10c)$$

Substituting the expressions for  $\delta U$ ,  $\delta V$ , and  $\delta K$  from Eqs. (6), (8), and (9) into Eq. (5) and integrating by parts, and collecting the coefficients of  $\delta w_0$  and  $\delta \phi$ , the following equations of motion of the beam are obtained

$$\delta w_0 : \frac{d^2 M}{dx^2} + q = I_0 \ddot{w}_0 + J_0 \ddot{\phi} - I_2 \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} + J_2 \frac{d^2 \ddot{\phi}}{dx^2} \quad (11a)$$

$$\delta \phi : \frac{d^2 P}{dx^2} - \frac{dQ}{dx} + N_z = -J_0 \ddot{w}_0 - J_2 \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} - K_0 \ddot{\phi} + K_2 \frac{d^2 \ddot{\phi}}{dx^2} \quad (11b)$$

### 2.3 Constitutive relations

The nonlocal theory considers that the stress at a point is related not only on the strain at that point but also on strains at all other points of the body. According to Eringen (1972, 1983), the

nonlocal stress  $\sigma$  at a point is expressed as

$$(1 - \mu \nabla^2) \sigma = t \tag{12}$$

where  $\nabla^2$  is the Laplacian operator, and  $t$  is the classical stress.  $t = e_0 a$  is the scale-effect parameter where  $e_0$  is a material constant experimentally predicted, and  $a$  is an internal characteristic length (e.g., lattice parameter, molecular diameter, granular distance). For one dimensional beam element with considering thickness stretching effects, the nonlocal constitutive equation, Eq. (12), can be represented by

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) \sigma_x = Q_{11} \varepsilon_x + Q_{13} \varepsilon_z \tag{13a}$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) \tau_{xz} = Q_{55} \gamma_{xz} \tag{13b}$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) \sigma_z = Q_{13} \varepsilon_x + Q_{33} \varepsilon_z \tag{13c}$$

Transforming the local stress resultants defined in Eq. (7), to nonlocal domain using the differential operator of Eringen, Eqs. (13), we obtain

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) M = -D \frac{d^2 w}{dx^2} + D_s \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + D_{st} \varphi \tag{14b}$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) P = -D_s \frac{d^2 w}{dx^2} + H_s \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + H_{st} \varphi \tag{14c}$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) Q = A_s \frac{d\varphi}{dx} \tag{14d}$$

$$\left(1 - \mu \frac{d^2}{dx^2}\right) N_z = -D_{st} \frac{d^2 w}{dx^2} + H_{st} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + F_{st} \varphi \tag{14f}$$

where

$$(D, D_s, H_s, F_{st}) = \int_A (z^2, z f, f^2, (g')^2) Q_{11} dA, \quad A_s = \int_A g^2 Q_{55} dA, \quad (D_{st}, H_{st}) = \int_A g'(z, f) Q_{13} dA, \tag{15}$$

By substituting Eq. (14) into Eq. (11), the nonlocal equations of motion can be expressed in terms of displacements ( $w_0, \varphi$ ) as

$$\begin{aligned} -D \frac{\partial^4 w_0}{\partial x^4} + D_s \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + D_{st} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + q - \mu \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} &= I_0 \left( \ddot{w}_0 - \mu \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} \right) - I_2 \left( \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} - \mu \frac{d^4 \ddot{w}_0}{dx^4} \right) \\ + J_0 \left( \ddot{\varphi} - \mu \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} \right) + J_2 \left( \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} - \mu \frac{d^4 \ddot{\varphi}}{dx^4} \right) & \end{aligned} \tag{16a}$$

$$\begin{aligned}
 & -D_s \frac{\partial^4 w_0}{\partial x^4} - D_{st} \frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2} + H_s \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + 2H_{st} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - A_s \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + Fst\varphi = -J_2 \left( \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} - \mu \frac{d^4 \ddot{w}_0}{dx^4} \right) \\
 & - J_0 \left( \ddot{w}_0 - \mu \frac{d^2 \ddot{w}_0}{dx^2} \right) + K_2 \left( \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} - \mu \frac{d^4 \ddot{\varphi}}{dx^4} \right) - K_0 \left( \ddot{\varphi} - \mu \frac{d^2 \ddot{\varphi}}{dx^2} \right)
 \end{aligned} \tag{16b}$$

### 3. Analytical solution of simply supported nanobeam

In this study, analytical solutions are given for simply supported isotropic nanobeams for bending and free vibration.

The following displacement field satisfies boundary conditions and governing equations.

$$\begin{Bmatrix} w_0 \\ \varphi \end{Bmatrix} = \sum_{n=1}^{\infty} \begin{Bmatrix} W_n e^{i\omega t} \sin \beta x \\ \phi_n e^{i\omega t} \sin \beta x \end{Bmatrix} \tag{17}$$

where  $W_n$  and  $\phi_n$  are arbitrary parameters to be determined,  $\omega$  is the eigenfrequency associated with  $n^{\text{th}}$  eigenmode, and  $\beta = \frac{n\pi}{L}$ . The transverse load  $q$  is also expanded in the Fourier sine series as

$$q(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n \sin(\beta x), \quad Q_n = \frac{2}{L} \int_0^L q(x) \sin(\beta x) dx \tag{18}$$

The Fourier coefficients  $Q_n$  associated with some typical loads are given

$$Q_n = q_0, \quad n = 1 \text{ for sinusoidal load,} \tag{19a}$$

$$Q_n = \frac{4q_0}{n\pi}, \quad n = 1,3,5 \dots \text{ for uniform load,} \tag{19b}$$

$$Q_n = \frac{2q_0}{L} \sin \frac{n\pi}{2}, \quad n = 1,2,3 \dots \text{ for point load } Q_0 \text{ at the midspan,} \tag{19c}$$

Substituting the expansions of  $w_0$ ,  $\varphi$ , ' and  $q$  from Eqs. (17) and (18) into Eq. (16), the closed form solutions can be obtained from the following equations

$$\left( \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{22} \end{bmatrix} - \lambda \omega^2 \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{12} & m_{22} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} W_n \\ \phi_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} Q_n \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{20}$$

where

$$\begin{aligned}
 S_{11} &= D\beta^4, S_{12} = -D_s\beta^4 + D_{st}\beta^2, S_{22} = H_s\beta^4 - 2H_{st}\beta^2 + A_s\beta^2 + F_{st}, \lambda = 1 + \mu\beta^2 \\
 m_{11} &= I_0 + I_2\beta^2, m_{12} = J_0 - J_2\beta^2, m_{22} = K_0 + K_2\beta^2.
 \end{aligned} \tag{21}$$

Table 1 Dimensionless maximum center deflection  $\bar{w}$  under uniform load for simply supported nanobeams

$L/h$	$\mu$ (nm <sup>2</sup> )	EBT	TBT	RBT	SBT ( $\epsilon_z=0$ )	Tounsi, Benguediab <i>et al.</i> (2013a) ( $\epsilon_z \neq 0$ )	Present ( $\epsilon_z \neq 0$ )
5	0	1.3021	1.4321	1.4320	1.4317	1.4185	1.4138
	1	1.4271	1.5674	1.5673	1.5671	1.5529	1.5476
	2	1.5521	1.7028	1.7027	1.7025	1.6872	1.6814
	3	1.6771	1.8381	1.8381	1.8379	1.8215	1.8152
	4	1.8021	1.9734	1.9735	1.9733	1.9559	1.9490
10	0	1.3021	1.3346	1.3346	1.3345	1.3299	1.3270
	1	1.4271	1.4622	1.4622	1.4621	1.4571	1.4539
	2	1.5521	1.5898	1.5898	1.5897	1.5843	1.5809
	3	1.6771	1.7173	1.7174	1.7173	1.7115	1.7078
	4	1.8021	1.8449	1.8450	1.8449	1.8387	1.8347
20	0	1.3021	1.3102	1.3102	1.3102	1.3077	1.3077
	1	1.4271	1.4359	1.4359	1.4358	1.4331	1.4332
	2	1.5521	1.5615	1.5615	1.5615	1.5585	1.5586
	3	1.6771	1.6871	1.6872	1.6871	1.6839	1.6841
	4	1.8021	1.8128	1.8128	1.8128	1.8093	1.8095
100	0	1.3021	1.3024	1.3024	1.3024	1.3005	1.3023
	1	1.4271	1.4274	1.4274	1.4274	1.4254	1.4273
	2	1.5521	1.5525	1.5525	1.5525	1.5502	1.5523
	3	1.6771	1.6775	1.6775	1.6775	1.6751	1.6773
	4	1.8021	1.8025	1.8025	1.8025	1.7999	1.8024

#### 4. Numerical results

Through this section, the effect of thickness stretching in nanobeam, nonlocality effect and slenderness ratios on the deflections and natural frequencies of the nanobeam will be discussed. The obtained results are compared with those predicted using the Euler-Bernoulli beam theory (EBT), Timoshenko beam theory (TBT), Reddy’s beam theory (RBT) and the model of Berrabah, Tounsi *et al.* (2013) for a wide range of nonlocal parameter and slenderness ratio. For all computations, the shear correction factor and Poisson’s ratio are considered as 5/6 and 0.3, respectively. The length of nanobeam  $L$  is supposed to be 10 nm. A conservative estimate of the nonlocal scale parameter  $0 \leq e_0 a \leq 2$  nm for single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) is proposed by Wang (2005). Hence, in this work, the nonlocal parameter is taken as  $\mu = (e_0 a)^2 = 0, 1, 2, 3$  and 4 nm to examine the nonlocal effects on the responses of nanobeam. For convenience, the following non-dimensional quantities are employed:

- $\bar{w} = 100w \frac{EI}{q_0 L^4}$  for uniform load;
- $\bar{\omega} = \omega L^2 \sqrt{\frac{I_0}{EI}}$  frequency parameter;

Table 1 illustrates the variation of the non-dimensional maximum deflections  $\bar{w}$  with respect to nonlocal scale parameter, proposed theories, and slenderness ratios. A simply supported nanobeam subjected to uniform load is considered in this example and the calculated values are obtained using 100 terms in series in Eqs. (17) and (18). The predicted results are compared to those given by the Euler-Bernoulli beam theory (EBT), Timoshenko beam theory (TBT), Reddy’s beam theory (RBT), Sinusoidal beam theory (SBT) of Berrabah, Tounsi *et al.* (2013) and the theory developed by Tounsi, Benguediab *et al.* (2013a). For all theories, it is noted that the deflection increases as the nonlocal scale parameter increases at a specified slenderness ratio. Moreover, for high slenderness ( $L/h=100$ ) ratio, all theories are approximately identical in predicting the deflection, which confirms the accuracy of the simple Euler-Bernoulli model in the case of thin nanoscale beams. However, the discrepancy between EBT and other theories is noticeable for a moderately thick beam ( $L/h=10$ ). On the other hand, the results predicted by employing the TBT coincide with those obtained using higher-order theories suggesting the accuracy of utilizing TBT for the case of moderately thick beams. It can be seen that the results from TBT, RBT and SBT due to ignoring the thickness stretching effect ( $\varepsilon_z=0$ ) are slightly overestimate when comparing with those from the present theory (quasi-3D,  $\varepsilon_z \neq 0$ ). This effect is more pronounced on thick beams ( $L/h=5$ ). Noted that the present model has only three unknowns as in the case of TBT, RBT and SBT, while the number of unknowns in quasi-3D (Tounsi, Benguediab *et al.* 2013a) is four. Also, the present theory does not required shear correction coefficients as in the case of TBT.

Table 2 Dimensionless fundamental frequency  $\bar{\omega}$  of simply supported nanobeam

$L/h$	$\mu$ (nm <sup>2</sup> )	EBT	TBT	RBT	SBT ( $\varepsilon_z=0$ )	Tounsi, Benguediab <i>et al.</i> (2013a) ( $\varepsilon_z \neq 0$ )	Present ( $\varepsilon_z \neq 0$ )
5	0	9.7112	9.2740	9.2745	9.2752	9.2993	9.3211
	1	9.2647	8.8477	8.8482	8.8488	8.8718	8.8926
	2	8.8747	8.4752	8.4757	8.4763	8.4983	8.5182
	3	8.5301	8.1461	8.1466	8.1472	8.1683	8.1874
	4	8.2228	7.8526	7.8530	7.8536	7.8740	7.8925
10	0	9.8293	9.7075	9.7075	9.7077	9.7197	9.7307
	1	9.3774	9.2612	9.2612	9.2614	9.2728	9.2834
	2	8.9826	8.8713	8.8714	8.8715	8.8825	8.8926
	3	8.6338	8.5269	8.5269	8.5271	8.5376	8.5473
	4	8.3228	8.2196	8.2197	8.2198	8.2300	8.2393
20	0	9.8595	9.8281	9.8281	9.8282	9.8365	9.8358
	1	9.4062	9.3763	9.3763	9.3764	9.3843	9.3837
	2	9.0102	8.9816	8.9816	8.9816	8.9892	8.9886
	3	8.6604	8.6328	8.6328	8.6329	8.6402	8.6396
	4	8.3483	8.3218	8.3218	8.3218	8.3289	8.3283
100	0	9.8692	9.8679	9.8679	9.8679	9.8750	9.8749
	1	9.4155	9.4143	9.4143	9.4143	9.4211	9.4210
	2	9.0191	9.0180	9.0180	9.0180	9.0245	9.0244
	3	8.6689	8.6678	8.6678	8.6678	8.6740	8.6739
	4	8.3566	8.3555	8.3555	8.3555	8.3615	8.3614

Table 3 The first three dimensionless frequency  $\bar{\omega}$  of simply supported nanobeam ( $L/h=5$ )

Modes (n)	$\mu$ (nm <sup>2</sup> )	EBT	TBT	RBT	SBT ( $\epsilon_z=0$ )	Tounsi, Benguediab <i>et al.</i> (2013a) ( $\epsilon_z \neq 0$ )	Present ( $\epsilon_z \neq 0$ )
1	0	9.7112	9.2740	9.2745	9.2752	9.2993	9.3211
	1	9.2647	8.8477	8.8482	8.8488	8.8718	8.8926
	2	8.8747	8.4752	8.4757	8.4763	8.4983	8.5182
	3	8.5301	8.1461	8.1466	8.1472	8.1683	8.1874
	4	8.2228	7.8526	7.8530	7.8536	7.8740	7.8925
2	0	37.1120	32.1665	32.1847	32.1948	32.3947	32.4491
	1	31.4239	27.2364	27.2519	27.2604	27.4297	27.4757
	2	27.7422	24.0453	24.0589	24.0664	24.2159	24.2565
	3	25.1104	21.7642	21.7765	21.7833	21.9186	21.9554
	4	23.1088	20.0293	20.0407	20.0470	20.1714	20.2053
3	0	78.0234	61.4581	61.5746	61.6192	62.1977	62.1968
	1	56.7798	44.7247	44.8095	44.8420	45.2629	45.2623
	2	46.8246	36.8831	36.9531	36.9798	37.3270	37.3265
	3	40.7568	32.1036	32.1645	32.1878	32.4900	32.4895
	4	36.5657	28.8023	28.8569	28.8778	29.1489	29.1485

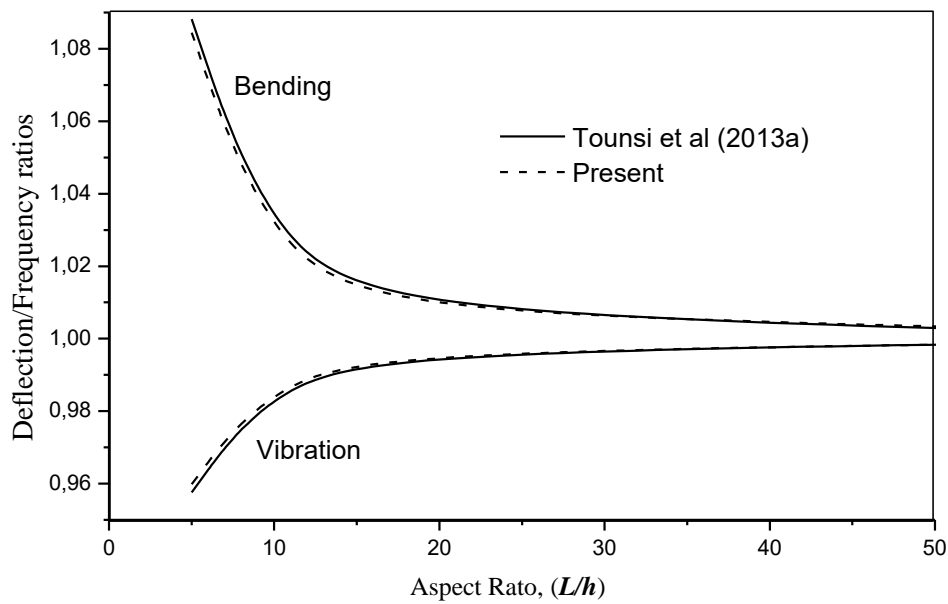


Fig. 1 Effect of the aspect ratio on the deflection, and fundamental frequency ratios for a simply supported nanobeam with  $e_0 a=1$  nm

The non-dimensional frequency  $\bar{\omega}$  of a simply supported nanoscale beam are shown in Tables 2 and 3 for various values of scale parameter  $\mu$  and four different values of slenderness ratio ( $L/h=5, 10, 20, 100$ ) based on analytical Navier solution technique. It can be concluded from these

results that an increase in nonlocal parameter gives rise to a decrement in the frequency. In addition, it is seen that the  $\bar{\omega}$  increases by increasing slenderness ratio ( $L/h$ ) and it can be stated that nonlocality factor has a notable influence on the frequency and especially at the higher vibration modes (see Table 3). Our results are in good agreement with those obtained by Berrabah, Tounsi *et al.* (2013 for EBT, TBT, RBT, and SBT. However, it can be seen that, the inclusion of thickness stretching effect (i.e.,  $\varepsilon_z \neq 0$ ) leads to a slight increase of frequency.

Fig. 1 demonstrates the variation of deflection and frequency ratios of nanobeam with the slenderness ratio ( $L/h$ ). In this example, the deflection, and frequency ratios are defined as the ratios of those computed by present formulation to the correspondences computed by EBT where the shear deformation effect is neglected. Observing this figure, it is easily deduced that, the influence of slenderness ratio is to decrease the natural frequencies and increase the deflections, and this effect is considerable for thick beams at higher vibration modes (see Fig. 2). This demonstrates that the slenderness ratio effect results in a reduction of the beam stiffness. Also it can be concluded from the results of the Fig. 1 that the present nonlocal model is capable to produce very accurate results compared with the nonlocal theory developed by Tounsi, Benguediab *et al.* (2013a) with higher number of unknowns.

The influence of the nonlocal scale parameter on the bending and vibration behaviors of nanoscale beam is shown in Fig. 3. The transverse displacement, and frequency ratios are defined as the ratios of those calculated by the nonlocal theory to the correspondences calculated by the local theory (i.e.,  $\mu=0$ ). This figure demonstrates a nonlinear variation of the bending and vibration responses with the nonlocal scale parameter. It can be observed that the transverse displacement ratio is greater than unity, whereas the frequency ratios are smaller than unity. It means that the local theory under-estimates the transverse displacements and over-estimates the frequencies of the nanoscale beams compared to the nonlocal one. This is due to the fact that the local model is

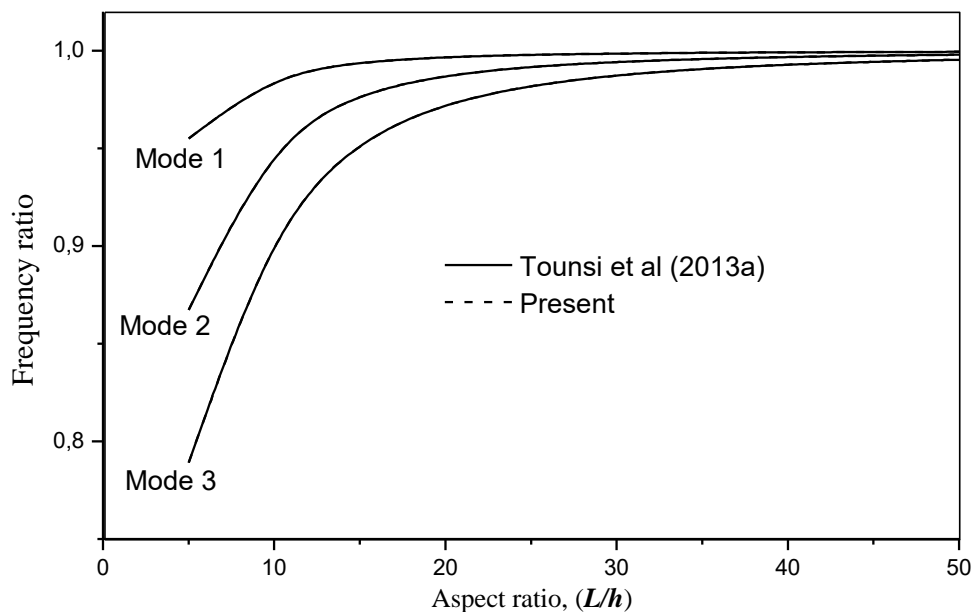


Fig. 2 Effect of the aspect ratio on higher frequency ratios for a simply supported nanobeam with  $e_0a=1$  nm



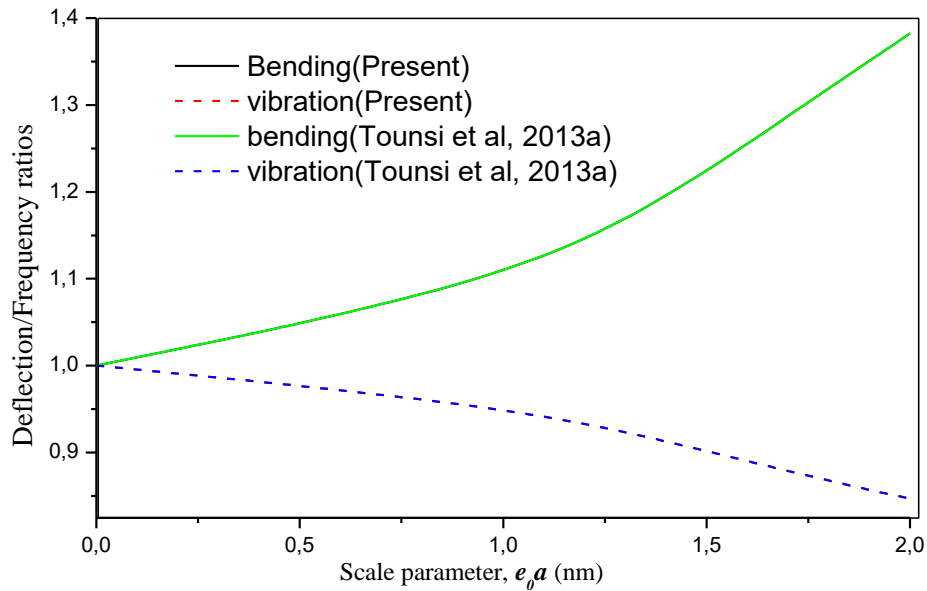


Fig. 3 Effect of the scale parameter on the deflection, and fundamental frequency ratios for a simply supported nanobeam with  $L/h=10$

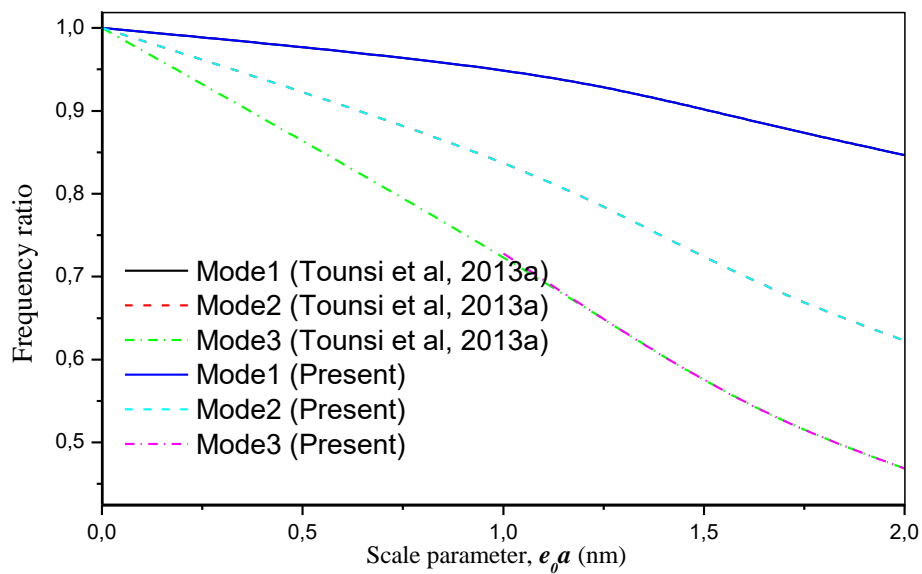


Fig. 4 Effect of the aspect ratio on higher frequency ratios for a simply supported nanobeam with  $e_0 a=1$  nm

unable to consider the small scale influence of the nanoscale beams. The difference between the local and nonlocal models is especially important for the higher modes (see Fig. 4).

## 5. Conclusions

A novel nonlocal thickness-stretching hyperbolic shear deformation beam theory is proposed for the bending, and dynamic behavior of nanobeams. The present theory is able to consider the small scale, shear deformation and thickness stretching influences of nanoscale beams, and respects the zero traction boundary conditions on the upper and lower surfaces of the nanoscale beam without employing shear correction coefficient. From Hamilton's principle as well as nonlocal elasticity theory of Eringen, the nonlocal equations of motion are obtained according to the refined two-variable shear deformation beam theory and then solved via an exact analytical solution. Results demonstrate that the incorporation of thickness stretching influence makes a nanoscale beam stiffer, and hence, leads to a diminishing of transverse displacement and an increase of frequency. However, it is remarked that the consideration of the nonlocal parameter and shear deformation influences lead to an increase in the transverse displacements and a reduction of the natural frequencies of nanoscale beams.

## Acknowledgments

This research was supported by the Algerian National Thematic Agency of Research in Science and Technology (ATRST) and university of Sidi Bel Abbes (UDL SBA) in Algeria.

## References

- Aghababaei, R. and Reddy, J.N. (2009), "Nonlocal third-order shear deformation plate theory with application to bending and vibration of plates", *J. Sound Vib.*, **326**, 277-289.
- Ahouel, M., Houari, M.S.A., Adda Bedia, E.A. and Tounsi, A. (2016), "Size-dependent mechanical behavior of functionally graded trigonometric shear deformable nanobeams including neutral surface position concept", *Steel Compos. Struct.*, **20**(5), 963-981.
- Ait Amar Meziane, M., Abdelaziz, H.H. and Tounsi, A. (2014), "An efficient and simple refined theory for buckling and free vibration of exponentially graded sandwich plates under various boundary conditions", *J. Sandw. Struct. Mater.*, **16**(3), 293-318.
- Ait Yahia, S., Ait Atmane, H., Houari, M.S.A. and Tounsi, A. (2015), "Wave propagation in functionally graded plates with porosities using various higher-order shear deformation plate theories", *Struct. Eng. Mech.*, **53**(6), 1143-1165.
- Amara, K., Tounsi, A., Mechab, I. and Adda Bedia, E.A. (2010), "Nonlocal elasticity effect on column buckling of multiwalled carbon nanotubes under temperature field", *Appl. Math. Model.*, **34**, 3933-3942.
- Belabed, Z., Houari, M.S.A., Tounsi, A., Mahmoud, S.R. and Anwar Bég, O. (2014), "An efficient and simple higher order shear and normal deformation theory for functionally graded material (FGM) plates", *Compos. Part B*, **60**, 274-283.
- Belkorissat, I., Houari, M.S.A., Tounsi, A., Adda Bedia, E.A. and Mahmoud, S.R. (2015), "On vibration properties of functionally graded nano-plate using a new nonlocal refined four variable model", *Steel Compos. Struct.*, **18**(4), 1063-1081.
- Bellifa, H., Benrahou, K.H., Hadji, L., Houari, M.S.A. and Tounsi, A. (2016), "Bending and free vibration analysis of functionally graded plates using a simple shear deformation theory and the concept the neutral surface position", *J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng.*, **38**(1), 265-275.
- Benguediab, S., Tounsi, A., Zidour, M. and Semmah, A. (2014), "Chirality and scale effects on mechanical buckling properties of zigzag double-walled carbon nanotubes", *Compos. Part B*, **57**, 21-24.

- Bennoun, M., Houari, M.S.A. and Tounsi, A. (2016), "A novel five variable refined plate theory for vibration analysis of functionally graded sandwich plates", *Mech. Adv. Mater. Struct.*, **23**(4), 423-431.
- Berrabah, H.M., Tounsi, A., Semmah, A. and Adda Bedia, E.A. (2013), "Comparison of various refined nonlocal beam theories for bending, vibration and buckling analysis of nanobeams", *Struct. Eng. Mech.*, **48**(3), 351-365.
- Bouderba, B., Houari, M.S.A. and Tounsi, A. (2013), "Thermomechanical bending response of FGM thick plates resting on Winkler-Pasternak elastic foundations", *Steel Compos. Struct.*, **14**(1), 85-104.
- Bounouara, F., Benrahou, K.H., Belkorissat, I. and Tounsi, A. (2016), "A nonlocal zeroth-order shear deformation theory for free vibration of functionally graded nanoscale plates resting on elastic foundation", *Steel Compos. Struct.*, **20**(2), 227-249.
- Bourada, F., Amara, K. and Tounsi, A. (2016), "Buckling analysis of isotropic and orthotropic plates using a novel four variable refined plate theory", *Steel Compos. Struct.*, **21**(6), 1287-1306.
- Bourada, M., Kaci, A., Houari, M.S.A. and Tounsi, A. (2015), "A new simple shear and normal deformations theory for functionally graded beams", *Steel Compos. Struct.*, **18**(2), 409-423.
- Chemi, A., Heireche, H., Zidour, M., Rakrak, K. and Bousahla, A.A. (2015), "Critical buckling load of chiral double-walled carbon nanotube using non-local theory elasticity", *Adv. Nano Res.*, **3**(4), 193-206.
- Duan, W.H. and Wang, C.M. (2007), "Exact solutions for axisymmetric bending of micro/nanoscale circular plates based on nonlocal plate theory", *Nanotechnology*, **18**, 385704.
- Ebrahimi, F. and Barati, M.R. (2016), "An exact solution for buckling analysis of embedded piezoelectromagnetically actuated nanoscale beams", *Adv. Nano Res.*, **4**(2), 65-84.
- Eltaher, M.A., Khater, M.E., Park, S., Abdel-Rahman, E. and Yavuz, M. (2016), "On the static stability of nonlocal nanobeams using higher-order beam theories", *Adv. Nano Res.*, **4**(1), 51-64.
- Eringen AC. (1983), "On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves", *J. Appl. Phys.*, **54**, 4703-4710.
- Eringen, A.C. (1972), "Nonlocal polar elastic continua", *Int. J. Eng. Sci.*, **10**, 1-16.
- Hamidi, A., Houari, M.S.A., Mahmoud, S.R. and Tounsi, A. (2015), "A sinusoidal plate theory with 5-unknowns and stretching effect for thermomechanical bending of functionally graded sandwich plates", *Steel Compos. Struct.*, **18**(1), 235-253.
- Hebali, H., Tounsi, A., Houari, M.S.A., Bessaim, A. and Adda Bedia, E.A. (2014), "A new quasi-3D hyperbolic shear deformation theory for the static and free vibration analysis of functionally graded plates", *ASCE J. Eng. Mech.*, **140**, 374-383.
- Houari, M.S.A., Tounsi, A., Bessaim, A. and Mahmoud, S.R. (2016), "A new simple three-unknown sinusoidal shear deformation theory for functionally graded plates", *Steel Compos. Struct.*, **22**(2), 257-276.
- Larbi Chaht, F., Kaci, A., Houari, M.S.A., Tounsi, A., Anwar Bég, O. and Mahmoud, S.R. (2015), "Bending and buckling analyses of functionally graded material (FGM) size-dependent nanoscale beams including the thickness stretching effect", *Steel Compos. Struct.*, **18**(2), 425-442.
- Lu, P., Zhang, P.Q., Lee, H.P., Wang, C.M. and Reddy, J.N. (2007), "Non-local elastic plate theories", *Proc. Royal Soc. A: Math. Phys. Eng. Sci.*, **463**, 3225-3240.
- Murmu, T. and Pradhan, S.C. (2009a), "Buckling of biaxially compressed orthotropic plates at small scales", *Mech. Res. Commun.*, **36**, 933-938.
- Murmu, T. and Pradhan, S.C. (2009b), "Small-scale effect on the free in-plane vibration of nanoplates by nonlocal continuum model", *Physica E: Low-dimens. Syst. Nanostruct.*, **41**, 1628-1633.
- Murmu, T. and Pradhan, S.C. (2009c), "Vibration analysis of nanoplates under uniaxial prestressed conditions via nonlocal elasticity", *J. Appl. Phys.*, **106**, 104301.
- Murmu, T. and Pradhan, S.C. (2009d), "Vibration analysis of nano-single-layered grapheme sheets embedded in elastic medium based on nonlocal elasticity theory", *J. Appl. Phys.*, **105**, 064319.
- Pradhan, S.C. (2009), "Buckling of single layer graphene sheet based on nonlocal elasticity and higher order shear deformation theory", *Phys. Lett. A*, **373**, 4182-4188.
- Pradhan, S.C. and Kumar, A. (2011), "Vibration analysis of orthotropic graphene sheets using nonlocal elasticity theory and differential quadrature method", *Compos. Struct.*, **93**, 774-779.

- Pradhan, S.C. and Murmu, T. (2009), "Small scale effect on the buckling of single-layered graphene sheets under biaxial compression via nonlocal continuum mechanics", *Comput. Mater. Sci.*, **47**, 268-274.
- Pradhan, S.C. and Phadikar, J.K. (2009a), "Small scale effect on vibration of embedded multilayered graphene sheets based on nonlocal continuum models", *Phys. Lett. A*, **373**, 1062-1069.
- Pradhan, S.C. and Phadikar, J.K. (2009b), "Nonlocal elasticity theory for vibration of nanoplates", *J. Sound Vib.*, **325**, 206-223.
- Pradhan, S.C. and Phadikar, J.K. (2010), "Scale effect and buckling analysis of multilayered graphene sheets based on nonlocal continuum mechanics", *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **7**, 1948-1954.
- Pradhan, S.C. and Sahu, B. (2010), "Vibration of single layer graphene sheet based on nonlocal elasticity and higher order shear deformation theory", *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **7**, 1042-1050.
- Reddy, J.N. (2010), "Nonlocal nonlinear formulations for bending of classical and shear deformation theories of beams and plates", *Int. J. Eng. Sci.*, **48**, 1507-1518.
- Reddy, J.N. and Pang, S.D. (2008). "Nonlocal continuum theories of beams for the analysis of carbon nanotubes", *J. Appl. Phys.*, **103**, 023511-1-023511-16.
- Semmah, A., Tounsi, A., Zidour, M., Heireche, H. and Naceri, M. (2015), "Effect of chirality on critical buckling temperature of a zigzag single-walled carbon nanotubes using nonlocal continuum theory", *Full Nanotube. Carbon Nanostruct.*, **23**, 518-522.
- Tounsi, A., Benguediab, S., Adda Bedia, E.A., Semmah, A. and Zidour, M. (2013c), "Nonlocal effects on thermal buckling properties of double-walled carbon nanotubes", *Adv. Nano Res.*, **1**(1), 1-11.
- Tounsi, A., Benguediab, S., Houari, M.S.A. and Semmah, A. (2013a), "A new nonlocal beam theory with thickness stretching effect for nanobeams", *Int. J. Nanosci.*, **12**, 1350025.
- Tounsi, A., Houari, M.S.A. and Bessaim, A. (2016), "A new 3-unknowns non-polynomial plate theory for buckling and vibration of functionally graded sandwich plate", *Struct. Eng. Mech.*, **60**(4), 547-565.
- Tounsi, A., Houari, M.S.A., Benyoucef, S. and Adda Bedia, E.A. (2013d), "A refined trigonometric shear deformation theory for thermoelastic bending of functionally graded sandwich plates", *Aerosp. Sci. Technol.*, **24**(1), 209-220.
- Tounsi, A., Semmah, A. and Bousahla, A.A. (2013b), "Thermal buckling behavior of nanobeams using an efficient higher-order nonlocal beam theory", *ASCE J. Nanomech. Micromech.*, **3**, 37-42.
- Wang, C.Y., Murmu, T. and Adhikari, S. (2011), "Mechanisms of nonlocal effect on the vibration of nanoplates", *Appl. Phys. Lett.*, **98**, 153101.
- Wang, Q. (2005), "Wave propagation in carbon nanotubes via nonlocal continuum mechanics", *J. Appl. Phys.*, **98**, 124301.
- Zemri, A., Houari, M.S.A., Bousahla, A.A. and Tounsi, A. (2015), "A mechanical response of functionally graded nanoscale beam: An assessment of a refined nonlocal shear deformation theory beam theory" *Struct. Eng. Mech.*, **54**(4), 693-710.
- Zenkour, A.M. (2013), "A simple four-unknown refined theory for bending analysis of functionally graded plates", *Appl. Math. Model.*, **37**, 9041-9051.
- Zidi, M., Tounsi, A., Houari M.S.A., Adda Bedia, E.A. and Anwar Bég, O. (2014), "Bending analysis of FGM plates under hygro-thermo-mechanical loading using a four variable refined plate theory", *Aerosp. Sci. Technol.*, **34**, 24-34.

## Abstract

In this work we examine the role of the multi-scale effect in the study of physical properties in the behavior of new materials and the discussions that generate on the link of atomic simulations. Theoretical effect is defined through modes of structural instability that are specified by criteria involving adjustable parameters. More, usually force can be characterized by the appearance of soft mode.

**Keys words:** multi-scale effect, new materials, technologic application

## Résumé

Dans ce travail de thèse nous examinons le rôle de l'effet multi échelle à l'étude des propriétés physique dans le comportement de nouveaux matériaux et les discussions qui engendrent sur le lien des simulations atomistiques. Effet théorique est défini grâce à des modes de l'instabilité structurelle qui sont spécifiés par des critères impliquant des paramètres ajustable. Plus, généralement la force peut être caractérisée par l'apparition de soft mode.

**Mots clés:** effet multi-échelle, nouveaux matériaux, application technologique.

## ملخص

في هذه الأطروحة تم دراسة دور التأثير متعدد النطاق في دراسة الخصائص الفيزيائية في سلوك المواد الجديدة والمواضيع التي تخلق صلة المحاكاة الذرية. ويعرف تأثير النظري أنماط من عدم الاستقرار الهيكلي التي تم تحديدها وفقا لمعايير التي تنطوي على تعديل الإعدادات. أكثر عموما القوة قد تميزت بظهور وضع لينية.

**كلمات مفتاحية:** التأثير متعدد النطاق، المواد الجديدة، التطبيقات التكنولوجية