

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 : MR HADJ EL MRABET ABDERRAHMANE

*Spécialité : Physique
Option : Nanomatériaux*

Intitulé

*Analyse des propriétés physiques des nanomatériaux
à base nitrure de bore et de carbone*

<i>Président :</i>	<i>M^R BENZAIK Abdelnour</i>	<i>Professeur</i>	<i>UDL -SBA</i>
<i>Examineurs :</i>	<i>M^R BESSEGHIER Abderrahmane</i>	<i>MCA</i>	<i>C.U- Tissemsilet</i>
	<i>M^R YEGHNEM Réda</i>	<i>MCA</i>	<i>U- SAIDA</i>
	<i>M^R ZIDOUR Mohamed</i>	<i>MCA</i>	<i>U- Tiaret</i>
<i>Encadreur :</i>	<i>M^R HEIRECHE Houari</i>	<i>Professeur</i>	<i>UDL -SBA</i>
<i>Co-directeur de thèse :</i>	<i>TOUNSI abdelouahed</i>	<i>Professeur</i>	<i>UDL -SBA</i>

Année universitaire: 2016-2017

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail :

A mes chers parents :

Pour leur incommensurable soutien moral et intellectuel et leur assistance illimitée tout au long de mes études.

Pour leur persévérance à me voir réussir dans ma vie scolaire et sans doute, de mener une vie professionnelle convenable et réussie.

A mon épouse :

Mérabet ismahane

A mon enfant :

Imad Eddine

A mes chers frères et sœurs

A tous mes beaux frères, mes belles sœurs et à toute ma famille :

Pour leurs encouragements les plus dévoués et pour leur soutien amical afin de mener à bien ce mémoire.

Remerciements

Arrivé au terme de la rédaction ce travail de thèse, il m'est particulièrement agréable d'exprimer ma gratitude et mes remerciements à tous ceux qui, par leur enseignement, leur soutien et leurs conseils, ont contribué de près ou de loin et m'ont aidé à son élaboration et enfin sa réalisation.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance et ma gratitude au Professeur HEIRECHE Houari, en tant que directeur de cette thèse pour. Il s'est toujours montré très généreux et disponible tout au long de la réalisation de ce mémoire, ainsi pour l'inspiration, l'aide, le avoir bien accepté de me prendre en charge et de m'encadrer en dirigeant mon présent travail, surtout pour ce qu'il a apporté directement ou indirectement à ma formation temps qu'il a bien voulu me consacrer, la grande patience dont il a su faire preuve malgré ses charges académiques et professionnelles et pour autant dire que, sans lui, cette thèse n'aurait jamais vu le jour.

Les mêmes remerciements vont également au Professeur TOUNSI Abdelouahed en tant que co-encadreur de cette thèse.

J'adresse mes sincères remerciements aux membres du Jury qui, par leur générosité, ont eu la peine et la gentillesse de lire, corriger, discuter et enfin évaluer ce modeste travail.

Mes remerciements les plus vifs vont particulièrement au Professeur BENZAIER Abdelnour d'avoir accepté de présider ce jury de thèse.

Les mêmes remerciements vont également au Docteur YEGHNEM Réda (U.SAIDA), au Docteur ZIDOUR Mohamed Docteur (U.TIARET) et au Docteur BESSEGHIR Abderrahmane Professeur au (U.TISSEMSILET) pour avoir accepté d'examiner mon travail.

Finalement, je rends hommages à tous mes professeurs de Physique sans exception pour le soutien qu'ils m'ont présenté tout au long de mon cursus universitaire.

MERCI A TOUS ET TOUTES

Abstract

The critical buckling temperature of single-walled Boron Nitride nanotube (SWBNNT) is estimated using a new nonlocal first-order shear deformation beam theory. The present model is capable of capturing both small scale effect and transverse shear deformation effects of SWBNNT and is based on assumption that the in-plane and transverse displacements consist of bending and shear components, in which the bending components do not contribute toward shear forces and, likewise, the shear components do not contribute toward bending moments. Results indicate the importance of the small scale effects in the thermal buckling analysis of Boron Nitride nanotube.

Keywords: Single walled boron nitride nanotube; Critical buckling temperature; Small scale effect.

Résumé

Dans ce travail , la température critique de flambement d'un nanotube de nitrure de bore mono paroi (SWBNNT) est estimée en utilisant une nouvelle théorie de la déformation de cisaillement non locale de premier ordre .

Le modèle actuel est capable de capturer à la fois l'effets de petite échelle et les effets de déformation transversale de nitrure de bore mono paroi SWBNNT et il est aussi basé sur l'hypothèse que les déplacements dans le plan et les déplacements transversaux **consistent les** composantes de flexion et de cisaillement dans lesquelles les composants de flexion ne contribuent pas aux forces de cisaillement et , de même, les composants de cisaillement ne contribuent pas aux moments de flexion.

Les résultats indiquent l'importance des effets à petite échelle dans l'analyse du flambement thermique du nanotube de nitrure de bore.

Mots-clés:

Les nanotubes de nitrure de bore ; la température critique de flambement – effet petit échelle

ملخص

في هذه العمل، نثمن درجة الحرارة التواء حرجة لأنابيب نتريد البورون أحادي الجدران باستخدام نظرية التشوه التقديرية من الدرجة الأولى اللاموضعية للعارضة

النموذج الحالي قادر على التقاط كل من تأثير صغر السلم وتأثير التشوه العرضي لأنابيب نتريد البورون أحادي الجدران و هي ايضا تعتمد على فرضيات الانتقال في المستوي والانتقال العرضي متناسقة مع احداثيات الالتواء حيث ان إحداثيات الالتواء لا تساهم في قوى القص

النتائج المبينة تشير إلى أهمية التأثيرات صغر السلم في تحليل التواء الحراري لأنابيب نتريد البورون

الكلمات المفتاحية :

نانو تيب نتريد البورون ; درجة حرارة الالتواء ; تأثير السلم الصغير.

Introduction générale

LISTE DES Figures

- Fig. 1.1** – Enroulement d'une feuille de graphène pour former un feuillet de nanotube.
- Fig. 1.2** : nanotubes de nitrure de bore mono- feuillets
- Fig. 1.3** – Mailles élémentaires des différentes phases allotropiques du nitrure de bore: (a) cubique, (b) rhomboédrique et (c) wurtzite.
- Fig. 1.4** – Empilement des feuillets dans le graphite et le hBN
- Fig. 1.5** – Description du mécanisme de croissance VLS
- Fig. 1.6**– *Structures des bandes des différents tubes de nitrure de bore*
- Fig II.1** *Cinématique d'Euler Bernoulli*
- Fig II.2** : *Cinématique de Timoshenko*
- Fig II.3** *cinématique de la théorie d'ordre élevé*
- Fig I.4** *Cinématique de Love-Kirchhoff*
- Fig II.5** *Cinématique de Reissner-Mindlin*
- Fig II.6** *Cinématique des théories d'ordre supérieur*
- Fig IV 1** : Relation entre la température critique de flambements non-dimensionnels et le nombre de mode pour différents coefficients d'échelle
- Fig IV 2** : Relation entre la température critique de flambement non-dimensionnelle et le nombre de mode pour différents valeurs L/d et $e_0a = 0.4 \text{ nm}$
- Fig IV 3** : Relation entre la température critique de flambement non-dimensionnelle et L/d pour différents valeurs e_0a et $n = 1$
- Fig IV 4** : Rapport de la température critique de flambement (TBT PFSDT) pour (EBT) nonlocale vs Rapport de la longueur de diamètre pour différent nombre de mode $e_0a = 0.6 \text{ nm}$

Introduction générale

Nomenclatures

hBN : nitrure de bore hexagonal

CVD : décomposition en phase vapeur

VLS : Vapeur-Liquide-Solide

HOMO : Highest Occupied Molecular Orbitals

LUMO : Lowest Unoccupied Molecular Orbitals.

MET : Microscopie électronique à transmission

GPa : Giga pascalle

BNNT : nanotube de nitrure de bore

FSDT : Modèle de Timoshenko ou bien la théorie de premier ordre

CLPT : théorie classique des plaques stratifiées

FSDT ! Théorie de déformation en cisaillement du premier ordre

SWBNNT : nanotubes de nitrure de bore mono paroi

DWBNNT : nanotubes de nitrure de bore double parois

FEM : méthode des éléments finis .

PFSDT : théorie du premier ordre non local

TBT : théorie classique de Timoshenko

STM : microscope à effet tunnel

STS : spectroscopie à effet tunnel

Sommaire

Introduction générale	1
Chapitre I : Généralité	3
I.1 Introduction	3
I.2 Description des nanotubes	4
I.3 Les nanotubes de nitrure de bore	4
I.4 Synthèse des nanotubes de nitrure de bore	7
I.4.1 Synthèse à haute température	8
I.4.2 Synthèse à basse et moyenne températures	9
I.5 Propriétés des nanotubes et applications	13
I.5.1 Propriétés électroniques.....	14
I.5.2 Propriétés mécaniques.....	17
1.5.2 Propriétés électro-mécanique.....	18
1.5.3 Propriétés vibrationnelles.....	19
1.5.4 Propriétés chimiques.....	19
1.5.5 Propriétés thermiques	21
Référence	22
Chapitre II :les modèle théoriques des milieux continus	28
II.1.Introduction	28
II.2 Théorie des milieux continus	28
II.2.1 Hypothèse de base.....	28
II.3. Les modèles théoriques des milieux continus	29
II.4 Théorie des poutres	29
II.4 .1 domaine d'application	29
II.4.2 Les différents modèles de la théorie des poutres.....	30
II.4.2.a Modèle d'Euler Bernoulli	30
II.4.2.b Modèle de Timoshenko	31
II.4.2.c théorie d'ordre élevé.....	33

II.5. LES DIFFERENTS MODELES DE LA THEORIE DES PLAQUES.....	35
II.5.1 Les modèles classiques Love–Kirchhoff.....	35
II.5.2 Les modèles Reissner-Mindlin.....	36
II.5.3 La Théorie d’ordre élevé.....	37
Référence.....	40
Chapitre III :Formulation mathématique et calcul.....	41
III .1. Introduction.....	41
III .2. Analyse.....	44
III .3.Relations constitutives.....	45
III .4.Équations gouvernantes.....	45
III .5.Solutions analytiques.....	48
Référence.....	50
Chapitre IV : Résultats et discussions.....	55
IV.1. Résultats numériques et discussion.....	55
Conclusions.....	59

Introduction

Générale

Introduction générale

Un monde nouveau est en train de naître, un monde qui nous promet des produits plus petits, plus légers, moins onéreux, un monde qui nous propose des ordinateurs plus performants, des moyens de communication plus rapides, des traitements médicaux plus efficaces, un environnement plus propre, un cadre de vie plus agréable.

Ce monde, c'est le nano monde, c'est-à-dire le monde des nanosciences et des nanotechnologies. Ce monde fascinant vise à élaborer de nouveaux matériaux et des composants toujours plus petits, à construire «atome par atome» de nouvelles molécules puis à les assembler pour réaliser de nouvelles fonctions, et à exploiter des phénomènes nouveaux qui n'apparaissent qu'à l'échelle du nanomètre.

Cette émergence des nanotechnologies et des nanosciences nécessite le développement de nouvelles techniques d'observation capables de s'adapter à cette miniaturisation des objets, afin d'étudier les propriétés physiques à l'échelle nanométrique.

La mesure et la compréhension des propriétés mécaniques d'objets nanométriques peuvent en effet apporter des informations très utiles concernant leur structure, leurs applications pratiques et aussi, dans le cas de nanostructures biologiques, d'approfondir notre connaissance du fonctionnement du monde du vivant.

Cependant, à l'heure actuelle, les microscopies de champ proche possèdent une difficulté intrinsèque difficilement contournable. Cette difficulté est due à la méconnaissance fine de la pointe tant dans sa forme que dans sa taille effective, voire dans son évolution (instabilité avec sauts d'atomes, collage de molécules. Une des stratégies employée pour résoudre ce problème est d'exploiter un nanotube fixé à l'extrémité d'une pointe de microscopie à force atomique. Comme nano sonde, le nanotube présente plusieurs avantages : un rapport d'aspect élevé entre sa longueur de contour et son diamètre, une robustesse mécanique et une faible réactivité chimique.

En outre, se développent une chimie et une biochimie spécifiques, orientées vers les nanotubes de carbone, qui en font, par le biais d'une fonctionnalisation spécifique, des pointes bien adaptées pour l'étude des systèmes biologiques.

Par ailleurs, le composé lamellaire structurellement le plus proche du graphite est le nitrure de bore BN. La stabilité des nanotubes de nitrure de bore a été prouvée théoriquement en 1994 par Rubio et Blase . Les premiers nanotubes de nitrure de bore multifeuillets constitués de

l'enroulement concentrique de plusieurs feuillets hexagonaux de nitrure de bore ont été synthétisés par Chopra et coll. Depuis, différentes équipes se sont essayées à la synthèse de nanotubes de nitrure de bore, utilisant des techniques de synthèse allant de l'arc électrique à l'ablation laser, en passant par le broyage mécanique. Cependant, bien que les caractéristiques des tubes obtenus varient d'un mode de synthèse à l'autre, toutes ces synthèses ont produit des nanotubes formés de plusieurs couches concentriques de nitrure de bore (nanotubes multifeuillets).

Le but principal de cette étude est de développer une formulation mathématique pour étudier le flambement thermique des nanotubes de nitrure de bore mono parois est ceci en tant en compte de l'effet d'échelle et des caractéristiques physiques.

Dans le premier chapitre, nous décrirons un petit rapelle sur la structure des nanotube de carbon et quelque aspect structural des nanotubes de nitrure de bore, leurs propriétés mécaniques, électroniques et electro-mécaniques, Propriétés chimiques et thermiques. Les différentes techniques de synthèse

Le second chapitre concerne la description de quelques méthodes du milieu continue.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons un développement mathématique pour une analyse thermique

Le quatrième chapitre sera consacré aux discussions des différents résultats obtenus et nous terminerons par une conclusion.

Chapitre I

Les nanotubes de nitrure de bore : généralités

Chapitre I : Généralité

1.1 Introduction

La grande histoire des nanotubes est en train de naître en 1991 lorsque Iijima[1], grâce à ses travaux en microscopie électronique à transmission sur les sous-produits de la synthèse des fullérènes, a découvert les premiers nanotubes de carbone . Ces structures présentant un très grand rapport longueur/diamètre sont quasi unidimensionnelles et présentent un potentiel indéniable en ce qui concerne leurs propriétés physiques et chimiques.

Un nanotube est formé de l'enroulement concentrique d'une ou plusieurs feuilles de graphène. Cet enroulement peut se faire de différentes façons, en fonction des directions du réseau hexagonal et l'angle qui existe entre l'axe d'enroulement de la feuille de graphène. Ainsi, il est possible de définir l'angle *chiral* ou *angle d'hélicité* θ (fig 1.1) qui est l'angle compris entre le vecteur chiral \mathbf{C}_h et les vecteurs de la maille élémentaire (\mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2). La valeur de cet angle permet de distinguer 3 types de tubes :

- les nanotubes « zig-zag » pour lesquels θ vaut 0°
- les nanotubes « armchair » pour lesquels θ vaut 30°
- les nanotubes « chiraux » pour lesquels θ est compris entre 0° et 30° .

Un nanotube est totalement défini par sa longueur, son diamètre et son angle chiral. Ces deux dernières valeurs sont reliées par le vecteur chiral \mathbf{C}_h qui résulte de la combinaison des vecteurs unitaires de la maille élémentaire du feuillet \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 .

$$\mathbf{C}_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad (1.1)$$

Les coefficients n et m sont connus sous le nom d'indices d'Hamada [2] 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 $n \neq m$ et $(n,m) \neq 0$ 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 :

Diamètre de tube :

$$d_t = a \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi} = a_{c-c} \sqrt{3} \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi}$$

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

Angle chiral :
$$\theta = \arctang \frac{\sqrt{3}m}{m+2n} = \arccos \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}}$$

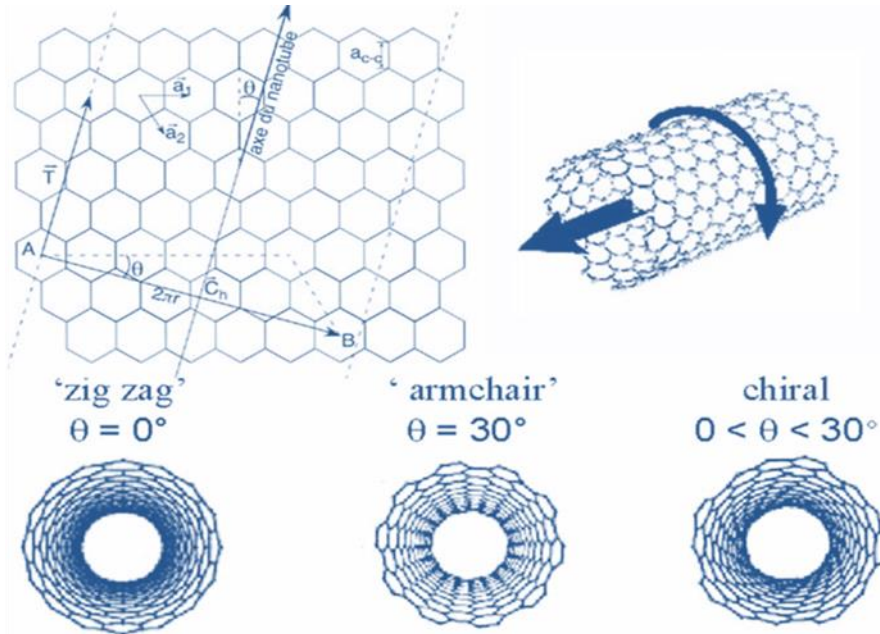


Fig. 1.1 - Enroulement d'une feuille de graphène pour former un feuillet de nanotube. Définition de l'angle chiral θ et des trois types d'enroulement.

1.2 Description des nanotubes

Les nanotubes peuvent être constitués de l'enroulement d'une (nanotubes mono-feuillets) 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 $3,44 \text{ \AA}$ pour les nanotubes de carbone. De plus, les nanotubes mono-feuillets peuvent se présenter soit isolés, soit sous forme de fagots (ou faisceaux, *bundles* en anglais) organisés.

1.3 Les nanotubes de nitrure de bore

Le carbone n'est pas le seul élément avec lequel il est possible de former des nanotubes. D'autres types de matériaux lamellaires tels le nitrure de bore hexagonal (hBN) Fig. 1.2, le sulfure de tungstène WS_2 et le sulfure de molybdène MoS_2 peuvent également conduire à la formation de nanotubes. Avant leur première synthèse en 1995, la stabilité des nanotubes de nitrure de bore avait été prédite théoriquement [3] par leurs calculs de structure électronique

en 1994. L'intérêt grandissant qui est porté aux nanotubes de nitrure de bore est notamment dû au fait que, contrairement aux nanotubes de carbone, les nanotubes de nitrure de bore sont des semi-conducteurs à grand gap (de l'ordre de 5,5 à 6 eV) [4, 3] et que leurs propriétés électroniques sont indépendantes du diamètre et de l'hélicité.

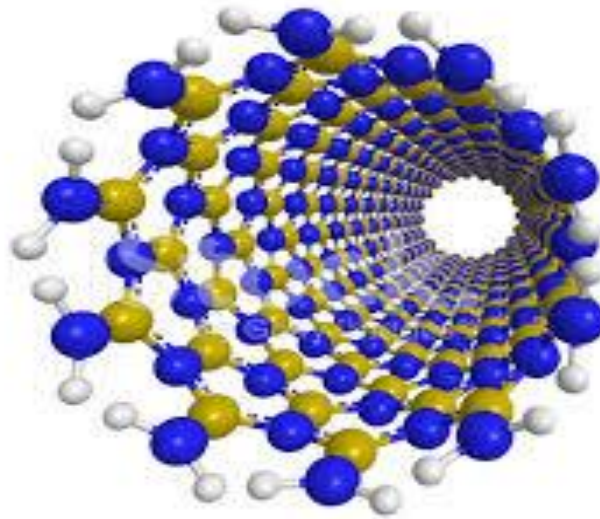


Fig. 1.2 : nanotubes de nitrure de bore mono-feuillets

Cette section présente brièvement le nitrure de bore hexagonal, matériau constitutif des nanotubes de nitrure de bore, puis les différentes voies de synthèse et les applications envisagées pour ces nanotubes.

-Le nitrure de bore

Le nitrure de bore (BN) est un composé non naturel qui a été synthétisé pour la première fois en 1842 [5, 6]. Le bore et l'azote étant situés de part et d'autre du carbone dans le tableau 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 wurtzitique (équivalent du diamant hexagonal) et le nitrure de bore rhomboédrique, les Mailles élémentaires des différentes phases allotropiques du nitrure de bore présenté sur la fig 1.3.

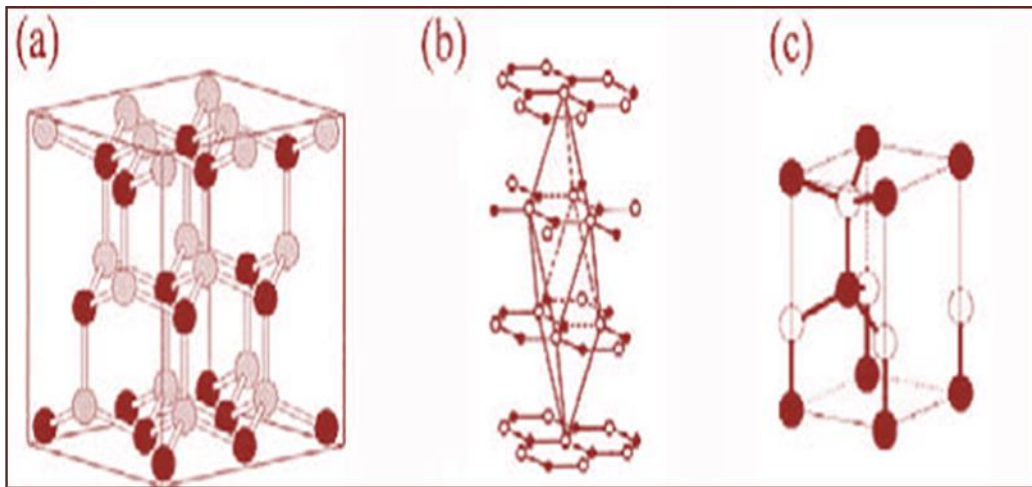


Fig. 1.3 – Mailles élémentaires des différentes phases allotropiques du nitrure de bore: (a) cubique, (b) rhomboédrique et (c) wurtzite.

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 le nitrure de bore hexagonal, $a=0,2464$ 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 nitrure de bore 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 nitrure de bore hexagonal, 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 fig 1.4. Le nitrure de bore hexagonal est composé de feuillets d'hexagones de B_3N_3 et sa géométrie est gouvernée par une hybridation sp^2 [7]. A la périphérie des réseaux hexagonaux, on trouve des groupements NH et B(OH).

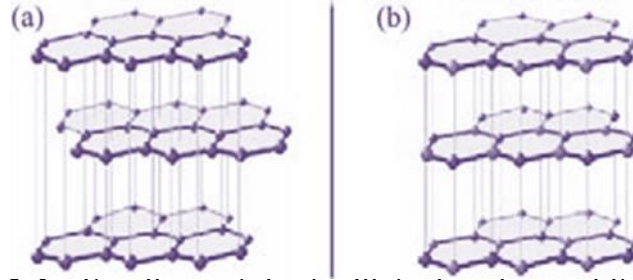


Fig. 1.4 – Empilement des feuillets dans le graphite et le hBN

La réelle formule brute du nitrure de bore hexagonal est par conséquent de la forme $(\text{NH})(\text{BN})_x(\text{BOH})$. Au sein du réseau hexagonal, les liaisons entre les atomes de bore et d'azote consécutifs sont covalentes, et de longueur 1,45 Å. En revanche, les liaisons existant entre les différents feuillets sont nettement plus longues (3,44 Å) car de type Van der Waals.

Le nitrure de bore hexagonal 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 [8] alors qu'elle est de 850 à 900°C pour le nitrure de bore hexagonal. A température ambiante, le nitrure de bore hexagonal est insoluble dans l'eau [9].

Enfin, contrairement au graphite qui est noir qu'il soit monocristallin ou non, le nitrure de bore hexagonal est transparent quand il est monocristallin et ne présente pas de défauts [10]. La couleur blanche et l'opacité généralement observées sont dues à l'existence de défauts structuraux ou d'impuretés.

1.4 Synthèse des nanotubes de nitrure de bore

Les nanotubes de nitrure de bore sont constitués de l'enroulement d'un ou plusieurs feuillets de nitrure de bore hexagonal.

Les différentes méthodes de synthèse des nanotubes de nitrure de bore peuvent se diviser en deux classes en fonction de la température de synthèse. On distingue ainsi les méthodes haute température (supérieure à 2000°C) et les méthodes nécessitant une température moins élevée (300 à 2000°C)[100].

1.4.1 Synthèse à haute température (>2000°C)

1.4.2 Arc électrique

La première équipe à avoir synthétisé des nanotubes de nitrure de bore est l'équipe de Zettl [11] en 1995. Le réacteur de synthèse par arc électrique est le même que celui utilisé pour la synthèse de fullérènes et nanotubes de carbone. Cependant, le nitrure de bore hexagonal hBN étant non conducteur, il n'est pas possible d'utiliser sur le modèle de ce qui se fait en carbone - une électrode de nitrure de bore. Dans cette première synthèse décrite, les auteurs ont utilisé comme anode une électrode de tungstène creuse remplie de nitrure de bore hexagonal. La cathode est une électrode de cuivre. Les nanotubes obtenus sont des nanotubes présentant en moyenne 7 à 9 feuillets, et de longueur supérieure à 200 nm. Ces tubes constituent cependant une faible proportion du brut de synthèse. Les premiers nanotubes monofeuillets sont obtenus par arc électrique en 1996 [12] par l'équipe d'Annick Loiseau en mélange avec des nanotubes multifeuillets. La différence principale avec la synthèse précédente est la nature des électrodes, qui sont cette fois en borure d'hafnium HfB_2 , composé métallique à haut point de fusion.

Ensuite, différentes équipes ont réalisé des synthèses avec d'autres systèmes d'électrodes [13, 14, 15, 16, 17, 18]. Dans toutes ces conditions, les nanotubes obtenus sont multifeuillets. L'équipe de Zettl a enfin mis en place une méthode de synthèse permettant d'obtenir exclusivement des nanotubes de nitrure de bore bifeuillets [19] en utilisant des électrodes contenant du bore, du nickel (1%) et du cobalt (1%).

- Torche plasma

La méthode de torche plasma a été développée par l'équipe de Shimizu [20]. Les auteurs se sont servi d'une torche plasma pour décomposer une cible de nitrure de bore hexagonal et ont obtenu des nanotubes de nitrure de bore multifeuillets en mélange avec des nanotubes de carbone multifeuillets et des nanotubes composés de feuillets de carbone et de nitrure de bore (pas de $B_xC_yN_z$).

- Vaporisation et ablation LASER

L'utilisation de l'énergie LASER pour former des nanotubes peut se faire de deux façons :

- par ablation

L'impact d'un LASER pulsé sur une cible de nitrure de bore éventuellement enrichie en

catalyseur métallique conduit à l'ablation de fragments de cette cible. Le chauffage de ces fragments est ensuite réalisé dans un four, et un gaz vecteur entraîne les poudres créées jusqu'à une zone de collection. Dans ce cas, la température au niveau de la cible reste inférieure à la température de dissociation du nitrure de bore hexagonal. Yu et coll. ont étudié la composition des poudres formées par l'ablation par un LASER excimère à 248 nm d'une cible de nitrure de bore compactée et sans catalyseur de nickel et cobalt [21, 22]. Des nanotubes sont obtenus dans les deux cas ; les nanotubes obtenus en présence de nickel et cobalt présentent une plus grande longueur et un nombre de feuillets plus réduit (monofeuillets et bifeuillets) que ceux obtenus en absence de catalyseur. D'autre part, en 2003, l'équipe de Golberg et Bando a pu synthétiser en absence de catalyseur un mélange de nanotubes monofeuillets et multifeuillets avec un LASER pulsé à 1064 nm [23].

-par vaporisation

La focalisation d'un LASER continu de forte puissance à la surface d'une cible de nitrure de bore permet le chauffage de celle-ci à des températures supérieures à la température de dissociation du nitrure de bore hexagonal (2700K à 1 bar sous N₂). La cible est alors vaporisée au niveau de l'impact du LASER, et les espèces vaporisées se recombinent dans une zone proche de celle chauffée par le LASER. Trois équipes ont ainsi utilisé un LASER de puissance CO₂ (10,6 μm) pour synthétiser des nanotubes de nitrure de bore [24, 25, 26]. L'équipe de Bando et Golberg a d'abord obtenu en 1996 des nanotubes multifeuillets par cette voie. Ensuite, en 2000, Thomas Laude et coll. ont formé des nanotubes possédant un nombre réduit (2 à 4) de feuillets.

Enfin, en 2001, l'équipe d'Annick Loiseau a obtenu par cette voie des nanotubes monofeuillets en grande quantité et en absence de nanotubes multifeuillets.

Ces deux voies, ablation et vaporisation LASER de cibles de nitrure de bore, permettent la synthèse de nanotubes de nitrure de bore. La technique de vaporisation par un LASER CO₂ a été reproduite par trois équipes, et c'est la seule qui a permis jusqu'à aujourd'hui la synthèse de nanotubes monofeuillets en grande quantité.

1.4.2 Synthèse à basse et moyenne températures (300 à 2000°C)

- Méthodes chimiques

La première des voies basse température employées est la décomposition en phase vapeur

Chapitre I : Généralité

(CVD). Dans cette technique, un substrat sur lequel sont déposées des particules de catalyseur métallique est chauffé à une température de l'ordre de 700°C. Les réactifs sont ensuite insérés sous forme de gaz. Les nanotubes croissent au niveau des particules métalliques. En 1993, l'équipe de Hamilton l'a utilisée [27] pour synthétiser des filaments de nitrure de bore par réaction de la trichloroborazine ($B_3Cl_3H_3N_3$) avec du césium sous vide à 1100°C. Quelques-uns de ces filaments étaient creux. De même, et par la décomposition en phase vapeur ont été synthétisés des filaments de nitrure de bore que l'on appellerait aujourd'hui des nanotubes bambous [28]. La réaction de formation des filaments se fait entre le diborane et le diazote, le catalyseur métallique étant le zirconium. Cependant, il a fallu attendre 2000 pour que la décomposition en phase vapeur permette d'obtenir de vrais nanotubes de nitrure de bore [29]. Ces premiers nanotubes, issus de la décomposition de trichloroborazine à 750 °C sur une membrane d'alumine sous pression, sont multifeuillets, de grand diamètre (entre 270 et 360 nm) et de longueur proche de 20 μm . Depuis, de nombreuses variantes de décomposition en phase vapeur ont été décrites pour synthétiser des tubes. La principale différence entre toutes ces méthodes est la nature chimique du mélange qui est décomposé [30, 31, 32, 33]. De plus, diverses adaptations des conditions de synthèse et des réactifs ont permis de synthétiser des nanotubes de nitrure de bore par voie CVD (la décomposition en phase vapeur) en l'absence de catalyseur métallique [34-35-36]. Le principe de synthèse des nanotubes par pyrolyse est similaire à celui de la décomposition en phase vapeur, à ceci près que certains réactifs sont sous forme solide et pas gazeuse. Ainsi, dès 1997, l'équipe de Terauchi [37, 38] a chauffé ensemble une poudre de bore amorphe et une poudre de lithium sous azote et a obtenu des nanotubes multifeuillets de longueur limitée et de diamètre inférieur à 10 nm. La technique a été améliorée ensuite par l'utilisation de poudres de bore rhomboédrique et de nitrure de bore hexagonal hBN et de lithium solide, l'ensemble étant chauffé à 1200°C sous hélium. Les nanotubes obtenus sont multifeuillets, de 10 nm de diamètre, et de 50 à 250 nm de longueur. L'équipe de Tang [39, 40] a pour sa part chauffé entre 1200 et 1500°C un mélange de poudres de bore et d'oxyde de fer sous ammoniac et a obtenu une faible quantité de nanotubes multifeuillets de plusieurs microns de longueur et de diamètre variant en fonction de la température utilisée. Le procédé a été amélioré (rendement en structures tubulaires porté à 80% en volume) [41] ensuite en ajoutant une poudre de silice au mélange de poudres pour

Chapitre I : Généralité

favoriser la formation de l'oxyde de bore qui réagit ensuite avec l'ammoniac pour former les tubes. Plus tard, de la même façon, l'équipe de Cai [42] a formé des tubes multifeuillets de diamètre interne de 100 nm et de plusieurs microns de longueur par mélange de bore, de chlorure d'ammonium et d'oxyde de fer à 600°C.

Enfin, deux nouvelles méthodes de synthèse des nanotubes de nitrure de bore multifeuillets ont été développées [43], l'une en phase gazeuse et l'autre en phase liquide [44]. La première synthèse est réalisée par chauffage à 1500°C sous atmosphère d'ammoniac d'oxyde borique en présence d'un précurseur carboné de polypropylène et carbone amorphe. La croissance des nanotubes se fait sur un support en alumine. Les nanotubes obtenus ont un diamètre de l'ordre de 40 nm et une longueur pouvant dépasser plusieurs centaines de microns. La seconde voie en phase liquide combine la pyrolyse d'un polyborazylène et un « templating » physique dans une membrane d'alumine poreuse à 1200°C. Les nanotubes sont obtenus par recuit à 1800°C des nanotubules formés à l'issue de la pyrolyse du polymère au sein des pores de la membrane d'alumine. La morphologie .

La variété des conditions utilisées (chaque équipe développe ses propres conditions) ne permet pas de valider la reproductibilité d'une méthode générale de synthèse des nanotubes par la décomposition en phase vapeur CVD ou pyrolyse.

Les tubes obtenus (diamètre 200 nm et longueur 60 microns) est liée à la morphologie des pores de la Le mécanisme de croissance des nanotubes synthétisés par la décomposition en phase vapeur ou pyrolyse est appelé mécanisme « VLS » (Vapeur-Liquide-Solide). Il est largement accepté pour la synthèse de nanotubes et est constitué des étapes suivantes : les espèces d'intérêt, en phase vapeur, se dissolvent dans les particules catalytiques métalliques - qui sont liquides aux températures concernées jusqu'à saturation de la phase liquide, puis cristallisent à l'interface liquide/substrat. Ce mécanisme est illustré sur la fig 1.5.

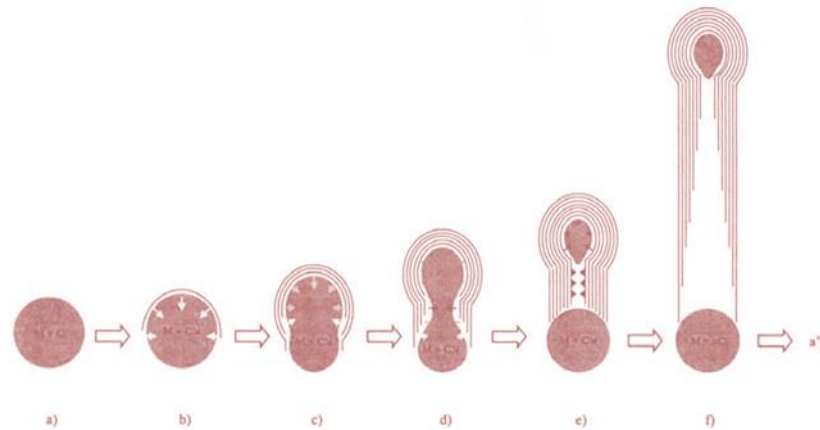


Fig. 1.5 - Description du mécanisme de croissance VLS : (a) décomposition des gaz et dissolution dans la particule métallique. (b) saturation de la particule et début de croissance. (c) formation de la première couche de structure hexagonale et début d'expulsion d'une partie de la particule. (d) formation d'une couche de structure hexagonale de forte courbure à l'intérieur de la tête. (e) détachement d'une partie de la particule. diminution du diamètre intérieur le long de la direction de croissance jusqu'à interruption de la croissance.

Méthode de broyage mécanique

L'équipe de Chen utilise une méthode de broyage mécanique dite « ball milling » [45] pour synthétiser les nanotubes de nitrure de bore multifeuillets avec un rendement supérieur à 85%. Cette méthode se fait en deux temps : les poudres borées sont d'abord broyées à l'aide de billes en acier en présence d'ammoniac à température ambiante pendant 150 heures. Ensuite, le produit obtenu est chauffé pendant une dizaine d'heures à des températures supérieures à 1000°C, sous flux d'azote ou d'argon. Au fil des années, diverses améliorations de cette technique ont été décrites par la même équipe [46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55]. Une autre équipe a récemment reproduit ce type de manipulation et produit des nanotubes de nitrure de bore mono-feuillets [56].

- Substitution à partir des nanotubes de carbone

Enfin, une autre méthode spécifique permettant la synthèse des nanotubes de nitrure de bore multifeuillets est la méthode carbothermique qui consiste à chauffer à des températures de l'ordre de 1500°C des nanotubes de carbone multifeuillets plus ou moins purifiés avec de l'oxyde ou de l'acide borique sous atmosphère azotée. L'équipe de Bando et Golberg a d'abord

Chapitre I : Généralité

développé cette technique de substitution [57], puis celle-ci a été reproduite par Pichler et coll. d'une part [58, 59] et Rao et coll. d'autre part [60]. Ces deux équipes ont adapté le contenu du mélange et les conditions de température et de pression, ainsi que le gaz utilisé. De façon plus marginale, l'équipe de Zettl a transformé des nanotubes $B_xC_yN_z$ en nanotubes de nitrure de bore purs par oxydation sélective des zones carbonées [61].

1.5 Propriétés des nanotubes et applications

Les nanotubes de nitrure de bore BN possèdent certaines propriétés (rigidité mécanique et grande conductivité thermique) proches de celles des nanotubes de carbone (tableau 1) du fait de leur identité structurale. Cependant, les nanotubes de BN présentent des propriétés exclusives grâce à leur composition chimique.

Caractéristiques/Propriété	C-NTs	BN-NTs
Electroniques	Métalliques ou semiconducteurs [3,4]	Isolants, gap ≈ 5.5 eV [8] (*) ≈ 5.8 eV [95]
Mécaniques <i>(Module de Young)**</i>	≈ 1 TPa [98]	1.22 ± 0.24 TPa [96] 722 GPa [97]
Stabilité Thermique / Résistance à l'Oxydation	≈ 400 °C [8]	700 - 900 °C [81]

Tableau.1 Comparaison des différentes propriétés, avec des valeurs expérimentales des deux sortes de NTs : carbone et BN. (*) Valeur théorique. (**) Pour des NTs multiparois.

1.5.1 Propriétés électroniques

Nous venons de signaler que les nanotubes de nitrure de bore BNNTs sont des isolants. Dans leurs travaux, la valeur de la bande interdite a été établie par des calculs de structure électronique, dans l'approximation GW, comme étant supérieure à 5.5 eV [4] pour des tubes de diamètre supérieur à 9.5 \AA . Ces auteurs ont montré que cette valeur est indépendante de l'hélicité et du nombre de parois des tubes. La Fig. 1.6 illustre ce résultat. Elle présente la structure de bandes pour différents tubes .

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 nitrure de bore hexagonal h-BN.

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, grâce à des calculs *ab-initio* (DFT-LDA) ont montré que pour un nanotube zig-zag (9,0), le gap peut varier entre 3.5 et 1 eV[93] . 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 nanotubes armchair. En effet, 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 [7].

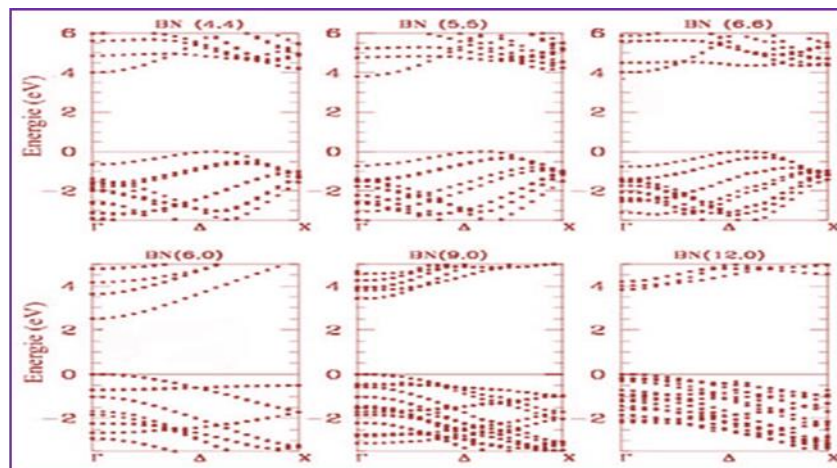


Fig. 1.6– Structures des bandes des différents tubes de nitrure de bore, calculées d'après Rubio et Blase [3,4].

Chapitre I : Généralité

Récemment, ont signalé que l'application d'un champ électrique transversal ($\approx 0.1 \text{ V/\AA}$) fait diminuer fortement la valeur du gap (2-3 eV) [62].

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 nanotubes de carbone. Toutefois, pour les nanotubes de nitrure de bore, cette modulation est plus accentuée et a des conséquences plus intéressantes en ce qui concerne les applications potentielles de ces nanotubes.

Il est intéressant de pouvoir moduler les propriétés électroniques des tubes de nitrure de bore, par exemple, en les dopant avec du carbone. Dans ce sens, Meunier [63] ont étudié, d'un point de vue théorique, ce type d'hétérostructures (jonctions de tubes de nitrure de bore 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 (Le principe de l'émission de champ est d'extraire des électrons, sous vide, d'une pointe métallique par effet tunnel en appliquant un champ électrique.) des nanotubes 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 [64, 65] en 2001, dans un microscope électronique en transmission et sur des tubes majoritairement double parois (diamètre $\approx 2.7 \text{ nm}$). Ils ont observé que les nanotubes de nitrure de bore, à faible tension ($< 10 \text{ V}$), sont de bons diélectriques et qu'ils ne montrent pas de grande résistance (dans ces valeurs), contrairement aux nanotubes de carbone. Mais, ils ont remarqué qu'à des tensions plus importantes, certains nanotubes de nitrure de bore

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 nanotubes de nitrure de bore. Ils ont trouvé que les nanotubes de nitrure de bore montrent un champ d'émission stable, avec moins de bruit que dans le cas des nanotubes de carbone (ce bruit est attribué aux molécules de gaz absorbées à la surface des tubes). Radosavljevic et al. [66] ont étudié les propriétés de transport des nanotubes monoparois synthétisés

à l'ONERA en les déposant entre deux électrodes en nickel. Ces auteurs ont confirmé que les nanotubes de nitrure de bore sont semiconducteurs mais dopés p. Ils attribuent ce dopage à la présence de particules de bore à l'extrémité des tubes [26] 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 nanotubes 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 nanotubes, car il est alors possible d'accéder simultanément à la structure atomique et à la densité d'états [67]. Deux équipes sont parvenues à le faire dans le cas des nanotubes de nitrure de bore, en 2003. La première, celle de Czerw [68], a étudié des nanotubes multiparois de grand diamètre (compris entre 5 et 20 nm), synthétisés par arc électrique et déposés sur un substrat en graphite. Les expériences par spectroscopie à effet tunnel 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 ± 0.7 eV. La deuxième équipe, celle de Ishigami [69], a étudié les tubes double parois (provenant de l'équipe Zettl) [19] 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 nanotube et le substrat. Notons que ces deux groupes signalent également : (i) la difficulté de réaliser l'imagerie ou la spectroscopie avec le microscope et la spectroscopie à effet tunnel sur des semiconducteurs à

grand gap (comme dans le cas du nitrure de bore) déposés sur des substrats (normalement métalliques) et (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 [68, 69].

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

1.5.6 Propriétés mécaniques

Les bonnes qualités mécaniques du nitrure de bore hexagonal amènent à penser qu'il serait intéressant de les retrouver dans les nanotubes de nitrure de bore . C'est effectivement le cas et elles s'y trouvent même augmentées. Le premier travail d'étude de ces propriétés date de 1998. Le module de Young des nanotubes de nitrure de bore double parois a été calculé en mesurant l'amplitude des vibrations thermiques dans un Microscopie electronique a transmission TEM à température ambiante. Ils ont trouvé une valeur de 1.22 ± 0.24 TPa, soit un module de Young du même ordre de grandeur que celui des nanotubes de carbone et bien supérieur à celui du nitrure de bore hexagonal mesuré dans le plan.

Récemment, La valeur d'élasticité a été mesurée, et elle varie entre 505 et 1031 GPa [71], avec une valeur moyenne de 722 GPa. Ces mesures ont été réalisées sur des nanotubes multiparois et avec la méthode des résonances électromagnétiques (Cette méthode est basée sur le couplage électromagnétique entre le champ électrique appliqué et le nanotube.) dans un Microscopie electronique a transmission TEM.

Du côté théorique, Le module de Young ont été calculée par la méthode de liaisons fortes pour des nanotubes de nitrure de bore et de carbone [72]. Ils ont trouvé que celui-ci est toujours inférieur à celui des nanotubes de carbone et dépendant du diamètre des tubes. Dans le cas des nanotubes de nitrure de bore , la valeur trouvée varie entre 0.837 et 0.912 TPa, pour des diamètres compris entre 0.81 et 2.08 nm. à l'aide de la dynamique moléculaire et des calculs *ab-initio* dans la DFT, ils ont étudié les structures des dislocations qui peuvent naître dans les nanotubes sous tension importante[73]. De même, ils ont remarqué que les nanotubes de nitrure de bore possèdent une tension critique plus élevée que celui des nanotubes de carbone.

confirme les résultats de leurs travaux précédents, [94] où ils avaient montré que les nanotubes de nitrure de bore sont plus résistants à la rupture que les nanotubes de carbone.

Notons également que même si les nanotubes 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 nanotubes 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 nitrure de bore hexagonal h-BN.

1.5.7 Propriétés électro-mécaniques

Un aspect très intéressant pour les nanotubes de nitrure de bore est leur caractère piézoélectrique. En effet, d'après les calculs récents montre que les nanotubes de nitrure de bore sont d'excellents matériaux piézoélectriques légers [74]. Et on montre, à l'aide de calculs *ab-initio*, que les nanotubes zig-zag et la plupart des nanotubes chiraux ne sont pas pyroélectriques [75](Ce type de matériaux pyroélectriques se caractérise pour avoir une polarisation à l'équilibre, en l'absence de forces déformatrices ou de champs appliqués externes.), 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 nanotubes de nitrure de bore peuvent avoir des applications nanoelectromécaniques, comme actuateurs ou nanosenseurs.

1.5.8 Propriétés vibrationnelles

L'étude des propriétés vibrationnelles des nanotubes 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*).

Citons du côté théorique, les travaux suivants : (i) avec une méthode de liaisons fortes ils ont calculer les modes de phonon des nanotubes de nitrure de bore. (ii) Pour calculer également les

modes de phonon [77], ils ont aussi employé un modèle semi-empirique, "Valence-Shell". Il a aussi simulé les spectres Raman des nanotubes à l'aide d'un modèle de polarisabilité de la liaison. Le groupe de Xiao [78], 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.

Quant au côté expérimental, il existe uniquement dans la littérature les travaux suivants : ceux de Wu [79] qui ont étudié, grâce à la spectroscopie Raman dans l'UV, les nanotubes biparois obtenus par arc électrique et les nanotubes multiparois $B_xC_yN_z$, et (ii) nos travaux en spectroscopies Raman (visible et UV) et infrarouge.

1.5.9 Propriétés chimiques

Comme nous l'avons vu précédemment, le nitrure de bore hexagonal est un matériau stable chimiquement et résistant à l'oxydation jusqu'à des températures proches de 900 °C [80]. On peut s'attendre alors à ce que les nanotubes de nitrure de bore se comportent de façon semblable. Effectivement, les nanotubes multiparois sont stables à des températures proches de 700 °C [81] 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 nanotubes. 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 nanotubes remplis (multiparois dans tous les cas) ou à les remplir après leur synthèse avec des fullerènes ("peapods") [82] ou avec des composés cristallins : (1) le carbure de silicium [86], (2) le cobalt et le fer-nickel [83], (3) l'oxyde de magnésium [87], (4) le borate d'aluminium [84] et (5) le borure de calcium [85].

Le stockage de l'hydrogène : les matériaux nanostructurés, et plus concrètement les nanotubes sont de bons candidats car ils présentent l'avantage d'avoir des surfaces spécifiques importantes et une structure hautement poreuse. Expérimentalement, des études sont faites pour l'adsorption de l'hydrogène dans les nanotubes de nitrure de bore [88]. Rappelons que des travaux faits sur des nanotubes de carbone monoparois ont montré que les nanotubes semiconducteurs permettaient probablement une meilleure adsorption de l'hydrogène. Etant

donné la difficulté actuelle à faire le tri entre nanotubes semiconducteurs et nanotubes métalliques de carbone, l'utilisation des nanotubes de nitrure de bore, qui sont tous des isolants avec une grande stabilité chimique et thermique, paraît très prometteuse. des études fondé sur deux sortes de nanotube nitrure de bore : les multiparois bien cristallisés et les multiparois de structure bambou. Ils ont observé que les nanotubes 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. [89] ont montré que les énergies de liaison des nanotubes de nitrure de bore sont 40 % supérieures à celles des nanotubes de carbone, du fait de la polarité de la liaison B-N. Ceci permet donc d'envisager que les nanotubes de nitrure de bore pourraient adsorber une quantité plus importante d'hydrogène que celle adsorbée par les tubes de carbone. Récemment, avec des calculs *ab-initio* (DFT) ils ont étudié l'influence d'une déformation radiale des nanotubes de nitrure de bore d'hélicité zig-zag sur l'adsorption chimique de l'hydrogène[90]. Ils ont aussi 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 nanotubes de nitrure de bore dans des dispositifs électroniques.

1.5.10 Propriétés thermiques

Dans la section consacrée au nitrure de bore hexagonal, 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 à partir d'un modèle de constantes de force (présenté précédemment), confirment que la chaleur spécifique des tubes est élevée.[91]. Ils ont trouvé une expression qui permet d'établir la chaleur spécifique (C_V) à 300 K d'un nanotube donné (valeurs des indices d'Hamada (n,m)). Ils prédisent également, en considérant le C_V des nanotubes de nitrure de bore, que leur conductivité est sûrement élevée. Il est important de connaître le comportement thermique des nanotubes. Le groupe de Moon [92]l'ont étudié à l'aide des calculs de dynamique moléculaire, avec des températures entre 1000 K et

Chapitre I : Généralité

5500 K. Ils ont observé que la désintégration des tubes dépend de leur hélicité : les nanotubes 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.[99]

Référence

- [1] Iijima S. « Microtubules of graphitic carbon »Nature 1991 354, 56.
- [2] Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S., editors. « Physical properties of Carbon nanotubes »Imperial College Press, London, 1998.
- [3] Rubio A., Corkill J.L., Cohen M.L. « Theory of graphitic boron nitride nanotubes »Phys. Rev. B 1994 49, 5081.
- [4] Blase X., Rubio A., Louie S.G. « Stability and band-gap constancy of boron nitride nanotubes »Europhys. Lett. 1994 28, 335.
- [5] Balmain W.H. Phil. Mag. 1842 21, 170.
- [6] Balmain W.H. « Bemerkungen über die Bildung von Verbindungen des Bors und Siliciums mit Stickstoff und gewissen Metallen »J. Prakt. Chem. 1842 27, 422.
- [7] Hubáček M., Ueki M., Sato T., Brozek V. « High-temperature behaviour of hexagonal boron nitride »Thermochim. Acta 1996 282/283, 359.
- [8] Economy J., Lin R.Y. « Boron nitride fibers in boron and refractory borides »Ed : Matkovich, V.I., Springer, Berlin, 1977.
- [9] Metals and Ceramics Information center « Engineering property data on selected ceramics, Volume I : Nitrides », Columbus Ohio, 1976.
- [10] Paine R.T., Narula C.K. « Synthetic routes to BN »Chem. Rev. 1990 90, 73.
- [11] Chopra N.G., Luykken R.J., Cherrey K., Crespi V.H., Cohen M.L., Louie S.G., Zettl A. « Boron nitride nanotubes »Science 1995 269, 966.
- [12] Loiseau A., Willaime F., Demoncey N., Hug G., Pascard H. « Boron nitride nanotubes with reduced numbers of layers synthesized by arc discharge »Phys. Rev. Lett. 1996 76(25), 4737.
- [13] Terrones M., Hsu W.K., Terrones H., Zhang J.P., Ramos S., Hare J.P., Castillo R., Prassides K., Cheetham A.K., Kroto H.W. « Metal particle catalysed production of nanoscale BN structures »Chem. Phys. Lett. 1996 259, 568.
- [14] Lee C.M., Choi S.I., Choi S.S., Hong S.H. « Synthesis of boron nitride nanotubes by arc-jet plasma »Curr. Appl. Phys. 2006 6, 166.
- [15] Nishiwaki A., Oku T. « Atomic structures and formation mechanism of boron nitride nanotubes and nanohorns synthesized by arc-melting LaB₆ powders »J. Eur. Cer. Soc. 2006 26, 435.

- [16] Oku T. « Synthesis and atomic structures of boron nitride nanotubes »Phys. B 2002 323, 357.
- [17] Kuno M., Oku T., Suganuma K. « Synthesis of boron nitride nanotubes and nanocapsules with LaB₆ »Diamond Rel. Mater. 2001 10, 1231.
- [18] Oku T., Kuno M. « Synthesis, argon/hydrogen storage and magnetic properties of boron nitride nanotubes and nanocapsules »Diamond Rel. Mater. 2003 12, 840.
- [19] Cumings J., Zettl A. « Mass-production of boron nitride double-wall nanotubes and nanococoons »Chem. Phys. Lett. 2000 316, 211.
- [20] Shimizu Y., Moriyoshi Y., Komatsu S., Ikegami T., Ishigaki T., Sato T., Bando Y. « Concurrent preparation of carbon, boron nitride and composite nanotubes of carbon with boron nitride by a plasma evaporation method »Thin Sol. Films 1998 316, 178.
- [21] Yu D.P., Sun X.S., Lee C.S., Bello I., Lee S.T., Gu H.D., Leung K.M., Zhou G.W., Dong Z.F., Zhang Z. « Synthesis of boron nitride nanotubes by means of excimer laser ablation at high temperature »Appl. Phys. Lett. 1998 72, 1966.
- [22] Wen Z.G., Ze Z., Gang B.Z., Peng Y.D. « Catalyst effects on formation of boron nitride nanotubes synthesized by laser ablation »Sol. Stat. Comm. 1999 109, 555.
- [23] Golberg D., Rode A., Bando Y., Mitome M., Gamaly E., Luther-Davies B. « Boron nitride nanostructures formed by ultra-high-repetition rate laser ablation »Diamond Rel. Mater. 2003 12, 1269.
- [24] Golberg D., Bando Y., Eremets M., Takemura K., Kurashima K., Yusa H. « Nanotubes in boron nitride laser heated at high pressure »Appl. Phys. Lett. 1996 69, 2045.
- [25] Laude T., Matsui Y., Marraud A., Jouffrey B. « Long ropes of boron nitride nanotubes grown by a continuous laser heating »Appl. Phys. Lett. 2000 76, 3239.
- [26] Lee R.S., Gavillet J., Lamy de la Chapelle M., Loiseau A., Cochon J.L., Pigache D., Thibault J., Willaime F. « Catalyst-free synthesis of boron nitride single-wall nanotubes with a preferred zig-zag configuration »Phys. Rev. B 2001 64, R121405.
- [27] Hamilton E.J.M., Dolan S.E., Mann C.M., Colijn H.O., McDonald C.A., Shore S.G. « Preparation of amorphous boron nitride and its conversion to a turbostratic, tubular form »Science 1993 260, 659.
- [28] Gleize M., Scouler M.C., Gadelle P., Caillet M. « Growth of tubular boron nitride filaments »J. Mater. Sci. 1994 29, 1575.

Chapitre I : Généralité

[29] Shelimov K.B., Moskovits M. « Composite Nanostructures Based on Template-Grown Boron Nitride Nanotubules »Chem. Mater. 2000 12, 250.

[30] Lourie O.R., Jones C.R., Bartlett B.M., Gibbons P.C., Ruoff R.S., Buhro W.E. « CVD growth of boron nitride nanotubes »Chem. Mater. 2000 12, 1808.

[31] Ma R., Bando Y., Sato T., Kurashima K. « Growth, morphology, and structure of boron nitride nanotubes »Chem. Mater. 2001 13, 2965.

[32] Ma R., Bando Y., Sato T., Kurashima K. « Thin boron nitride nanotubes with unusual large inner diameters »Chem. Phys. Lett. 2001 350, 434.

[33] Tang C., Bando Y., Golberg D. « Multi-walled BN nanotubes synthesized by carbonfree method »J. Sol. Stat. Chem. 2004 177, 2670.

[34] Ma R., Bando Y., Sato T. « CVD synthesis of boron nitride nanotubes without metal catalysts »Chem. Phys. Lett. 2001 337, 61.

[35] Tang C., Bando Y., Sato T., Kurashima K. « A novel precursor for synthesis of pure boron nitride nanotubes »Chem. Commun. 2002 12, 1290.

[36] Wang X.Z., Wu Q., Hu Z., Chen Y. « Template-directed synthesis of boron nitride nanotube arrays by microwave plasma chemical reaction »Electrochim. Act. 2007 52,2841.

[37] Terauchi M., Tanaka M., Matsuda H., Takeda M., Kimura K. « Helical nanotubes of hexagonal boron nitride »J. Electr. Micros. 1997 1, 75.

[38] Terauchi M., Tanaka M., Suzuki K., Ogino A., Kimura K. « Production of zigzag-type BN nanotubes and BN cones by thermal annealing »Chem. Phys. Lett. 2000 324, 359.

[39] Tang C.C., Lamy de la Chapelle M., Li P., Liu Y.M., Dang H.Y., Fan S.S.« Catalytic growth of nanotube and nanobamboo structures of boron nitride »Chem. Phys. Lett. 2001 342, 492.

[40] Tang C.C., Fan S.S., Li P., Liu Y.M., Dang Y. « Synthesis of boron nitride in tubular form »Mater. Lett. 2001 51, 315.

[41] Tang C.C., Ding X.X., Huang X.T., Gan Z.W., Qi S.R., Liu W., Fan S.S. « Effective growth of boron nitride nanotubes »Chem. Phys. Lett. 2002 356, 254.

[42] Cai P., Chen L., Shi L., Yang Z., Zhao A., Gu Y., Huang T., Qian Y. « One convenient synthesis route to boron nitride nanotube »Sol. Stat. Comm. 2005 133, 621.

Chapitre I : Généralité

[43] Bechelany M. « Nouveau procédé de croissance de nanofils base de SiC et de nanotubes de BN. Etude des propriétés physiques d'un nanofil individuel base de SiC. »2006 Thèse de doctorat

[45] Chen Y. « Mechanical Alloying and Milling »Adv. Mater. 2005 17, 2893.

[46] Chen Y., Fitz Gerald J., Williams J.S., Bulcock S. « Synthesis of boron nitride nanotubes at low temperatures using reactive ball milling »Chem. Phys. Lett. 1999 299, 260.

[47] Chen Y., Chadderton L.T., Fitz Gerald J., Williams J.S. « A solid-state process for formation of boron nitride nanotubes »Appl. Phys. Lett. 1999 74, 2960.

[48] Chen Y., Chadderton L.T., Williams J.S., FitzGerald J. « Solid-state formation of carbon and boron nitride nanotubes »J. Metast. Nanocryst. Mater. 1999 8, 63.

[49] Tang C., Bando Y., Sato T. « Catalytic growth of boron nitride nanotubes »Chem. Phys. Lett. 2002 362, 185.

[50] Bae S.Y., Seo H.W., Park J., Choi Y.S., Park J.C., Lee S.Y. « Boron nitride nanotubes synthesized in the temperature range 1000-1200°C »Chem. Phys. Lett. 2003 374, 534.

[51] FitzGerald J.D., Chen Y., Conway M.J. « Nanotube growth during annealing of mechanically milled boron »Appl. Phys. A 2003 76, 107.

[52] Huo K.F., Hu Z., Chen F., Fu J.J., Chen Y., Liu B.H., Ding J., Dong Z.L., White T. « Synthesis of boron nitride nanowires »Appl. Phys. Lett. 2002 80, 3611.

[53] Chen, Y., FitzGerald J., Williams J.S., Willis P. « Mechanochemical synthesis of boron nitride nanotubes »J. Metast. Nanocryst. Mater. 1999 2-6, 173.

[54] Chen Y., Conway M., Williams J.S. « Large-quantity production of high-yield boron nitride nanotubes »J. Mater. Res. 2002 17(8) 1896.

[55] « One-dimensional nanomaterials synthesized using high-energy ball milling and annealing process »Sci. Technol. Adv. Mater. 2006 7, 839.

[56] Lim S.H., Luo J., Ji W., Lin J. « Synthesis of boron nitride nanotubes and its hydrogen uptake »Cat. Tod. 2007 120, 346.

[57] Han W., Bando Y., Kurashima K., Sato T. « Synthesis of boron nitride nanotubes from carbon nanotubes by a substitution reaction »Appl. Phys. Lett. 1998 73, 3085.

[58] Fuentes G.G., Borowiak-Palen E., Pichler T., Liu X., Graff A., Behr G., Kalenczuk R.J., Knupfer M., Fink J. « Electronic structure of multiwall boron nitride nanotubes »Phys. Rev. B 2003 67, 35429.

Chapitre I : Généralité

- [59] Borowiak-Palen E., Rummeli M., Gemming T., Knupfer M., Kalenczuk R.J., Pichler T. « Formation of novel nanostructures using carbon nanotubes as a frame »Synth. Met. 2005 153, 345.
- [60] Deepak F.L., Vinod C.P., Mukhopadhyay K., Govindaraj A., Rao C.N.R. « Boron nitride nanotubes and nanowires »Chem. Phys. Lett. 2002 353, 345.
- [61] HanW.Q., Mickelson W., Cumings J., Zettl A. « Transformation of $B_xC_yN_z$ nanotubes to pure BN nanotubes »Appl. Phys. Lett. 2002 81(6), 1110.
- [62] Y.-H. Kim, K.J. Chang, and S.G. Louie. Electronic structure of radially deformed BN and BC₃ NTs. Phys. Rev. B,63 :205408, 2001.
- [63] V. Meunier, C. Roland, J. Bernholc, and M. Buongiorno Nardelli. Electronic and field emission properties of BN/CN
- [64] J. Cumings and A. Zettl. Field emission properties of BN-NTS. AIP conference Proceedings : Electronic Properties of Molecular Nanostructures, :577, 2001.
- [65] J. Cumings and A. Zettl. Field emission and current-voltage properties of BN-NTs. Solid State Comm., 129 :661, 2004. T superlattices. Appl. Phys. Lett., 81 :46, 2002.
- [66] 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.
- [67] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and Ph. Avouris, editors. Carbon nanotubes : synthesis, structure, properties, and applications. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [68] 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.
- [69] M. Ishigami, S. Aloni, and A. Zettl. STM and STS of BN-NTS. AIP conference Proceedings :Electronic Properties of Molecular Nanostructures, 685 :389, 2003.
- [70] N.G. Chopra and A. Zettl. Measurement of the elastic modulus of a multi-wall BN-NT. Solid State Comm., 105 :297, 1998.
- [71] 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.
- [72] E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, and A. Rubio. Elastic properties of C and $B_xC_yN_z$ composite. Phys. Rev. Lett., 80 :4502, 1998

Chapitre I : Généralité

- [73] T. Dumitrica, H. Bettinger, G.E. Scuseria, and B. Yakobson. Thermodynamics of yield in BN-NTs. *Phys. Rev. B*, 68 :085412, 2003.
- [74] E.J. Mele and P. Kral. Electric polarization of heteropolar NTs as a geometric phase . *Phys. Rev. Lett.*, 88 :056803, 2002.
- [75] 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.
- [76] D. Sanchez-Portal and E. Hernandez. Vibrational properties of single-wall nanotubes and monolayers of hexagonal BN. *Phys. Rev. B*, 66 :235415, 2002.
- [77] V.N. Popov. Lattice dynamics of SW-BNNTs. *Phys. Rev. B*, 67 :085408, 2003.
- [78] 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.
- [79] J.Wu, Wei-Qiang Han, W. Walukiewicz, J.W. Ager III, W. Shan, E.E. Haller, and A. Zettl. Raman spectroscopy and time-resolved photoluminescence of BN and BxCyNz NTs. *Nano Letters*, 4 :647, 2004.
- [80] M. Hubacek, M. Ueki, T. Sato, and V. Broiek. High-temperature behaviour of hexagonal boron nitride. *Thermochim. Acta*, 282/283 :359, 1996.
- [81] Y. Chen, J. Zou, S.J. Campbell, and G. Le Caer. BN-NTs : pronounced resistance to oxidation. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :2430, 2004.
- [82] W. Mickelson, S. Aloni, W.-Q. Han, J. Cumings, and A. Zettl. Packing C60 in BN-NTs. *Science*, 300 :467, 2003.
- [83] Y. Bando, K. Ogawa, and D. Golberg. Insulating nanocables : invar Fe-Ni alloy nanorods inside BNNTs. *Chem. Phys. Lett.*, 347 :349, 2001.
- [84] Y.-C. Zhu, Y. Bando, and R.-Z. Ma. Aluminium borate-BN nanocables. *Adv. Mater.*, 15 :1377, 2003.
- [85] R. Arenal, J.L. Cochon, O. Stephan, and A. Loiseau. MWBNNTs fillings by CaB6. , En préparation.
- [86] W. Han, P. Redlich, F. Ernst, and M. Ruhle. Synthesizing BNNTs filled with SiC nanowires by using CNTs as templates. *Appl. Phys. Lett.*, 75 :1875, 1999.
- [87] D. Golberg, Y. Bando, K. Fushimi, M. Mitome, L. Bourgeois, and C.-C. Tang. Nanoscale oxygen generators : MgO₂-based fillings of BNNTs. *J. Phys. Chem.*, 107 :8726, 2003.

Chapitre I : Généralité

- [88] R. Ma, Y. Bando, H. Zhu, T. Sato, C. Xu, and D. Wu. Hydrogen uptake in BN-NTs at room temperature. *JACS*, 124 :7672, 2002.
- [89] 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.
- [90] 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.
- [91] 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.
- [92] W.H. Moon and H.J. Hwang. Molecular-dynamics simulation of structure and thermal behaviour of BN-NTs. *Nanotechnology*, 15 :431, 2004.
- [93] Y.-H. Kim, K.J. Chang, and S.G. Louie. Electronic structure of radially deformed BN and BC₃ NTs. *Phys. Rev. B*, 63 :205408, 2001
- [94] H.F. Bettinger, T. Dumitrica, G.E. Scuseria, and B.I. Yakobson. Mechanically induced defects and strength of BNNTs. *Phys. Rev. B*, 65 :041406.
- [95] R. Arenal, O. Stephan, M. Kociak, D. Taverna, C. Colliex, A. Rubio, and A. Loiseau. Low-Loss EELS measurements on BNNTs. *En préparation*, , 2004.
- [96] N.G. Chopra and A. Zettl. Measurement of the elastic modulus of a multi-wall BN-NT. *Solid State Comm.*, 105 :297, 1998.
- [97] K.P. Loh, I. Sakaguchi, N. Gamo, S. Tagawa, T. Sugino, and T. Ando. Surface conditioning of CVD hexagonal BN film for negative electron affinity. *Appl. Phys. Lett.*, 74 :28, 1999.
- [98] 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.
- [99] (Raul ARENAL-2005) : Raul ARENAL, synthèse de nanotube de nitrure de bore : étude de la structure et des propriétés vibrationnelles et électroniques -2005
- [100] (Aude Maguer-2007) : Aude Maguer , Manipulation et fonctionnalisation de nano-tube : Application aux nanotubes de nitrure de bore.. *Chimie. Universit_e Paris Sud - Paris XI*, 2007.

Chapitre II

*Les modèles théoriques des
milieux continus*

Chapitre II :les modèle théoriques des milieux continus

II.1.Introduction

La théorie de la mécanique des milieux continus est définis comme une branche des sciences de l'ingénieur et des sciences physique qui étudie l'état d'équilibre ou de mouvement des corps qui sont sujet à l'action des forces extérieures ou intérieures des corps à l'échelle microscopique ou macroscopique. Elle peut aussi étudier la mécanique des systèmes de masses ponctuelles, leur mouvement, leur vitesse et leur accélération sous l'effet des forces, des mouvements ou des déformations.

En effet, la mécanique des milieux continus peut être définie comme une branche des sciences fondamentales qui concerne l'état d'équilibre ou le mouvement des corps qui sont sujet à l'action des contraintes. Elle concerne l'étude et l'analyse des structures mécaniques, le dessin et le concept des machines, la mécanique des fluides, l'aérodynamique ainsi que l'instrumentation électrique et le comportement moléculaire et atomique des éléments. Pour ce fait, la théorie des milieux continus fait intervenir des connaissances mathématiques plus complexes que l'on nomme tenseur pour les forces et contraintes, et distributeur pour les vitesses et accélérations

II.2 Théorie des milieux continus

La mécanique des milieux continus est un outil qui permet de modéliser mathématiquement des corps matériels (solides ou fluides) déformables. Elle permet de poser une base d'étude pour différentes matière qui découle d'elle par la suite comme Résistance des matériaux (Élasticité, Plasticité) , Mécanique des fluides (Fluides newtoniens, Fluides non-newtoniens)

La méthode des milieux continus a pour but de définir par le calcul les contraintes et les déformations, en tous point d'un corps solide d'une forme connue ou d'un ensemble de corps solides est en donne l'intensité et l'emplacement des charges extérieures appliquées, et la qualité intrinsèque des solides considère défini par ses coefficient d'élasticité.

II.2.1 Hypothèse de base

II.2.1.a- 1^{ère} hypothèse de l'élasticité (loi de proportionnalité)

La propriété d'un corps d'être élastique signifie donc que les forces extérieures qui provoquent les déformations d'un corps ne déplacent pas certaine limites et la déformation disparue en même temps que la force qui a donne une naissance

Chapitre II :les modèle théoriques des milieux continus

II.2.1.b- 2^{ème} hypothèse

La matière qui constitue un corps élastique est homogène et uniformément distribuer dans son volume, de sorte que le plus petit élément détache de se corps possède les même propriétés physique que le corps lui-même.

II.2.1.c- 3^{ème} hypothèse (le corps est isotrope)

Même propriété élastique dans toutes les directions

II.3. Les modèles théoriques des milieux continus

Le flambement ou flambage est un phénomène d'instabilité d'un matériau, qui soumis a une force de compression, a tendance a se déformé dans une direction perpendiculaire a la force de compression.

L'étude de flambement des nanotubes est une manière importante d'intérêt courant. Parmi le divers modèle utilisé, les modèles des poutres élastiques qui ont efficacement étudié le flambement des nanotubes de carbone, et ont donne des résultats fiables.

Dans ces cas les nanotubes de carbone ont été modèles comme une poutre élastique Le flambement des nanotubes est étudié en se basant sur le model simple paroi et double paroi, dont le flambement est analyse par le model d'Euler Bernoulli et le model de Timoshen

II.4 Théorie des poutres

Le terme de < poutre > désigne un objet dont la longueur est grande par rapport aux dimensions transverses .

La théorie des poutres est une application de la théorie d'élasticité isotrope. Pour mener les calculs de résistance des matériaux, on considère les hypothèses suivantes.

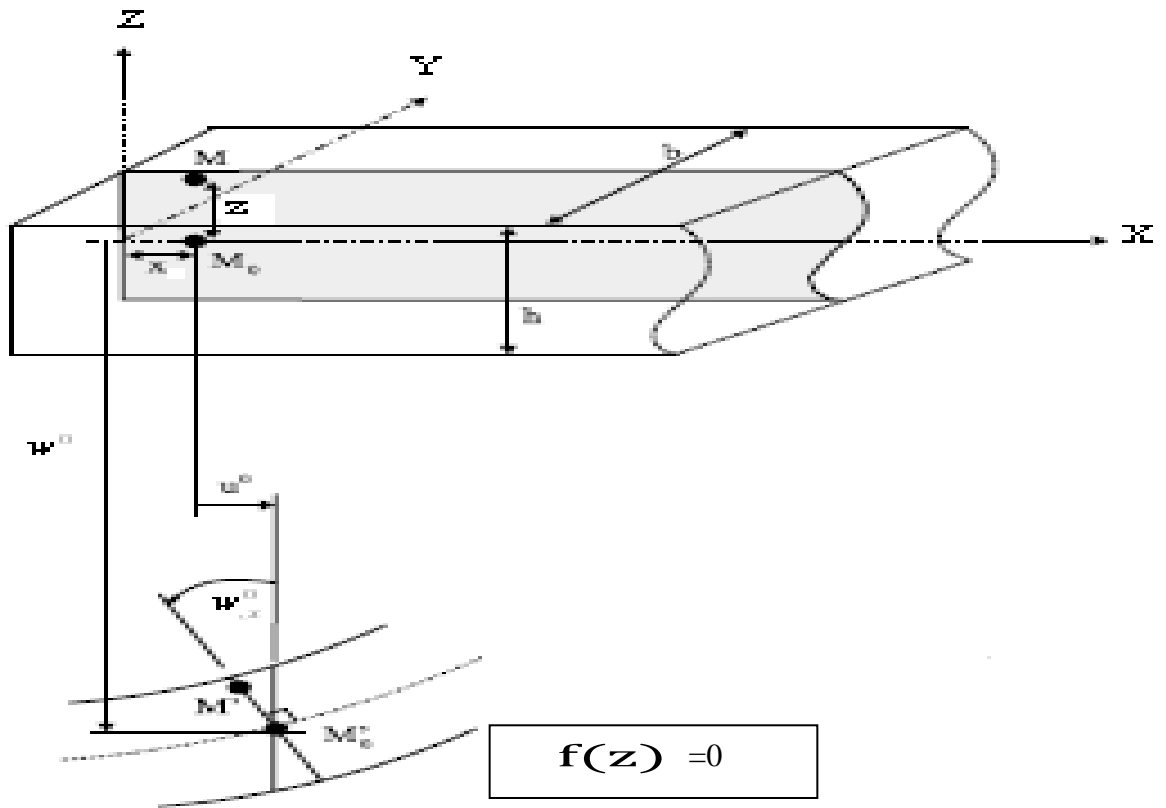
II.4 .1 domaine d'application

La théorie des poutres est la base de la résistance des matériaux. Elle s'applique sur des solides élancés (typiquement les prismes dont la longueur vaut 10 fois la plus grande dimension transversale), là où la détermination de la solution exacte pour les champs de contrainte et de déformation n'est pas possible, elle permet d'obtenir une solution approchée, qui donne une bonne idée sur les efforts et les déplacements.

II.4.2 Les différents modèles de la théorie des poutres

II.4.2.a Modèle d'Euler Bernoulli ou bien la théorie classique des poutres

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



FigII.1 Cinématique d'Euler Bernoulli

Dans cette théorie, les modèles sont basés sur une distribution linéaire des déplacements suivant l'épaisseur de la poutre[1]. L'hypothèse dans cette théorie :

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

$$f(z) = 0 \quad (II-1)$$

Pour le cas des poutres élancées et d'après la théorie classique des poutres, le déplacement d'un

Chapitre II : les modèles théoriques des milieux continus

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 ou bien la flèche.

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

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

Où $U_0(x)$ et $w_0(x)$ sont les composantes de déplacement au milieu de la section et sur la ligne moyenne de la poutre, respectivement le long des axes X et Z.

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

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

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

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

II.4.2.b Modèle de Timoshenko ou bien la théorie de premier ordre (FSDT)

Cette théorie s'applique pour le cas des poutres courtes, 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 la poutre (fig II.2)[1]. Ceci est dû au cisaillement transversal, découvert par Timoshenko, sur l'épaisseur de la poutre. Cette théorie est analogue à la théorie de "Reissner-Mindlin" dans le cas des plaques épaisses [2]. 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 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 la poutre

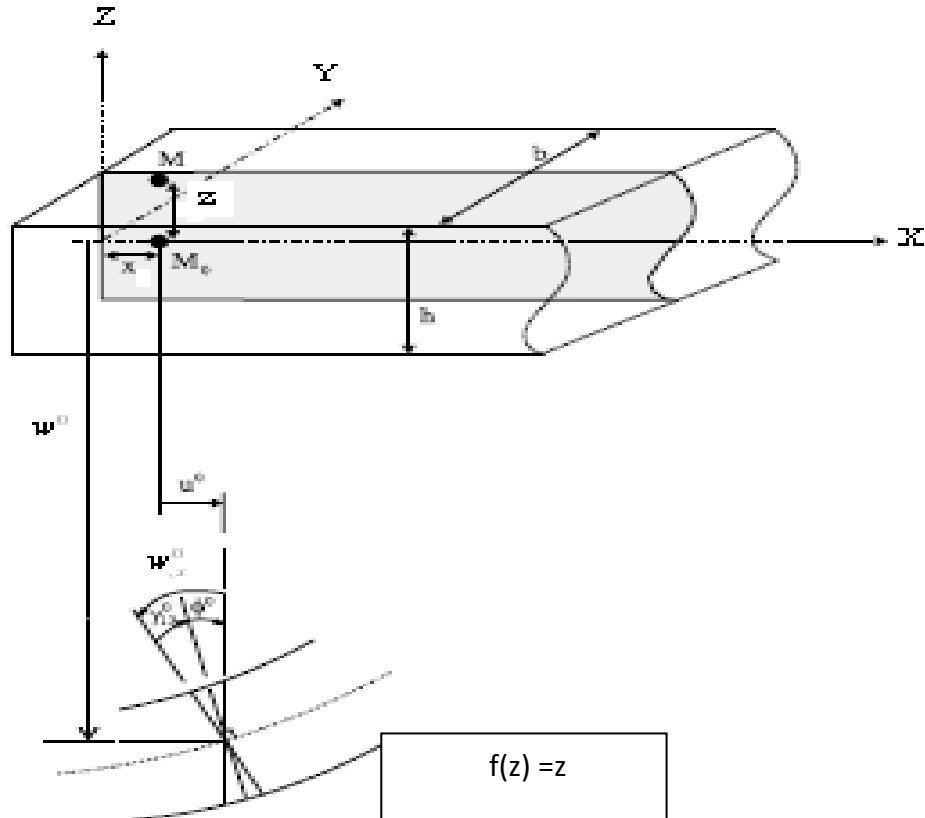


Fig II.2 : Cinématique de Timoshenko

Par définition, la distorsion est donnée par la relation suivante

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

$$\gamma_{xz} = \varphi_0(x) \quad (\text{II-9})$$

Sachant que la contrainte de cisaillement est égale

$$\tau_{xz} = G_{xz} \gamma_{xz} = G_{xz} \varphi_0 \quad (\text{II-10})$$

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 de la poutre, cela veut dire qu'elles existent même sur les bords supérieurs et inférieurs de la poutre et pourtant il n'y a 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 la poutre considérée (par exemple, pour une poutre de section rectangulaire $k=5/6$).

La non nullité des contraintes tangentielles sur les bords extrêmes de la poutre et l'introduction des coefficients de correction de cisaillement ont menés d'autres chercheurs à essayer de trouver

Chapitre II : les modèles théoriques des milieux continus

une autre théorie pouvant tenir compte de ces facteurs, c'est « la théorie d'ordre élevé ».

II.4.2.c théorie d'ordre élevé

La théorie d'ordre élevé est basée sur une distribution non linéaire des champs de déplacement selon l'épaisseur de la poutre [1]. 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 de la poutre perd sa planéité (fig II.3). La fonction $f(z)$ représente le gauchissement et sa dérivée $f'(z)$ le cisaillement

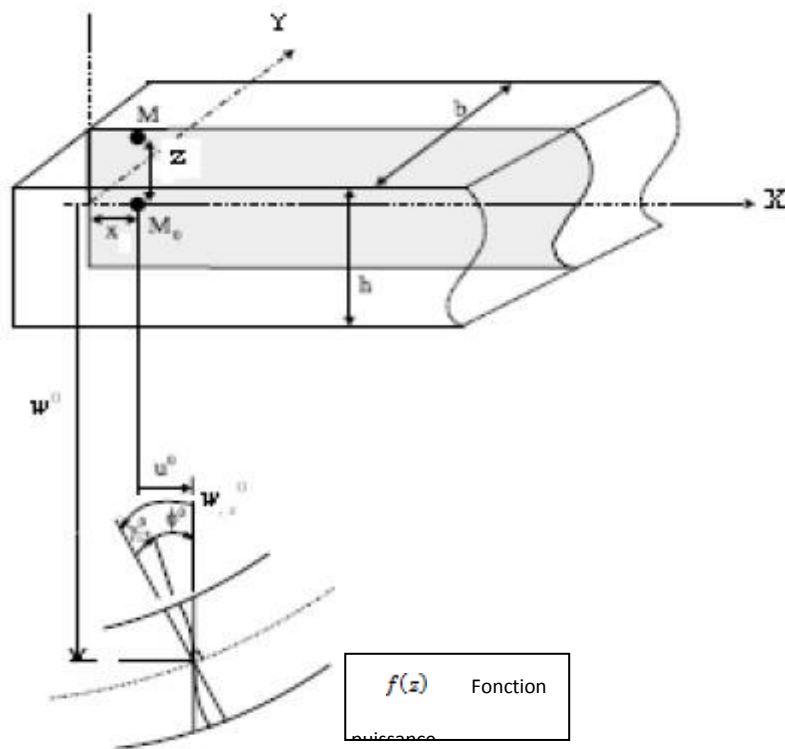


Fig II.3 cinématique de la théorie d'ordre élevé

Dans ce cas, le champ de déplacement devient :

$$U(M) = \begin{cases} U(x, z) = U_0(x) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + f(z)\varphi_0(x) \\ w(x, z) = w_0(x) \end{cases} \quad (\text{II-11})$$

$$\begin{aligned} \gamma_{xz} &= \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + f'(z)\varphi_0(x) + \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} \\ \gamma_{xz} &= f'(z)\varphi_0(x) \end{aligned} \quad (\text{II-12})$$

Pour que les contraintes tangentielles soient nulles sur les bords extrêmes de la poutre, on doit avoir :

Chapitre II :les modèle théoriques des milieux continus

$$f'(z) = f' \left(+\frac{h}{2}, -\frac{h}{2} \right) = 0 \quad (\text{II-13})$$

C'est la condition qui nous permet d'avoir une répartition parabolique des contraintes de cisaillement sur l'épaisseur de la poutre d'une part et de choisir correctement des fonctions cubiques qui répondent à la condition (II.13).

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

* Le modèle Euler-Bernoulli (la théorie des poutres classiques) ETB

$$f(z) = 0 \quad (\text{II-14})$$

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

$$f(z) = z \quad (\text{II-15})$$

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

$$f(z) = \frac{5z}{4} \left(1 - \frac{4z^2}{3h^2} \right) \quad (\text{II-16})$$

* Le modèle exponentiel proposé par Afaq [6]

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

* Le modèle d'Aydogdu [7]

$$f(z) = z \alpha \frac{-2\left(\frac{z}{h}\right)^2}{\ln \alpha} \quad (\text{II-18})$$

Avec, h étant l'épaisseur de la poutre

II.5. LES DIFFERENTS MODELES DE LA THEORIE DES PLAQUES

II.5.1 Les modèles classiques Love–Kirchhoff (théorie classique des plaques stratifiées) CLPT

Les modèles sont basés sur une distribution linéaire des déplacements suivant l'épaisseur [8]

L'hypothèse adoptée est celle de Love-Kirchhoff de contraintes planes et les déformations dues aux cisaillements transverses sont négligées. La normale reste droite et elle est perpendiculaire à la surface moyenne après déformation (Fig. II.4).

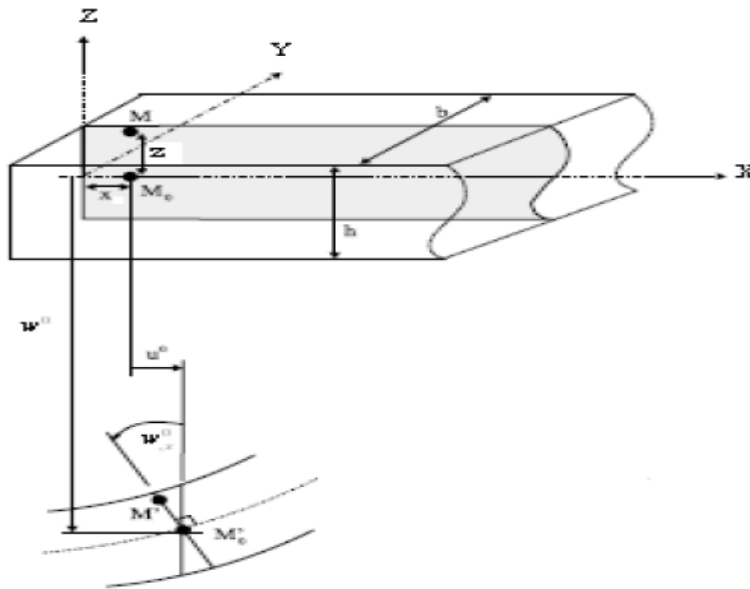


Fig II.4 Cinématique de Love-Kirchhoff

Le champ de déplacement de Love –Kirchhoff s'écrit alors,

$$U(M) = \begin{cases} U(x, y, z) = U_0(x, y) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} \\ V(x, y, z) = V_0(x, y) - z \frac{\partial w_0(y)}{\partial y} \\ W(x, y, z) = W_0(x, y) \end{cases} \quad (II-19)$$

Avec $U_0(x, y)$ et $V_0(x, y)$ les déplacements de membrane dans la direction x et y

W : La flèche de la plaque

$\frac{\partial w_0(x)}{\partial x}, \frac{\partial w_0(y)}{\partial y}$: Rotation dues à la flexion (sans cisaillement)

II.5.2 Les modèles Reissner-Mindlin (Théorie de déformation en cisaillement du premier ordre) FSDT

Pour tenir compte de l'effet de cisaillement transverse, l'hypothèse cinématique de Mindlin[9] adoptée est la suivante :

La normale reste droite mais non perpendiculaire à la surface moyenne (à cause de l'effet du cisaillement transverse) dans la configuration déformé (fig II.5).

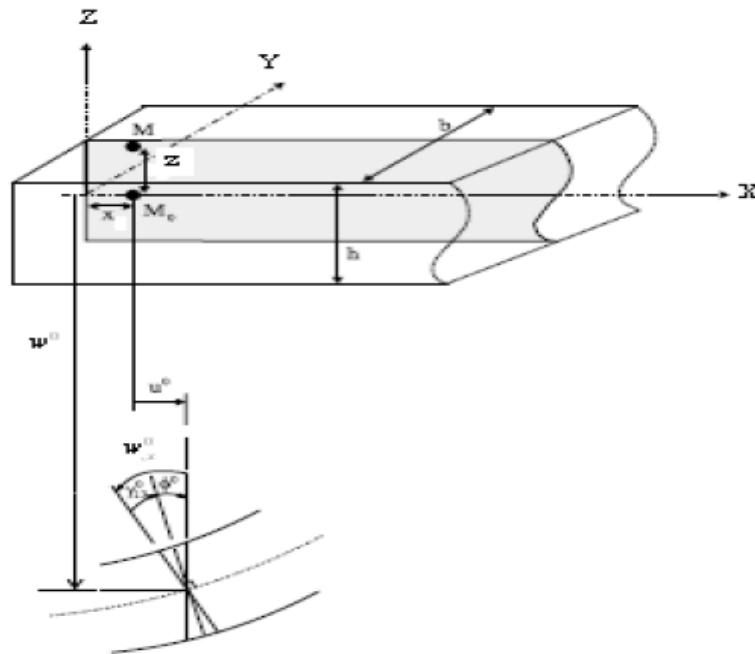


Fig II.5 Cinématique de Reissner-Mindlin

Le champ de déplacement de Reissner-Mindlin [9] s'écrit :

$$U(M) = \begin{cases} U(x, y, z) = U_0(x, y) + z\varphi_0(x) \\ V(x, y, z) = V_0(x, y) + z\varphi_0(y) \\ W(x, y, z) = W_0(x, y) \end{cases} \quad (\text{II-20})$$

$\varphi_0(x)$ et $\varphi_0(y)$ étant les rotations totales de la section mesurée sur la ligne moyenne de la plaque.

Avec ce choix de la forme des champs de déplacements, les déformations transversales sont constantes en Z.

Les contraintes de cisaillement sont donc uniformes dans chaque couche et discontinues entre les couches.

Cette mauvaise description oblige à introduire des coefficients correcteurs pour mieux prendre en compte les effets de cisaillement[10].

Chapitre II : les modèles théoriques des milieux continus

Les résultats obtenus dépendent essentiellement du choix empirique dans des situations complexes des coefficients correcteurs et l'étude des composites épais restes aléatoires par ce type d'approche cinématique.

II.5.3 La Théorie d'ordre élevé (Modèle d'ordre Supérieur)

Pour passer les limites des théories de déformation en cisaillement du premier ordre, certains auteurs proposent des théories à un ordre supérieur.

Ces théories sont basées sur une distribution non linéaire des champs suivant l'épaisseur fig (II.6) et permettent de représenter le gauchissement de la section dans la configuration déformée [11].

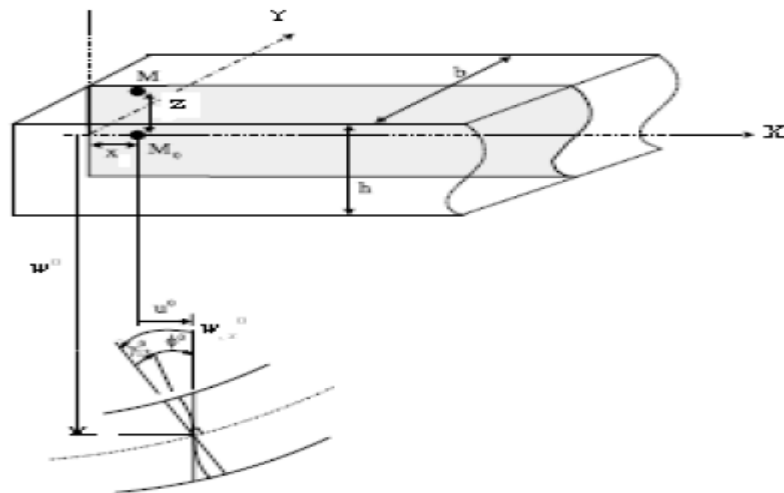
Le champ de déplacement est en général défini par une série de Taylor de la forme

$$U(x, y, z) = u_i^0(x, y) + z\varphi_i^{0(1)}(x, y) + z^2 z\varphi_i^{0(2)}(x, y) + z^3 z\varphi_i^{0(3)}(x, y) + z^4 z\varphi_i^{0(4)}(x, y) \quad (\text{II-21})$$

Dans la théorie du premier ordre (Reissner-Mindlin), la fonction $\varphi_i^{0(j)} = 0$ pour $j=2,3,4$

La précision augmente dans les modèles d'ordre supérieur que dans les modèles du premier ordre.

Elle augmente avec l'ordre de développement, c'est-à-dire avec le nombre de paramètres supplémentaires. Cependant, les conditions aux limites sur bords sont difficiles à satisfaire et le nombre de variables de déplacement indépendantes dépasse celui des modèles classiques, pour le réduire plusieurs simplifications sont proposées. On impose souvent les conditions de nullité des contraintes de cisaillement transverse aux surfaces supérieure et inférieure de la plaque.



Chapitre II :les modèle théoriques des milieux continus

Fig II.6 Cinématique des théories d'ordre supérieur

Finalement le champ de déplacement devient :

$$U(M) = \begin{cases} U(x, y, z) = U_0(x) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + z \varphi_0(x) \\ V(x, y, z) = V_0(x, y) - z \frac{\partial w_0(y)}{\partial y} + z \varphi_0(y) \\ W(x, y, z) = W_0(x, y) \end{cases} \quad (\text{II-22})$$

On va citer quelques exemples des fonctions de cisaillement utilisées dans les modèles d'ordre supérieur :

☐ L'approche d'Ambartsumyan [12] avec :

$$f(z) = \frac{z}{2} \left(\frac{h^2}{4} - \frac{z^2}{3} \right) \quad (\text{II-23})$$

☐ L'approche de Reissner [13] avec

$$f(z) = \frac{5z}{4} \left(1 - \frac{4z^2}{3h^2} \right) \quad (\text{II-24})$$

☐ L'approche de Levinson , Murthy et Reddy [14-15-16] avec :

$$z(z) = z \left(1 - \frac{4z^2}{3h^2} \right) \quad (\text{II-25})$$

h : étant l'épaisseur de multicouches.

Dans le modèle de Reddy [16] le champ de déplacement membranaire est cubique et le déplacement normal w est constant. Ce modèle donne une bonne approximation pour les contraintes de cisaillement transverse par rapport à la solution élastique tridimensionnelle.

La distribution des contraintes de cisaillement transversal est parabolique dans l'épaisseur. Les conditions aux limites sur les surfaces libres sont satisfaites.

* L'approche de Touratier [11] avec le modèle sinus :

fonction trigonométrique sinusoïdale utilisée pour modéliser la répartition des contraintes de cisaillement dans l'épaisseur de la plaque, la fonction de cisaillement transverse s'écrit :

$$f(z) = \frac{h}{\pi} \sin \frac{\pi z}{h} \quad (\text{II-26})$$

*Afaq[6] propose un modèle exponentiel avec une cinématique plus riche. La fonction de cisaillement transverse prend la forme suivante :

$$f(z) = z e^{-2\left(\frac{z}{h}\right)^2} \quad (\text{II-27})$$

Le choix de la fonction exponentielle permet un développement en puissance pair et impair de la variable alors que la fonction « sinus » ne permet qu'un

Chapitre II :les modèle théoriques des milieux continus

développement en puissances impaires.

* L'approche d'Aydogdu[7] avec :

$$f(z) = z\alpha \frac{-2\left(\frac{z}{h}\right)^2}{\ln\alpha} \quad (\text{II-28})$$

h: étant l'épaisseur de la plaque FGM

Référence

- [1] (L.Dufort, S.Drapier, and M.Grediac. «Closed from Solution for the Cross Section Warping in Short Beams under three Point Bending». Composite structures, Pages: 233-246, 2001
- [2] S.P.Timoshenko et J.M.Gere. « Mechanicsof Materials ». New York: D.VanNostrand Company, 1972.
- [3] M. Levinson. «An accurate simple theory of the statics and dynamics of elastic plates». MechanicsResearch Communication, Volume 7, pages:343-350, 1980.
- [4] M.V.V. Murthy. «An Improved Transverse Shear Deformation Theory for Laminated Anisotropic Plate». Rapport technique, NASA, 1981.
- [5] J.N. Reddy. «A Simple Higher-Order Theory for Laminated Composite Plates».Journal of Applied Mechanics, Volume 51, pages: 745-752, 1984
- [6] K.S. Afaq, M. Karama& S. Mistou. «Un Nouveau Modèle Raffine pour les Structures Multicouches». In Comptes-rendus des 13emes Journées nationales sur les Composites, pages: 289-292. Strasbourg, March 2003.
- [7] Meeting Aydogdu, «Vibration analysis of cross-ply laminated beams with general boundary conditions by Ritz method», International Journal of Mechanical Sciences 47, pages: 1740-1755, 2005.
- [8] E. Reissner:«The Effectof Transverse Shear Deformation on the BendingofElastic Plates». J. Appl. Mech., Volume 12, pages: 69-77, 1945.
- [9] R.D. Mindlin: «Influence of Rotary Inertia and Shear on Flexural Motions of Isotropic, Elastic Plates». Journal of AppliedMechanics, Volume 18, pages:: 31-38, 1951.
- [10] J.M. Whitney. « Shear Correction Factors for Orthotropic Laminates under Static Loads ». J.AppliedMechanics, Volume 40, pages: 302-304, 1973.
- [11] Touratier, M., An efficient standard plate theory International Journal of Engineering Science 29 (8) (1991) 901-916.
- [12] S.A. Ambartsumyan: «Theory of Anisotropic Plate».Economic Publishing Co, 1969.
- [13] E Reissner «The Effectof Transverse Shear Deformation on theBendingofElastic Plates». J. Appl. Mech., Volume 12, pages: 69-77, 1945.
- [14] M. Levinson. «An accurate simple theory of the statics and dynamics of elastic plates». MechanicsResearch Communication, Volume 7, pages:343-350, 1980.
- [15] M.V.V. Murthy. «An Improved Transverse Shear Deformation Theory for Laminated Anisotropic Plate». Rapport technique, NASA, 1981.
- [16] J.N. Reddy. «A Simple Higher-Order Theory for Laminated Composite Plates».Journal of Applied Mechanics, Volume 51, pages: 745-752, 1984

Chapitre III

Formulation mathématique et calcul

III .1. Introduction

Depuis la découverte des nanotubes de carbone (CNTs) au début des années 1990 [1], des recherches approfondies dans les domaines de la chimie, la physique, la science et génie des matériaux ont été rapportées [2-6].

Le comportement mécanique et vibratoire des nanotubes de carbone ont fait l'objet de nombreuses études récentes. Depuis, les expériences contrôlées à l'échelle nanométrique demeurent difficiles et les simulations de dynamique moléculaire restent coûteux et redoutables pour les systèmes à grande échelle, ainsi les modèles de mécanique des milieux continus, tel que le modèle classique d'Euler-Bernoulli a été effectivement utilisé pour étudier la déformation mécanique globale des nanotubes de carbone, tels que la déviation statique , le flambage, les fréquences, les modes de résonance, et la propagation des ondes sonores [7-8]

En nanotechnologie, l'effet de taille est plus répandu pour cela nous faisant appel à l'applicabilité des modèles continus classiques et ceux pour des nanostructures de très petites dimensions. Les modèles continus classiques ou locaux, comme poutre et modèles de coques, n'admettent pas la dépendance de la taille intrinsèque des solutions élastiques, des inclusions et des inhomogénéités.

A l'échelle du nanomètre, les effets de taille sont souvent du premier plan, dont la cause doit être explicitement abordée avec un intérêt croissant dans le domaine général des nanotechnologies [9]. La modélisation d'un tel phénomène, dépendant de la taille, est devenue un sujet intéressant de certaines recherches dans ce domaine [10-11].

Donc, Il est conclu que l'applicabilité des modèles continus classiques à très petites échelles est discutable, puisque la microstructure du matériau à petite taille, comme espacement de réseau entre les atomes individuels, devient de plus en plus importante et la structure discrète de la matière ne peut plus être homogénéisée dans un milieu continu

Par conséquent, le modèle de continus nouvellement proposé plutôt que les modèles continus classiques peut être une alternative à prendre en compte avec l'effet d'échelle dans les études des nanomatériaux.

Un des matériaux les plus prometteurs pour la nanotechnologie est le nanotube de nitrure de bore (BNNT) en raison des caractéristiques de couplage du champ électromécanique. Ce matériel prometteur a été théoriquement prédit en 1994[12] et

expérimentalement réalisé, l'année suivante [13]. Le nanotube de nitrure de bore BNNT est un analogue structural d'un nanotube de carbone CNT dans la nature [14]. Les atomes de B et de N remplaçant entièrement les atomes de C dans la feuille graphitique avec presque aucun changement dans l'espacement atomique [15]. Les nanotubes de nitrure de bore BNNTs possèdent de nombreuses propriétés supérieures à celle des nanotube de carbone CNT[16] telles que les propriétés élastiques exceptionnelles [17-18-19-20-21] ; grande résistance mécanique [22-23-24-25] , inerte chimique[26] . La stabilité structurale [27], la conduction thermique élevée et la piézoélectricité [28]. De plus, le nanotube de nitrure de bore BNNT présente un large intervalle de bande interdite indépendant de la configuration géométrique /atomique. Ces facteurs rendent le nanotube de nitrure de bore BNNT particulièrement adapté aux applications biologiques et médicales [29-30-31-32].

Ces dernières années, une grande quantité de travaux de recherche ont été effectués sur le flambage et la vibration des nanotubes. La propagation des ondes et les propriétés vibratoires des nanotubes de carbone CNTs à simple paroi ou à parois multiples modèle ont été étudiés [33]. Reddy a développé des théories non locales pour les poutres d'Euler-Bernoulli [34]. On obtient des solutions analytiques de flexion, de vibration et de flambement qui mettent en évidence l'effet non-local sur la déformation de flexion, la charge de flambement et les fréquences naturelles. La propagation de l'onde sonore dans des nanotubes de carbone à paroi simple a été étudiée en utilisant la théorie d'élasticité non locale [35]. l'effet d'échelle sur la propagation des ondes des nanotubes de carbone à double paroi avec une charge axiale initiale a été discutée [35]. Les effets de Chiralité et d'échelle sur les propriétés mécaniques de flambage des nanotubes de carbone zigzag à double paroi ont été étudiés [36]. Les propriétés de vibration non linéaires d'un nanotube de carbone à paroi simple en zigzag incorporé dans une matrice polymère ont été examinées [37]. Le problème des vibrations libres pour les nanotubes chiraux à double paroi a été étudié en utilisant la théorie de l'élasticité non-locale et le modèle de faisceau d'Euler Bernoulli a été étudié [38]. En outre, l'équation gouvernante cohérente du mouvement pour la vibration libre de CNTs fluide-transportant avec l'effet non-local a été dérivée [39]. Plus récemment, le flambement thermique des nano membranes a été étudié [40]. Compte tenu des effets de la déformation transversale du cisaillement et de l'inertie rotative, les propriétés de flambement thermique des nanotubes de carbone à double paroi ont été étudiées avec le

modèle classique de poutre de Timoshenko [41]. Les caractéristiques de la température de flambage critique ont été présentées.

Toutes les références mentionnées ci-dessus ont été considérées comme nanotubes de carbone CNTs, mais peu d'études portant sur les nanotubes de nitrure de bore BNNTs peuvent être trouvées dans la littérature publiée. Récemment, le modèle FE basé sur la mécanique des structures moléculaires a été utilisé pour simuler la structure atomique des nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT en considérant la présence d'une lignée étendue de défauts / dislocations[42].un modèle atomique à éléments finis tridimensionnels a été utilisé pour simuler la structure atomique du nanotube de nitrure de bore mono paroi SWBNNT[43]. Les potentiels des nanotubes de nitrure de bore BNNTs à paroi simple en tant que résonateurs nano mécaniques, en considérant à la fois les canaux et les nanotubes pontés ont été étudiés on utilisant l'approche analytique basée sur la mécanique des milieux continus et le modèle par éléments finis[44]. L'analyse de réponse vibratoire de nanotubes de nitrure de bore mono paroi traités comme tube à paroi mince a été réalisée [45] en utilisant la méthode des éléments finis (FEM). En utilisant l'approche de simulation basée sur la modélisation de FE, la faisabilité du biocapteur à base de nanotubes de nitrure de bore mono paroi en termes de détection ainsi que l'identification de la position d'atterrissage intermédiaire de l'objet biologique ayant une masse d'échelle de zéptogramme est expliquée [46]. un bio sensor ultra-sensible basé sur une structure de nanotubes de nitrure de bore (SWBNNT) mono parois a été présenté pour la détection de l'acétone[47].

Le flambement des structures est un sujet important de recherches. En effet, la réponse de flambement thermique de la plaque circulaire poreuse a été examinée avec des actionneurs piézoélectriques basés sur la théorie de la déformation par cisaillement de premier ordre[48]. le flambement d'un faisceau nano viscoélastique piézoélectrique soumis à des forces Vander Waards a été étudié [49]. Le comportement au flambement des panneaux composites cylindriques piézoélectriques renforcés par des nanotubes de carbone a été discuté [50]. les propriétés vibratoires des nanoparticules à gradation fonctionnelle ont été analysée en utilisant un nouveau modèle à quatre variables non localisé raffiné[51]. la théorie de déformation par cisaillement non locale a été présentée pour la vibration libre de plaques à échelle nanométrique fonctionnellement calées sur une fondation élastique [52]. La stabilité statique des nano membres non localisés a été étudiée en utilisant des théories des poutres d'ordre élevé [54]. Au mieux des

connaissances des auteurs, le flambement thermique des nanotubes de nitrure de bore n'est pas étudié dans la littérature ouverte.

Dans cette recherche, le flambement thermique non linéaire des nanotubes de nitrure de bore mono paroi a été étudié à l'aide d'une nouvelle théorie de déformation de cisaillement des poutres de premier ordre non locale basée sur le modèle de poutre local développée [54]. Le champ de déplacement de la théorie proposée est choisi en fonction des hypothèses suivantes:

1 - Le déplacement transversal se compose de composants de flexion et de cisaillement dans lesquels les composants de flexion ne contribuent pas aux forces de cisaillement et, de même, les composants de cisaillement ne contribuent pas à la flexion des moments.

2 - La composante du déplacement axial de flexion est similaire à celle donnée par la théorie des poutres d'Euler-Bernoulli. Sur la base des relations constitutives non-locales d'Eringen (1983) [55] et des relations cinématiques non linéaires de von Karman, les équations gouvernantes des nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT sont dérivées en utilisant le principe du travail virtuel. Les effets d'échelle sur les propriétés de flambement thermique du nanotube de nitrure de bore BNNT sont étudiés. Les influences des coefficients d'échelle, le rapport de la longueur au diamètre, la déformation transversale du cisaillement et l'inertie rotative sont discutés. Les résultats présentés dans ce chapitre peuvent fournir des conseils utiles pour l'étude et la conception de la prochaine génération de nano dispositifs qui utilisent les propriétés de flambement thermique des nanotubes de nitrure de bore.

III .2. Analyse

Les nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT ont un module de Young équivalent, un module de cisaillement, une longueur, un rayon moyen et une épaisseur. La théorie de déformation au cisaillement des poutres de premier ordre est utilisée pour analyser la réponse de flambement thermique pour les nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT soumis à une élévation de température uniforme. Le champ de déplacement du présent modèle est donné comme suit[54]:

$$u(x, z) = -z \frac{\partial w_b}{\partial x} \quad (1a)$$

$$w(x, z) = w_b(x) + w_s(x) \quad (1b)$$

Où le déplacement transversal w est divisé en cintrage (w_b) et en cisaillement (w_s). u est le déplacement axial.

Les contraintes non nulles associées aux déplacements dans l'équation (1) sont [54]

$$\varepsilon_x = -z \frac{\partial^2 w_b}{\partial x^2} \text{ et } \gamma_{xz} = \frac{\partial w_s}{\partial x} \quad (2)$$

Où ε_x est la contrainte axiale et γ_{xz} la contrainte de cisaillement.

III .3.Relations constitutives

Réponse des matériaux à l'échelle nanométrique est différente de celles de leurs homologues en vrac. L'élasticité non locale est d'abord considérée par Eringen (1983). Il a supposé que la contrainte à un point de référence est une fonction du champ de déformation à chaque point. Eringen (1983) a proposé une forme différentielle de la relation constitutive non locale comme :

$$\sigma_x - \mu \frac{d^2 \sigma_x}{dx^2} = E \varepsilon_x \quad (3a)$$

$$\tau_{xz} - \mu \frac{d^2 \tau_{xz}}{dx^2} = G \gamma_{xz} \quad (3b)$$

Où σ_x est la contrainte axiale, τ_{xz} la contrainte de cisaillement, E le module de Young, G le module de cisaillement et $\mu = (e_0 a)^2$ est le paramètre non local. e_0 Est une constante appropriée à chaque matériau et a est une longueur caractéristique interne.

III .4.Équations gouvernantes

Le principe des travaux virtuels du nanopoutre considéré est exprimé par [56-57-58-59-60-61] :

$$\delta U + \delta V = 0 \quad (4)$$

Où δU est l'énergie de déformation virtuelle et δV est le travail virtuel externe en raison de la charge externe appliquée au nanopoutre. La variation de l'énergie de déformation du faisceau peut être indiquée comme [62-56] ;

$$\begin{aligned}\delta U &= \int_0^L \int_A (\sigma_x \delta \varepsilon_x + \tau_{xz} \delta \gamma_{xz}) dA dx \\ &= \int_0^L \left(-M_b \frac{d^2 \delta w_b}{dx^2} + Q \frac{d \delta w_s}{dx} \right) dx\end{aligned}\quad (5)$$

Où M_b et Q sont les facteurs de contrainte définis comme[56] :

$$M_b = \int_A z \sigma_x dA \quad \text{et} \quad Q = \int_A \tau_{xz} dA \quad (6)$$

la variation de l'énergie potentielle pour les charges appliquées peut être écrite comme [57] :

$$\delta V = - \int_0^L N_0 \frac{d(w_b + w_s)}{dx} \frac{d \delta(w_b + w_s)}{dx} dx \quad (7)$$

Où N_0 est la charges axiale.

En remplaçant les expressions de δU et δV pour les équations (5) et (7) dans l'équation (4) et en fait l'intégration par parties, δw_b et δw_s . Les équations suivantes de la proposition de la théorie de la poutre sont obtenues :

$$\delta w_b : \frac{d^2 M_b}{dx^2} - N_0 \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} = 0 \quad (8a)$$

$$\delta w_s : \frac{dQ}{dx} - N_0 \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} = 0 \quad (8b)$$

Lorsque l'effet de déformation du cisaillement est négligé ($w_s = 0$), les équations d'équilibre de l'équation (8) récupérer ces dérivés de la théorie des poutres d'Euler-Bernoulli.

En remplaçant l'équation (2) dans l'équation (3) et les résultats suivants dans l'équation (6), les contraintes résultantes sont obtenues comme :

$$M_b - \mu \frac{d^2 M_b}{dx^2} = -D \frac{d^2 w_b}{dx^2} \quad (9a)$$

$$Q - \mu \frac{d^2 Q}{dx^2} = A_s \frac{dw_s}{dx} \quad (9b)$$

Chapitre III :Formulation mathématique et calcul

$$D = \int_A z^2 E dA , A_s = K_s \int_A G dA \quad (10)$$

Où K_s est le facteur de correction de cisaillement utilisé pour compenser l'erreur due à l'hypothèse de la contrainte de cisaillement constante.

En remplaçant l'équation (9) dans l'équation (8), les équations gouvernantes non locales peuvent être exprimées en termes de déplacements (w_b, w_s) comme :

$$(D - \mu N_0) \frac{d^4 w_b}{dx^4} + N_0 \left(\frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} - \mu \frac{d^4 w_s}{dx^4} \right) = 0 \quad (11a)$$

$$(N_0 - A_s) \frac{d^2 w_s}{dx^2} + N_0 \left(\frac{d^2 w_b}{dx^2} - \mu \frac{d^4 (w_b + w_s)}{dx^4} \right) = 0 \quad (11b)$$

Les équations gouvernantes de la théorie locale des poutres peuvent être obtenues à partir de l'équation (11) en réglant le paramètre d'échelle μ égal à zéro.

Pour le présent modèle, l'équation gouvernante non locale pour le flambement de SWBNNT en considérant les effets thermiques peuvent être réécrits comme :

$$(D - \mu N_{th}) \frac{d^4 w_b}{dx^4} + N_{th} \left(\frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} - \mu \frac{d^4 w_s}{dx^4} \right) = 0 \quad (12a)$$

$$(N_{th} - A_s) \frac{d^2 w_s}{dx^2} + N_{th} \left(\frac{d^2 w_b}{dx^2} - \mu \frac{d^4 (w_b + w_s)}{dx^4} \right) = 0 \quad (12b)$$

Basée sur la théorie d'élasticité thermique mécanique, la charge axiale peut être exprimée comme :

$$N_{th} = \frac{EA}{1 - 2\nu} \alpha_x T \quad (13)$$

Où α_x est le coefficient de dilatation thermique dans la direction de l'axe x, et ν est le rapport de Poisson T présente le changement de température.

Dans le présent travail, on suppose que seule la force axiale due au changement de température existe sur le SWBNNT.

III .5.Solutions analytiques

Une solution explicite la température critique de flambement par rapport aux paramètres géométriques, à la charge thermique et aux paramètres d'échelle non locale est illustrée dans cette section. Le champ de déplacement dans le cas de nanotube de nitrure de bore mono paroi SWBNNT supposé ;divisé en deux limites est peut être décrit par les fonctions harmoniques qui respectent les conditions aux limites:

$$\begin{cases} w_b \\ w_s \end{cases} = \sum_{n=1}^{\infty} \begin{cases} W_{bn} \sin(\beta x) \\ W_{sn} \sin(\beta x) \end{cases} \quad (14)$$

Où W_{bn} , et W_{sn} sont des paramètres arbitraires à déterminer, ω est la fréquence propre associée au mode propre n , et $\beta = n\pi / L$.

En remplaçant les expressions de w_b et w_s de l'équation (14) dans l'équation (12), les solutions de forme fermée peuvent être obtenues à partir des équations suivantes :

$$\left(\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{22} \end{bmatrix} - \lambda N_{th} \alpha^2 \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{cases} W_{bn} \\ W_{sn} \end{cases} = \begin{cases} 0 \\ 0 \end{cases} \quad (15)$$

Ou

$$S_{11} = D\beta^4, S_{12} = 0, S_{22} = A_s\beta^2, \lambda = 1 + \mu\beta^2 \quad (16)$$

Ensuite, la charge de flambement thermique critique avec la théorie milieu continu non local peut être dérivée comme

$$N_{th} = \frac{S_{11}S_{22}}{\lambda\beta^2(S_{11} + S_{22})} \quad (17)$$

La température critique avec la théorie milieu continu non local peut être obtenue comme :

$$T_{cr} = \frac{\beta^2 K_s GI(1-2\nu)}{\alpha_x(1 + \mu\beta^2)(\beta^2 EI + K_s GA)} \quad (18)$$

La température critique non dimensionnelle peut s'écrire sous la forme suivante :

$$P_{cr} = \alpha_x \frac{AL^2}{I} T_{cr} \quad (19)$$

Chapitre III :Formulation mathématique et calcul

I représente le moment de l'aire de la section transversale.

références

- [1] S. Iijima *Nature (London)*, 354 (1991), p. 56
- [2] T. Rueckers, K. Kim, E. Joselevich, G.T. Tseng, C.L. Cheung, C.M. Lieber *Science*, 289 (2000), p. 94
- [3] H.W.C. Postma, T. Teepen, Z. Yao, M. Grifoni, C. Dekker *Science*, 293 (2000), p. 76
- [4] L. Roschier, R. Tarkiainen, M. Ahlskog, M. Paalanen, P. Hakonen *Appl. Phys. Lett.*, 78 (2001), p. 3295
- [5] H. Dai, J.H. Hafner, A.G. Rinzler, D.T. Colbert, R.E. Smalley *Nature (London)*, 384 (1996), p. 147
- [6] P. Kim, C.M. Lieber *Science*, 286 (1999), p. 2148
- [7] D. Qian, G.J. Wagner, W.K. Liu, M.F. Yu, R.S. Ruoff *Appl. Mech. Rev.*, 55 (2002), p. 495
- [8] C.Q. Ru Elastic models for carbon nanotubes H.S. Nalwa (Ed.), *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, vol. 2 American Scientific Publishers, Stevenson Ranch, CA (2004), pp. 731–744
- [9] P. Sharma, S. Ganti, N. Bhate *Appl. Phys. Lett.*, 82 (2003), p. 535
- [10] P.E. Sheehan, C.M. Lieber *Science*, 272 (1996), p. 1158
- [11] B.I. Yakobson, R. Smalley *Am. Sci.*, 85 (1997), p. 324
- [12] Blase, X., Rubio, A., Louie, S.G., Cohen, M.L. (1994), “Stability and band gap constancy of boron nitride nanotubes”, *Europhys. Lett.*, **28**, 335–341.
- [13] Chopra, N.G., Luyken, R.J., Cherrey, K., Crespi, V.H., Cohen, M.L., Louie, S.G., Zettl, A. (1995), “Boron-nitride nanotubes”, *Science*, **269**, 966–972.
- [14] Oberlin, A., Endo, M., Koyama, T. (1976), “Filamentous growth of carbon through benzene decomposition”, *Journal of Crystal Growth*, **32**(3), 335.
- [15] Panchal, M.B., Upadhyay, S.H. (2013a), “Cantilevered single walled boron nitride nanotube based nanomechanical resonators of zigzag and armchair forms”, *Physica E*, **50**, 73–82.
- [16] Santosh, M., Maiti, P.K., Sood, A.K. (2009), “Elastic properties of boron nitride nanotubes and their comparison with carbon nanotubes”, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, **9**(9), 5425.

- [17] Goldberg, D., Bando, Y., Huang, Y., Terao, T., Mitome, M., Tang, C., Zhi, C. (2010), "Boron nitride nanotubes and nanosheets", *ACS Nano*, **4**(6), 2979.
- [18] Moon, W., Hwang, H. (2004), "Molecular mechanics of structural properties of boron nitride nanotubes", *Physica E*, **23**(1–2), 26.
- [19] Pokropivny, V., Kovrygin, S., Gubanov, V., Lohmus, R., Lohmus, A., Vesi, U. (2008), "Ab-initio calculation of Raman spectra of single-walled BN nanotubes", *Physica E*, **40**(7), 2339.
- [20] Verma, V., Jindal, V.K., Dharamvir, K. (2007), "Elastic moduli of a boron nitride nanotube", *Nanotechnology*, **18**(43), 1.
- [21] Li, C., Chou, T. (2006), "Static and dynamic properties of single-walled boron nitride nanotubes", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, **6**(1), 54.
- [22] Jeon, G.S., Mahan, G.D. (2009), "Lattice vibrations of a single-wall boron nitride nanotube", *Physical Review B*, **79**(8), 085424.
- [23] Ghassemi, H.M., Yassar, R.S. (2010), "On the mechanical behavior of boron nitride nanotubes", *Applied Mechanics Reviews*, **63**(2), 020804
- [24] Suryavanshi, A., Yu, M., Wen, J., Tang, C., Bando, Y. (2004), "Elastic modulus and resonance behavior of boron nitride nanotubes", *Applied Physics Letters*, **84**(14), 2527.
- [25] Chopra, N., Zettl, A. (1998), "Measurement of the elastic modulus of a multi-wall boron nitride nanotube", *Solid State Communications*, **105**(5), 297.
- [26] Zhi, C.Y., Bando, Y., Tang, C.C., Huang, Q., Golberg, D. (2008), "Boron nitride nanotubes: functionalization and composites", *Journal of Materials Chemistry*, **18**(33), 3900.
- [27] Ciofani, G., Raffa, V., Menciassi, A., Cuschieri, A. (2009), "Boron nitride nanotubes: An innovative tool for nanomedicine", *Nano Today*, **4**(1), 8.
- [28] Oh, E.S. (2010), "Elastic properties of boron-nitride nanotubes through the continuum lattice approach", *Material Letters*, **64**(7), 859.
- [29] Zhi, C., Bando, Y., Tang, C., Golberg, D. (2005), "Immobilization of proteins on boron nitride nanotubes", *Journal of American Chemical Society*, **127**(49), 17144.
- [30] Kumar, S., Panchal, M.B., Kumar, A., Upadhyay, S.H. (2014), "Continuum solid modeling based FEM simulation approach for single walled boron nitride nanotube based biosensing", *Procedia Materials Science*, **5**, 2 – 10.
- [31] Genchi, G.G., Rocca, A., Grillone, A., Marino, A., Ciofani, G. (2016), "Boron nitride nanotubes in nanomedicine: Historical and future perspectives", In *"Boron Nitride*

Nanotubes in Nanomedicine", 201-218, edited by Ciofani G., Mattoli V. (Elsevier, UK, 2016).

[32] Rocca, A., Marino, A., del Turco, S., Cappello, V., Parlanti, P., Pellegrino, M., Golberg, D., Mattoli, V., Ciofani, G. (2016), "Pectin-coated boron nitride nanotubes: In vitro cyto- / immune-compatibility on RAW 264.7 macrophages", *Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects*, **1860**(4), 775-784.

[33] Lu, P., Lee, H.P., Lu, C., Zhang, P.Q. (2007), "Application of nonlocal beam models for carbon nanotubes", *Int. J. Solids Struct.*, **44**, 5289–5300.

[34] Reddy, J.N. (2007), "Nonlocal theories for bending, buckling and vibration of beams", *Int. J. Eng. Sci.*, **45**, 288.

[35] Heireche, H., Tounsi, A., Benzair, A., Bedia, E.A.A. (2008a), "Sound wave propagation in single-walled carbon nanotubes using nonlocal elasticity", *Physica E*, **40**, 2791.

[36] Heireche, H., Tounsi, A., Benzair, A. (2008b), "Scale Effect on wave propagation of double-walled carbon nanotubes with initial axial loading", *Nanotechnology*, **19**, 185703.

[37] Benguediab, S., Tounsi, A., Zidour, M., Semmah, A. (2014), "Chirality and scale effects on mechanical buckling properties of zigzag double-walled carbon nanotubes", *Composites Part B*, **57**, 21 – 24.

[38] Besseghier, A., Heireche, H., Bousahla, A.A., Tounsi, A., Benzair, A. (2015), "Nonlinear vibration properties of a zigzag single-walled carbon nanotube embedded in a polymer matrix", *Advances in Nano Research*, **3**(1), 29-37.

[39] Rakrak, K., Zidour, M., Heireche, H., Bousahla, A.A., Chemi, A. (2016), "Free vibration analysis of chiral double-walled carbon nanotube using non-local elasticity theory", *Advances in Nano Research*, **4**(1), 31-44

[40] Tounsi, A., Heireche, H. and Adda Bedia, E.A. (2009b) ,"Comment on "Free transverse vibration of the fluid-conveying single-walled carbon nanotube using nonlocal elastic theory" [J. Appl. Phys. 103, 024302 2008]", *J. Appl. Phys.*, **105**, 126105

[41] Tounsi, A., Semmah, A., Bousahla, A.A. (2013), "Thermal buckling behavior of nanobeams using an efficient higher-order nonlocal beam theory", *Journal of Nanomechanics and Micromechanics*, **3**, 37 – 42.

[42] Panchal, M. B., Upadhyay, S.H., Harsha, S.P. (2013b), "Vibration analysis of single walled boron nitride nanotube based nanoresonators", *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine, Transactions of ASME*, **3**(3), 031004.

- [43] Panchal, M.B., Upadhyay, S.H. (2013a), "Cantilevered single walled boron nitride nanotube based nanomechanical resonators of zigzag and armchair forms", *Physica E*, **50**, 73–82.
- [44] Panchal, M. B., Upadhyay, S.H., Harsha, S.P. (2012), "Mass detection using single walled boron nitride nanotube as a nanomechanical resonator", *NANO: Brief Reports and Reviews*, **7**(4), 1250029.
- [45] Panchal, M. B., Upadhyay, S.H., Harsha, S.P. (2013b), "Vibration analysis of single walled boron nitride nanotube based nanoresonators", *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine, Transactions of ASME*, **3**(3), 031004.
- [46] Panchal, M. B., Upadhyay, S.H. (2014), "Single walled boron nitride nanotube-based biosensor: an atomistic finite element modeling approach", *IET Nanobiotechnol*, **8**(3), 149–156.
- [47] Panchal, M. B., Upadhyay, S.H., Harsha, S.P. (2014), "Boron nitride nanotube-based biosensor for acetone detection: molecular structural mechanics-based simulation", *Molecular Simulation*, **40**(13), 1035 – 1042.
- [48] Jabbari, M., Farzaneh Joubaneh, E., Mojahedin, A. (2014), "Thermal buckling analysis of porous circular plate with piezoelectric actuators based on first order shear deformation theory", *Int J Mech Sci*, **83**, 57–64.
- [49] Chen, C., Li, S., Dai, L., Zhao, Q.C. (2014), "Buckling and stability analysis of a piezoelectric viscoelastic nano beam subjected to vander Waals forces", *Commun Nonlinear Sci Numer Simulat*, **19**, 1626–1637.
- [50] Nasihatgozar, M., Daghighi, V., Eskandari, M., Nikbin, K., Simoneau, A. (2016), "Buckling analysis of piezoelectric cylindrical composite panels reinforced with carbon nanotubes", *Int J. Mech. Sci.*, **107**, 69–79
- [51] 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., Int. J.*, **18**(4), 1063-1081.
- [52] Bounouara, F., Benrahou, K.H., Belkorissat, I., Tounsi, A. (2016), "A nonlocal zeroth-order shear deformation theory for free vibration of functionally graded nanoscale plates resting on elastic foundation", *Steel and Composite Structures*, **20**(2), 227 – 249.
- [53] Eltahir, M.A., Khater, M.E., Park, S., Abdel-Rahman, E., Yavuz, M. (2016), "On the static stability of nonlocal nanobeams using higher-order beam theories", *Advances in Nano Research*, **4**(1), 51-64.

- [54] Bouremana, M., Houari, M.S.A., Tounsi, A., Kaci, A., Adda Bedia, E.A. (2013), "A new first shear deformation beam theory based on neutral surface position for functionally graded beams", *Steel and Composite Structures*, **15**(5), 467-479.
- [55] Eringen, A.C. (1983), "On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves", *Journal of Applied Physics*, **54**, 4703–4710.
- [56] Bourada, M., Kaci, A., Houari, M.S.A., Tounsi, A. (2015), "A new simple shear and normal deformations theory for functionally graded beams", *Steel and Composite Structures*, **18**(2), 409 – 423.
- [57] Bourada, F., Amara, K., Tounsi, A. (2016), "Buckling analysis of isotropic and orthotropic plates using a novel four variable refined plate theory ", *Steel and Composite Structures*, **21**(6). 1287 – 1306.
- [58] Ait Amar Meziane, M., Abdelaziz, H.H., Tounsi, A. (2014), "An efficient and simple refined theory for buckling and free vibration of exponentially graded sandwich plates under various boundary conditions" *Journal of Sandwich Structures and Materials*, **16**(3), 293 – 318.
- [59] 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.
- [60] 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., Int. J.*, **53**(6), 1143-1165.
- [61] Bennoun, M., Houari, M.S.A., Tounsi, A. (2016), "A novel five variable refined plate theory for vibration analysis of functionally graded sandwich plates", *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, **23**(4), 423 – 431.
- [62] Hebali, H., Tounsi, A., Houari, M.S.A., Bessaim, A., Adda Bedia, E.A. (2014), "New quasi-3D hyperbolic shear deformation theory for the static and free vibration analysis of functionally graded plates", *Journal of Engineering Mechanics (ASCE)*, **140**, 374 – 383.

Chapitre IV

Résultats et discussions

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV.1. Résultats numériques et discussion

Les dimensions et les caractéristiques utilisées dans les résultats numériques des nanotubes de nitrure de bore mono paroi (SWBNNT) à structure zigzag sont les suivantes: épaisseur de paroi $h = 0.075 \text{ nm}$, rayon moyen $r = 0.313 \text{ nm}$, coefficient de Poisson $\nu = 0.34$, module Young $E = 1.8 \text{ TPa}$ et la valeur du coefficient de dilatation thermique $\alpha_x = 1.2 \times 10^{-6}$.

-La variation de la température critique en fonction du nombre de mode axial est représentée dans la fig 1. Les résultats obtenus par la théorie du premier ordre non local (PFSDT) coïncident avec ceux prédits en utilisant la théorie classique de Timoshenko (TBT). On peut voir que les résultats basés sur les théories locales et non locales sont pratiquement les mêmes pour les petits nombres de modes. Cependant, en augmentant le numéro de mode, la différence devient évidente. De plus, on peut observer que l'augmentation du paramètre non local entraîne la diminution de la température critique.

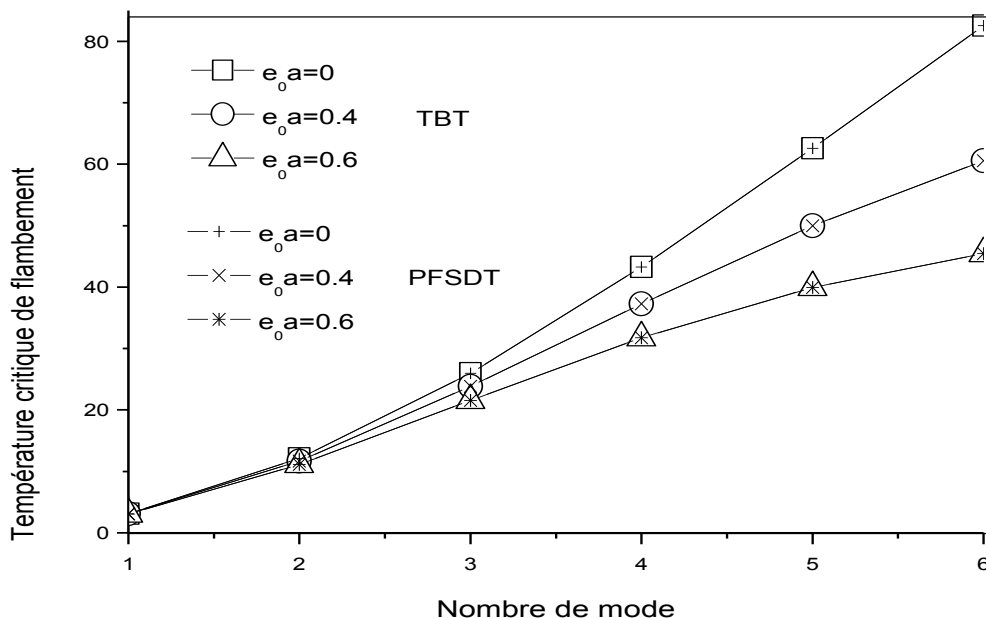


Fig IV 1 : Relation entre la température critique de flambement et le nombre de mode pour différents coefficients d'échelle

-La comparaison de la température critique de flambement des nanotubes de nitrure de bore mono paroi (SWBNNT) en forme zigzag avec différents rapports d'élanement pour les six premiers modes basés sur la théorie classique de Timoshenko conventionnelle non locale et la théorie du premier ordre non local PFSDT est présentée dans la fig 2. les deux théories fournissent des résultats identiques. On peut voir que l'effet du rapport d'élanement sur le flambement de la température critique est important aux modes supérieurs et que la diminution du rapport d'élanement réduit la température critique des nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT en zigzag.

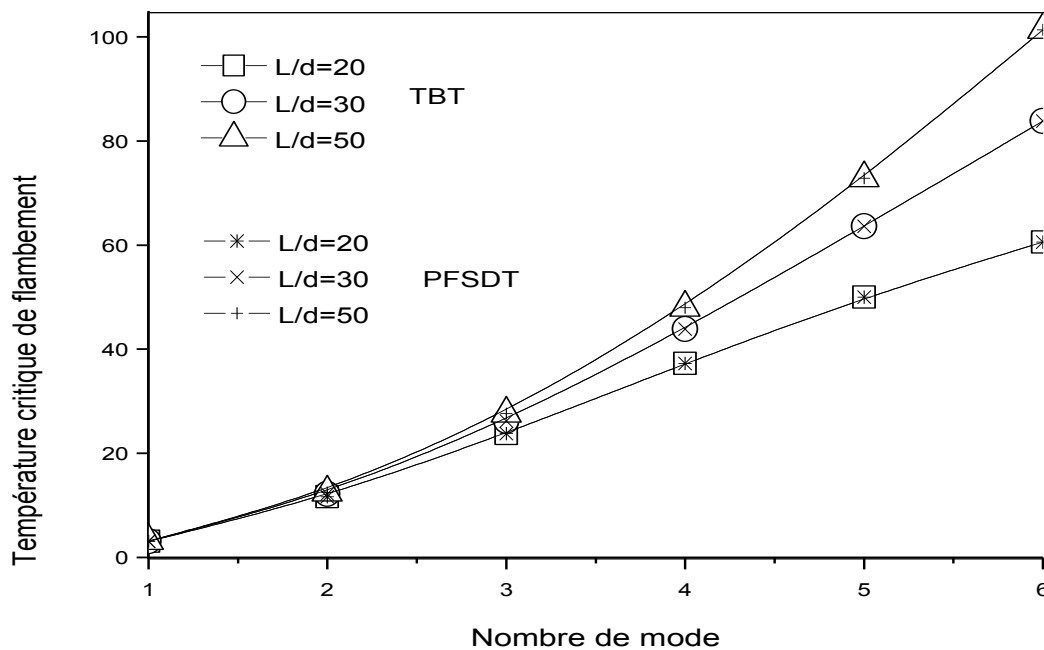


Fig IV 2 : Relation entre la température critique de flambement et le nombre de mode pour différents valeurs L/d et $e_0a = 0.4 \text{ nm}$

-La dépendance de la température de critique de flambement non-dimensionnelle sur le rapport d'élanement des nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT en forme zigzag est également représentée sur la Fig. 3. Il est constaté que la théorie classique de Timoshenko TBT conventionnel non local et la théorie du premier ordre non local PFSDT annoncent des résultats similaires. On peut conclure des résultats de cette figure qu'une augmentation du paramètre d'échelle non locale produit un décrétement de la température critique de flambement. En outre, on peut voir que lorsque le rapport d'élanement est faible, les effets d'échelle non locale sont significatifs. Cependant, les

effets d'échelle non locale sur la température critique de flambement non dimensionnelle diminueront avec l'augmentation du rapport d'élanement. Cela implique que les effets non locaux sur les caractéristiques de flambement thermique ne sont pas évidents pour le nanotube de nitrure de bore mono paroi SWBNNT élané mais devraient être pris en compte pour le nanotube de nitrure de bore mono paroi court.

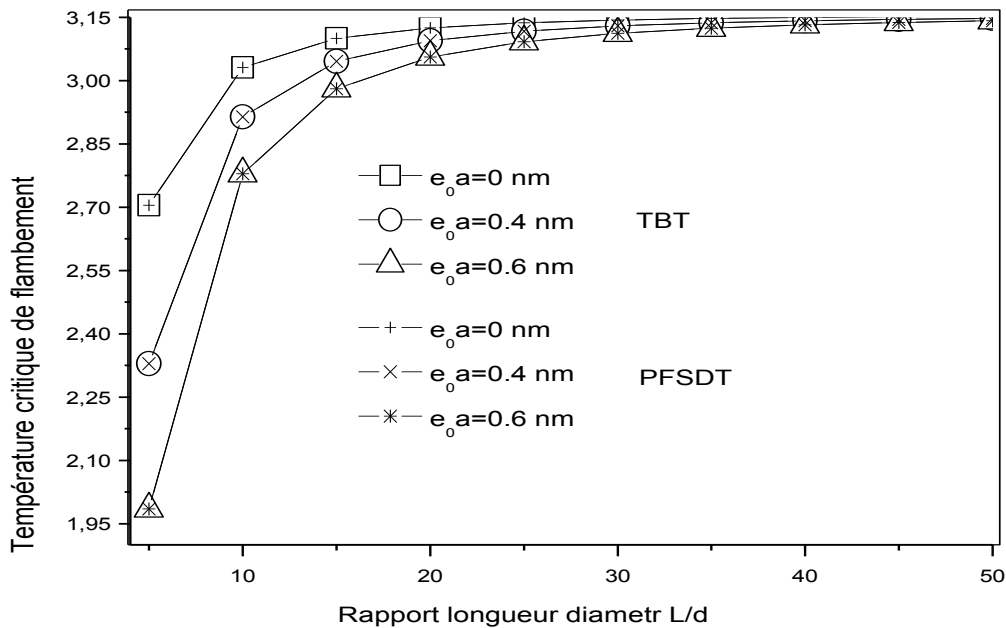


Fig IV 3 : Relation entre la température critique de flambement non-dimensionnelle et L/d pour différents valeurs $e_0 a$ et $n = 1$

-Afin de démontrer les effets de la déformation transversale du cisaillement, la température critique de flambement des nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT en forme zigzag par la présente théorie du premier ordre non local PFSDT et la théorie classique de Timoshenko TBT non local au modèle de poutre Euler-Bernoulli non local avec différents rapports d'élanement est présentée à la Fig. 4. On considère les numéros de mode 1, 3, 6 et le coefficient d'échelle 0,6 nm, on peut observer que, pour les différents numéros de mode, tous les rapports sont inférieurs à 1,0. Cela signifie qu'en raison des effets de la déformation transversale du cisaillement, la température critique de flambement de la théorie du premier ordre non local PFSDT, la théorie du premier ordre non local est inférieure à celle du modèle de poutre non local Euler-Bernoulli. Ce phénomène est plus évident pour les numéros de mode plus élevé et pour

les rapports d'élanement plus petits. Cela signifie que les effets de la déformation transversale du cisaillement doivent être considérés et que la théorie du premier ordre non local PFSDT est plus précise pour les nanotubes courts de nitrure de bore.

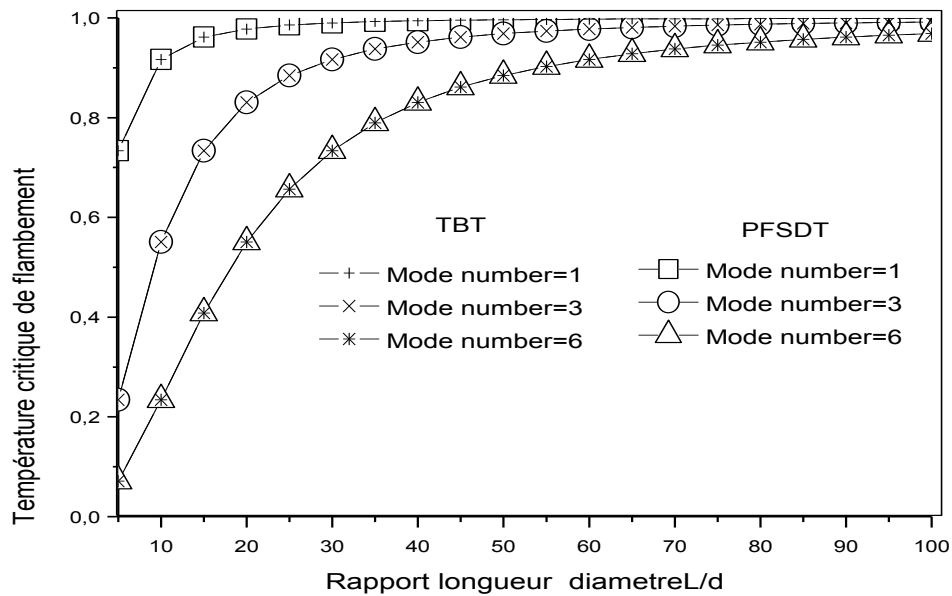


Fig IV 4 : Rapport de la température critique de flambement (TBT PFSDT) pour (EBT) nonlocale vs Rapport de la longueur de diamètre pour différents nombres de mode

$$e_0 a = 0.6 \text{ nm}$$

Conclusion Général

Conclusion Générale

Dans ce travail, la température critique de flambement des nanotubes de nitrure de bore mono paroi (SWBNNTs) en zigzag soumis à une élévation de température uniforme est étudiée en utilisant une nouvelle théorie de déformation de cisaillement de premier ordre non local. Une solution analytique est dérivée et une équation explicite pour la prédiction de la température critique de flambement est obtenue. A partir des exemples examinés, on peut conclure que les effets d'échelle non locale doivent être pris en compte pour les réponses de flambement thermique, en particulier pour les numéros de mode plus élevé et le nanotube de nitrure de bore mono paroi (SWBNNT) court. La température critique de flambement non dimensionnelle peut être modifiée par des rapports d'élanement différents du nanotube de nitrure de bore mono paroi (SWBNNT). Les résultats démontrés dans ce travail peuvent fournir des conseils utiles pour l'étude et la conception de la prochaine génération de nanodispositifs qui utilisent les caractéristiques de flambage thermique des nanotubes de nitrure de bore mono paroi (SWBNNTs).

