

N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE & POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR & DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILALI LIABES
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
SIDI BEL ABBES

THESE DE DOCTORAT

Présenté par:

BAGHDADI HABIB

Spécialité : sciences physiques

Option : sciences des matériaux

Intitulé :

***Étude des caractéristiques physiques et
mécaniques des nanotubes en carbone et leurs
applications technologiques***

Soutenu le 09/04/2015

Devant le jury composé de :

<i>Président:</i>	M ^R .	HEIRECHE	HOUARI	MCA	U.D.L./S.B.A
<i>Encadreur :</i>	M ^R .	BENZAIR	ABDENOUR	Professeur à	U.D.L./S.B.A.
<i>Co-encadreur :</i>	M ^R .	TOUNSI	ABDELWAHED	Professeur à	U.D.L./S.B.A.
<i>Examineurs:</i>	M ^R .	SEKKAL	NADIR	Professeur à	E.N.P/ORAN
	M ^R .	BALTACHE	HADJ	Professeur à	U/MASCARA
	M ^R .	YOUCEF MAHMOUD MAHMOUD		MCA	CU/RELIZANE

Année universitaire 2014/2015

Remerciements

Je voudrais remercier ici les nombreuses personnes qui ont contribué à mon encadrement et à la bonne ambiance de cette thèse.

En premier lieu, je voudrais remercier mon encadreur, monsieur le professeur Benzair Abdenour de l'U.D.L. de Sidi Belabbes, ainsi que monsieur le professeur Tounsi Abdelouahed le co-encadreur, pour m'avoir accueilli dans leur laboratoire, et orienté durant mes recherches et pour leur disponibilité et leurs conseils avisés, sans lesquels ce travail ne serait pas,

Je voudrais aussi remercier messieurs les professeurs :Heireche Houari, Sekkal Nadir, Beltache Hadj, et Youcef Mahoud Mahoud ; membres du jury et les nombreuses personnes ayant contribué à l'environnement scientifique de cette recherche, notamment mes collègues doctorants :naeri mokhtar et semah abdelwahid .

De nos jours, aucun travail de mémoire ou de thèse ne peut être mené sans de nombreuses collaborations, surtout sur un sujet aussi important que mon sujet intitulé:

***Étude des caractéristiques physiques et
mécaniques des nanotubes en carbone et leurs
applications technologiques***

Dédicaces

Je dédie ce travail à :

*Mes parents que dieu les
bénisse*

Me frères et sœurs

Ma femme et mes enfants

Mes amis et mes collègues

TABLE DE MATIÈRES

Liste des notations.....	1
Liste des abréviations.....	4
Abstract.....	5
Introduction générale.....	8
CHAPITRE I - Généralités sur les nanotubes	
I.1. Introduction.....	11
I.2. Les formes traditionnelles du carbone.....	
I.2.1. Le graphite.....	
I.2.2. Le diamant.....	12
I.2.3. Les carbones mal organisés.....	13
I.3 Les nouvelles formes du carbone.....	
I.3.1. Fullerènes et dérivés.....	
I.3.2. Nanotubes de carbone.....	14
a. Définition.....	
b. Nanotubes multifeuillets (ou multi parois).....	15
c. Nanotubes monofeuillets (Single Wall Nanotube, SWNT).....	16
I.4. Propriétés physiques des nanotubes de carbone.....	18
I.4.1 Propriétés électroniques.....	19
I.4.2 Propriétés thermiques.....	20
I.4.3 Propriétés optiques.....	21
I.4.4 Propriétés de capillarité.....	22
I.5. Défauts des nanotubes de carbone.....	
I.6. Applications technologiques des nanotubes de carbone.....	24
I.6.1 Pointes AFM.....	25
I.6.2 Fibres à base de (NTC).....	26

I.7. risques et préventions.....	27
CHAPITRE II – Propriétés Mécaniques des nanotubes de carbone...	
II.1 Introduction.....	
II.2 Le modèle de la mécanique moléculaire.....	29
II.3. Les propriétés mécaniques des nanotubes monocouches (SWCNT's)	30
II.3.1 module de Young.....	33
II.3.2 Le coefficient de cisaillement.....	34
II.3.3 Coefficient de poisson.....	38
II.4 L'effet de la température sur le module de Young d'un nanotube de carbone monocouche (SWNT).....	41
	42
CHAPITRE III: Formulation théorique.....	
III.1.Introduction	
III.2-Etude des caractéristiques vibratoires des nanotubes de carbones.....	43
III.2.1.Théories de base.....	
III.2.2.Théorie de poutre de Reddy.....	44
III-3-Etude du flambement d'un SWNT de type Armchair.....	
III.3.1.Introduction.....	
III.3.2. Flambement Par charge due à une élévation de température.....	49
a. Équations de poutre de Timoshenko et conditions aux limites pour la charge de flambement de tiges/tubes	
b. Conditions aux limites.....	
c. Calcul de la charge critique PT de flambement	52
d. Application aux différents cas d'extrémités.....	53
III.3.3 Application au nanotube de carbone du type fauteuil (Armchair) ...	54
III.4.1Extrémités appuyée- appuyée	60
III.4.2-Extrémités encastrée- encastrée	61
III.4.3-Extrémités encastrée – libre.....	65
Chap. IV- Résultats et discussion.....	66
IV. 1.propriétés mécaniques.....	
IV. 1.1.effet de la chiralité.....	
IV. 1.2.effet de la température	

IV. 1.3 Conclusion.....	67
IV. 2. partie vibration.....	68
IV. 3. Partie flambement.....	69
a-Extrémités appuyée – appuyée	73
b-Extrémités encastree- encastree	
c-Extrémités encastree – libre	74
Conclusion	76
-CONCLUSION GENERALE.....	80
-BIBLIOGRAPHIE.....	82

LISTE DES NOTATION

- A : La surface de la section d'un nanotube.
- \vec{a}_1, \vec{a}_2 : Les vecteurs de base du graphène.
- a et b : Type de liaison carbone-carbone.
- α : Le coefficient de dilatation thermique.
- β : Le coefficient correcteur de cisaillement.
- C : La constante de la variation d'angle.
- \vec{ch} : Le vecteur chiral.
- C_{ijkl} : Le tenseur de module d'élasticité.
- C : Le coefficient d'interaction par unité de longueur.
- dR_i : L'allongement de la liaison i .
- $d\alpha, d\beta$: La variation d'angles α et β ,
- da, db : L'allongement de la liaison a et b .
- d_{in} : Le diamètre du nanotube interne.
- D : diamètre du nanotube
- E_a : Le module de Young du nanotube type armchair.
- E_z : Le module de Young du nanotube type zigzag.
- E_g : Le module de Young du graphite.
- E_N : Le module de Young du nanotube.
- E_{SWNT} : Le module de Young du nanotube monocouche.
- e_0 : Une constante appropriée à chaque matériau.
- e_0a : Le rapport de petite échelle.

-
- ε : La déformation axiale d'un nanotube de carbone.
- F : Force de traction .
- $f(x)$: Une charge répartie appliquée par le milieu élastique.
- ϕ : L'angle de rotation de la section d'une poutre.
- G : Le module de cisaillement.
- γ : La déformation tangentielle.
- J : Le constant de torsion correspond au cylindre mince.
- K : Constante d'allongement de la liaison.
- k_{win} : Le module d'élasticité du ressort.
- k_{win}^0 : Le module d'élasticité du ressort dans le cas de la température de référence d'environnement.
- K : Le nombre de mode.
- l_0 : La longueur de la liaison carbone-carbone.
- L : La longueur du nanotube de carbone.
- L/D : Le rapport longueur/diamètre.
- M : Le moment de flexion.
- n,m : Un couple de nombres entiers qui définit la structure du nanotube.
- Nt : Charge thermique.
- ν : Le coefficient de poisson.
- R : Le rayon du nanotube.
- ρ : La masse volumique.
- t : L'épaisseur de la couche d'un nanotube.
- T : Température critique de flambement de Timoshenko non-locale,
- TE : Température critique de flambement non -locale Euler,

-
- T_0 : Température critique de flambement locale Timoshenko
 TE_0 : Température critique de flambement locale Euler
 HE_{cr} : Température critique de flambement adimensionnelle, non-locale d'Euler
 HE_{cr} : Température critique de flambement adimensionnelle, non-locale d'Euler
 HE_0cr : Température critique de flambement adimensionnelle locale d' Euler
 HT_{cr} : Température critique de flambement adimensionnelle non-locale, de Timoshenko
 HT_0cr : Température critique de flambement adimensionnelle, locale de Timoshenko
 θ : La variation de la température.
 $\bar{\theta}$: L'angle chiral.
 σ : La contrainte axiale.
 τ : La contrainte tangentielle
 U_τ : Energies associées aux torsions.
 $U_{\bar{\theta}}$: Energies associées à la variation des angles .
 U_W : Energies associées aux inversions.
 U_{vdw} : L'énergie due a l'interaction non-liée de van der Walls.
 u_i : Le vecteur de déplacement.
 V : La force de cisaillement.
 \bar{W} : L'amplitude de déflexion du nanotube.
 W : Le déplacement transversal.
 $(\omega_k)_{NR}$: la fréquence basée sur le model non local de poutres de Reddy avec effet thermique
 $(\omega_k)_{LR}$: la fréquence basée sur le model local de poutres de Reddy avec effet thermique
 $(\omega_k)_{NR}^0$: la fréquence basée sur le model non local de poutres de Reddy sans effet thermique ($\vartheta=0^\circ$)

χ_N : *Le rapport de fréquences non locales et locales de Reddy avec effet thermique*

(χ_{th}) : *Le rapport de fréquences non locales et locales de Reddy sans effet thermique*

X : *L'axe des coordonnées axiales.*

Y : *Coordonnée mesurée positive à mi-distance dans la direction transversale.*

LISTE DES ABRÉVIATIONS

OU Acronymes

AFM: Microscopie à force atomique.

C60: Fullerène C₆₀.

C70: Fullerène C₇₀.

C76 Fullerène C₇₆.

C78 Fullerène C₇₈

C80: Fullerène C₈₀.

C82: Fullerène C₈₂

C84: Fullerène C₈₄

C-C: La liaison carbone-carbone.

CNT: Carbon nanotube

CVD: Chemical Vapor Deposition.

DWCNT: Nanotube de carbone double parois

MD: Dynamique moléculaire

MET: Microscopie électronique de transmission

MWNT Nanotube de carbone multi parois

NTC: Nanotube de carbone

SAM: Self-assembled monolayer

STM: Microscopie à effet tunnel.

SWCNT: Nanotube de carbone multi parois

TABLE DE MATIÈRES

Liste des notations.....	1
Liste des abréviations.....	4
Abstract.....	5
Introduction générale.....	8
CHAPITRE I - Généralités sur les nanotubes	
I.1. Introduction.....	11
I.2. Les formes traditionnelles du carbone.....	
I.2.1. Le graphite.....	
I.2.2. Le diamant	12
I.2.3. Les carbones mal organisés	13
I.3 Les nouvelles formes du carbone	
I.3.1. Fullerènes et dérivés.....	
I.3.2. Nanotubes de carbone.....	14
a. Définition	
b. Nanotubes multifeuillets (ou multi parois).....	15
c. Nanotubes monofeuillets (Single Wall Nanotube, SWNT).....	16
I.4. Propriétés physiques des nanotubes de carbone.....	18
I.4.1 Propriétés électroniques	19
I.4.2 Propriétés thermiques	20
I.4.3 Propriétés optiques	21
I.4.4 Propriétés de capillarité	22
I.5. Défauts des nanotubes de carbone.....	
I.6. Applications technologiques des nanotubes de carbone.....	24
I.6.1 Pointes AFM.....	25
I.6.2 Fibres à base de (NTC)	26
I.7. risques et préventions.....	27

CHAPITRE II – Propriétés Mécaniques des nanotubes de carbone...	
II.1 Introduction.....	
II.2 Le modèle de la mécanique moléculaire.....	29
II.3. Les propriétés mécaniques des nanotubes monocouches (SWCNT's)	30
II.3.1 module de Young.....	33
II.3.2 Le coefficient de cisaillement.....	34
II.3.3 Coefficient de poisson.....	38
II.4 L'effet de la température sur le module de Young d'un nanotube de carbone monocouche (SWNT).....	41
	42
CHAPITRE III: Formulation théorique.....	
III.1.Introduction	
III.2-Etude des caractéristiques vibratoires des nanotubes de carbones.....	43
III.2.1.Théories de base.....	
III.2.2.Théorie de poutre de Reddy.....	44
III-3-Etude du flambement d'un SWNT de type Armchair.....	
III.3.1.Introduction.....	
III.3.2. Flambement Par charge due à une élévation de température.....	49
a. Équations de poutre de Timoshenko et conditions aux limites pour la charge de flambement de tiges/tubes	
b. Conditions aux limites.....	
c. Calcul de la charge critique PT de flambement	52
d. Application aux différents cas d'extrémités.....	53
III.3.3 Application au nanotube de carbone du type fauteuil (Armchair) ...	54
III.4.1Extrémités appuyée- appuyée	60
III.4.2-Extrémités encastrée- encastrée	61
III.4.3-Extrémités encastrée – libre.....	62
Chap. IV- Résultats et discussion.....	63
IV. 1.propriétés mécaniques.....	66
IV. 1.1.effet de la chiralité.....	
IV. 1.2.effet de la température	
IV. 1.3Conclusion.....	67
IV. 2.partie vibration.....	68
IV. 3.Partie flambement.....	69
a-Extrémités appuyée – appuyée	73

b-Extrémités encastrée- encastrée	
c-Extrémités encastrée – libre	74
Conclusion	76
-CONCLUSION GENERALE.....	80
-BIBLIOGRAPHIE.....	82

LISTE DES NOTATION

- A : La surface de la section d'un nanotube.
- \vec{a}_1, \vec{a}_2 : Les vecteurs de base du graphène.
- a et b : Type de liaison carbone-carbone.
- α : Le coefficient de dilatation thermique.
- β : Le coefficient correcteur de cisaillement.
- C : La constante de la variation d'angle.
- \vec{ch} : Le vecteur chiral.
- C_{ijkl} : Le tenseur de module d'élasticité.
- C : Le coefficient d'interaction par unité de longueur.
- dR_i : L'allongement de la liaison i .
- $d\alpha, d\beta$: La variation d'angles α et β ,
- da, db : L'allongement de la liaison a et b .
- d_{in} : Le diamètre du nanotube interne.
- D : diamètre du nanotube
- E_a : Le module de Young du nanotube type armchair.
- E_z : Le module de Young du nanotube type zigzag.
- E_g : Le module de Young du graphite.
- E_N : Le module de Young du nanotube.
- E_{SWNT} : Le module de Young du nanotube monocouche.
- $e0$: Une constante appropriée à chaque matériau.
- $e0a$: Le rapport de petite échelle.
- ε : La déformation axiale d'un nanotube de carbone.
- F : Force de traction .
- $f(x)$: Une charge répartie appliquée par le milieu élastique.
- ϕ : L'angle de rotation de la section d'une poutre.
- G : Le module de cisaillement.
- γ : La déformation tangentielle.
- J : Le constant de torsion correspond au cylindre mince.

K	: Constante d'allongement de la liaison.
k_{win}	: Le module d'élasticité du ressort.
k_{win}^0	: Le module d'élasticité du ressort dans le cas de la température de référence d'environnement.
K	: Le nombre de mode.
l_0	: La longueur de la liaison carbone-carbone.
L	: La longueur du nanotube de carbone.
L/D	: Le rapport longueur/diamètre.
M	: Le moment de flexion.
n,m	: Un couple de nombres entiers qui définit la structure du nanotube.
N_t	: Charge thermique.
ν	: Le coefficient de poisson.
R	: Le rayon du nanotube.
ρ	: La masse volumique.
t	: L'épaisseur de la couche d'un nanotube.
T	: Température critique de flambement de Timoshenko non-locale,
TE	: Température critique de flambement non -locale Euler,
$T0$: Température critique de flambement locale Timoshenko
$TE0$: Température critique de flambement locale Euler
$HEcr$: Température critique de flambement adimensionnelle, non-locale d'Euler
$HEcr$: Température critique de flambement adimensionnelle, non-locale d'Euler
$HE0cr$: Température critique de flambement adimensionnelle locale d' Euler
$HTcr$: Température critique de flambement adimensionnelle non-locale, de Timoshenko
$HT0cr$: Température critique de flambement adimensionnelle, locale de Timoshenko
θ	: La variation de la température.
$\bar{\theta}$: L'angle chiral.
σ	: La contrainte axiale.
τ	: La contrainte tangentielle
U_τ	: Energies associées aux torsions.
$U_{\bar{\theta}}$: Energies associées à la variation des angles .
U_w	: Energies associées aux inversions.
U_{vdw}	: L'énergie due a l'interaction non-liée de van der Walls.

- u_i : Le vecteur de déplacement.
 V : La force de cisaillement.
 \bar{W} : L'amplitude de déflexion du nanotube.
 W : Le déplacement transversal.
 $(\omega_k)_{NR}$: la fréquence basée sur le model non local de poutres de Reddy avec effet thermique
 $(\omega_k)_{LR}$: la fréquence basée sur le model local de poutres de Reddy avec effet thermique
 $(\omega_k)_{NR}^0$: la fréquence basée sur le model non local de poutres de Reddy sans effet thermique ($\theta=0^\circ$)
 χ_N : Le rapport de fréquences non locales et locales de Reddy avec effet thermique
 (χ_{th}) : Le rapport de fréquences non locales et locales de Reddy sans effet thermique
 X : L'axe des coordonnées axiales.
 Y : Coordonnée mesurée positive à mi-distance dans la direction transversale.

LISTE DES ABRÉVIATIONS
OU Acronymes

- AFM: Microscopie à force atomique.*
- C60: Fullerène C₆₀.*
- C70: Fullerène C₇₀.*
- C76 Fullerène C₇₆.*
- C78 Fullerène C₇₈*
- C80: Fullerène C₈₀.*
- C82: Fullerène C₈₂*
- C84: Fullerène C₈₄*
- C-C: La liaison carbone-carbone.*
- CNT : Carbon nanotube*
- CVD: Chemical Vapor Deposition.*
- DWCNT : Nanotube de carbone double parois*
- MD: Dynamique moléculaire*
- MET: Microscopie électronique de transmission*
- MWNT Nanotube de carbone multi parois*
- NTC: Nanotube de carbone*
- SAM : Self-assembled monolayer*
- STM: Microscopie à effet tunnel.*
- SWCNT: Nanotube de carbone multi parois*

ملخص

في هذا العمل عرضتُ بشكل أساسي نموذج ريدي لدراسة الخصائص الفيزيائية كتواترات الاهتزازات الحرارية الناشئة داخل أنبوب فحمي نانوي أحادي الطبقة واخترنا في هذه الدراسة نوعين من الأنابيب النانوية : ذات الشكل المتعرج و ذات شكل الأريكة، مع التعرّيج على نظرية تموشينكو لدراسة الإنبعاج الحراري لهذه الأنابيب الفحمية بتحديد درجات الحرارة الحرجة لهذه الظاهرة . إن ثابت يونغ ومعامل القطع لهذين النوعين من الأنابيب تم الحصول عليهما بطريق نموذج الطاقة المكافئة. تبين النتائج أن هناك تبعية ذات دلالة للتواترات وكذا درجات الحرارة الحرجة للإنبعاج متعلقة بنوعية نسيج الأنبوب الفحمي . أخيرا أجريت مقارنة بين التواترات الطبيعية لكل من نوعي الأنابيب النانوية الفحمية المتعرجة والأريكية وأيضا مقارنة بين نتائج استعمال نظرية تيموشينكو لدراسة درجات الحرارة النسبية الحرجة للإنبعاج ونتائج نظرية أولار متبوعة بمناقشة .

كلمات مفتاحية : أنبوب نانوي فحمي ؛ الخصائص الفيزيائية ؛ الاهتزازات ؛ الإنبعاج ؛

درجات الحرارة الحرجة

RÉSUMÉ

RÉSUMÉ

Dans ce travail, le model non-local de Reddy et celui de Timochenko sont présentés pour étudier les caractéristiques physiques tels que l'influence thermique sur les fréquences naturelles d'un nanotube de carbone à simple paroi (SWCNT) de type zigzag et armchair et les températures critiques de flambement d'un nanotube de carbone de type armchair. Le module de Young et le module de cisaillement équivalents des nanotubes (SWCNTs) de type zigzag et armchair sont obtenus en utilisant le model de l'énergie équivalente. Les résultats indiquent qu'il y a une dépendance significative des fréquences naturelles et des températures critiques de flambement à la chiralité des nanotubes de carbones. En fin, une comparaison est faite entre les fréquences naturelles des nanotubes de carbones (SWCNT) de type armchair et zigzag, et une autre comparaison entre les résultats données par la théorie de Timochenko et celle d'Euler concernant l'étude des températures critiques de flambement d'un nanotube de carbone de type armchair , suivie d'une large discussion.

Mots clés: Nanotube de carbone ; Propriétés physiques ; Vibration ; flambement; Température critique.

RÉSUMÉ

ABSTRACT

This study investigates the thermal vibration of armchair and zigzag single walled carbon nanotubes (SWCNTs) based on Reddy beam theory, and also the thermal buckling of armchair SWCNTs based on Timoshenko beam theory. Equivalent Young and shear modulus of zigzag and armchair types of nanotubes (SWCNTs) are obtained with using equivalent energy model. According to this study, the results showed a signifying dependence of the vibration natural frequencies and buckling critic's temperatures on the chirality of armchair and zigzag carbon nanotubes. Finely a comparison is done between natural frequencies of single walled carbon nanotubes (SWCNT) in the armchair type and zigzag type, and another comparison between the results of the Timoshenko beam theory and Euler beam theory in the study of the buckling of a SWCNT under a thermal effect; followed by a large discussion.

Key words: Vibration, Carbon Nanotubes, Buckling, Natural frequencies, Critic's temperature.

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Durant les dernières décennies, les micro-matériaux à l'échelle nanométrique et leurs applications technologiques, ont attiré beaucoup d'attention. Les structures carbonées étaient l'une des priorités des recherches scientifiques en vue de leur relation avec plusieurs domaines de la vie contemporaine. Avant 1985, on ne connaissait que deux phases cristallines de carbone : le diamant et le graphite. Une nouvelle phase fut mise en évidence à cette date, conséquence des recherches menées par Kroto et Smalley [Kroto 1985]: il s'agit de la famille des fullerènes. Cette nouvelle forme allotropique, qui se présente sous la forme d'une cage sphérique de carbone, suscita rapidement un grand intérêt de la part de la communauté scientifique.

Après la découverte des nanotubes de carbone (CNTs) en 1991 par S.Iijima[Iijima 1991], qui a observé pour la première fois dans un sous produit de synthèse de fullerènes, des structures tubulaires. Ces tubes, entièrement composés de carbone, sont appelés nanotubes, en référence à leur diamètre qui ne mesure que quelques nanomètres. Les (CNTs) présentent en effet des propriétés mécaniques exceptionnelles.

Ce nouveau domaine de recherche, transversal à de nombreuses disciplines scientifiques (biologie, physique, chimie...), annonce l'évènement d'une nouvelle révolution industrielle. L'élaboration de structures, dispositifs ou de systèmes à l'échelle nanométrique possède l'avantage de réduire la consommation d'énergie et de matière, que ce soit pour leur fabrication, ou pour leur fonctionnement. Au cœur de l'intense recherche qui a lieu sur les nanostructures, les matériaux carbonés occupent une place privilégiée.

Le savoir faire des matériaux à l'échelle nanométrique et ses applications technologiques a attiré beaucoup d'attention après cette découverte. Les dernières études en relations avec les nanotubes de carbones [Dai 1996],[Dharap 2004], ont montré que les CNTs ont de bonnes propriétés électriques et une haute dureté mécanique de façon qu'ils seront utilisés dans l'industrie nanoélectronique. Les expériences de conduction contrôlées à l'échelle nanométrique sont difficiles et les simulations de dynamique moléculaire (MD) restent formidables pour les CNTs à grande échelle.

Par conséquent, la mécanique classique du milieu continu sur laquelle sont basés plusieurs modèles tel que le model de poutres [Avouris 2003],[Zhang 2009], type de Shell [Yakobson1996],[Ru 2000], espace du cadre [Li 2003],[Tserpes 2005], ont été largement appliqués à l'analyse de ces nanostructures cylindriques. Cependant ces modèles continus sont à l'échelle libre et ne peuvent pas incorporer l'effet de petite échelle dans la formulation. La mécanique continue non locale établie par Eringen [Eringen 1996],[Eringen 2002], permet un effet de petite échelle en considérant l'état de contrainte à un point donné comme étant une fonction du champs de pression à toutes les points du corps. Après, plusieurs

recherches ont appliqué le concept d'élasticité non locale à l'analyse des plis, flambements et vibrations des nanotubes et nano-poutres [Kitipornchaia2005],[Tounsi 2013].

Bien que plusieurs études sur le comportement dynamique non local des nanotubes de carbone ont été faites, basées sur la théorie du modèle de poutre, aucune étude n'a été trouvée pour le comportement non local des CNTs de forme armchair et zigzag qui se base sur la théorie de poutre de Reddy [Reddy1984].

Donc, le but de cette étude est d'analyser la propagation d'une onde dans les CNTs de types armchair et zigzag en utilisant la théorie de poutre non locale de Reddy contenant à la fois le changement de température et la chiralité du CNT.

Le module de Young et le coefficient de cisaillement équivalents pour le SWCNT sont obtenus en utilisant un modèle d'énergie équivalente développé par Wu et al [Wu 2006]. Les résultats obtenus dans cet article peuvent fournir des conseils utiles à l'étude et concevoir la génération prochaine des nano-plans qui font intervenir les propriétés de vibration thermique des nanotubes de carbone à simple parois en formes armchair et zigzag.

L'analyse des vibrations linéaires ou non linéaires est une thématique actuelle importante, tant d'un point de vue académique qu'industrielle et qui touche de nombreux domaines, tels que l'aéronautique, le génie civil, les transports, l'acoustique musicale ou encore le génie nucléaire. Pour ces vibrations, la gamme de techniques ou de logiciels dédiés à l'étude expérimentale ou numérique est très large et permet de traiter un grand nombre de problèmes de structures. La vibration et la stabilité des structures situées dans les fondations élastiques ont été largement adoptées par plusieurs recherches pour modéliser divers problèmes constructifs pendant les décennies passées. Un nanotube peut être exposé à plusieurs sortes de vibrations liées à sa structure interne et qui peuvent être influencées par des conditions externes telles que l'élévation de température.

Un nanotube peut aussi subir sous l'effet de température une déformation appelée flambement. Dans cette étude on est intéressé à illustrer les températures critiques de flambement. On s'est basée sur la théorie de Timoshenko sur la déformation de cisaillement transversale qui a été formulée au début du vingtième siècle.

Un nanotube de carbone est assimilé à une poutre unidimensionnelle, En y appliquant une force de compression mécanique il subit des déformations. De même quand on élève la température, une force de compression est engendrée et cause une déformation de sens perpendiculaire à l'axe longitudinal de la poutre.

Pour la théorie de Timoshenko, une section plane est perpendiculaire au plan moyen de la poutre avant la déformation. Après la déformation elle reste plane mais non perpendiculaire au plan moyen de cette poutre, θ est la rotation de la section.

Le but de ce travail est d'analyser l'effet thermique sur la vibration libre d'un nanotube de carbone monocouche(SWCNT) de types zigzag et armchair, et de faire une comparaison. Pour cela on a développé le modèle élastique non local de poutre de Reddy. De plus, on a développé le modèle élastique non local de la poutre de Timochenko pour analyser le flambement d'un nanotube monocouche sous l'effet de température. Le module de Young et le module de cisaillement du nanotube type zigzag sont développés par l'utilisation de l'énergie équivalente. Différents paramètres qui influent sur les vibrations on été utilisés comme la constante de petite échelle (e_0a), le rapport (L/d), le nombre de mode (k), la chiralité du nanotube (n).

Le plan de travail est divisé en quatre chapitres. Dans le premier chapitre j'ai donné des généralités sur les nanotubes notamment les nouvelles formes de carbone et leurs différentes structures, toute en citant les propriétés physiques essentielles de ces nanostructures et ses applications technologiques.

Dans le deuxième chapitre, une étude quantitative détaillée est faite sur les propriétés mécaniques des nanotubes notamment le module de Young, le coefficient de cisaillement et le coefficient de Poisson, avec illustration de l'effet thermique sur ces paramètres.

Le troisième chapitre a été consacré à une étude de l'effet thermique sur la propagation des ondes de vibrations naturelles le long d'un nanotube de carbone monocouche, précisément ses deux types zigzag et armchair. Cette étude basée sur la théorie de poutre de Reddy est suivie d'une étude des températures critiques de flambement d'un nanotube de type armchair sous l'effet d'une charge thermique.

Dans le quatrième chapitre j'ai illustré les résultats de cette étude suivis d'une large discussion.

Et enfin j'ai terminé par une conclusion générale qui résume les résultats obtenus dans cette thèse et détermine les principaux facteurs qui régissent quelques comportements mécaniques des nanotubes.

CHAPITRE I : GÉNÉRALITÉS SUR LES NANOTUBES

I.1.Introduction

Élément fondamental de la vie, le carbone a un atome capable de se lier d'une manière variée à un grand nombre d'atomes différents, ce qui lui permet d'offrir des possibilités de synthèse multiples. Cette versatilité est due à sa structure électronique particulière [$1s^2_2s^2_2p^2$]. Ses orbitales atomiques sont capables de s'hybrider avec d'autres atomes de carbone ou des hétéroatomes, pour former des orbitales moléculaires de type sp^1 , sp^2 ou sp^3 , ce qui confère au carbone un caractère bi-, tri- ou tétravalent. Il est donc possible de rencontrer des structures carbonées monodimensionnelles, bidimensionnelles ou tridimensionnelles. La seule forme thermodynamiquement stable du carbone est le graphite hexagonal. Les autres formes allotropiques du carbone sont métastables dans les conditions normales de température et de pression.

Les formes traditionnelles du carbone sont le graphite, le diamant, les carbones mal organisés. De nouvelles formes de carbone ont été récemment découvertes, tels que les fullerènes, les nanotubes multifeuillets, les nanotubes monofeuillets.[Iijima, 1991]

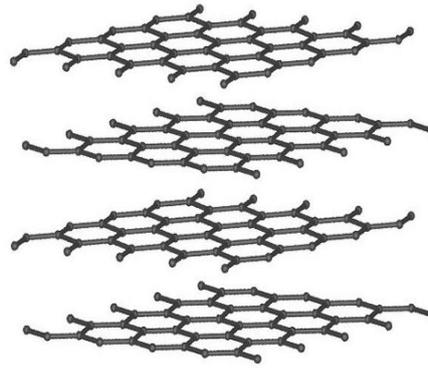
I.2. Les formes traditionnelles du carbone

I.2. 1. Le graphite

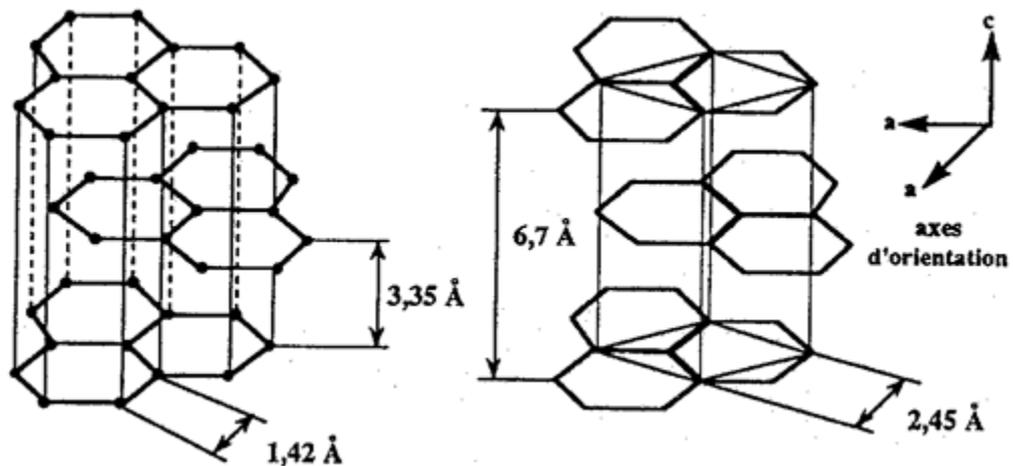
Le graphite présente une structure lamellaire constituée d'un empilement de feuillets. Chaque feuillet, ou plan de graphène, est constitué d'atomes de carbone en état d'hybridation sp^2 , formant un réseau hexagonal de paramètre de maille 0,243 nm, la longueur de la liaison C-C étant de 0,142 nm. Il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

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

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



-a-



-b-

Fig.I.1. Structure du graphite hexagonal

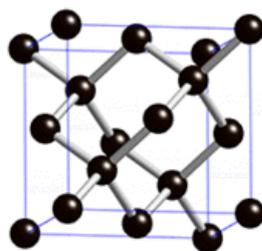
I.2. 2. Le diamant

Le diamant est une forme allotropique tridimensionnelle du carbone. Dans le diamant, les atomes de carbone sont en état d'hybridation sp^3 , et donc tétravalents. Il existe plusieurs structures cristallines du diamant, comme le diamant hexagonal ou la lonsdaléite, mais la structure la plus courante est le diamant cubique (Fig.1.2.b), qui compte 8 atomes par maille.

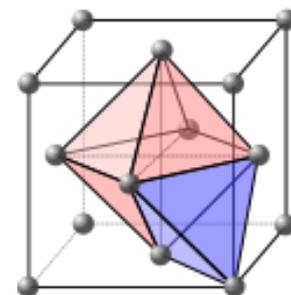
La maille de cette structure est de type cubique à faces centrées, avec un paramètre de maille de 0,356 nm, et une distance interatomique de 0,154 nm.



a



b



c

Fig.I.2. Structure du diamant

I.2. 3. Les carbones mal organisés

Le carbone ne présente pas toujours une organisation cristalline. Des formes de carbone mal organisées peuvent exister. C'est notamment le cas du carbone amorphe. Il s'agit d'un réseau désordonné d'atomes de carbone présentant des états d'hybridation sp^2 et sp^3 . A l'état naturel, le carbone amorphe est rare. Il est présent dans les particules des couches extérieures de l'atmosphère des étoiles froides, appelées poussières d'étoiles.

Plus proche de nous, le carbone amorphe est synthétisé sous forme de couches minces, obtenues généralement par dépôt plasma. Il sert de revêtement, apportant une tenue mécanique supplémentaire à des pièces industrielles. De plus, son caractère hydrophobe lui permet d'être utilisé en tant que couche de protection.

I.3. Les nouvelles formes du carbone

I.3.1. Fullerènes et dérivés

L'élément principal du graphite, et également point de départ pour la construction par l'esprit de nouvelles nanostructures carbonées, est le plan de graphène, que l'on peut représenter comme une feuille plane pavée d'hexagones. Il est possible de briser virtuellement la planéité de la feuille de graphène en insérant des défauts dans la structure, de type pentagone ou heptagone.

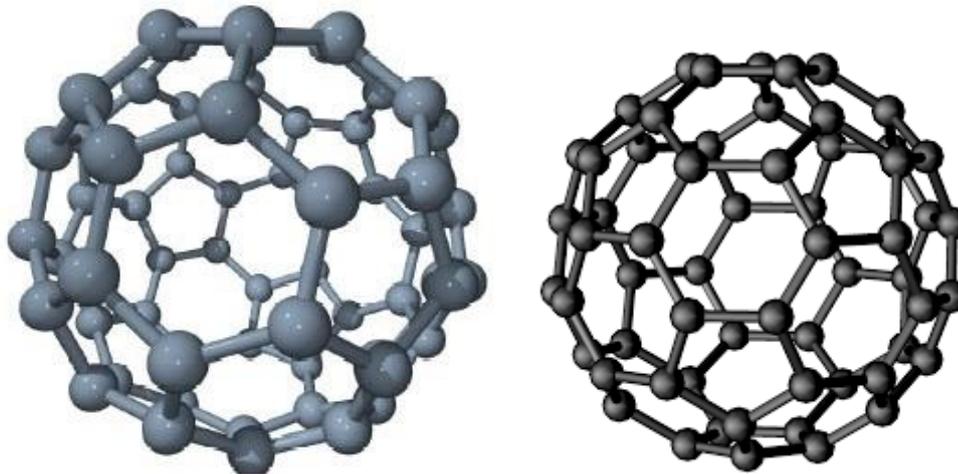


Fig.1.3: Fullerène C60. Notons la présence des 12 pentagones servant à fermer la structure.

L'ajout d'un pentagone dans un plan d'hexagones crée une courbure positive. L'ajout d'un heptagone créera, dans le même plan, une courbure négative. La courbure créée par chaque type de défaut s'annule, et une feuille de graphène dans laquelle on aurait inséré un pentagone et un heptagone resterait globalement plane.

Au 18^e siècle, Leonhard Euler s'intéressa aux polyèdres d'Archimède. Il compléta et généralisa ces travaux sous la forme d'un théorème, le théorème de Descartes-Euler, plus connu sous le nom de règles d'Euler.

Les règles d'Euler démontrent qu'il est possible de fermer géométriquement n'importe quelle structure contenant des pentagones et des hexagones avec uniquement douze pentagones, pour un nombre quelconque d'hexagones. Ces assemblages géométriques sont longtemps restés des vues de l'esprit, jusqu'à ce que l'on identifie une forme de matière obéissant aux règles du mathématicien Euler. En voulant identifier les espèces carbonées présentes dans l'espace interstellaire, Curl, Kroto et Smalley vaporisaient des cibles en graphite avec un laser pulsé, dans un plasma chaud. En 1985, ils réussirent à isoler une forme majoritaire constituée de 60 atomes de carbone.

Cette molécule, refermée sur elle-même comme une cage, a la forme d'un icosaèdre tronqué dont tous les sommets sont occupés par des atomes de carbone. Sa structure obéit à la règle d'Euler, étant constituée de 12 pentagones et 20 hexagones. Cette nouvelle molécule de 60 atomes de carbone, ou C₆₀, a été appelée buckminsterfullerène, par analogie avec les dômes géodésiques de l'architecte R. Buckminster Fuller. Depuis, le nom a évolué, et on se réfère à cette molécule en tant que fullerène, ou plus simplement, C₆₀.

Le fullerène C₆₀ est le représentant le plus connu de la famille des fullerènes, molécules "cages" de plus de 60 atomes de carbone. Les fullerènes doivent tous obéir à la règle de stabilité.

Les fullerènes doivent obéir à de fortes conditions de stabilité chimique ; toutes les structures géométriquement possibles n'existent donc pas. Les fullerènes les plus connus sont les C₆₀ et C₇₀, mais il existe également les C₇₆, C₇₈, C₈₂, C₈₄...

Depuis leur synthèse initiale par ablation laser, les moyens de production de fullerènes ont progressé. En 1990, Krätschmer réussit à la première synthèse à grande échelle de fullerènes par la sublimation d'une électrode en graphite par arc électrique. Aujourd'hui, des méthodes de synthèse du C₆₀ par voie organique existent, ouvrant la voie à une production de masse des fullerènes.

I.3.2. Les nanotubes de carbone

a-Définition

Un nanotube de carbone est un feuillet de graphite formé d'atomes de carbone disposés en réseau hexagonal (*Fig. 1.4*), comme un nid d'abeilles, et enroulé sur lui-même.

Son diamètre est de l'ordre du nanomètre, sa longueur peut atteindre plusieurs micromètres. À chacune de ses deux extrémités se trouve une demi-molécule de fullerène. Cette molécule est constituée de 60 atomes de carbone, son diamètre est d'environ un nanomètre et elle est formée d'hexagones et de pentagones qui lui donnent une forme presque sphérique, semblable à un ballon de football.

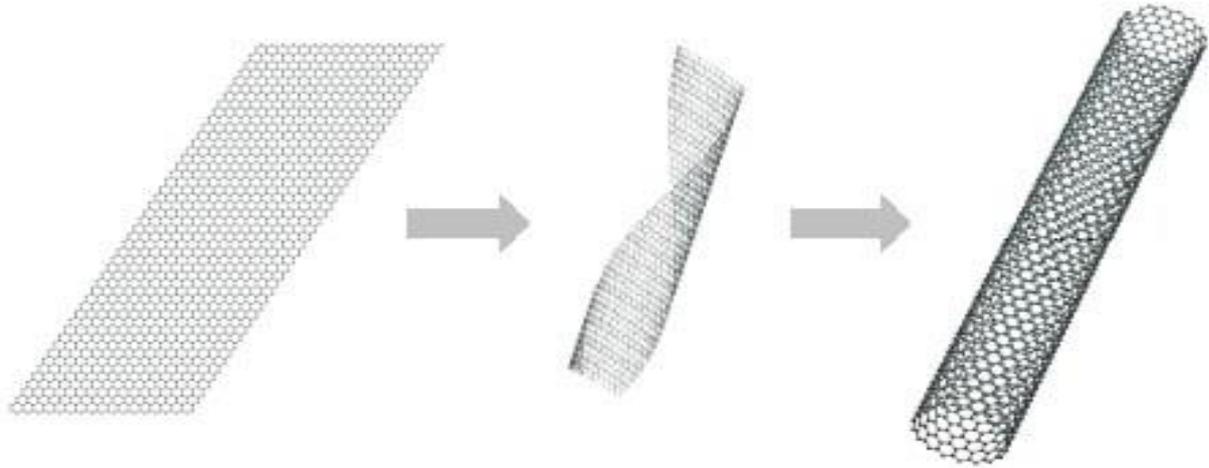


Fig1.4 Du graphène nanotube de carbone

b. Nanotubes multifeuillets (ou multiparois)

Ces nanotubes multifeuillets sont constitués d'un arrangement concentrique de feuilles de graphène, repliées sur elles-mêmes de manière à former des cylindres (Fig.1.5). Cette structure est communément appelée poupée russe, par analogie avec le jeu de poupées qui s'emboîtent les unes dans les autres. Le diamètre du plus petit tube interne détermine la taille du canal central du nanotube. Le diamètre interne d'un nanotube multifeuillets est de l'ordre de deux nanomètres, tandis que le diamètre externe est de l'ordre d'une vingtaine de nanomètres. Cependant, les nanotubes multifeuillets peuvent aller jusqu'à la centaine de nanomètres de diamètre.

La façon dont les différentes couches graphitiques des nanotubes multifeuillets s'empilent est a priori aléatoire. Il n'a pas été mis en évidence un empilement selon des règles préférentielles entre les différents feuillets. La distance moyenne inter-feuillets est de 0,344 nm, ce qui rapproche sa structure de celle du graphite turbo statique.

La structure des nanotubes multifeuillets de type poupée russe décrite précédemment est communément admise, mais ce n'est pas la seule structure possible. Ainsi, certaines études expérimentales laissent envisager que les nanotubes multifeuillets pourraient avoir une structure de type rouleau de parchemin.

D'autres études suggèrent, surtout dans le cas des gros nanotubes, que les deux types de structure coexistent au sein des tubes multifeuillets, les tubes de petit diamètre, au centre, présentant une structure de type poupée russe, tandis que les tubes extérieurs possèdent une structure plus défectueuse de type rouleau de parchemin.

Enfin, une étude postérieure montre que la structure de type poupée russe est la plus fréquemment rencontrée, les nanotubes ne croissant selon le type rouleau de parchemin que dans des conditions particulières.

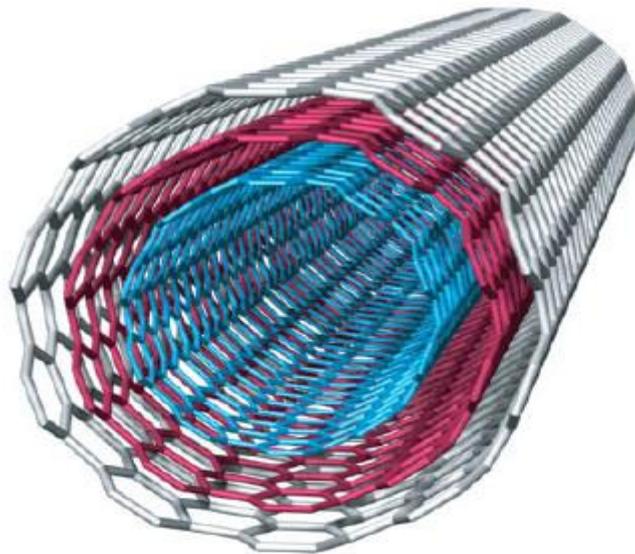


Fig.I. 5 _ Structure schématique d'un MWNT, où l'on voit bien l'arrangement concentrique des feuilles de graphène.

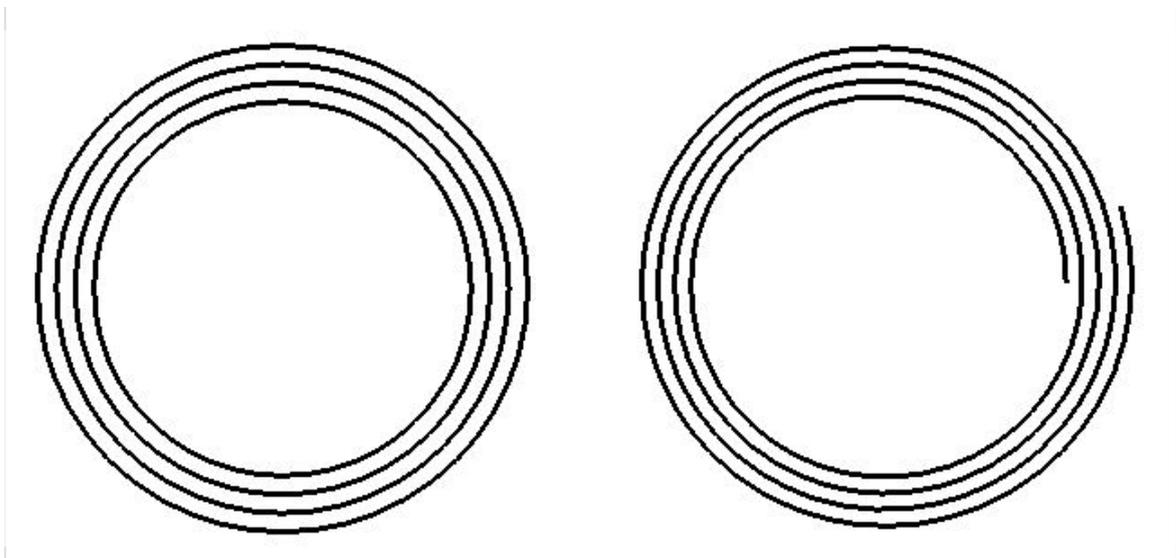


Fig.I. 6: Structures possibles des MWNT.

Gauche : type poupée russe. Droite : type rouleau de Parchemin

c. Nanotubes monofeuillets (SingleWall Nanotube, SWNT)

Les nanotubes de carbones monofeuillets ont été découverts en parallèle par Béthune et Iijima en 1993. Intéressons-nous donc à la structure de ces fascinants objets, sujets principaux de ce travail de thèse. Un

nanotube monofeuillet est une feuille de graphène enroulée sur elle-même, de manière à former un cylindre unique. Le nano-objet obtenu est alors unidimensionnel. Les atomes de carbone restent dans un état d'hybridation sp^2 . Le nanotube idéal ainsi formé présente deux extrémités, qui peuvent être fermées par deux dômes, comme des demi-fullerènes, mais pouvant comporter des défauts dans le cas d'un nanotube réel. L'enroulement de la feuille de graphène va définir la structure et les propriétés du nanotube formé (Fig.1.7). [Dai1996]

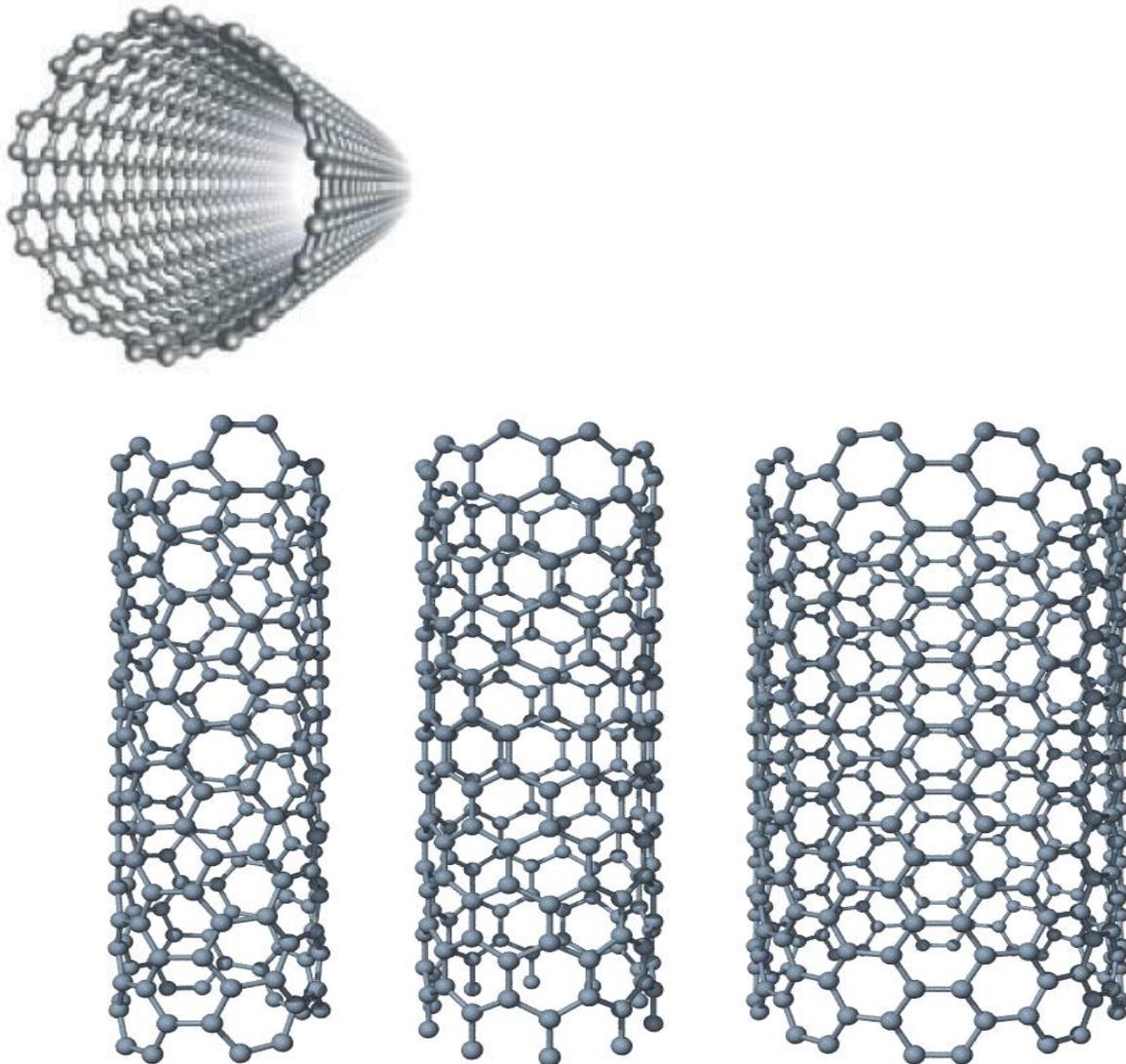


Fig.1.7.a: Nanotubes de carbone monofeuillet (SWNT).

- Gauche : Nanotube chiral (6,4)

- Centre : Nanotube (10,0) zig-zag (notez la découpe transversale du tube en forme de zig-zag)

- Droite : Nanotube (10,10) armchair (notez la découpe transversale du tube en forme de chaise).

Les tubes ont pour diamètres respectifs 0.68 nm, 0.78 nm et 1.36 nm. [Izard 2004].

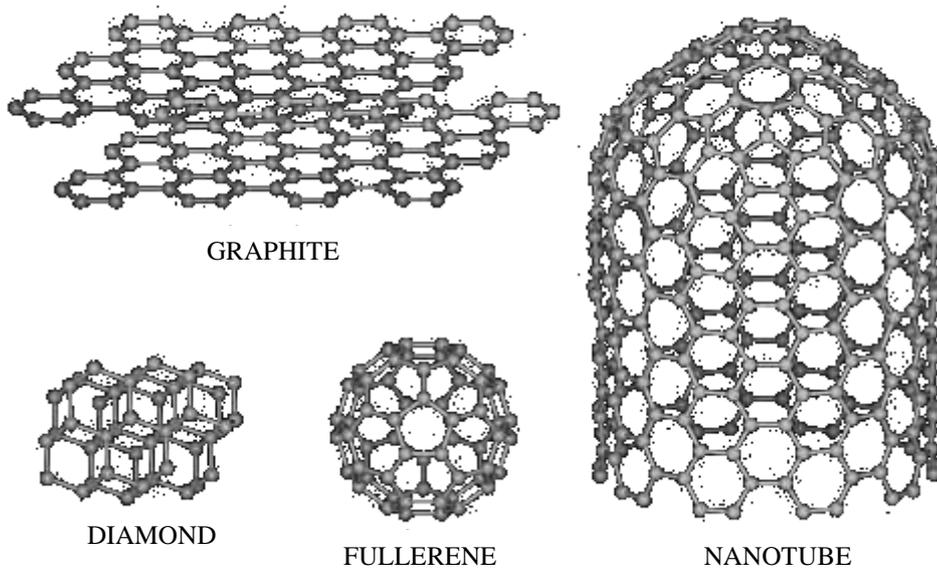


Fig. I.7-b : Différent structures de carbone.

I.4. Propriétés physiques des nanotubes de carbone:

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés physiques exceptionnelles.

- Très faible déformation sous charge : module d'Young axial ($550-1060\text{GPa}$) pour (SWNT) contre 210 pour l'acier au carbone,
- Très forte résistance à la traction : (150GPa), plus de 100 fois supérieure à l'acier ultra-résistant.
- Très forte conductivité thermique : ($3000-6000\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$) contre 400 pour le cuivre,
- Conductivité électrique : même niveau que le cuivre.

Evidements, la meilleure dispersion des nanotubes dans les matériaux composite permet d'atteindre les mêmes performances.

La Corée du sud est en pointe dans les technologies sur les nanotubes :

En effet le développement des nanotechnologies en Corée du sud a fait un grand bond. Ceci est dû à une bonne commercialisation des produits et en particulier des investissements fournis de la part du secteur privé et du gouvernement. Ce dernier a fait passer les financements de 83 milliards de wons (soit environ $66,4$ millions d'euros) en 2001 à 277 milliards de wons (soit environ $221,6$ millions d'euros) en 2006 . La Corée du sud a ainsi réussi à se hisser au quatrième rang mondial dans le domaine, après les Etats-Unis, le Japon et l'Allemagne.

Les ingénieurs et les scientifiques coréens ont donc acquis une plus grande confiance dans le développement de leur technologie dans divers secteurs, notamment les semi-conducteurs, la médecine, l'industrie chimique et la mécanique microscopique, domaines dans lesquels les nanotubes de carbone sont en train de devenir très intéressants.

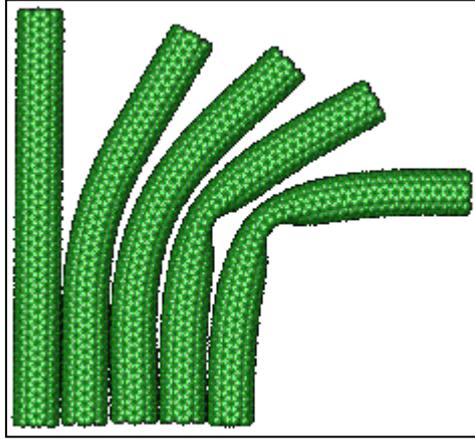


Fig. I.8

Par exemple l'équipe de scientifiques coréens dirigée par Ahn Sang-jung, chercheur au Korea Research Institute of Standards and Sciences (KRISS), a découvert accidentellement une technologie attendue depuis longtemps pour plier les nanotubes de carbone (Fig. I.8). Elle est basée sur l'utilisation d'un faisceau d'ions. Elle a été utilisée pour la fabrication de pointes pour microscope à force atomique (AFM).

Un microscope à force atomique utilise la réaction des atomes entre eux: à très faible distance ils ont naturellement tendance à s'attirer (c'est la force de Van der Waals) tandis que quand ils sont extrêmement près ils se repoussent à cause des électrons de leur cortège électronique (c'est le principe d'exclusion de Pauli). Ces différentes forces utilisées pour étudier un échantillon sont mesurées à l'aide de la déviation d'une pointe microscopique généralement constituée de silicium ou de nitrure de silicium. Or cette pointe risque de s'endommager rapidement au contact des surfaces. Les nanotubes de carbone, bien plus résistants, pourraient donc les remplacer, une innovation qui était impossible sans la technologie découverte par Ahn Sang-jung.

Mais cette technologie est aussi intéressante pour d'autres raisons: elle va permettre d'accélérer les applications des nanotubes dans différents domaines comme les systèmes d'affichage par émission (écrans plats utilisant un faisceau d'électrons) ainsi que les équipements permettant de régler les caractéristiques des semi-conducteurs.

I.4.1 Propriétés électroniques:

Du fait de leur unidimensionnalité, la structure électronique des nanotubes monofeuillets présente plusieurs particularités. La structure de bandes d'un tube monofeuillet, dans le modèle des liaisons fortes approche de la structure de bandes du graphène [Saito 1998], [Ducastelle 2003], [Charlier 2003]. Les propriétés électroniques du nanotube sont calculées à partir de celles d'un feuillet de graphène bidimensionnel, mais en rajoutant des conditions périodiques selon leur vecteur de chiralité. [Izard 2004]

En ce qui concerne les nanotubes monocouches, les propriétés électroniques sont principalement liées aux deux nombres entiers n et m qui définissent l'hélicité du tube ainsi que son diamètre (Fig. I.7). Les calculs théoriques sur des tubes infinis permettent de recenser les trois cas suivants: [Mintmire 1993]

- Les nanotubes de configuration armchair (n, n) sont des conducteurs de profil métallique.
- Les tubes (n, m) avec $(n-m)$ multiple de 3 non nul sont des semi-conducteurs de faible gap.
- Les autres nanotubes sont des semi-conducteurs à gap large ou des isolants.

Plus généralement, on considère que les nanotubes de configuration (n, m) sont métalliques si $(n-m)$ est un multiple de 3. Dans le cas contraire, ils sont semi-conducteurs. La (Fig. I.10) résume ces résultats.

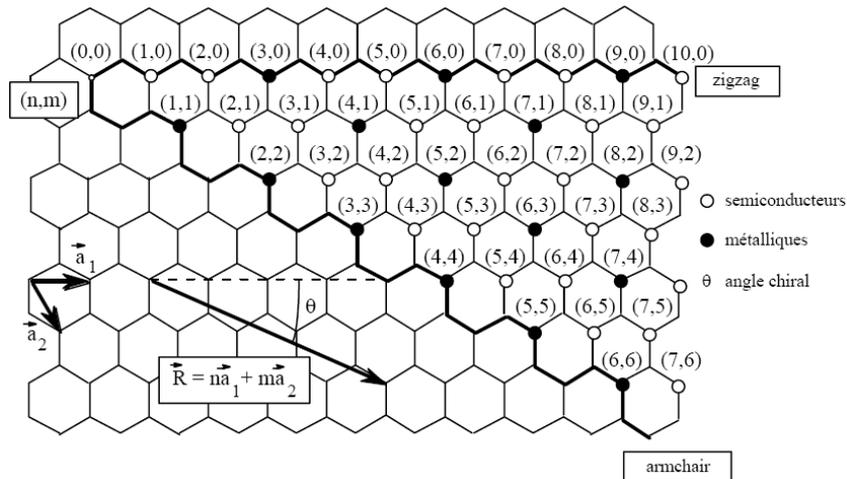


Fig I.10: Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monocouches en fonction de leurs indices de chiralité (n, m) .

Des mesures expérimentales récentes [Tans 1997] concernant des tubes monofeuillets, montrent qu'ils se comportent comme des fils quantiques, dans lesquels la conduction semble se produire par sauts d'énergie quantifiés, en bon accord avec les prédictions théoriques [Wildöer 1998].

Les nanotubes de carbone peuvent supporter une forte densité de courant de (100 MA.cm^{-2}) [Wei 2001] et ont une résistivité de l'ordre de $(10^{-4} \Omega.cm)$ dans le cas des (MWNTs), en comparaison celle du cuivre est de $(10^{-6} \Omega.cm)$. Ainsi, une des applications les plus prometteuses pour les nanotubes de carbone est l'apport de la conduction électrique dans les polymères en utilisant une très faible quantité de nanotubes tout en conservant les propriétés de la matrice polymère. [Saint-aubin 2010]

I.4.2 Propriétés thermiques:

De même que pour les propriétés électroniques, l'unidimensionnalité des nanotubes laisse espérer des propriétés thermiques originales. Le diamant présente la conductivité thermique la plus élevée de tous les matériaux connus à ce jour environ $(10^3 \text{ à } 300 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1})$. Le plan de graphène possède une conductivité comparable, mais le graphite présente des propriétés moindres dues à l'anisotropie. La structure

particulière des nanotubes permet de penser que leur conductivité doit également être grande le long de l'axe du nanotube. [Lassagne 2006]

La mesure des propriétés thermiques d'un nano-objet comme les nanotubes est délicate. Cependant, quelques études expérimentales ont permis de mesurer la conductivité thermique de nanotubes multifeuillets. Leur conductivité est grande, mais significativement plus faible que celle du graphite. Ces résultats sont a priori décevants, mais ils peuvent s'expliquer en considérant le fait que tous les feuillets ont participé à la conduction thermique alors que seul le feuillet externe a été utilisé pour les mesures. Ces considérations permettent d'estimer la magnitude de la conduction d'un tube monofeuillet au même ordre de grandeur que celle du graphite. [Izard 2004]

L'étude des propriétés thermiques des nanotubes est un domaine assez peu exploré, en partie à cause des difficultés expérimentales. Des études sont encore nécessaires pour mieux comprendre les phénomènes, en particulier dans le domaine des hautes températures, où les données expérimentales sont quasiment inexistantes. [Izard 2004]

Les matériaux carbonés sont utilisés industriellement pour améliorer la conductivité thermique. C'est pourquoi la découverte des nanotubes en 1991 a rapidement conduit à prédire [Ruoff 1995] pour cette nouvelle forme allotropique unidimensionnelle de carbone une conductivité thermique égale ou supérieure à celle du diamant ou du graphite. Les propriétés thermiques des nanotubes, qu'ils soient multicouches ou monocouches, ont encore été relativement peu explorées.

Des mesures aboutirent à des valeurs de conductivité thermique longitudinale allant de (1800 à $6000 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) pour un fagot isolé et à température ambiante. [Hone 1999] Des valeurs aussi élevées sont imputées à un libre parcours moyen particulièrement élevé pour les phonons (*de l'ordre de 100 nm*). Une valeur de ($6600 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) fut obtenue pour un nanotube ($10,10$) isolé et à température ambiante, [Berber 2000] ce qui est comparable à la conductivité thermique d'un hypothétique feuillet de graphène isolé. [Marcoux 2002]

I.4.3 Propriétés optiques

Les nanotubes possèdent des propriétés de limitation optique dans une large gamme de longueurs d'onde, depuis le visible jusqu'au proche infrarouge. Des seuils faibles de non linéarité et de grandes densités optiques ont été obtenues lors de l'étude de dispersions aqueuses des nanotubes monocouches [Vivien 1999]. Ces performances égalent ou surpassent celles d'autres bons limiteurs optiques, comme le ($C60$) ou le noir de carbone, que ce soit dans le visible ou dans le le proche infrarouge.

Les dispersions liquides de nanotubes monocouches apparaissent donc comme des systèmes prometteurs pour une limitation optique à bande large. D'autres solvants ont été essayés, comme l'éthylène glycol [Mishra 2000] ou le chloroforme. [Vivien 1999]. Plusieurs phénomènes optiques non linéaires peuvent être à l'origine d'une limitation optique : réfraction, absorption, diffusion.

L'origine de la limitation dans le cas des nanotubes est essentiellement une forte diffusion non linéaire engendrée par la formation de bulles de solvant à la surface des nanotubes et par une sublimation des tubes à plus forte fluence. [Vivien 2000] Il est à noter que des (MWNTs) dispersés dans un film de polymère, en l'occurrence du (PMMA), ont montré également des propriétés de limitation optique à large bande. [Sun 1998]

Le développement des sources laser intenses a entraîné la nécessité de concevoir des systèmes de protection pour l'œil et les détecteurs optiques. Les systèmes de protection actifs sont appelés limiteurs optiques. Idéalement, ils transmettent la lumière pour de faibles flux lumineux tandis que pour de forts flux ils limitent la transmission, de manière à maintenir l'intensité en dessous du seuil de dommage du détecteur. [Marcoux 2002]

Des études commencent d'apparaître également sur l'utilisation de nanotubes comme détecteur infrarouge. [Xu 2001]

I.4.4 Propriétés de capillarité :

Le nanotube peut être considéré comme un « nano fil » creux qu'il est possible de combler par capillarité. On peut ainsi encapsuler à l'intérieur du nanotube des métaux [Ajayan 1993 (1)], [Grobert 1999] (Fig. I.9a) ou bien des macromolécules comme des fullerènes [Suenaga 2000] (Fig. I.9b). Ces structures à base de fullerène appelées « peapods » ont été observées la première fois par Smith et al. [Smith 1998]

Des métallos fullerènes (un fullerène qui possède un ou quelques atomes métalliques emprisonnés dans sa structure cage carbonée) peuvent être aussi encapsulés dans les (SWNT) (Fig. I.9b). De nombreux métaux (le plus souvent des terres rares) peuvent être ainsi isolés à l'état atomique et arrangés sous la forme d'une chaîne [Suenaga 2001]. Il s'agit là d'une des très rares structures où des atomes peuvent être observés et analysés de manière isolée. [Gohier 2007]

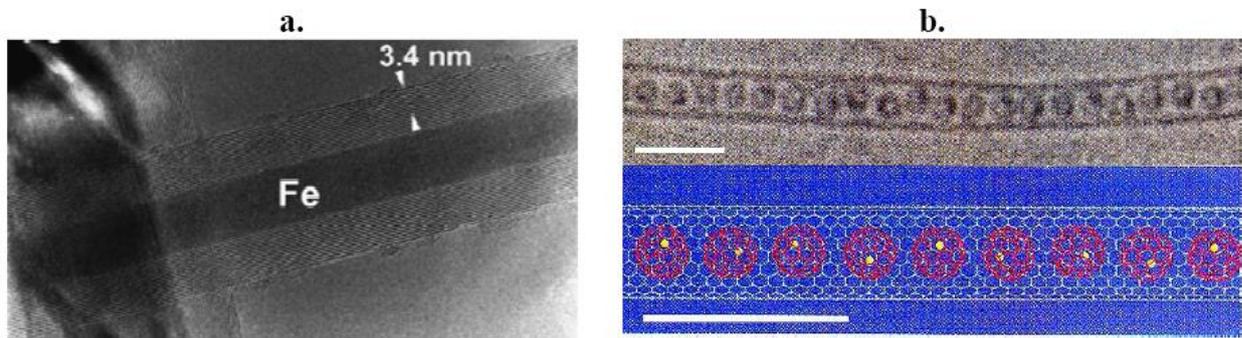


Figure I.9: a. Fe encapsulé dans un MWNT [Grobert 1999], b. C82 encapsulé dans un (SWNT). [Suenaga 2000]

I.5. Défauts des nanotubes de carbone:

Du fait d'interactions attractives de van der Waal entre parois, les nanotubes monocouches ont la plupart du temps tendance à s'agglomérer en faisceaux de nanotubes appelés fagots. Du fait de la

présence de cycles non hexagonaux, il existe des défauts dans le réseau graphène constitutif d'une paroi. Un pentagone introduit une courbure positive tandis qu'un heptagone conduira à une courbure négative (Fig. I.11)

[Marcoux 2002]

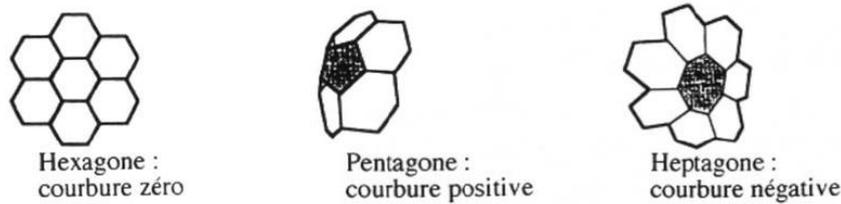


Fig I.11:Influence du type de cycle sur la courbure de la surface.

Sur la (Fig I.11) on peut voir l'influence des cycles non hexagonaux sur les surfaces des feuillets de 2 nanotubes .

La combinaison de plusieurs de ces défauts sur un tube peut induire un grand nombre de géométries particulières. Ainsi, du fait de l'annulation de leurs courbures respectives à un niveau global mais non à un niveau local, une paire heptagone-pentagone (appelé défaut de Stone-Wales [Stones 1986]) peut provoquer une variation de diamètre et de chiralité le long du tube (Fig I.12).

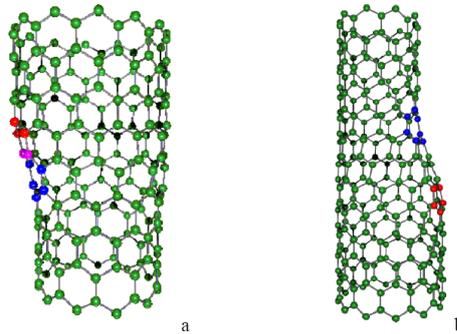


Fig I.12:Introduction d'une paire pentagone-heptagone provoquant une variation de diamètre et de chiralité : a- de (11,0) à (12,0) ; b- de (9,0) à (12,0).

De telles combinaisons peuvent expliquer la forme torsadée de certains nanotubes multicouches produits par décomposition catalytique d'hydrocarbures. En introduisant ces défauts en plus grand nombre dans le réseau graphitique, il est possible d'imaginer une grande quantité de structures variées (jonctions en Y, en T, etc.) (Fig. I.13).

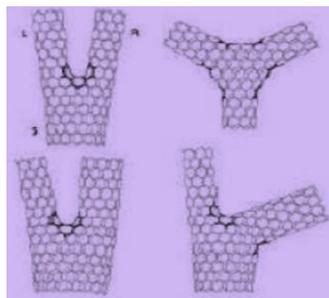


Fig I.13: Défauts pentagonaux et heptagonaux se traduisant par des jonctions.

En plus de ces défauts qu'on pourrait qualifier d'intrinsèques, il faut tenir compte d'impuretés, carbonées ou non, s'ajoutant aux nanotubes. La nature de ces impuretés dépend naturellement du mode de synthèse des nanotubes: [Marcoux 2002]

Lorsqu'un catalyseur métallique est employé dans la synthèse on le retrouve dans l'échantillon brut. Il est d'autant plus difficile de s'en séparer qu'il est le plus souvent sous forme de particules nanométriques (rendant difficile une séparation par filtration ou centrifugation) et recouvert de plusieurs feuillets graphitiques (rendant peu efficace une élimination par oxydation).

Tout le carbone présent dans un échantillon brut n'est malheureusement pas sous forme de nanotubes. On trouve des particules de graphite et du carbone amorphe plus ou moins structuré (Fig I.14). Des molécules carbonées de faible masse peuvent également être présentes, comme du (C60) ou des hydrocarbures poly-aromatiques. [Marcoux 2002]

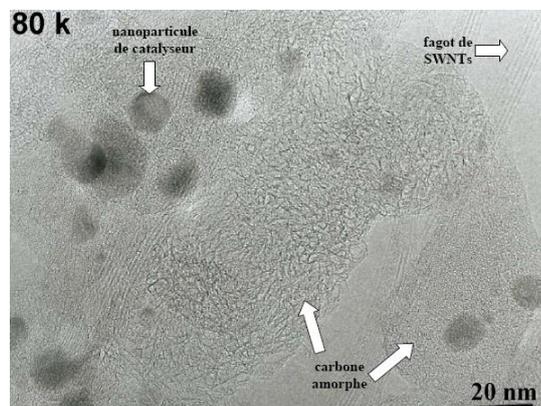


Fig I.14: Image (MET) d'un échantillon de nanotubes (collerette brute produite par arc électrique). On peut distinguer, en plus des (SWNTs), des particules de catalyseur et deux formes de carbone amorphe.

I.6. Applications technologiques des nanotubes de carbone:

Les nanotubes de carbone et Grâce à leurs dimensions nanométriques et leurs propriétés spécifiques sont des matériaux très intéressants du point de vue applications. Vu leur très important facteur de forme, ils sont d'excellents émetteurs d'électrons sous faible champ. Cela intéresse particulièrement l'industrie des écrans plats. Ils peuvent stocker une quantité importante d'hydrogène et intéressent donc l'industrie des batteries.

L'application la plus directe envisagée consiste à les utiliser comme additifs pour polymères (thermoplastiques, thermodurcissables et élastomères) [Houdyp 2006]. Les propriétés spécifiques des nanotubes de carbone peuvent ainsi être transposées dans des matrices, à condition d'assurer une bonne dispersion de l'additif dans le composite.

Des matériaux composites haute performance ou des polymères conducteurs contenant des nanotubes peuvent ainsi être trouvés dans leurs applications dans l'automobile (peintures conductrices évitant l'emploi de solvants polaires), l'aéronautique (ailes d'avions, trains d'atterrissage des hélicoptères, etc.), Il existe d'ailleurs déjà des prototypes utilisés par des sportifs de haut niveau (cyclistes utilisant des vélos dont le cadre est un matériau composite contenant des nanotubes, joueurs de tennis utilisant des raquettes à base de nanotubes de carbone, joueurs de hockey utilisant des crosses dopées en nanotubes de carbone. . .). Ils peuvent aussi être utilisés comme une peinture anti-fouling enrichie en nanotubes de carbone.

Nous verrons par la suite que leur rigidité, leur grande flexibilité et leur très faible diamètre les nanotubes de carbone sont utilisés comme pointes dans les microscopies à force atomique, de plus, sous forme de fibres macroscopiques. [Bernard 2007]

I.6.1 Pointes AFM:

La microscopie électronique projette une image en deux dimensions. Pour accéder à la troisième dimension, il faut utiliser les microscopies à effet tunnel et à force atomique. Le (NTC) semble être la structure idéale pour une utilisation comme pointe dans les microscopies à force atomique (AFM) et à effet tunnel (STM) (Fig I.15). Son premier atout est son facteur de forme (longueur/rayon) souvent supérieur à 100, son diamètre peut même être comparable dans le cas de (SWNT) à de simples molécules. D'autre part, ses propriétés mécaniques lui confèrent une bonne stabilité et la possibilité de se déformer élastiquement. Finalement, il peut être fonctionnalisé de manière NTC covalente à son extrémité pour réaliser des mesures chimiques ou biochimiques. [Ludovic 2014]

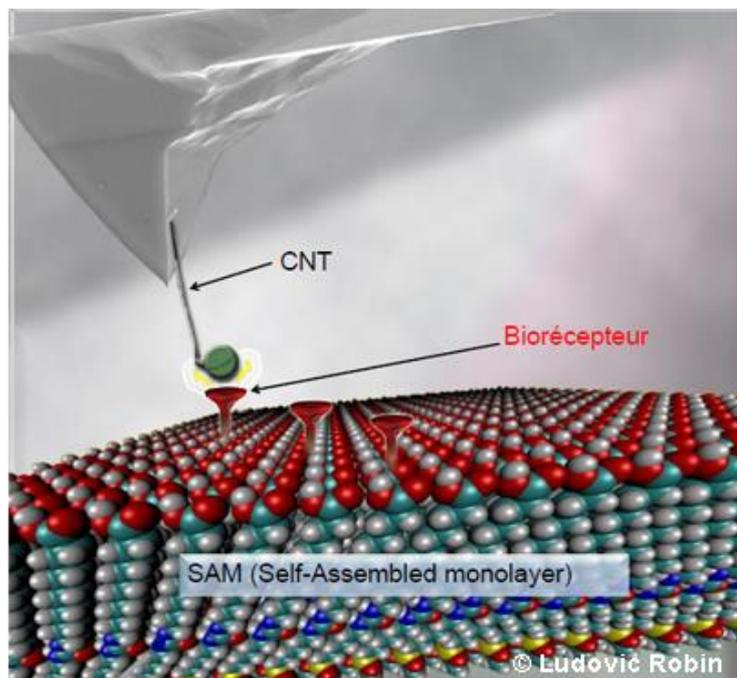


Figure I.15: NTC à l'extrémité d'une pointe. [Ludovic 2014]

Il existe plusieurs méthodes pour accrocher le (NTC) sur la pointe. Les premières réalisations ont été effectuées en « collant » sous un microscope optique un fagot de nanotube à l'aide d'un adhésif acrylique [Dai 1996 (2)]. Une autre approche consiste à appliquer un champ électrique entre la pointe et un substrat couvert de (NTC). Une dernière technique consiste à faire croître directement le nanotube sur la pointe par CVD. [Hafner 1999]

Les images obtenues à l'aide d'un (NTC) en guise de pointe affichent une meilleure résolution qu'avec une pointe conventionnelle à base de silicium [Guo 2004], [Stevens 2000]. De plus, la durée de vie de ce type de pointe est plus importante. Notons qu'il s'agit d'une des premières réalisations à base de nanotube à être commercialisée. [Gohier 2007]

I.6.2 Fibres à base de (NTC):

La réalisation de fibres en (NTC) possédant des propriétés mécaniques se rapprochant au maximum de celle du (NTC) individuel, intéresse au plus la communauté scientifique. Le premier défi dans ce domaine a été d'« assembler » les (NTC) sous forme de fibres macroscopiques. Une avancée majeure dans ce domaine a été effectuée en 2000 par Vigolo et al [Vigolo 2000] qui ont confectionné les premières fibres (d'un diamètre de $15\mu\text{m}$) de (SWNT) alignés et intégrés dans une matrice polymère (Fig I.15a). La procédure utilisée par Vigolo et al, a été améliorée et a permis de fabriquer des fibres composites de 100 mètres de longueur. [Dalton 2003]

Des fibres exclusivement constituées de (MWNT) ont aussi été réalisées. Pour ces dernières, la méthode consiste à « filer » des (NTC) orientés sur un substrat [Jiang 2002] ou bien directement les (NTC) produits pendant une synthèse par CVD (Chemical Vapor Deposition) [Li 2004]. Des « tresses » en (NTC) peuvent ainsi être produites par ces méthodes (Fig. I.16b). [Zhang 2004]

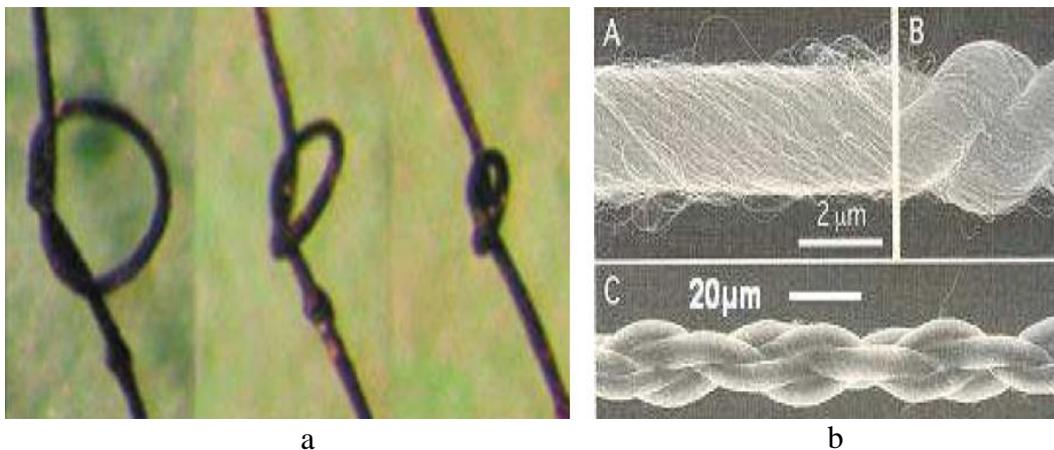


Figure I.16: a. Fibres composites à base de (SWNT) [Vigolo 2000], b. (A~C) Fibres et tresses à partir de (MWNT). [Zhang 2004]

Les valeurs restent cependant un ordre de grandeur inférieure aux valeurs mesurées sur des (*NTC*) individuels (4,2 *GPa* pour Kumar et al.) [Kumar 2002]. Les propriétés de conduction électrique sont néanmoins plus intéressantes pour les fibres constituées uniquement en (*NTC*). Ces fibres conductrices, possèdent une résistance cinq fois supérieure à celle de la soie d'araignée, cette résistance est une propriété

recherchée dans les textiles de protection comme les casques, les gants, les vêtements, de manutention ou les gilets pare-balles. [Gohier 2007]

I.7. risques et préventions:

Il y a encore très peu d'études sur la toxicité des nanotubes de carbone pour l'homme. Des organismes de Recherche et de Sécurité recommandent de prendre le plus de précautions possibles lors de leur manipulation.

La plupart des données toxicologiques proviennent d'études réalisées chez l'animal. Ces travaux sont de surcroît de portée limitée (expositions uniques de courte durée pour la détection rapide d'effets éventuels) et les caractéristiques physiques et chimiques des nanotubes utilisés y sont rarement précisées (types, granulométrie, présence de métaux, etc.). Or les propriétés toxicologiques des nanotubes de carbone sont directement corrélées à leurs caractéristiques physico-chimiques.[Ricaud 2008]

L'appareil respiratoire constitue la voie majeure de pénétration de nanotubes de carbone dans l'organisme humain. Leur finesse les rend volatiles et leur diamètre nanométrique leur permet de pénétrer dans les cellules du corps humain.

Toutes les étapes de la production allant de la réception et de l'entreposage des matières premières jusqu'au conditionnement et à l'expédition des produits finis, en passant par le transfert éventuel de produits intermédiaires peuvent risquer les salariés aux nanotubes de carbone. De même, leur utilisation et, plus précisément, leur manipulation, leur incorporation dans diverses matrices ainsi que l'usinage(découpe, polissage, nettoyage, perçage, etc.) de composites en contenant constituent des sources d'exposition supplémentaire. Leur nature (poudre, suspension dans un liquide, intégration dans une matrice polymère, etc.), les méthodes de synthèse utilisées, le degré de confinement des différentes étapes, la quantité de produits manipulée, les moyens de protection mis en place et la capacité des produits à se retrouver dans l'air ou sur les surfaces de travail constituent les principaux paramètres qui influent sur le degré de risque.

La zone de travail doit être signalisée, délimitée et restreinte aux seuls salariés directement concernés par la fabrication ou l'utilisation des nanotubes de carbone. Les zones susceptibles d'exposer aux nanotubes de carbone doivent être clairement identifiées et séparées des zones « propres ». Le passage des unes aux autres doit comporter les installations nécessaires au changement d'équipements de protection éventuels. L'installation de vestiaires doubles permet d'éviter tout risque de contamination à l'extérieur

des aires de travail. Les sols et les surfaces de travail (de préférence lisses avec des coins arrondis) doivent être régulièrement et soigneusement nettoyés à l'aide de linges humides et d'un aspirateur équipé de filtres à très haute efficacité afin de réduire la contamination des lieux et la remise en suspension dans l'air des nanotubes de carbone déjà déposés. Tout renversement doit être immédiatement nettoyé selon une procédure établie en fonction du risque. La présence sur les lieux de travail d'éviers et de douches est nécessaire pour la décontamination des régions cutanées exposées aux nanotubes de carbone.

Si le captage est insuffisant dans les ateliers de production ou d'utilisation des nanotubes de carbone, il est recommandé de porter un appareil de protection respiratoire ; en tenant compte du fait que les objets de taille nanométrique sont susceptibles de passer par la moindre fuite. Pour les travaux exposants (fabrication, manipulation, transfert de nanotubes de carbone, etc.), il est recommandé de porter un appareil isolant à apport d'air externe, à savoir un masque, une cagoule ou une combinaison complète à adduction d'air comprimé. [Hure 2002].

CHAPITRE II – PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES DES NANOTUBES DE CARBONE

II.1 Introduction:

Un nanotube de carbone est privilégié par rapport à d'autres substances pour ses propriétés mécaniques assez excellentes ; il est ($100\ 000$) fois plus fin qu'un cheveu, (100) fois plus résistant et (6) fois plus léger qu'un fil d'acier de mêmes dimensions. Ses avantages ne s'arrêtent pas là : il est aussi flexible et conducteur. De ses propriétés mécaniques remarquables, un nanotube de carbone peut avoir un module de Young plus élevé que ($1\ TPa$) [Lu 1997]. Des recherches intéressantes sur les nanotubes de carbone peuvent être trouvées dans plusieurs publications. [Torstensson 1899] [Gao 2001]

Les études sur les propriétés mécaniques des nanotubes de carbone ont mis l'accent à la fois sur l'étude expérimentale et l'étude théorique. Une des approches expérimentales est d'obtenir le module d'Young en mesurant les amplitudes de vibration thermique intrinsèque des nanotubes de carbone. Suivant cette approche, Une étude expérimentale sur un nanotube monocouche a été présentée par Krishnan et al. [Krishnan 1998], qui ont déclaré un module de Young de $1,3 (-0.4 /+ 0.6)\ TPa$ mesurées à partir de 27 (*SWCNTs*). Le modèle de poutre simplement appuyée a été utilisé par Salvetat et al. [Salvetat 1999 (1)] [Salvetat 1999 (2)] pour simuler les déflexions de (*SWCNT*) de tailles différentes. Ils ont constaté que le module de Young de (*MWCNT*) était d'environ ($1\ TPa$).

Dans l'étude théorique, les propriétés mécaniques de carbone nanotubes ont été simulées respectivement par la modélisation atomistique et la mécanique des milieux continus. Une méthode typique de la modélisation atomistique est la dynamique moléculaire classique (MD) est utilisée par Yao et al. [Yao 2002], ils ont choisi la fonction de Brenner pour étudier les propriétés mécaniques de (*SWCNT*) type armchair ayant un diamètre de $1,2\ nm$ et une longueur de $4,7\ nm$; un module de Young de ($3.62\ TPa$) et une résistance à la traction de ($9,6\ GPa$) ont été calculé. Cornwell et al. [Cornwell 1998] avec la méthode de Tersoff-Brenner, ont constaté que le module d'Young de nanotubes de carbone avec des rayons allant de ($0.5\ à\ 1\ nm$) varie de ($400\ à\ 800\ GPa$). Shintani et al. [Shintani 2003] ont obtenu la dépendance de coefficient de poisson avec la chiralité d'un nanotube monocouche par l'utilisation de la dynamique moléculaire (MD). Hernandez et al. [Hernandez 1998] ont trouvé par la dynamique moléculaire des (*SWCNTs*) de différentes chiralité, un module de Young et un coefficient de poisson de ($1.24TPa$ et 0.26) respectivement.

Dans ce chapitre on utilise le lien entre la mécanique moléculaire et la mécanique des solides, un modèle équivalent en énergie est utilisé pour l'étude des propriétés mécaniques d'un nanotube monocouche de carbone (*SWCNTs*). Au départ, on se base sur le principe de la mécanique moléculaire, l'énergie potentielle totale du système associé à la déformation des liaisons carbone-carbone et la variation d'angles des hexagones est obtenue. Puis, en considérant le (*SWCNT*) comme un cylindre mince soumis

à un chargement axial de traction ou un chargement de torsion, l'énergie de déformation est obtenue sur la base de la mécanique des milieux continus. Ensuite, on détermine le module de Young, le module de cisaillement et coefficient de poisson par l'égalité de l'énergie potentielle totale et l'énergie de déformation.

II.2 Le modèle de la mécanique moléculaire:

Un nanotube monocouche est constitué d'un seul feuillet de graphène enroulée sur lui-même, de manière à former un cylindre unique très long. Le nano-objet obtenu est alors unidimensionnel. Les atomes de carbone restent dans un état d'hybridation (sp^2). Sa géométrie est déterminée par son diamètre et son hélicité. Cette dernière dépend des conditions d'enroulement de la feuille de graphène. Elles sont définies par un vecteur de chiralité noté ($\vec{c\hbar}$) ou bien par un angle d'hélicité et un diamètre (*Fig.II.1*).

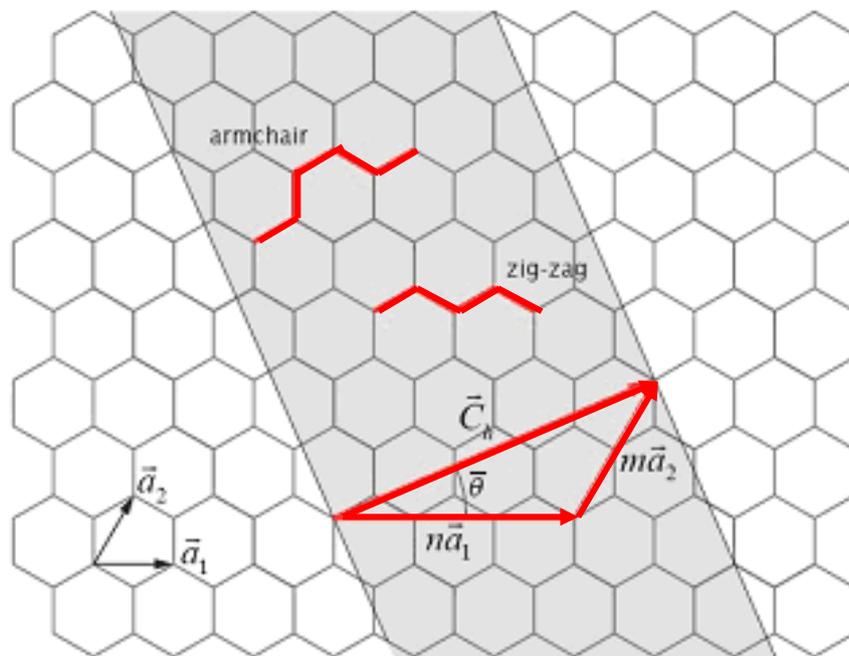


Fig.II.1: Structure d'un plan de graphène en deux dimensions. Le réseau hexagonal est décrit à partir des deux vecteurs de base (\vec{a}_1) et (\vec{a}_2) [Yongdong 2006].

Une feuille de graphène est un pavage hexagonal à deux dimensions constitué d'atomes de carbone de côté ($l_0 = 0.142nm$) (*Fig.II.1*) [Yongdong 2006].

La feuille de graphène possède deux atomes par maille. Le nanotube est obtenu en pliant la feuille de graphène de façon à faire coïncider deux sites cristallographiques équivalents reliés par le vecteur chiral ($\vec{c\hbar}$). [Izard 2004]

Le vecteur chiral (\vec{ch}) est une combinaison linéaire des vecteurs de base du graphène (\vec{a}_1 et \vec{a}_2):

$$\vec{ch} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (\text{II.1})$$

Où (n, m) est un couple de nombres entiers. Ce couple (n, m) définit entièrement la structure du nanotube. [Izard 2004]

Il existe deux bases possibles pour définir des coordonnées sur un plan hexagonal comme le graphène. L'angle entre les vecteurs de base (\vec{a}_1) et (\vec{a}_2) peut être de (60°) ou de (120°) . Hamada [Hamada 1992] a utilisé une base de (120°) pour définir les coordonnées des nanotubes, tandis que Dunlap [Dunlap 1992] a utilisé une base de (60°) .

L'angle ($\bar{\theta}$) entre (\vec{ch}) et le vecteur de base (\vec{a}_1) est appelé angle chiral. Les nanotubes se divisent en deux familles : les nanotubes chiraux et les nanotubes non chiraux. Les nanotubes non chiraux possèdent une symétrie miroir, ce qui n'est pas le cas des nanotubes chiraux. Les hexagones dessinent une hélice sur la surface du nanotube (*Fig.I.7.a*), (*Fig.II.2*). [Izard 2004]

Les nanotubes peuvent être classés selon leur hélicité. Il existe trois hélicités différentes :

- $\bar{\theta} = 0^\circ$ ($n=0$ ou $m=0$) : le nanotube est non chiral, de type zigzag.
- $\bar{\theta} = 30^\circ$ ($n=m$) : le nanotube est non chiral, de type chaise ou armchair.
- $\bar{\theta} \neq 0^\circ$ et $\neq 30^\circ$: le nanotube est chiral.

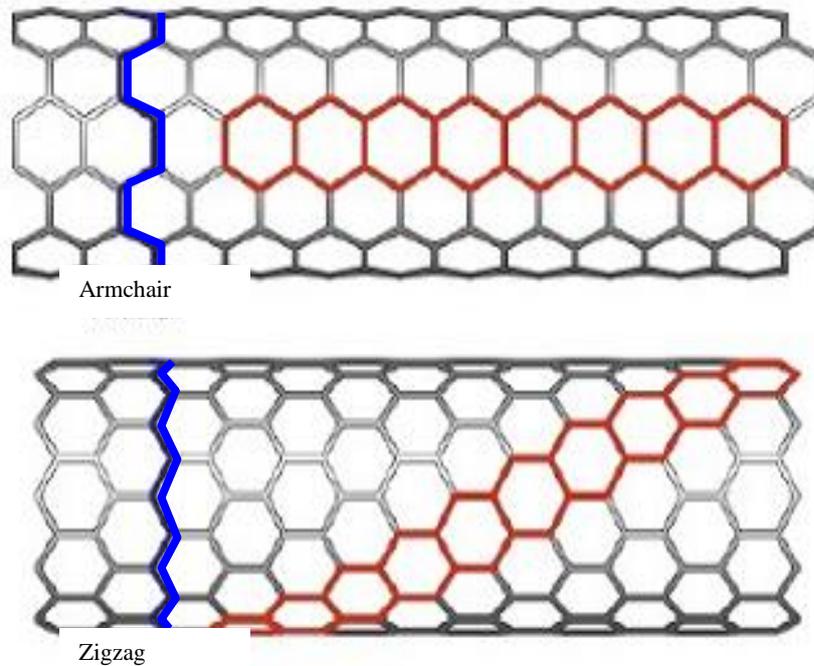


Fig.II.3: Exemples d'hélices dessinées(en rouge) à la surface des nanotubes [Izard 2004].

Il existe un certain nombre de relations permettant de calculer le vecteur de chiralité, le diamètre et l'angle de chiralité, à partir de la seule connaissance du couple (n, m) : [Bernard 2007]

- vecteur (\vec{ch}) .

$$\|\vec{ch}\| = l_0 \sqrt{3} \sqrt{m^2 + n^2 + mn} \quad (\text{II.2})$$

- On déduit l'expression du diamètre du nanotube.

$$D = l_0 \sqrt{3} \frac{\sqrt{m^2 + n^2 + mn}}{\pi} \quad (\text{II.3})$$

Où (l_0) la longueur de la liaison carbone-carbone ($l_0 = 1,42$ nm). [Bernard 2007]

- On peut aussi définir de la même manière l'angle de chiralité $(\bar{\theta})$ qui est l'angle entre les vecteurs (\vec{ch}) et (\vec{a}_1) .

$$\bar{\theta} = \arctan \frac{\sqrt{3}m}{m+2n} = \arccos \frac{2n+m}{2\sqrt{m^2+n^2+mn}} \quad (\text{II.4})$$

Du point de vue mécanique moléculaire, un nanotube de carbone est considéré comme une grande molécule constituée par des atomes de carbone. Les noyaux des atomes sont considérés comme des points matériels. Leurs mouvements sont régis par un champ de force, qui est généralisé par l'interaction (électron-noyau) et (noyau-noyau). Habituellement, le champ de force est exprimé sous la forme d'énergie potentielle. Elle dépend uniquement des positions relatives des noyaux. L'expression générale de l'énergie potentielle totale, en omettant l'interaction électrostatique, est la somme des énergies dues à des interactions liées ($c-c$) et non-liées (van der Walls). [Rappe 1992]

$$U = U_\rho + U_{\bar{\theta}} + U_\tau + U_w + U_{vdw} \quad (\text{II.5})$$

Où $(U_\rho, U_{\bar{\theta}}, U_\tau, U_w)$ sont des énergies associées aux liaisons allongées, la variation des angles, torsion et inversion, respectivement, (U_{vdw}) est l'énergie due à l'interaction non-liée de van der Walls. [Wu 2006]

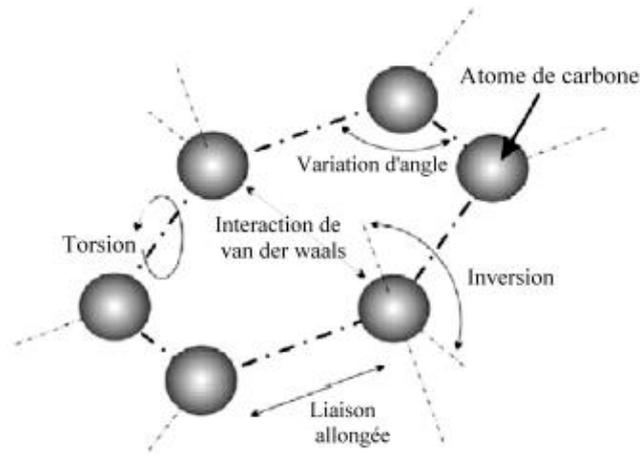


Fig.II.4: L'énergie due à des interactions liées (c-c) et non-liées (van der Walls) [Mahmood 2010]

Généralement pour un nanotube monocouche (SWCNT) soumis à des chargements de traction et de torsion, l'énergie due à l'interaction non-liée de van der Walls est négligeable, tandis que l'énergie due à la torsion et l'inversion reste insignifiante par rapport à l'énergie potentielle inter-atomes. Seules les énergies associées aux liaisons allongées et la variation des angles sont importantes dans le système énergétique potentiel total. Par conséquent, l'équation. (II.5) peut être simplifiée comme suit:

$$U = U\rho + U\theta = \frac{1}{2} \sum_i K_i (dR_i)^2 + \frac{1}{2} \sum_j C_j (d\theta_j)^2 \quad (\text{II.6})$$

Où (dR_i et K_i) sont respectivement l'allongement et la constante d'allongement de la liaison (i), et ($d\theta_j$ et C_j) sont la variation d'angle (j) et sa constante. Ainsi nous pouvons obtenir la force d'allongement et l'équation d'équilibre du moment de torsion.

$$F = KdR, \quad M = Cd\theta \quad (\text{II.7})$$

II.3 Les propriétés mécaniques des nanotubes monocouches (SWCNT's):

La liaison (C-C) du graphite est une liaison chimique forte. C'est la raison pour laquelle les nanotubes ont des propriétés mécaniques uniques [Heath 1985].

Depuis leur découverte, de nombreux travaux théoriques ont prévu un module d'Young très élevé pour les nanotubes. Lu, en utilisant un modèle empirique, prévoit un module de Young de (1.06 TPa) pour les nanotubes monoparois. Il montre aussi que le module de Young, ainsi que d'autres constantes élastiques (cisaillement) sont dépendants des caractéristiques géométriques des tubes (chiralité, diamètre...), [Wu 2006].

Un nanotube monocouche peut être considéré comme un cylindre mince doté d'une structure moléculaire liée par des liaisons carbone-carbone. Pour obtenir les équations d'équilibre de cette structure, on la substitue par le modèle de structure représenté dans la (Fig.II.5), dont on peut étudier selon les cas de figure les propriétés mécaniques telle que le module de Young, le module de cisaillement et le coefficient de Poisson.

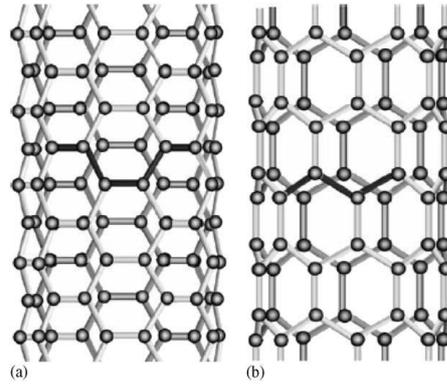


Fig.II.5: Schéma représente: (a) un nanotube armchair et (b) un nanotube zigzag.

II.3.1 module de Young:

On va d'abord étudier les caractéristiques mécaniques d'un nanotube de type armchair soumis à une charge axiale. Selon la structure, (Fig.II.6a), les liaisons carbone-carbone et leurs angles peuvent être classées en deux types :les liaisons (*a* et *b*), et les angles (α et β) . Pour un nanotubes de carbone type armchair, nous supposons que la force exercée sur la liaison (*b*) suivant la direction axiale est (*f*) (Fig.II.6b).

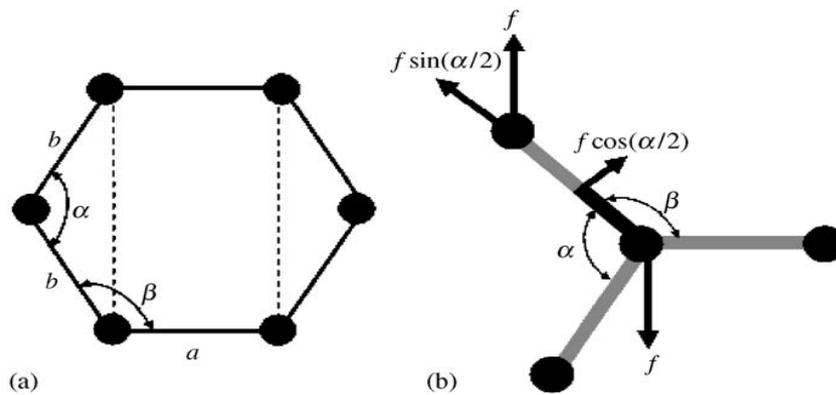


Fig.II.6: Schéma d'un nanotube de carbone type armchair: (a) hexagonale (b) distribution de la Force en liaison [Wu 2006].

Dans le plan (*b-b*), la force (*f*) a deux composantes : l'une est ($f = \sin(\alpha/2)$) le long de la direction de la liaison, et l'autre ($f = \cos(\alpha/2)$) est perpendiculaire à la liaison. Par l'utilisation de l'équation d'équilibre des forces, l'allongement (*db*) de la liaison est:

$$db = \frac{1}{K} f \sin(\alpha/2) \quad (II.8)$$

Pour ($\alpha = 120^\circ$), l'énergie due a l'allongement de la liaison peut être écrite comme suit:

$$U_\rho = \frac{3f^2}{8K} \quad (II.9)$$

Les expressions de la variation d'angles $d\alpha$ et $(d\beta)$ doivent être trouvés en premier lieu, afin d'obtenir l'énergie. La liaison (b) est divisée en deux moitiés, de sorte que le moment de rotation exercé sur la moitié droite dans le plan ($b-b$) est $(fl_0 \cos(\alpha/2)/2)$.

D'autre part, le moment de rotation produit par la variance d'angle $d\alpha$ dans le plan ($b-b$) est $(Cd\alpha)$, et par la variance d'angle $(d\beta)$ dans le plan ($a-b$) est $(Cd\beta)$. Ainsi l'équation d'équilibre des moments peut être écrite comme suit:

$$\frac{fl_0}{2} \cos(\alpha/2) = Cd\alpha + Cd\beta \cos \varphi \quad (\text{II.10})$$

Où φ est l'angle de torsion entre le plan ($b-b$) et le plan ($a-b$), qui peut être calculé par.

$$\cos \varphi = \frac{\tan(\alpha/2)}{\tan \beta} \quad (\text{II.11})$$

Sur la base de la structure géométrique de (n, n) des nanotubes, la relation entre les angles (α et β) peut être écrite comme suit:

$$\cos \beta = -\cos(\alpha/2) \cos(\pi/2n) \quad (\text{II.12})$$

La dérivation des deux côtés de l'équation. (II.12), on obtient.

$$d\beta = -\frac{\sin(\alpha/2)}{2 \sin \beta} \cos(\pi/2n) d\alpha \quad (\text{II.13})$$

En substituant l'équation. (II.13) dans l'équation. (II.10), l'expression de $(d\alpha)$ peut être écrite comme suit:

$$d\alpha = \frac{fl_0 \lambda_{a1}}{C} \quad (\text{II.14})$$

D'ou :

$$\lambda_{a1} = \frac{\sin^2 \beta \cos^2(\alpha/2)}{2 \sin^2 \beta \cos(\alpha/2) - \sin^2(\alpha/2) \cos \beta \cos(\pi/2n)} \quad (\text{II.15})$$

Pour $(\alpha=120^\circ)$, l'équation. (II.15) peut être simplifiée comme suit:

$$\lambda_{a1} = \frac{4 - \cos^2(\pi/2n)}{16 + 2 \cos^2(\pi/2n)} \quad (\text{II.16})$$

Donc, l'énergie associée à la variation angle $(d\alpha)$ est.

$$U_{\theta\alpha} = \frac{1}{2} C (d\alpha)^2$$

$$U_{\theta\alpha} = \frac{1}{2} \frac{f^2 l_0^2 \lambda_{a1}^2}{C} \quad (\text{II.17})$$

En substituant l'équation (II.14) dans l'équation. (II.13), et par l'utilisation l'équation. (II.6), l'énergie associée à la variation angle ($d\beta$) peut être obtenu comme suit:

$$U_{\theta\beta} = \frac{1}{2} \frac{f^2 l_0^2 \lambda_{a2}^2}{C} \quad (\text{II.18})$$

D'où:

$$\Rightarrow \lambda_{a2} = \frac{\sqrt{12 - 3 \cos^2(\pi/2n)} \cos(\pi/2n)}{32 + 4 \cos^2(\pi/2n)} \quad (\text{II.19})$$

Pour un nanotube de carbone type armchair, le nombre des hexagonales le long de la direction circonférentielle est ($2n$). En supposant que le nombre des hexagones le long de la direction axiale est (N'), par conséquence, on a ($2N'n$) hexagones de carbone, et ($4N'n$) liaison (b). Il y a aussi ($4N'n$) angles (α) et ($8N'n$) angles (β) dans un nanotubes de carbone type armchair. Pour un hexagone de carbone composé de deux angles (α) et quatre angles (β), l'énergie potentielle total d'un nanotube de carbone de type armchair est: [Wu 2006]

$$U = \frac{3f^2 (4N'n)}{8K} + \frac{1}{2} \frac{f^2 l_0^2 \lambda_{a1}^2 (4N'n)}{C} + \frac{1}{2} \frac{f^2 l_0^2 \lambda_{a2}^2 (8N'n)}{C}$$

$$U = \frac{3N'n f^2}{2K} + \frac{2N'n f^2 l_0^2 \lambda_{a1}^2}{C} + \frac{4N'n f^2 l_0^2 \lambda_{a2}^2}{C} \quad (\text{II.20})$$

Selon la mécanique des matériaux, l'énergie de déformation d'un cylindre mince de longueur (L) soumis à une force axiale (F) est:

$$U_b = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{F^2}{E_a A} dL = \frac{1}{2} \frac{F^2 L}{E_a A} \quad (\text{II.21})$$

Basé sur les précédentes hypothèses, nous pouvons constater que la longueur d'un nanotube de carbone (n, n) est, ($L = \sqrt{3} N' l_0$), et la force axiale ($F = 2nf$). En utilisant l'équation (II.3), la surface de la section du nanotube peut être écrit comme suit : ($A = 2\pi R t = 3n l_0 t$) (t est l'épaisseur de la couche du nanotube). Ainsi l'expression de l'énergie de déformation d'un cylindre mince correspondant à un nanotube type armchair est:

$$U_b = \frac{2N'n f^2}{\sqrt{3} E_a t} \quad (\text{II.22})$$

En comparant l'énergie potentielle moléculaire total et l'énergie de déformation d'un nanotube type armchair, le module d'Young équivalent peut être obtenu comme suit: [Wu 2006]

$$\frac{2N'n f^2}{\sqrt{3} E_a t} = \frac{3N'n f^2}{2K} + \frac{2N'n f^2 l_0^2 \lambda_{a1}^2}{C} + \frac{4N'n f^2 l_0^2 \lambda_{a2}^2}{C}$$

$$E_a = \frac{4\sqrt{3}}{3} \frac{KC}{3Ct + 4Kl_0^2t(\lambda_{a1}^2 + 2\lambda_{a2}^2)} \quad (\text{II.23})$$

Pour $n \rightarrow \infty$, l'expression du module de Young d'un graphite est donnée par.

$$E_s = \frac{8\sqrt{3}KC}{18Ct + Kl_0^2t} \quad (\text{II.24})$$

Pour un nanotube zigzag, les positions des liaisons et des angles sont présentées sur la (fig III. 7a). Il est vu que l'énergie potentielle n'est pas seulement associée à l'allongement de la liaison b, mais aussi avec la liaison a. Donc, l'équation d'équilibre des forces et des moments peut être obtenue comme suit:

$$f \cos(\pi - \beta) = Kdb \quad (\text{II.25})$$

$$2f = Kda \quad (\text{II.26})$$

$$\frac{fl_0}{2} \sin(\pi - \beta) = Cd\beta + Cd\alpha \cos \varphi \quad (\text{II.27})$$

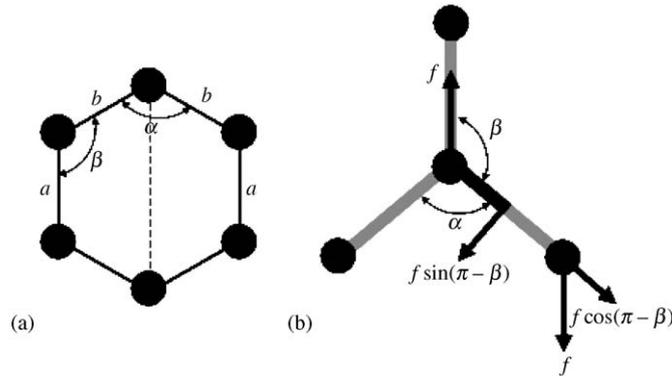


Fig.II.7: Schéma d'un nanotube de carbone type zigzag ($n, 0$): (a) l'hexagonale (b) répartition de la force en liaison [Wu 2006].

Où (da) et (db) sont les allongements des liaisons (a et b). La relation entre les angles (α et β) est:

$$\sin(\alpha/2) = \sin \beta \cos(\pi/2n) \quad (\text{II.28})$$

De même, l'énergie potentielle associée à l'allongement des liaisons (a et b) sont:

$$U_{pb} = \frac{1}{2} K(db)^2 = \frac{f^2}{8K}, \quad U_{pa} = \frac{1}{2} K(da)^2 = \frac{2f^2}{K} \quad (\text{II.29})$$

Et les l'énergie potentielle associée à la variation des angles (da et $d\beta$) sont:

$$U_{\theta\alpha} = \frac{1}{2} \frac{f^2 l_0^2 \lambda_{z1}^2}{C}, \quad U_{\theta\beta} = \frac{1}{2} \frac{f^2 l_0^2 \lambda_{z2}^2}{C} \quad (\text{II.30})$$

Où

$$\lambda_{z1} = \frac{-3\sqrt{4-3\cos^2(\pi/2n)}\cos(\pi/2n)}{8\sqrt{3}-2\sqrt{3}\cos^2(\pi/2n)} \quad (\text{II.31})$$

$$\lambda_{z2} = \frac{12-9\cos^2(\pi/2n)}{16\sqrt{3}-4\sqrt{3}\cos^2(\pi/2n)} \quad (\text{II.32})$$

Ainsi, sur la base de la structure d'un nanotube type zigzag, l'énergie potentielle moléculaire totale peut être obtenu comme suit:

$$U = \frac{9N'nf^2}{4K} + \frac{N'nf^2l_0^2\lambda_{z1}^2}{C} + \frac{2N'nf^2l_0^2\lambda_{z2}^2}{C} \quad (\text{II.33})$$

L'énergie de déformation d'un cylindre mince correspondant à un nanotube type zigzag est:

$$U_b = \frac{\sqrt{3}N'nf^2}{E_z t} \quad (\text{II.34})$$

Donc, le module de Young équivalent d'un nanotube type zigzag est [Wu 2006]:

$$\frac{\sqrt{3}N'nf^2}{E_z t} = \frac{9N'nf^2}{4K} + \frac{N'nf^2l_0^2\lambda_{z1}^2}{C} + \frac{2N'nf^2l_0^2\lambda_{z2}^2}{C}$$

$$E_z = \frac{4\sqrt{3}KC}{9Ct + 4Kl_0^2t(\lambda_{z1}^2 + 2\lambda_{z2}^2)} \quad (\text{II.35})$$

Pour $(n \rightarrow \infty)$ dans $(\lambda_{z1}$ et $\lambda_{z2})$ on peut obtenir le module de Young de graphite à nouveau.

II.3.2 Le coefficient de cisaillement:

De même, un nanotube de carbone type armchair soumis à un chargement de torsion, le modèle analytique est présenté sur la (Fig.II.8). Lorsque les contraintes de cisaillement dans les deux directions sont les même, la relation entre $(f_1$ et $f_2)$ est comme suit:

$$f_1 = \frac{\sqrt{3}}{3} f_2 \quad (\text{II.36})$$

L'équation d'équilibre des forces est:

$$f_1 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) + f_2 \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) = Kdb \quad (\text{II.37})$$

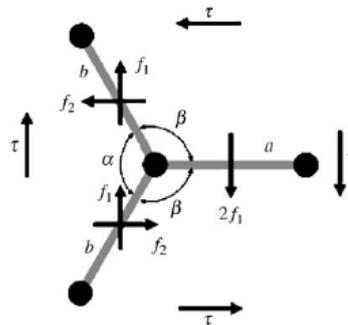


Fig.II.8: Schéma présente la distribution des forces d'un nanotube type armchair. [Wu 2006]

Pour ($\alpha = 120^\circ$) l'énergie associée à l'allongement de la liaison peut être obtenue en utilisant les équations (II.37) et (II.6):

$$U_\rho = \frac{1}{2} K (db)^2 = \frac{1}{2} \frac{f_2^2}{K} \quad (\text{II.38})$$

L'équation d'équilibre des moments exercé sur la moitié droite de la liaison (b) est:

$$f_2 \frac{l_0}{2} \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) - f_1 \frac{l_0}{2} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) = Cd\beta \cos \varphi \quad (\text{II.39})$$

Par l'utilisation des équations (II.39), (II.11) et (II.12) la variation d'angle ($d\beta$) peut être obtenue comme suit:

$$d\beta = -\frac{f_2 l_0 \lambda_a}{6C} \quad (\text{II.40})$$

Donc l'énergie associée à la variation d'angle ($d\beta$) est:

$$U_\theta = \frac{f_2^2 l_0^2 \lambda_a^2}{72C} \quad (\text{II.41})$$

Où

$$\lambda_a = \sqrt{(4/\cos^2(\pi/2n)) - 1} \quad (\text{II.42})$$

Ainsi, l'énergie potentielle moléculaire totale d'un nanotube type armchair peut être obtenu comme suit:

$$U = \frac{2N'nf_2^2}{K} + \frac{N'nf_2^2 l_0^2 \lambda_a^2}{9C} \quad (\text{II.43})$$

L'énergie de déformation due à la torsion d'un cylindre mince correspondant à un nanotube type armchair est:

$$U_b = \int_L \frac{1}{2} \frac{T^2}{G_a J} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{G_a J} \quad (\text{II.44})$$

Ou (G_a) est le module de cisaillement, ($T = 2nf_2 r$) est le moment de torsion et ($J = 2\pi r^3 t$) est la constante de torsion correspondant à un cylindre mince.

Substituant l'expression de (T , J et r) dans l'équation (II.44) on obtient :

$$U = \frac{2\sqrt{3}N'nf_2^2}{3G_a t} \quad (\text{II.45})$$

Le module de cisaillement équivalent d'un nanotube de carbone de type armchair peut être obtenue par l'égalité des équations (II.43) et (II.45). [Wu 2006]

$$G_a = \frac{6\sqrt{3}KC}{(18C + Kl_0^2\lambda_a^2) \times t} \quad (\text{II.46})$$

Pour ($n \rightarrow \infty$) dans l'expression de (λ_a) on peut obtenir le module de cisaillement du graphite :

$$G_g = \frac{2\sqrt{3}KC}{(6C + Kl_0^2) \times t} \quad (\text{II.47})$$

La (fig III.9) représente le modèle analytique un nanotube de carbone type zigzag soumis à un chargement de torsion. Les équations d'équilibres des forces et des moments sont données par :

$$f_1 \cos(\pi - \beta) + f_2 \sin(\pi - \beta) = Kdb \quad (\text{II.48})$$

$$2f_2 \frac{l_0}{2} = 2Cd\beta \cos \varphi \quad (\text{II.49})$$

$$f_1 = \sqrt{3}f_2 \quad (\text{II.50})$$

De même, l'énergie potentielle associée aux liaisons et à la variation d'angle ($d\beta$) d'un nanotube type zigzag peut être obtenu comme suit:

$$U\rho = \frac{3f^2}{2K} \quad (\text{II.51})$$

$$U_\theta = \frac{3f^2 l_0^2 \lambda_z^2}{8C} \quad (\text{II.52})$$

Où

$$\lambda_z = \sqrt{(4/3 \cos^2(\pi/2n)) - 1} \quad (\text{II.53})$$

Ainsi, l'énergie potentielle moléculaire totale d'un nanotube type zigzag peut être obtenu comme suit:

$$U = \frac{3N'nf^2}{K} + \frac{3N'nf^2 l_0^2 \lambda_z^2}{2C} \quad (\text{II.54})$$

L'énergie de déformation due à la torsion d'un cylindre mince correspondant à un nanotube type zigzag est:

$$U_b = \frac{\sqrt{3}f^2 N'n}{Gt} \quad (\text{II.55})$$

Le module de cisaillement d'un nanotube de carbone type zigzag peut être obtenue comme suit:

$$G_z = \frac{2\sqrt{3}KC}{6Ct + 3Kl_0^2 \lambda_z^2 t} \quad (\text{II.56})$$

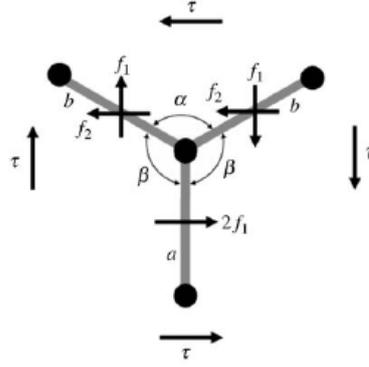


Fig.II.9: Schéma présente la distribution des forces d'un nanotube type zigzag. [Wu 2006]

II.3.3 Coefficient de poisson:

Pour obtenir le coefficient de poisson, la déformation axiale (ε) et la déformation circonférentiel (ε') d'un nanotube de carbone type armchair sont données par :

$$\varepsilon = \frac{d[b \sin(\alpha/2)]}{b \sin(\alpha/2)} \quad (\text{II.57})$$

$$\varepsilon' = \frac{d[a + b \cos(\alpha/2)]}{a + b \cos(\alpha/2)} \quad (\text{II.58})$$

Substituant l'expression de $(db \text{ et } d\alpha)$ dans les équations précédentes considérant les relations $(a = b = l_0 \text{ et } \alpha = 120^\circ)$ on obtient :

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{f}{Kl_0} + \frac{\sqrt{3}}{6} \frac{fl_0 \lambda_{a1}}{C} \quad (\text{II.59})$$

$$\varepsilon' = \frac{\sqrt{3}}{6} f \left(\frac{1}{Kl_0} - \frac{l_0 \lambda_{a1}}{C} \right) \quad (\text{II.60})$$

A partir de la définition du coefficient de poisson nous avons:

$$\nu = -\frac{\varepsilon'}{\varepsilon} = \frac{l_0^2 \lambda_{a1} K - C}{l_0^2 \lambda_{a1} K + 3C} \quad (\text{II.61})$$

Pour un nanotube de carbone type zigzag La déformation axiale (ε) et la déformation circonférentiel (ε') est comme suit:

$$\varepsilon = \frac{1}{6} f \left(\frac{9}{2Kl_0} + \frac{\sqrt{3}l_0 \lambda_{z2}}{C} \right) \quad (\text{II.62})$$

$$\varepsilon' = \frac{f}{4Kl_0} - \frac{\sqrt{3}fl_0 \lambda_{z2}}{6C} \quad (\text{II.63})$$

L'expression du coefficient de poisson d'un nanotube de carbone type zigzag est comme suit:

$$\nu = -\frac{\varepsilon'}{\varepsilon} = \frac{l_0^2 \lambda_{z2} K - \frac{\sqrt{3}}{2} C}{l_0^2 \lambda_{z2} K + \frac{3\sqrt{3}}{2} C} \quad (\text{II.64})$$

A partir des équations (II.61) et (II.64) L'expression du coefficient de poisson d'un graphite est donnée par cette relation. [Wu 2006]

$$\nu = \frac{l_0^2 K - 6C}{l_0^2 K + 18C} \quad (\text{II.65})$$

II.4 L'effet de la température sur le module de Young d'un nanotube de carbone monocouche (SWNT)

Sous les changements de température d'environnements, le module de Young peut être une fonction de la variation de température comme suit: [Mallick 1997] [Shen 2001]

$$E_N = E_N^0 (1 - 0.0005\theta) \quad (\text{II.66})$$

Où (E_N^0, θ) sont respectivement le module Young du nanotube de carbone monocouche sous la référence température et le changement de la température.

Dans cette étude les constantes d'allongement de la liaison et la variation d'angle sont: $(K/2 = 46900 \text{ kcal/mol/nm}^2, C/2 = 63 \text{ kcal/mol/rad}^2)$, la valeur expérimentale du module de Young de graphite est (1.06 TPa) [Thostenson 1899], et l'épaisseur de la couche du nanotube est $(t = 0.258 \text{ nm})$.

II.5 Conclusion

Les nanotubes sont dotés de bonnes propriétés mécaniques qui leurs placent au sommet des préoccupations des chercheurs, et des investisseurs dans les domaines des nanotechnologies récentes.

CHAPITRE III: FORMULATION THÉORIQUE

III.1.Introduction

Les vibrations structurales sont très indésirables puisqu'elles peuvent causer des problèmes tels que la fatigue structurale, la transmission des vibrations à d'autres systèmes, le bruit interne ou externe dû au rayonnement acoustique, etc... Néanmoins, il est possible de limiter leurs effets grâce à des techniques de réduction de vibrations, dont on peut citer deux :

La première technique est l'annulation (ou suppression), utilisée surtout pour éliminer le bruit engendré par la vibration et non la vibration elle-même, elle se fait par la production d'une source de bruit secondaire émettant le négatif du bruit primaire afin d'aboutir à une annulation de l'effet des deux sources.

La seconde est l'isolation qui consiste à éviter la transmission des vibrations d'un système à un autre sans éliminer les vibrations du système émetteur.

D'un point de vue historique, Rayleigh, en 1877, fut l'un des premiers, [Strutt 1945]) qui ont formulé la théorie des vibrations telle qu'on la connaît aujourd'hui. Il a introduit le concept fondamental d'oscillations d'un système linéaire autour d'une position d'équilibre, et la notion de fréquences et de modes propres, montrant leur existence pour des systèmes discrets ou continus. Ensuite, au cours des années vingt du siècle dernier, les besoins de structures légères en aéronautique ont permis de développer l'étude des problèmes de vibration et de dynamique. Il s'agissait entre autres de prédire le comportement aéroélastique des avions.

Ainsi pendant une quarantaine d'années, on développa des méthodes plutôt analytiques avec des structures définies par un petit nombre de degrés de liberté. Puis, la naissance et le développement de l'informatique au cours des années soixante du même siècle a entraîné l'apparition des méthodes matricielles puis le développement de codes éléments finis, s'adaptant à l'augmentation constante de la taille des systèmes traités. Ainsi on est aujourd'hui capable d'élaborer des modèles numériques performants pour prédire le comportement de structures en dynamique. De même, l'informatique a beaucoup apporté au traitement de résultats expérimentaux, avec entre autres le développement de techniques d'analyse modale (depuis 1960) et celui de logiciels dédiés à l'analyse vibratoire expérimentale de structures.

Dans ce chapitre, nous présenterons l'effet thermique sur la vibration transversale d'un nanotube de carbone monocouche de types zigzag et armchair, on a commencé par le développement du modèle élastique non local de la poutre de REDY, ensuite, de différents paramètres qui influent sur la vibration ont été utilisés, comme le rapport de petite échelle (e_0a), le rapport (L/d), le nombre de mode (k).

III. 2-Etude des caractéristiques vibratoires des nanotubes de carbones

III.2.1.Théories de base

Il y a plusieurs théories de poutre pour montrer l'aspect d'une poutre sous influence de différents contraintes. Considérant une poutre uniforme de longueur L , de section circulaire de diamètre D et d'épaisseur effective h soit le système de coordonnées (x,y,z) , ou l'axe des x est pris le long de l'axe médiane de la poutre, l'axe des y en direction de sa largeur, et l'axe des z est en direction de son hauteur. L'origine des coordonnées est au bout gauche de la poutre. Cette étude est basée sur le model non-local de Reddy destiné à expliquer les relations entre les contraintes et les déformations qui résultent dans une poutre. On suppose que la déformation de la poutre ait lieu dans le plan $x-z$. alors les composantes (u,y,w) , le long des axes x,y,z à l'instant t ne dépend que des coordonnées x et z et t , et le champs de déplacement peut être régit par les relations suivantes :

$$u(x, z, t) = -z \frac{dw(x,t)}{dx} + \left(z - \frac{4z^3}{3h^2} \right) \left(\frac{dw(x,t)}{dx} + \varphi(x, t) \right) \quad (\text{III.1})$$

$$y(x, z, t) = 0 \quad (\text{III.2})$$

$$w(x, z, t) = w(x, t) \quad (\text{III.3})$$

Où : $\varphi(x, t)$ est le déplacement angulaire de la section de la poutre prise en ce point par rapport l'axe oz .

III.2.2.Théorie de poutre de Reddy

Reddy[Reddy 1984], [Heyliger1988] ont développé une théorie de poutres de troisième ordre pour la déformation de cisaillement, dans laquelle la contrainte de cisaillement transversal a une distribution parabolique en respectant l'épaisseur de la poutre, sans aucun facteur de correction. Les déformations peuvent être données par :

$$\varepsilon_{x,x} = \frac{\partial u}{\partial x} = z \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{4z^3}{3h^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) \quad (\text{III.4-a})$$

$$\gamma_{x,z} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = \left(1 - \frac{4z^2}{h^2} \right) \left(\varphi + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad (\text{III.4-b})$$

L'équation constitutive non locale simplifiée pour la contrainte et déformation normale dans un cas unidimensionnel est donné par :

$$\sigma_{x,x} - (e_0 a)^2 \frac{d^2 \sigma_{x,x}}{dx^2} = E \varepsilon_{x,x} \quad (\text{III. 5})$$

où σ_{xx} est la contrainte normale, ε_{xx} la déformation normale, E Module de Young et $e_0 a$ le coefficient de balance qui incorpore l'effet d'échelle réduite. Noter que a est la caractéristique interne de la longueur

(par exemple paramètre de maille, longueur de bonde de (c-c) et e_0 est une constante appropriée à chaque matériau. La relation constitutive pour la contrainte de cisaillement et la déformation, cependant, est la même que dans la théorie locale, c'est-à-dire :

$$\sigma_{x,z} - (e_0 a)^2 \frac{d^2 \sigma_{x,z}}{dx^2} = G \gamma_{x,z} \quad (\text{III. 6})$$

Le principe des déplacements virtuels Suppose que si un corps est en équilibre, le travail virtuel total effectué doit être nul:

$$\delta W = \delta U + \delta V - \delta K = 0 \quad (\text{III. 7})$$

L'expression de l'énergie virtuelle interne des contraintes δU est donnée par :

$$\delta U = \iint_{0A}^L (\sigma_{x,x} \delta \varepsilon_{x,x} + \sigma_{x,z} \delta \gamma_{x,z}) dA dx \quad (\text{III. 8})$$

où σ_{xx} est la contrainte normal, σ_{xz} la contrainte transversale de cisaillement, L la longueur du nanotube et A la section.

Supposant que le tube est soumis à une élévation de température ΔT qui y engendre une charge axiale compressive N_t , alors l'énergie potentielle virtuelle δV de la charge axiale est donnée par :

$$\delta V = \int_0^L -N_t \frac{dw}{dx} \left(\frac{d\delta w}{dx} \right) dx \quad (\text{III. 9})$$

l'énergie cinétique de vibration des particules agitées dans le CNT est donnée par :

$$\delta K = \iint_{0A}^L \rho \left(\frac{du}{dt} \delta \frac{du}{dt} + \frac{dw}{dt} \delta \frac{dw}{dt} \right) dA dx \quad (\text{III. 10})$$

Ainsi, vue l'équation (III. 7); et tenant compte des équations : (III. 4), (III. 5), (III. 6), (III. 8), (III. 9), (III. 10), les équations différentielles élasto-dynamiques qui régissent la vibration thermique des SWCNTs basées sur le model non local de Reddy [Reddy 2007] et sur Le principe de travaux virtuels sont données par:

$$\begin{aligned} G\tilde{A} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) - N_t \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[w - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right] + c_1 \left[EJ \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} - c_1 EK \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} + \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right) \right] = m_0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + \\ c_1 m_4 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial t^2} - c_1^2 m_6 \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial t} \right) - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[m_0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + c_1 m_4 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x \partial t^2} - c_1^2 m_6 \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial t} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{III.11a})$$

$$\begin{aligned} E\hat{I} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - c_1 EJ \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) - G\tilde{A} \left(\phi + \frac{\partial w}{\partial x} \right) = \hat{m}_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c_1 \hat{m}_4 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} \right) - \\ (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\hat{m}_2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c_1 \hat{m}_4 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{III.11b})$$

Où $c_1 = 4/3h^2$ et h est la hauteur de la poutre, x la coordonnée axiale, w le déplacement transversal

flexible de l'axe neutre du SWCNT et ϕ est l'angle de rotation de la section de la poutre. E et G sont respectivement le module de Young et le module de cisaillement. N_t est la force axiale résultant de l'effet thermique.

Les variables additionnels introduits dans l'équation de mouvement sont données par:

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= \bar{A} - c_2 \bar{I}, \quad \bar{I} = I - c_2 J, \quad \bar{A} = A - c_2 I, \quad \hat{I} = I - c_1 J, \quad \hat{J} = J - c_1 K \\ \hat{m}_2 &= m_2 - c_1 m_4, \quad \hat{m}_4 = m_4 - c_1 m_6, \quad (m_0, m_2, m_4, m_6) = \int_A \rho (1, z^2, z^4, z^6) dA \end{aligned} \quad (\text{III.12})$$

Où ρ est la densité de masse du CNT, $c_2 = 4/h^2$.

Et les moments de la section autour de l'axe des ordonnées (y) sont données par:

$$(A, I, J, K) = \int_A (1, z^2, z^4, z^6) dA \quad (\text{III.13})$$

$e_0 a$ est le paramètre non local, a la longueur caractéristique interne (longueur de la liaison C – C , espace de la maille, distance granulaire) et e_0 une constante liée au matériau . Le Choix de $e_0 a$ (qui a une dimension d'une longueur) est important pour assurer la validité du modèle non local.

Ce paramètre est déterminé en comparant la dispersion des courbes basée sur les model atomiques [Eringen1983],[Eringen2002]. Pour un matériau spécifique, Le paramètre non local correspondant peut être estimé en rapprochant les résultats de la dynamique moléculaire avec les résultats expérimentaux. Arash et Wang [Arash 2012] ont montré que la valeur du paramètre non local dépend des conditions aux limites, de la chiralité, de la forme du mode, le nombre des parois, et de la nature du mouvement. Dans la recherche du paramètre non local, il est nécessaire de déterminer la valeur du paramètre e_0 car elle a une influence signifiante sur l'effet de la dimension réduite. Jusqu'à maintenant aucune expérience a conduit à la prédiction de la valeur de e_0 pour les nanotubes de carbone. Dans les références [Wang 2007],[Tounsi 2013],[Arash 2010], il a été suggéré que la valeur du paramètre non local peut être déterminée en utilisant une comparaison de la dispersion des courbes obtenues par la mécanique des milieux continus non local et la simulation en dynamique moléculaire. Selon cette dernière discussion sur les valeurs du paramètre non local $e_0 a$, on signale que la valeur de ce paramètre est toujours considéré inférieure à 2.0 nm pour les nanostructures [Wang 2007]. Zhang et al. [Zhang 2005] ont donné une valeur prédite de e_0 et elle a été approchée à 0.82 pour un nanotube de carbone. Dans le présent calcul cette estimation de valeur est utilisée.

La charge thermique (N_t) est déterminée à partir de la relation constitutive entre la déformation

thermique et la contrainte thermique et elle est définie comme suit [Benzair 2008] :

$$N_t = -\alpha E A \theta \quad (\text{III.14})$$

Où θ est le changement de température et α le coefficient de conductivité thermique, A la surface de la section du nanotube.

Puisqu'il est possible de trouver une solution analytique du problème pour un nanotube simplement appuyé avec les conditions suivantes :

$$w = 0 \text{ et } M = 0 \quad \text{à } x = 0, L \quad (\text{III.15})$$

Les solutions suivantes pour les déplacements généralisés w et ϕ qui satisferont les conditions au limites des équations(III.15)sont utilisés :

$$w(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} W_k \sin \frac{k\pi x}{L} e^{i\omega_k t}, \quad \phi(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} \Phi_k \cos \frac{k\pi x}{L} e^{i\omega_k t} \quad (\text{III.16})$$

La substitution de l'équation (III.12) dans les équations du mouvement (III.11a) et (III.11b), donne :

$$\begin{aligned} -\left(\frac{k\pi}{L}\right) A_k \left(\Phi_k + \frac{k\pi}{L} W_k\right) + \lambda_k N_t \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 W_k + c_1 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^3 EJ \Phi_k \\ + \lambda_k \left[m_0 W_k - c_1 m_4 \frac{k\pi}{L} \Phi_k + c_1^2 m_6 \frac{k\pi}{L} \left(\Phi_k + \frac{k\pi}{L} W_k\right) \right] \omega_k^2 = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.17a})$$

$$-E\hat{I} \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \Phi_k - B_k \left(\Phi_k + \frac{k\pi}{L} W_k\right) + \lambda_k \left[\hat{m}_2 \Phi_k - c_1 \hat{m}_4 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \left(\Phi_k + \frac{k\pi}{L} W_k\right) \right] \omega_k^2 = 0 \quad (\text{III.17b})$$

Où :

$$A_k = G\bar{A} - c_2 G\bar{I} + c_1^2 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 EK, \quad B_k = G\bar{A} - c_2 G\bar{I} - c_1 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 EJ, \quad \lambda_k = 1 + (e_0 a)^2 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \quad (\text{III.17c})$$

Les fréquences naturelles ω_k^2 peuvent être calculées à partir des équations homogènes :

$$\left[-\frac{k\pi}{L} A_k + c_1 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^3 EJ - \frac{k\pi}{L} \lambda_k \omega_k^2 c_1 \hat{m}_4 \right] \Phi_k + \left[-\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 A_k + \lambda_k \omega_k^2 \left(m_0 + c_1^2 m_6 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \right) \right] W_k = 0 \quad (\text{III.18a})$$

$$\left[-E\hat{I} \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 - B_k + \lambda_k \omega_k^2 \tilde{m}_2 \right] \Phi_k + \left[-B_k \left(\frac{k\pi}{L}\right) - \lambda_k \omega_k^2 c_1 \hat{m}_4 \left(\frac{k\pi}{L}\right) \right] W_k = 0 \quad (\text{III.18b})$$

où $\tilde{m}_2 = \hat{m}_2 - c_1 \hat{m}_4$. En utilisant le déterminant de la matrice des coefficients des équations précédentes, on obtient un polynôme quadratique en ω_k^2 .

Soit Mat cette matrice :

$$\text{Mat} = \begin{pmatrix} \left[-\frac{k\pi}{L} A_k + c_1 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^3 EJ - \frac{k\pi}{L} \lambda_k \omega_k^2 c_1 \hat{m}_4 \right] & \left[-\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 A_k + \lambda_k \omega_k^2 \left(m_0 + c_1^2 m_6 \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \right) \right] \\ \left[-E\hat{I} \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 - B_k + \lambda_k \omega_k^2 \tilde{m}_2 \right] & \left[-B_k \left(\frac{k\pi}{L}\right) - \lambda_k \omega_k^2 c_1 \hat{m}_4 \left(\frac{k\pi}{L}\right) \right] \end{pmatrix} \quad (\text{III.19})$$

Le déterminant $\det(\text{Mat})$ étant nul, alors :

$$\begin{aligned} & (-k^2 \pi^2 \lambda_k^2 c_1^2 \tilde{m}_4^2 + \lambda_k^2 L^4 \tilde{m}_2 m_0 + k^2 \pi^2 \lambda_k^2 c_1^2 \tilde{m}_6 \tilde{m}_2^2 L^2) \omega_k^4 + \left(k^2 \pi^2 A_k L^2 \lambda_k c_1 \tilde{m}_4 - \right. \\ & k^4 \pi^4 c_1^2 EJ \lambda_k \tilde{m}_4 + k^2 \pi^2 \lambda_k B_k L^2 c_1 \tilde{m}_4 + \lambda_k m_0 L^4 B_k + k^2 \pi^2 A_k L^2 \lambda_k \tilde{m}_2 + k^2 \pi^2 \lambda_k \hat{I} EL^2 m_0 + \\ & \left. k^4 \pi^4 c_1^2 E \lambda_k m_6 \hat{I} + k^2 \pi^2 \lambda_k B_k L^2 c_1^2 m_6 \right) \omega_k^2 - k^4 \pi^4 c_1 E J B_k - k^4 \pi^4 E A_k \hat{I} = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.20})$$

D'où l'on tire ω_k^2 et puis ω_k .

Il s'ensuit que le rapport des résultats qui tiennent compte de la variation de température et du paramètre non local avec ceux qui n'en tiennent pas compte sont donnés respectivement comme suit :

$$\chi_N = \frac{(\omega_k)_{NR}}{(\omega_k)_{LR}}, \quad \chi_{th} = \frac{(\omega_k)_{NR}}{(\omega_k)_{NR}^0} \quad (\text{III.21})$$

Où $(\omega_k)_{NR}$ est la fréquence basée sur le model non local de poutres de Reddy avec effet thermique $(\omega_k)_{LR}$ est la fréquence basée sur le model local de poutres de Reddy avec effet thermique, et $(\omega_k)_{NR}^0$ est la fréquence basée sur le model non local de poutres de Reddy sans effet thermique : $(\theta=0^\circ)$

Le tracé des fonctions χ_N et (χ_{th}) permet de connaitre les différentes contributions des paramètres tels que l'ordre k, la température θ et la chiralité n des structures.

III-3-Etude du flambement d'un SWNT de type Armchair

III.3.1.Introduction

Un nanotube de carbone est assimilé à une poutre unidimensionnelle, En y appliquant une force de compression mécanique il subit des déformations. De même quand on élève la température, une force de compression est engendrée et cause une déformation de sens perpendiculaire à l'axe longitudinal de la poutre. Cette déformation est appelée flambement.

dans cette étude on s'intéresse à illustrer les températures critiques de flambement. On se base sur la théorie de Timoshenko expliquant la déformation de cisaillement transversale, qui a été formulée au début du vingtième siècle. Dans cette théorie, une section plane perpendiculaire au plan moyen de la poutre, après une déformation reste plane mais non perpendiculaire à ce plan, elle effectue une rotation d'angle θ par rapport à sa position initiale.

III.3.2. Flambement Par charge due à une élévation de température :

Assimilant le nanotube (SWCNT) à une poutre et appliquant la théorie des poutres de Timochenko :

a. Équations de poutre de Timoshenko et conditions aux limites pour la charge de flambement de tiges/tubes

Selon la théorie de poutre de Timoshenko, les relations de différents déplacements [J. Phys. 2006] sont données par:

$$\begin{cases} u(x, z, t) = u_0(x, t) + z\phi \\ w(x, z, t) = w_0(x, t) \end{cases} \quad (\text{III. 22})$$

où x est la coordonnée longitudinale, z la coordonnée mesuré à partir de l'axe neutre de la poutre, w le déplacement transversal, ϕ la rotation due au recourbement, ϵ_{xx} la déformation normale, γ_{xz} la déformation transversale de cisaillement.

Nous avons les relations donnant les différentes contraintes :

$$\epsilon_{x,x} = \frac{du}{dx} = \frac{du_0}{dx} + z \frac{d\phi}{dx} \quad (\text{III. 23})$$

Sachant que $\frac{du_0}{dx} \approx 0$ on obtient donc:

$$\Rightarrow \epsilon_{x,x} = z \frac{d\phi}{dx} \quad (\text{III. 24})$$

$$\gamma_{x,z} = \frac{du}{dz} + \frac{dw}{dx}$$

$$\Rightarrow \gamma_{x,z} = \phi + \frac{dw}{dx} \quad (\text{III. 25})$$

Le principe de l'énergie virtuelle est toujours utilisé pour cette étude et les équations (III.7), (III.8), (III.9), sont donc valables, on peut aboutir à :

$$\delta U = \int_0^L \left(M \frac{d\delta\phi}{dx} + Q \left(\delta\phi + \frac{d\delta w}{dx} \right) \right) dx \quad (III. 26)$$

où M et Q sont le moment et la force de cisaillement, respectivement,

$$M = \int_A \sigma_{xx} z dA \quad (III. 27)$$

$$Q = K_s \int_A \sigma_{xz} dA \quad (III. 28)$$

Où K_s est le facteur de correction du cisaillement de la théorie des poutres de Timoshenko qui compense l'erreur en supposant que la contrainte de cisaillement (ou déformation) est constante à travers l'épaisseur de la poutre.

L'énergie potentielle engendrée par la force P_T due à une variation de température s'écrit :

$$\delta V = - \int_0^L P_T \frac{dw}{dx} \left(\frac{d\delta w}{dx} \right) dx \quad (III. 29)$$

Ainsi, vue les équations (III. 7), (III.26) et (III.29), nous avons :

$$\begin{aligned} & \int_0^L \left(M \frac{d\delta\phi}{dx} + Q \left(\delta\phi + \frac{d\delta w}{dx} \right) \right) dx + \int_0^L -P_T \frac{dw}{dx} \left(\frac{d\delta w}{dx} \right) dx = 0 \\ & \int_0^L \left(M \frac{d\delta\phi}{dx} + Q \left(\delta\phi + \frac{d\delta w}{dx} \right) - P_T \frac{dw}{dx} \left(\frac{d\delta w}{dx} \right) \right) dx = 0 \end{aligned} \quad (III. 30)$$

$$\int_0^L \left[\left(-\frac{dM}{dx} + Q \right) \delta\phi + \left(-\frac{dQ}{dx} + P_T \frac{d^2 w}{dx^2} \right) \delta w \right] dx + [M\delta\phi]_0^L + \left[\left(Q - P_T \frac{dw}{dx} \right) \delta w \right]_0^L = 0 \quad (III. 31)$$

Puisque $\delta\phi$ et δw sont arbitraires dans $0 < x < L$, nous obtenons les deux équations d'équilibre suivantes :

$$\frac{dM}{dx} = Q \quad (III. 32)$$

$$\frac{dQ}{dx} = P_T \frac{d^2 w}{dx^2} \quad (III. 33)$$

Vue l'équation (III.31), les conditions aux limites de La théorie des poutres de Timoshenko non local sont de la forme :

$$w \text{ ou } Q - P_T \frac{dw}{dx} = 0 \quad (III. 34)$$

$$\phi \text{ ou } M = 0 \quad (III. 35)$$

Comme écrit, les équations régissant le flambement et les conditions aux limites apparaissent sous la même forme que dans la théorie des poutres de Timoshenko local, mais il est à reconnaître que les

expressions du moment et de la force de cisaillement pour la théorie des poutres non local seront différentes puisque les relations constitutives non locales diffèrent un peu.

L'équation constitutive de l'élasticité classique est un rapport algébrique entre le tenseur de contraintes et de déformations tandis que l'élasticité non local d'Eringen implique les intégrales spatiales qui représentent des moyennes pesées de contributions des tenseurs de déformations de tous les points dans le corps au tenseur contraintes au point donné. Bien qu'il est difficile mathématiquement d'obtenir la solution du problème d'élasticité non local du aux intégrales spatiales dans les équations constitutives d'Eringen, ces intégrales partiels des équations constitutives peuvent être converties en équations constitutives différentielles équivalentes dans certaines conditions. L'équation constitutive non locale simplifiée pour la contrainte et déformation normale dans un cas unidimensionnel est donné par l'équation (III.5):

La relation constitutive pour la contrainte de cisaillement et la déformation, cependant, est la même que dans la théorie locale , c'est-à-dire :

$$\sigma_{x,z} = G\gamma_{x,z} \quad (III.36)$$

Où $\sigma_{x,z}$ est la contrainte de cisaillement transversal, γ_{xz} la déformation de cisaillement transversal et G le module de cisaillement. Aucun effet non local n'est injecté dans la relation constitutive de cisaillement parce que la forme adoptée du modèle constitutif non local d'Eringen utilisé pour l'équation (III.5) est inadmissible pour la direction z .

Multipliant l'équation (III.5) par $(z \, dA)$ et intégrant le résultat sur la surface A

$$\int_A z(\sigma_{xx} - e_0 a^2 \frac{d^2 \sigma_{xx}}{dx^2}) dA = \int_A z E \sigma_{xx} dA$$

On sait que : $M = \int_A \sigma_{x,x} z dA$, $\epsilon_{x,x} = z \frac{d\phi}{dx}$ ce qui donne :

$$\int_A \sigma_{x,x} z dA - (e_0 a)^2 \frac{d^2 \sigma_{x,x}}{dx^2} dA = \int_A z^2 E \frac{d\phi}{dx} dA$$

Prenant $I = \int_A \epsilon_{x,x} z^2 dA$ où I est le deuxième moment de la surface. Alors :

$$\Rightarrow M - (e_0 a)^2 \frac{d^2 M}{dx^2} = EI \frac{d\phi}{dx} \quad (III.37)$$

En outre, Par intégration de l'équation (III.29) on a :

$$Q = K_s \sigma_{xz} A$$

en substituant par l'équation (III.24) et (III.36) on obtient :

$$Q = K_s GA \left(\varnothing + \frac{dw}{dx} \right) \quad (III. 38)$$

où K_s est le facteur de correction de cisaillement.

En substituant les équations d'équilibre (III.32) et (III.33) dans l'équation (III.37), on obtient

$$M = EI \frac{d\varnothing}{dx} + (e_0 a)^2 P_T \frac{d^2 w}{dx^2} \quad (III. 39)$$

Noter que le moment de flexion indiqué dans l'équation (III.39) est réduit à celui du modèle local de Timoshenko quand la caractéristique $e_0 a$ est égale à zéro.

En substituant les équations (III.38) et (III.39) dans les équations d'équilibre (III.32) et (III.33), on trouve les équations régissant le flambement des poutres avec effet non local de Timoshenko :

$$EI \frac{d^2 \varnothing}{dx^2} + (e_0 a)^2 P_T \frac{d^3 w}{dx^3} - K_s GA \left(\varnothing + \frac{dw}{dx} \right) = 0 \quad (III. 40)$$

$$K_s GA \left(\frac{d\varnothing}{dx} + \frac{d^2 w}{dx^2} \right) - P_T \frac{d^2 w}{dx^2} = 0 \quad (III. 41)$$

Basant sur les équations (III.34) et (III.35), les deux conditions aux limites, lié à la théorie des poutres de Timoshenko non local, à chaque extrémité de la poutre sont données par :

$$w = 0, \quad M = EI \frac{d\varnothing}{dx} + (e_0 a)^2 P_T \frac{d^2 w}{dx^2} = 0 \quad (III. 42)$$

b-Conditions aux limites:

-Pour des extrémités appuyée-appuyée :

$$w = 0, \quad \varnothing = 0 \quad (III. 43)$$

-Pour des extrémités encastrée -encastrée :

$$M = EI \frac{d\varnothing}{dx} + (e_0 a)^2 P_T \frac{d^2 w}{dx^2} = 0$$

$$Q - P_T \frac{dw}{dx} = K_s GA \left(\phi + \frac{dw}{dx} \right) - P_T \frac{dw}{dx} = 0 \quad (\text{III.44})$$

-Pour des extrémités libres :

Quelques papiers ont édité sur l'application de la théorie de poutres non local pour les flambements et l'analyse dynamique contient les équations régissantes et les états de **bondes qui ne sont pas** conformés variationnelle. Par exemple, un des états de bondes d'extrémités appuyées de la théorie non local de poutres d'Euler est inexactement énoncé comme $\frac{d^2w}{dx^2} = 0$.

Au lieu de cela ,le moment de flexion non local devrait être nul $M = 0$.

c. Calcul de la charge critique P_T de flambement

Le déplacement et la rotation dans les deux équations (III.40) et (III.41) régissantes le flambement élastique de Timoshenko non local tiges/tubes peut être découplé comme montré ci-dessous :

Les paramètres adimensionnels sont définies par: $\bar{w} = w/L$, $\bar{x} = x/L$

$$\frac{d^4 \bar{w}}{d\bar{x}^4} + \left(\frac{\frac{P_T L^2}{EI}}{\left[1 - \frac{P_T}{K_s GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right]} \right) \frac{d^2 \bar{w}}{d\bar{x}^2} = 0$$

Posant $k = \left(\frac{\frac{P_T L^2}{EI}}{\left[1 - \frac{P_T}{K_s GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right]} \right)$, on aura : (III.45)

$$\frac{d^4 \bar{w}}{d\bar{x}^4} + k \frac{d^2 \bar{w}}{d\bar{x}^2} = 0, \quad (\text{III.46})$$

$$\left(-\frac{(e_0 a)^2 P_T K_s GA}{K_s GA - P_T} + EI \right) \frac{d^3 \phi}{dx^3} - K_s GA \left(1 - \frac{K_s GA}{K_s GA - P_T} \right) \frac{d\phi}{dx} = 0$$

$$\frac{P_T}{EI \left[1 - \frac{P_T}{K_s GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right]} = \frac{P_T e}{EI}$$

$$\Rightarrow \frac{d^3 \phi}{dx^3} + \left[-\left(\frac{K_s GA \left(1 - \frac{K_s GA}{K_s GA - P_T} \right)}{\left(-\frac{(e_0 a)^2 P_T K_s GA}{K_s GA - P_T} + EI \right)} \right) \right] \frac{d\phi}{dx} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d^3 \phi}{dx^3} + \left(\frac{\frac{P_T L^2}{EI}}{\left[1 - \frac{P_T}{K_s GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right]} \right) \frac{d\phi}{dx} = 0$$

$$\frac{d^3\varnothing}{d\bar{x}^3} + k \frac{d\varnothing}{d\bar{x}} = 0 \quad (\text{III.47})$$

Les solutions générales pour les équations (III.46) et (III.47) sont, respectivement,

$$\bar{w} = C_1 \sin \sqrt{k\bar{x}} + C_2 \cos \sqrt{k\bar{x}} + C_3 \bar{x} + C_4, \quad (\text{III.48})$$

$$\varnothing = -C_1 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA}\right) \cos \sqrt{k\bar{x}} + C_2 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA}\right) \sin \sqrt{k\bar{x}} - C_3 \quad (\text{III.49})$$

où C_1, C_2, C_3 et C_4 sont des constantes inconnues.

Par l'application des conditions aux limites aux équations (III.48) et (III.49), le problème de valeur propre peut être exprimé comme suit :

$$[S] 4 \times 4 \{C\} 4 \times 1 = \{0\} 4 \times 1, \quad (\text{III.50})$$

où $\{C\}^T = \{C_1, C_2, C_3, C_4\}$ et la matrice $[S]$ est donné ci-dessous pour tiges/tubes avec de divers conditions aux limites .

d. Application aux différents cas d'extrémités :

1 - extrémités appuyée - appuyée :

$$\bar{w} = 0, M = 0$$

En application ces conditions aux limites aux solutions (III.48) et (III.49) on obtient :

$$C_1 \sin \sqrt{k\bar{x}} + C_2 \cos \sqrt{k\bar{x}} + C_3 \bar{x} + C_4 = 0$$

$$EI \left(C_1 k \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA}\right) \sin \sqrt{k\bar{x}} + C_2 k \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA}\right) \cos \sqrt{k\bar{x}} - (e_0 a)^2 P_T (C_1 k \sin \sqrt{k\bar{x}} + C_2 k \cos \sqrt{k\bar{x}}) \right) = 0$$

$$\bar{x} = 0:$$

$$C_2 + C_4 = 0$$

$$EI C_2 k \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA}\right) - (e_0 a)^2 P_T C_2 k = 0$$

$$\bar{x} = 1:$$

$$C_1 \sin \sqrt{k} + C_2 \cos \sqrt{k} + C_3 + C_4 = 0$$

$$EI \left(C_1 k \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA}\right) \sin \sqrt{k} + C_2 k \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA}\right) \cos \sqrt{k} - (e_0 a)^2 P_T (C_1 k \sin \sqrt{k} + C_2 k \cos \sqrt{k}) \right) = 0$$

$$M_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ \sin \sqrt{k} & \cos \sqrt{k} & 1 & 1 \\ 0 & \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI}\right) & 0 & 0 \\ \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI}\right) \sin \sqrt{k} & \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI}\right) \cos \sqrt{k} & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 51})$$

2. extrémités encastree- encastree :

$$\bar{w} = 0, \varphi = 0$$

En application ces conditions aux limites aux solutions (III.48) et (III.49) on obtient :

$$C_1 \sin \sqrt{k} \bar{x} + C_2 \cos \sqrt{k} \bar{x} + C_3 \bar{x} + C_4 = 0$$

$\bar{x} = 0$:

$$C_2 + C_4 = 0$$

$$C_1 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA}\right) + C_3 = 0$$

$\bar{x} = 1$:

$$C_1 \sin \sqrt{k} + C_2 \cos \sqrt{k} + C_3 + C_4 = 0$$

$$-C_1 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA}\right) \cos \sqrt{k} + C_2 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA}\right) \sin \sqrt{k} - C_3$$

$$M_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ \sin \sqrt{k} & \cos \sqrt{k} & 1 & 1 \\ \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA}\right) \sqrt{k} & 0 & 1 & 0 \\ -\left(1 - \frac{P_T}{K_s GA}\right) \sqrt{k} \cos \sqrt{k} & \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA}\right) \sqrt{k} \sin \sqrt{k} & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 52})$$

3. extrémités encastree-libre

$\bar{x} = 0$:

$$C_2 + C_4 = 0$$

$$C_1 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_s GA}\right) + C_3 = 0$$

$\bar{x} = 1$:

$$EI \left(C_1 k \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} \right) \sin \sqrt{k} + C_2 k \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} \right) \cos \sqrt{k} \right) - (e_0 a)^2 P_T (C_1 k \sin \sqrt{k} + C_2 k \cos \sqrt{k}) = 0$$

$$K_S GA \left(-C_1 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} \right) \cos \sqrt{k} + C_2 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} \right) \sin \sqrt{k} + C_1 \sqrt{k} \cos \sqrt{k} - C_2 \sqrt{k} \sin \sqrt{k} \right) - P_T (C_1 \sqrt{k} \cos \sqrt{k} - C_2 \sqrt{k} \sin \sqrt{k} + C_3) = 0$$

$$-P_T C_3 = 0$$

$$M_3 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right) \sin \sqrt{k} & \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right) \cos \sqrt{k} & 0 & 0 \\ -\sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} \right) & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -P_T & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III.53})$$

4. extrémités encastree- appuyée

$\bar{x} = 0$:

$$C_2 + C_4 = 0$$

$$C_1 \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} \right) + C_3 = 0$$

$\bar{x} = 1$:

$$C_1 \sin \sqrt{k} + C_2 \cos \sqrt{k} + C_3 + C_4 = 0$$

$$\left(\left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right) \sin \sqrt{k} \right) C_1 + \left(\left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right) \cos \sqrt{k} \right) C_2 = 0$$

$$M_4 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ \sin \sqrt{k} & \cos \sqrt{k} & 1 & 1 \\ \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} \right) \sqrt{k} & 0 & 1 & 0 \\ \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right) \sin \sqrt{k} & \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right) \cos \sqrt{k} & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III.54})$$

Pour une solution de flambement non triviale, le déterminant de la matrice [S] doit être nul.
Calculons les déterminants des quatre matrices trouvées ci-dessus

$$\text{Det}(M_1) = \frac{\sin \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right) (-K_S GA EI + P_T EI + (e_0 a)^2 P_T K_S GA)}{K_S GA EI}$$

$$\frac{\sin \sqrt{k} (-K_S GA EI + P_T EI + (e_0 a)^2 P_T K_S GA)^2}{(K_S GA EI)^2} = 0$$

-Donc pour extrémités appuyée-appuyée :

$$\sin(\sqrt{k}) = 0$$

$$\sqrt{k} = n\pi, \text{ pour } n=1 : k = \pi^2$$

Sachant que k est donnée par l'équation (III.45) ce qui donne:

$$\begin{aligned} \frac{P}{EI \left[1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right]} &= \frac{\pi^2}{L^2} \end{aligned} \quad \text{(III. 55)}$$

Est on a aussi la relation entre p_T (Timochenko) et p_{Te} (Euler)

$$\begin{aligned} \frac{P_T}{EI \left[1 - \frac{P_T}{K_S GA} - (e_0 a)^2 \frac{P_T}{EI} \right]} &= \frac{P_{Te}}{EI} \\ \frac{P_{Te}}{EI} &= \frac{K}{L^2} \end{aligned} \quad \text{(III. 56)}$$

$$\frac{P_{Te}}{EI} = \frac{\pi^2}{L^2} \Rightarrow P_{Te} = \frac{\pi^2 EI}{L^2}$$

et la charge p_T sera donc donnée par la relation suivante:

$$P_T = \frac{P_{Te}}{1 + \frac{P_{Te}}{K_S GA} + \frac{(e_0 a)^2 P_{Te}}{EI}} \quad \text{(III. 57)}$$

- pour extrémités encastree- encastree :

$$\begin{aligned} D(M_2) &= \frac{-\sqrt{k}(-K_S GA + P_T)(K_S GA \sin^2 \sqrt{k} + K_S GA - 2 K_S GA \cos \sqrt{k} - K_S GA \sqrt{k} \sin \sqrt{k} + P_T \sqrt{k} \sin \sqrt{k} + K_S GA \cos^2 \sqrt{k})}{K_S GA^2} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Pour simplifier le $D(M_2)$, il faut introduire les deux formules suivantes:

$$\cos \alpha = \cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2}$$

$$\sin \alpha = 2 \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2}$$

Ce qui donne :

$$\sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{k}\right) \left[-4K_sGA \sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{k}\right) + 2\sqrt{k}K_sGA \cos\left(\frac{1}{2}\sqrt{k}\right) - 2\sqrt{k}P_T \cos\left(\frac{1}{2}\sqrt{k}\right) \right] = 0$$

Et donc :

$$\sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{k}\right) = 0 \quad (III.58)$$

$$\frac{1}{2} \sqrt{k} = n\pi, \text{ pour } n = 1 \text{ on a : } 1/2 \sqrt{k} = \pi \Rightarrow k = 4\pi^2$$

l'équation (34) donne :

$$\frac{P_{Te}}{EI} = 4 \frac{\pi^2}{L^2} \Rightarrow P_{Te} = 4 \frac{\pi^2}{L^2} EI \quad (III.59)$$

toujours avec
$$P_T = \frac{P_{Te}}{1 + \frac{P_{Te}}{K_sGA} + \frac{(e_0a)^2 P_{Te}}{EI}}$$

-pour extrémités encastree- libre :

$$D(M_3) = \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_sGA}\right) \cos \sqrt{k} \left(1 - \frac{P_T}{K_sGA} - (e_0a)^2 \frac{P_T}{EI}\right) P = 0$$

$$\cos \sqrt{k} = 0 \quad (III. 60)$$

$$\sqrt{k} = \frac{1}{2} \pi \quad \text{ou } k = \frac{1}{4} \pi^2$$

c.à.d

$$\frac{P_T}{EI \left(1 - \frac{P_T}{K_sGA}\right) - (e_0a)^2 P_T} = \frac{P_{Te}}{EI} = \frac{1}{4} \frac{\pi^2}{L^2} \quad (III. 61)$$

$$P_{Te} = EI \frac{\pi^2}{4L^2}$$

$$Et:P_T = \frac{P_{Te}}{1 + \frac{P_{Te}}{K_s GA} + \frac{(e_0 a)^2 P_{Te}}{EI}}$$

-pour extrémités encastrée- appuyée:

$$D(M_4) = - \frac{(-K_s GA EI + P_T EI + (e_0 a)^2 P_T K_s GA)(-K_s GA \sqrt{k} \cos \sqrt{k} + P_T \sqrt{k} \cos \sqrt{k} + K_s GA \sin \sqrt{k})}{(K_s GA)^2 EI} = 0$$

$$\left(1 - \frac{P_T}{K_s GA}\right) \sqrt{k} - \tan \sqrt{k} = 0 \quad (III. 62)$$

Basé sur les résultats calculés et l'expression de Charge de flambement locale de Timoshenko proposés par Ziegler , le rapport de charge de flambement pour le cas de tige a extrémités encastrée-appuyée peut être approximativement exprimé comme la plus petite racine positive:

$$P_T \approx \frac{P_{Te}}{1 + 1.1 \frac{P_{Te}}{K_s GA} + (e_0 a)^2 \frac{P_{Te}}{EI}} \quad (III. 63)$$

où P_T est la force de compression axiale qui dépend de l'élévation de la température ΔT et du coefficient de dilatation thermique α , où $\Delta T = T - T_0$ et T_0 est la température initiale et on suppose qu'elle est égale à 25 C°.

Ainsi, la force peut être exprimée en tant que $P_T = \alpha E \Delta T A$ d'où :

$$T_c = \frac{P_{Tc} I}{\alpha A L^2} + 25 \quad (III. 64)$$

où T_c représente la température critique de flambement et P_{Tc} la charge de flambement de Timoshenko pour tige/tube, avec :

$$P_{Te} = \pi^2 EI/L^2 \text{ pour tige/tube d'extrémités appuyées,}$$

$$P_{Te} = 4\pi^2 EI/L^2 \text{ pour rod/tube d'extrémités encastrées,}$$

$$\text{et } P_{Te} = \pi^2 EI/4L^2 \text{ pour tige/tube d'extrémités encastrée-libre.}$$

où P_{Te} est la charge de flambement d'Euler locale pour tige/tube .

En fait, le rapport de charge thermique de flambement dans l'équation (III.53) peut également s'avérer valide pour tige/tube d'extrémités appuyées avec les ressorts de rotation de la rigidité égale supplémentaires à ses extrémités .

Noter que l'expression de charge de flambement antérieure dans l'équation (III.53) réduit à la solution de flambement de Sudak . pour la colonne appuyé-appuyé quand l'effet de la déformation de cisaillement est négligé (c. -à - d. en posant $K_s. G. A \rightarrow \infty$).

Quant au tiges/tubes d'extrémités encastree-appuyée, l'équation (III.53) ne peut être pas appliqué en raison de la présence du facteur $[1 - P/(Ks.G.A)]$ devant \sqrt{k} dans l'équation caractéristique (III.58) la charge de flambement peut, cependant, être déterminée à partir de la solution transcendante de l'équation (III.58) pour la plus basse racine positive.

III.3.3 Application au nanotube de carbone du type fauteuil (Armchair) :

Les caractéristiques mécaniques (module de Young et coefficient de cisaillement) de ce genre de nanotube sont E_a et G_a

$$\text{posons } q = \frac{L}{d_t} \Rightarrow L = qd_t \text{ avec } L \text{ longueur du nanotube}$$

Et sachant que :

$$l = 0.142 \times 10^{-9} \text{m, et } \sqrt{3} = 1.7320508$$

$$K = 2 \times 46900 \times 0.0695 \times 10^{-1} \text{N/mol. nm,}$$

$$K = 651.91 \text{ N/mol. nm}$$

$$C = 2 \times 63 \times 0.0695 \times 10^{-19} \text{Nm/mol. rad}^2$$

$$C = 0.8757 \cdot 10^{-18} \text{Nm/mol. rad}^2$$

$$d_t = 0.426 \cdot 10^{-9} \text{n}/\pi$$

$$I = 0.1659620552 \cdot 10^{-40} \text{n}^4$$

$$k_s = 9/10$$

$$th = 0.258 \times 10^{-9} \text{m}$$

$$A = 0.109908 \times 10^{-18} \text{n}$$

$$\lambda_{a_1} = \frac{4 - \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2}{16 + 2 \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2}$$

$$\lambda_{a_2} = -\frac{\sqrt{12 - 3 \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2} \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)}{32 + 4 \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2}$$

$$\lambda_a = -\sqrt{\frac{4}{\cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2} - 1}$$

E_a

$$= \frac{0.1318385308 \times 10^{-14}}{.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} \times (4 - \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2)^2}{(16 + \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2)^2} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} \times (12 - 3 \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2) \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2}{(32 + 4 \cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2)^2}}$$

$$G_a = \frac{0.00002299509259}{0.261748676 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045296 \times 10^{-16}}{\cos\left(\frac{1}{2n}\pi\right)^2}}$$

III.4-Etude de flambement par charge due à une élévation de température :

Notaion :

T :Temperature

critique de flambement de Timoshenko non-locale ,

TE : Température critique de flambement non -locale Euler,

T0 : Température critique de flambement locale Timoshenko ,

TE0 : Température critique de flambement locale Euler,

HEcr : Température critique de flambement adimensionnelle, non-locale d'Euler

HE0cr : Température critique de flambement adimensionnelle locale d' Euler ,

HTcr : Température critique de flambement adimensionnelle non-locale, de Timoshenko

HT0cr : Température critique de flambement adimensionnelle, locale de Timoshenko .

De l'équation (III.64) on posant $b = \frac{I}{\alpha AL^2}$ on peut tirer les équations qui donnent les relations des températures adimensionnelles.

$$HE_{0cr} = \frac{TE0}{b}$$

$$HE_{cr} = \frac{TE}{b}$$

$$HT_{0cr} = \frac{T0}{b}$$

$$HT_{cr} = \frac{T}{b}$$

III.4.1-Extrémités appuyée- appuyée :

Pour q=5 , on étudie deux casde contribution du réseau:

eo_a=0nm

$$HE_{0cr} = 0.01217699 + 0.9869604n$$

HT_{0cr}

$= 0.01217699$

$$+ \frac{0.9869604n}{0.2065306 \times 10^{-12} n (0.2617487 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045 \times 10^{-16}}{(\cos \frac{\pi}{2n})^2}}$$

$$1 + \left(\frac{0.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} (4 - \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(16 + \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} (12 - 3\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2) (\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)}{(32 + 4\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)} \right)$$

eo_a=2nm

$$HE_{cr} = 0.01217699 + \frac{0.9869604n}{1 + \frac{85.8816294}{n^2}}$$

HT_{cr}

= 0.01217699

$$+ \frac{0.9869604n}{1 + \frac{0.2065306 \times 10^{-12} n (0.2617487 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045 \times 10^{-16}}{(\cos \frac{\pi}{2n})^2})}{0.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} (4 - \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(16 + \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} (12 - 3\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)(\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)}{(32 + 4\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)} + \frac{85.8816293}{n^2}}$$

III.4.2-Extrémités encastree- encastree :

$$HE_{0cr} = 0.0000195(25 + \frac{202628.1599n}{q^2})q^2$$

$$HE_{cr} = 0.0000195 \left(25 + \frac{202628.1599n}{q^2(1 + \frac{0.5367602 \times 10^{21} eoa^2}{q^2 n^2})} \right) q^2$$

$$HT_{cr} = 0.0000195 \left(25 + \frac{202628.1599n}{q^2 \left(1 + \frac{0.2065306 \times 10^{-10} n (0.2617487 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045 \times 10^{-16}}{(\cos \frac{\pi}{2n})^2})}{0.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} (4 - \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(16 + \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} (12 - 3\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)(\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)}{(32 + 4\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)} + \frac{0.2147041 \times 10^{21} eoa^2}{q^2 n^2}} \right) q^2$$

Pour q=5 on étudie deux cas de contribution du réseau :

eo_a=0nm

$$HE_{0cr} = 0.01217699 + 3.947842n$$

$$HT_{0cr} = 0.01217699 + \frac{3.947842n}{1 + \frac{0.8261225 \times 10^{-12} n (0.2617487 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045 \times 10^{-16}}{(\cos \frac{\pi}{2n})^2}}{0.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} (4 - \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(16 + \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} (12 - 3\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2) (\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(32 + 4\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}}}$$

eo_a=2nm

$$HE_{cr} = 0.01217699 + \frac{3.9478418n}{1 + \frac{85.8816294}{n^2}}$$

$$HT_{cr} = 0.01217699 + \frac{3.9478418n}{1 + \frac{0.8261225 \times 10^{-12} n (0.2617487 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045 \times 10^{-16}}{(\cos \frac{\pi}{2n})^2}}{0.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} (4 - \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(16 + \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} (12 - 3\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2) (\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(32 + 4\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2} + \frac{343.5265174}{n^2}}}$$

III.4.3-Extrémités encastree - libre

$$HE_{0cr} = 0.0000195 \left(25 + \frac{12664.25996n}{q^2} \right) q^2$$

$$HNE_{cr} = 0.0000195 \left(25 + \frac{12664.25996n}{q^2 \left(1 + \frac{0.5367602 \times 10^{21} eoa^2}{q^2 n^2} \right)} \right) q^2$$

$$HT_{cr} = 0.0000195 \left(25 + \frac{12664.25996n}{q^2 \left(1 + \frac{0.1290816 \times 10^{-11} n (0.2617487 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045 \times 10^{-16}}{(\cos \frac{\pi}{2n})^2}}{0.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} (4 - \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(16 + \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} (12 - 3\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2) (\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(32 + 4\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2} \right) q^2} + \frac{0.1341900 \times 10^{21} eoa^2}{q^2 n^2} \right) q^2$$

Pour $q=5$, on étudie deux cas de contribution du réseau:

eo_a=0nm

$$HE_{0cr} = 0.01217699 + 0.2467401n$$

$$HT_{0cr} = 0.01217699$$

$$+ \frac{0.2467401n}{1 + \frac{0.5163266 \times 10^{-13} n (0.2617487 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045 \times 10^{-16}}{(\cos \frac{\pi}{2n})^2})}{0.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} (4 - \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(16 + \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} (12 - 3\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2) (\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(32 + 4\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}}$$

eo_a=2nm

$$HE_{cr} = 0.1948318 + \frac{0.2467401n}{1 + \frac{5.3676018}{n^2}}$$

$$HT_{cr}$$

$$= 0.1948318$$

$$+ \frac{0.2467401n}{1 + \frac{0.3227041 \times 10^{-14} n (0.2617487 \times 10^{-17} + \frac{0.5258045 \times 10^{-16}}{(\cos \frac{\pi}{2n})^2})}{0.6777918 \times 10^{-27} + \frac{0.1356575686 \times 10^{-25} (4 - \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(16 + \cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2} + \frac{0.2713151373 \times 10^{-25} (12 - 3\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2) (\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2}{(32 + 4\cos(\frac{1}{2n}\pi)^2)^2} + \frac{1.3419004}{n^2}}}$$

CHAP.IV- RESULTATS ET DISCUSSIONS

IV. 1.propriétés mécaniques

Les propriétés mécaniques du nanotube à simple parois que se soit du type armchair ou zigzag sont étudiées à travers les constantes mécaniques à savoir le module de Young, le coefficient de cisaillement et le coefficient de Poisson qui subissent des variations lors du changement de leurs tailles ou de la température de fabrication de ces nanostructures.

IV. 1.1-effet de la chiralité:

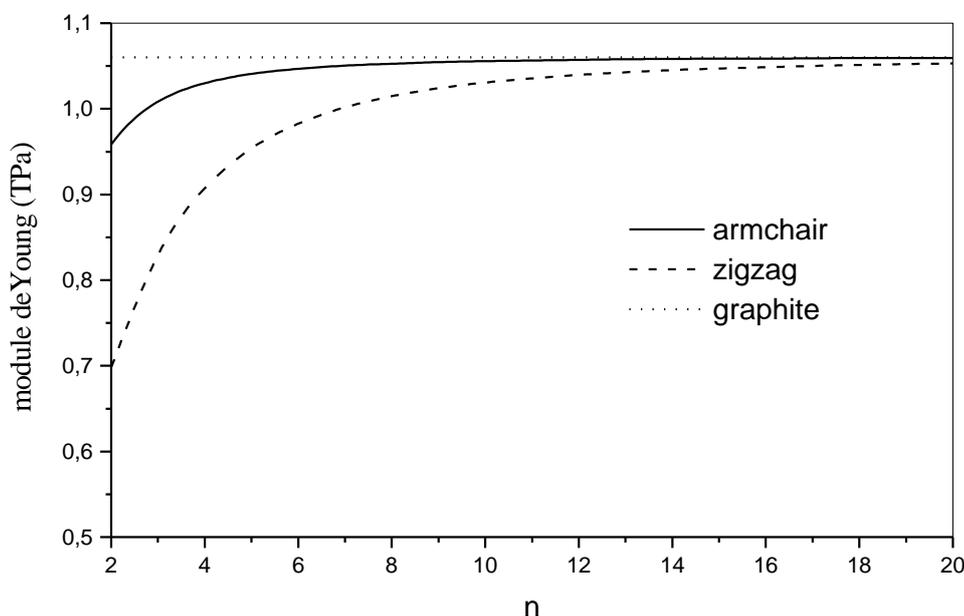


Fig.IV.1: Variation du module de Young de nanotubes de type armchair et zigzag en fonction de leur chiralité.

La figure (IV.1) montre la variation du module de Young avec le nombre de chiralité n d'un nanotube à simple parois, il est clair que le module de Young des deux types du CNT à savoir armchair et zigzag croît quand l'indice de structure n augmente. Pour une valeur donnée de n le module de Young pour un nanotube de type armchair est légèrement supérieur à celui du type zigzag.

RESULTATS ET DISCUSSIONS

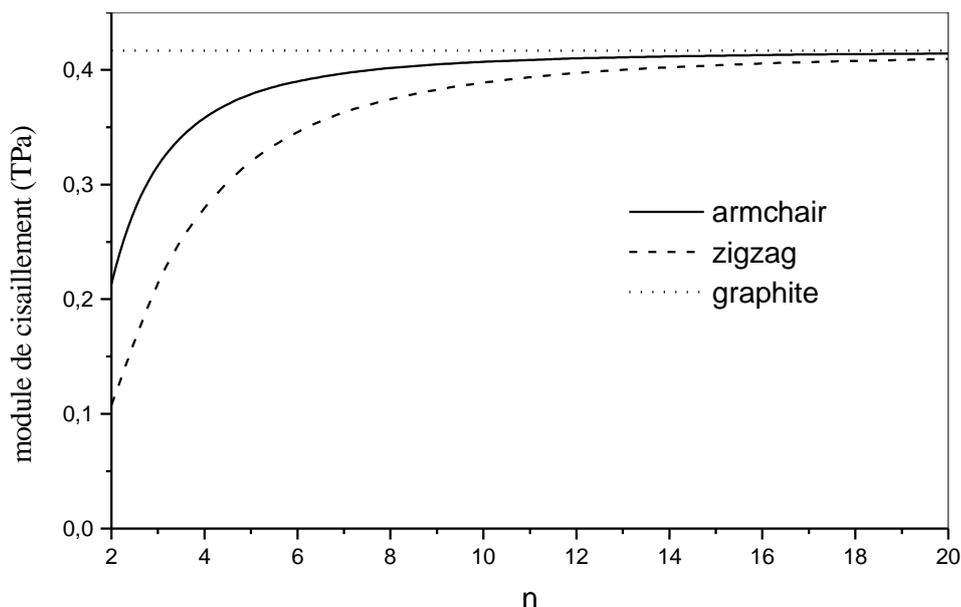


Fig.IV.2: La variation du module de cisaillement d'un nanotube type armchair et zigzag en fonction de sa chiralité.

Pour le coefficient de cisaillement des nanotubes de carbone, la même tendance de variation est observée dans la figure (IV.2). Dans les deux figures(IV.1) et (IV.2) on peut clairement observer que pour les nanotubes de carbone de petites tailles, le module de Young et le coefficient de cisaillement subissent une grande dépendance du caractéristique de structure n. Cependant pour ceux de grandes tailles (valeur de n élevée) cette dépendance devient légère. la raison de ce phénomène est qu'un nanotube de carbone d'indice de maille n petit, a une plus grande courbure qui produit une distorsion des liaisons C-C plus signifiante.

Quand la caractéristique de structure n du nanotube augmente, l'effet de courbure diminue graduellement, et les valeurs du module de Young, du coefficient de cisaillement, approchent de celles d'une feuille de graphite comme prédit par le présent model et conformément aux références [Xiao 2005] ,[Popov 2000].

On peut aussi constater que les nanotubes de carbone de type armchair ou zigzag qui ont des grands diamètres sont plus rigide que les autres (moins de 1nm de diamètre), parce que le diamètre a une relation

directe avec la chiralité($D = l_0 \sqrt{3} \frac{\sqrt{(m^2 + n^2 + mn)}}{\pi}$). D'autre par les nanotubes de carbone type armchair

sont plus rigide que les nanotubes du type zigzag.

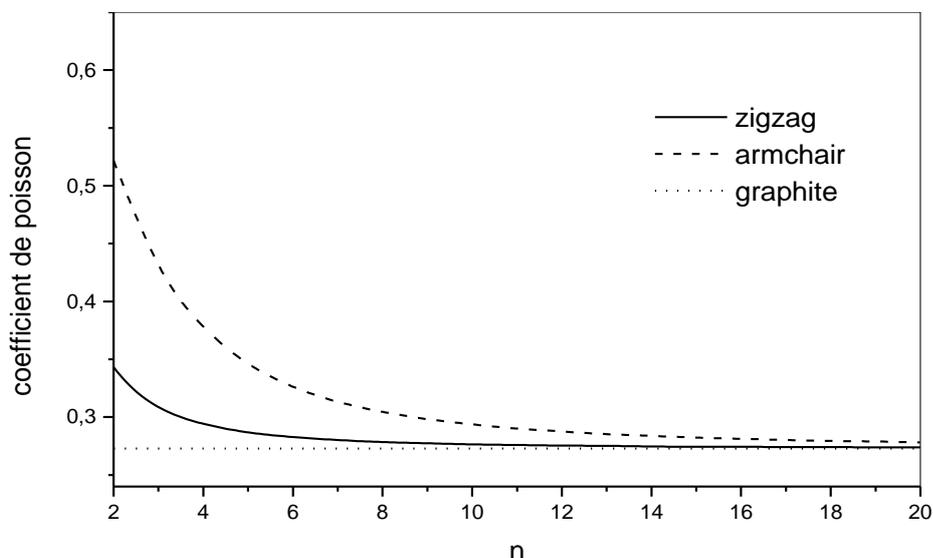
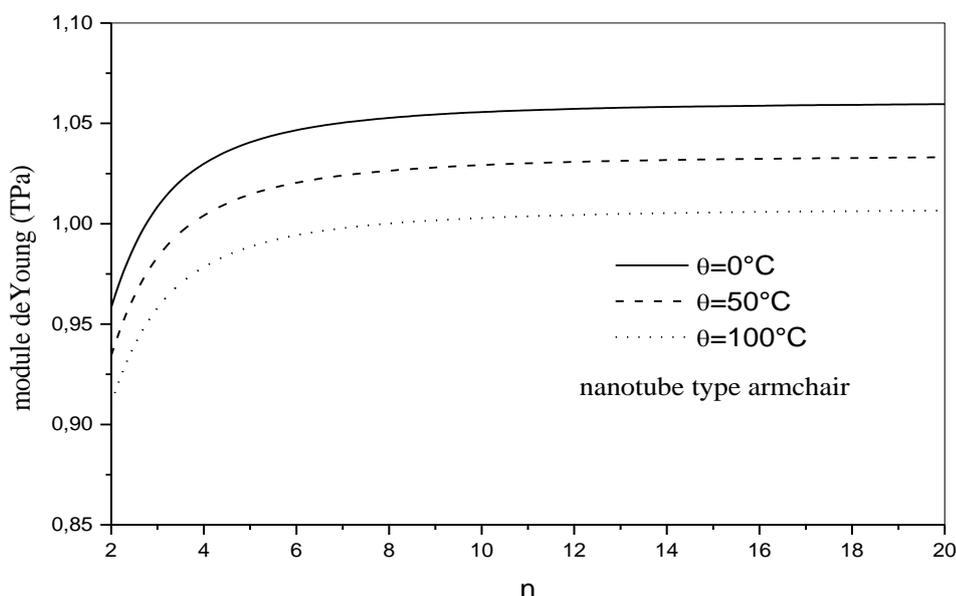


Fig.IV.3: Variation du coefficient de poisson d'un nanotube de carbone type armchair et zigzag en fonction de sa chiralité.

Dans la figure (IV.3) on présente la variation du coefficient de poisson d'un nanotube type armchair, et un autre de type zigzag et même dans le cas du graphite en fonction de la chiralité n . Cette figure montre que le coefficient de poisson diminue si l'indice de structure n augmente et aussi approche de celle d'une feuille de graphite comme dit auparavant pour les autres caractéristique mécanique. Le coefficient de poisson pour le nanotube de carbone de type zigzag, est un peut inférieur à celui d'un nanotube de type armchair.

IV. 1.2-effet de la température



RESULTATS ET DISCUSSIONS

Fig.IV.4: Variation du module de Young en fonction de nombre de maille (n) de carbone monocouche type armchair pour différentes valeurs de la température (θ).

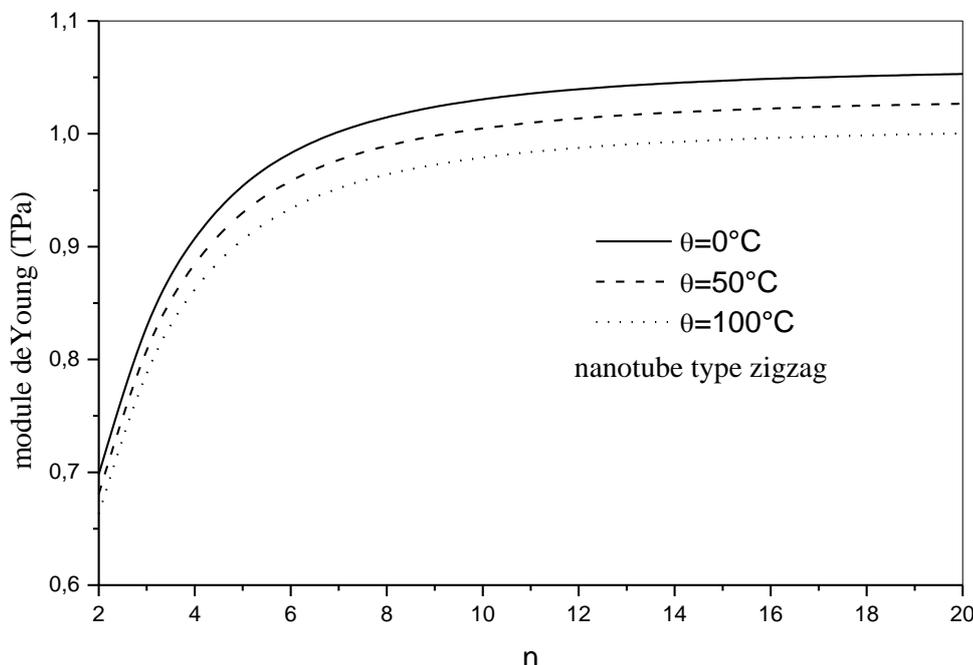


Fig IV.5: Variation du module de Young en fonction de nombre de maille (n) de carbone monocouche type zigzag pour différentes valeurs de la température (θ).

Il est vu dans les figures (IV.4 et IV.5) que le module de Young du nanotube de carbone diminue si la valeur de la température augmente. Donc l'influence de la température joue un rôle négatif sur la rigidité du nanotube de carbone qu'il soit du type armchair ou zigzag.

IV. 1.3- Conclusion

Basé sur le lien entre la mécanique moléculaire et la mécanique du solide, un modèle équivalent en énergie a été utilisé pour l'étude des propriétés mécaniques de (SWCNT). Le module de Young, le module de cisaillement et le coefficient de Poisson d'un nanotube monocouche (SWCNT) ont été obtenus par l'utilisation de ce modèle. Il a été constaté que pour une augmentation de diamètre du nanotube on a une augmentation de module de Young et du coefficient de cisaillement et une diminution du coefficient de poisson jusqu'à une valeur exacte dans le cas du graphite.

Les nanotubes de petit diamètre (inférieur à 1nm) ont une rigidité un peut faible par rapport aux autres nanotubes (diamètre supérieur à 1nm). D'autre par les nanotubes de carbone type armchair sont plus rigide que les nanotubes du type zigzag.

Le coefficient de poisson pour le nanotube de carbone type zigzag, est un peut inférieur à celui du nanotube type armchair, et il diminue si le diamètre du nanotube augmente.

L'augmentation de température joue un rôle négatif sur la rigidité du nanotube de carbone qu'il soit du type armchair ou zigzag. Cette influence peut aller jusqu'au phénomène de flambement .

IV. 2. partie vibration

En se basant sur les formulations obtenues auparavant en utilisant le model non local de REDDY, l'effet thermique sur les propriétés vibratoires des nanotubes à simple parois de type armchair et zigzag est discutable.

Les paramètres utilisés dans les calculs pour les nanotubes à simple parois de type armchair et zigzag sont donnés comme suit :

L'épaisseur effective du SWCNT est égale à 0.258nm[Zhang 2006] , les constantes de force sont: $K/2=46900\text{kcal/mol/nm}^2$, $C/2=63\text{ kcal/mol/rad}^2$ [Cornell 1995] , la densité de masse est : $\rho = 2.3\text{ g cm}^{-3}$ [Heireche 2008].

Comme indiqué par Jiang et al. [Jiang 2004], les coefficients d'expansion thermique pour les CNTs sont négatifs à basses températures et deviennent positifs pour des températures plus élevées. Par conséquence, on considère deux cas : Pour le cas de température basse ou ambiante, on suppose $\alpha = -1.6 \times 10^{-6}\text{ K}^{-1}$ et pour le cas de température élevée, on prend $\alpha = 1.1 \times 10^{-6}\text{ K}^{-1}$ [Yao 2006], [Yao 2007].

Pour examiner l'effet du paramètre d'échelle et de la variation de température sur les vibrations des nanotubes de types armchair et zigzag, les résultats des calculs comprenant ou non comprenant l'effet thermique et l'effet d'échelle sont comparables. En plus, les caractéristiques de vibration des différents types de nanotubes (armchair et zigzag) sont comparées pour savoir l'effet de la chiralité.

Dans les pages qui suivent j'expose les différents graphes représentant les rapports de fréquences de vibrations χ_N en fonctions de la chiralité n des nanotubes de carbones dans de différents cas avec une comparaison entre le type armchair et le type zigzag de ces nanotubes.

RESULTATS ET DISCUSSIONS

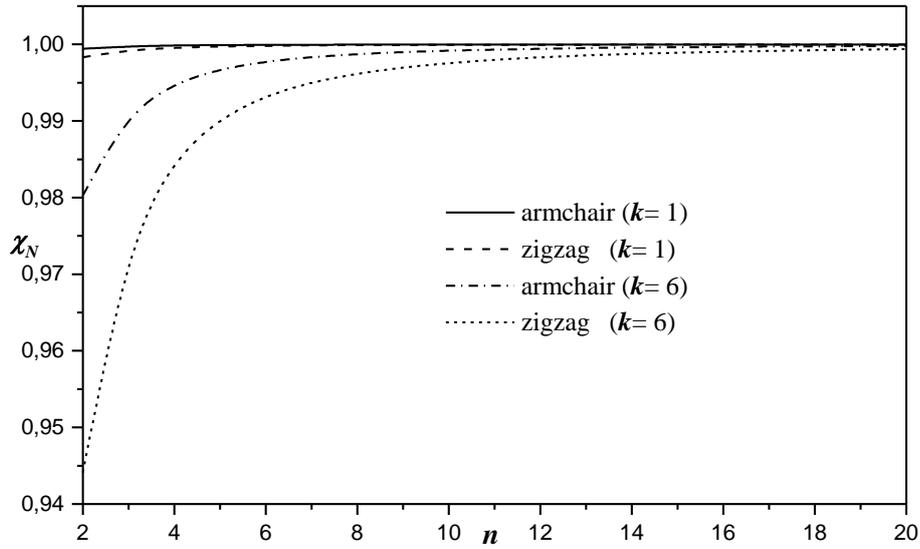


Fig.IV. 6: Relation entre les valeurs du rapport χ_N et la chiralité du nanotube de carbone du type armchair et zigzag dans le cas de température ambiante ($\theta = 40$ K), avec $L/d = 40$.

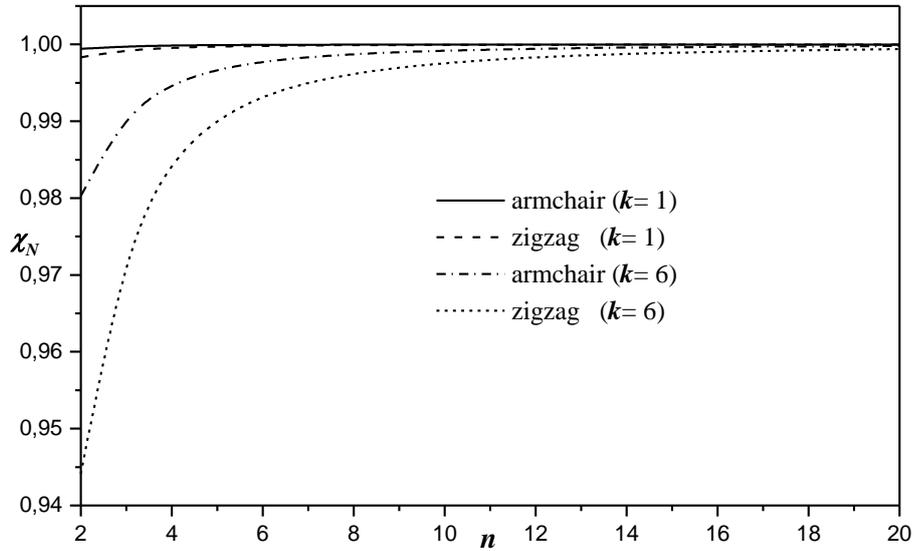


Fig.IV. 7: Relation entre les valeurs du rapport χ_N et la chiralité du nanotube de carbone du type armchair et zigzag dans le cas de température élevée ($\theta = 40$ K), avec $L/d = 40$.

La relation entre le rapport de fréquences (χ_N) et la caractéristique de structure du nanotube (n) pour les types armchair et zigzag avec $L/d = 40$ et $\theta = 40$ K est illustrée dans les figures : (IV.6) et (IV.7)

RESULTATS ET DISCUSSIONS

Il est tout clair des deux figures (IV.6) et (IV.7) que pour les deux cas de température que soit basse ou élevée, le rapport de fréquences (χ_N) est inférieure à l'unité. Ceci veut dire que l'application du model local de poutre de Reddy pour l'analyse des CNT va mener à une bonne prédiction des fréquences si l'effet d'échelle entre les atomes de carbonnes du CNT est négligé pour des grandes valeurs de n .

On peut aussi observer que le rapport de fréquences (χ_N) montre qu'il y a une dépendance du caractéristique de structure n pour les types de nanotubes : armchair et zigzag surtout pour les petites valeurs de n et pour les modes élevés de vibration. Cependant, pour les CNTs de grandes tailles (n élevé) cette dépendance devient très limitée quel que soit le nombre de mode k .

la raison de ce phénomène est qu'un nanotube de carbone d'indice de maille n petit a une plus grande courbure qui produit une distorsion des liaisons C-C plus signifiante. En plus de ça, la chiralité du CNT n'a pas d'effet observable sur le rapport de fréquence χ_N lorsqu'on considère le mode fondamental ($k=1$). On trouve que ce rapport pour le type de CNT zigzag est légèrement inférieur à celui du type armchair pour le mode fondamental. Cependant pour les modes élevés (e.g. $k = 6$), la différence devient importante. Ceci implique que la réduction des fréquences est spécialement signifiante pour les modes de vibrations élevés. Et à ce moment l'effet d'échelle faible ne peut pas être négligé.

La réduction peut être expliquée comme suit : le petit effet d'échelle rend le CNT plus flexible de tel sorte que le model non locale peut être considéré comme des atomes liés par des liaisons élastiques alors que le model local continu considère que les constantes des liaisons prennent des valeurs infinies.

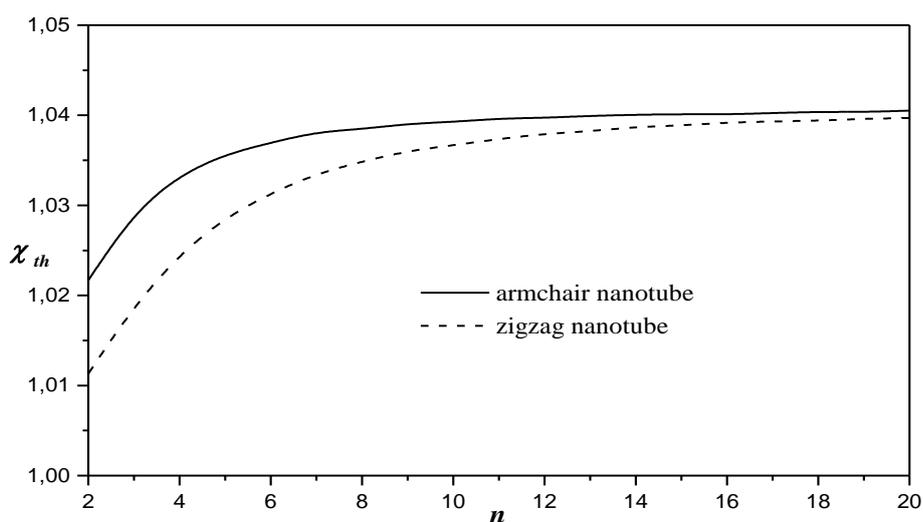


Fig.IV. 8: Relation entre les valeurs du rapport χ_{th} et la chiralité du nanotube de carbone du type armchair et zigzag dans le cas de température basse ou ambiante ($\theta = 40$ K), avec $L/d = 40$, et ($k = 1$).

RESULTATS ET DISCUSSIONS

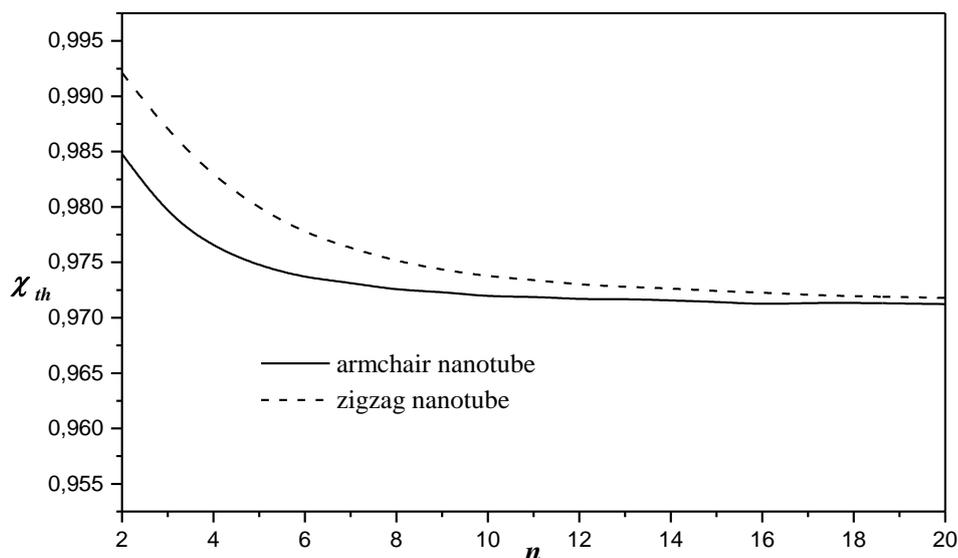


Fig.IV. 9:Relation entre les valeurs du rapport χ_{th} et la chiralité du nanotube de carbone du type armchair et zigzag dans le cas de haute température ($\theta = 40$ K), avec $L/d = 40$, et ($k = 1$).

Les figures (IV.8)et(IV.9) montrent la dépendance du rapport de fréquence (χ_{th}) de la chiralité (n) des CNTs de type armchair et zigzag pour les deux cas de températures basse et élevée. On peut observer que la chiralité du nanotube a un effet significatif sur le rapport χ_{th} pour le cas du mode fondamental.

Certainement cet effet est plus important pour les petites valeurs de "n". En plus, on peut observer qu'à une température ambiante ou basse le rapport χ_{th} du CNT de type armchair est légèrement supérieur à celui du CNT de type zigzag pour le mode fondamental, contrairement au cas de haute température.

Comme signalé par Jiang et al. [Jiang 2004] les coefficients de l'expansion thermique des CNTs sont négatives à basses températures et deviennent positive à des températures élevées. Par Conséquence deux cas de température sont considérés. Pour le cas de température ambiante ou basse température, on suppose $\alpha = - 1.6 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ et Pour le cas de haute température on suppose $\alpha = 1.1 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [Yao 2006] , [Yao 2007]. Pour estimer l'effet d'échelle et de la variation de température sur la vibration des SWCNTs de types armchair et zigzag, on peut juger que les résultats avec ou sans ces paramètres sont comparables

IV. 3.Partie flambement

En analysant les graphes suivants on constate qu'il y a deux paramètres qui entre en jeu : le quotient ($q=L/d$) qui détermine le rapport entre la longueur du nanotube et son diamètre et le paramètre (eoa) qui représente le taux de contribution du réseau cristallin dans le comportement du nanotube envers une force extérieure ou une variation de température en un point donnée du nanotube. On discute l'effet d'échelle sur le phénomène de flambement au cas d'un nanotube de type armchair avec un quotient (q)fixe.

a-Extrémités appuyée – appuyée :

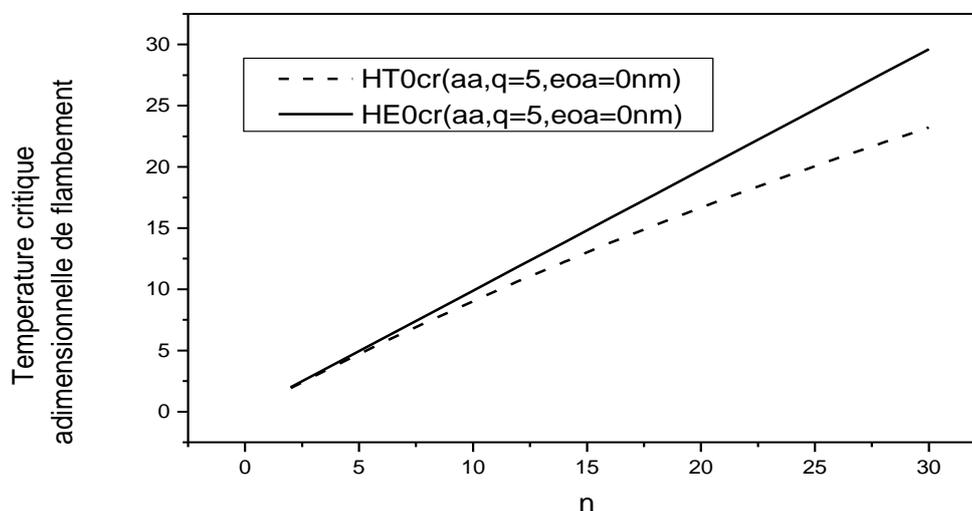


Fig.IV. 10- Températures critiques adimensionnelles de flambement local de Timochenko et d'Euler en fonction de la chiralité n pour extrémité appuyée -appuyée

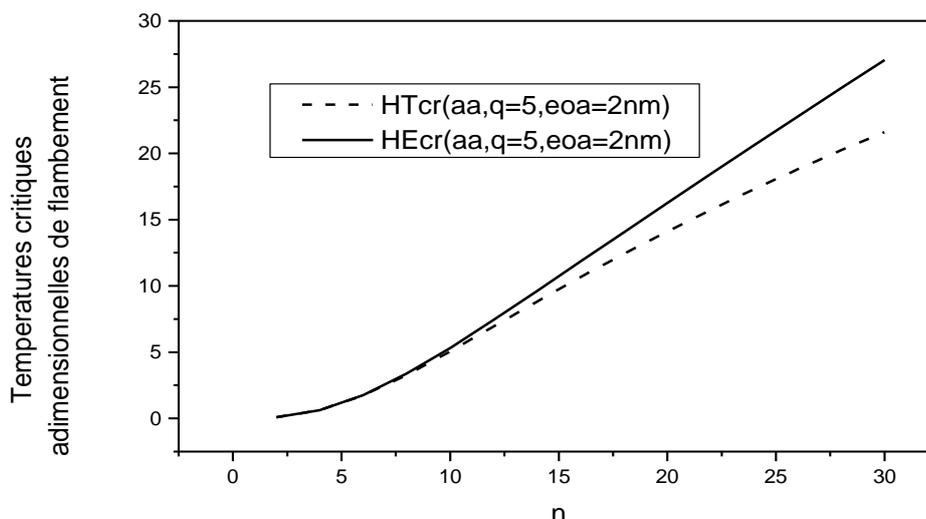


Fig.IV. 11- Températures critiques adimensionnelles de flambement **non local** de Timochenko et d'Euler en fonction de la chiralité n pour extrémités appuyée -appuyée

Pour une charge due à l'élévation de température ,et pour le même rapport L/d ;L'effet d'échelle dû à la contribution du réseau a un effet important sur les nanotubes de plus courte taille ($n < 10$), mais dans cette gamme de tailles, la théorie de Timochenko rejoint celle d'Euler en ce qui concerne les températures critiques de flambement prévues.la température critique de flambement augmente presque linéairement avec le nombre de structure n dans le cas de ($n > 10$:diamètres grands).Mais dans ce domaine de la théorie d'Euler prévoit des températures critiques de flambement un peut élevées par rapport à celles prévues par la théorie de Timochenko, voir figures : (IV. 10) et (IV. 11).

b-Extrémités encastrée- encastrée :

RESULTATS ET DISCUSSIONS

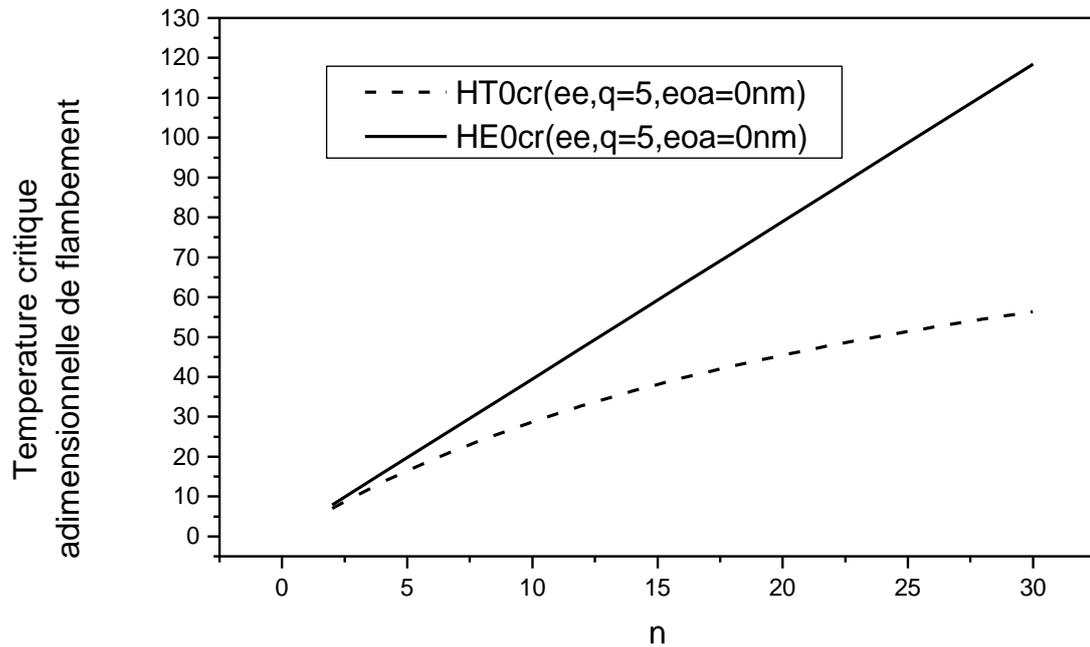


Fig.IV. 12- Températures critiques adimensionnelles de flambement **local** de Timochenko et d'Euler en fonction de la chiralité n pour des extrémités encastrée-encastrée

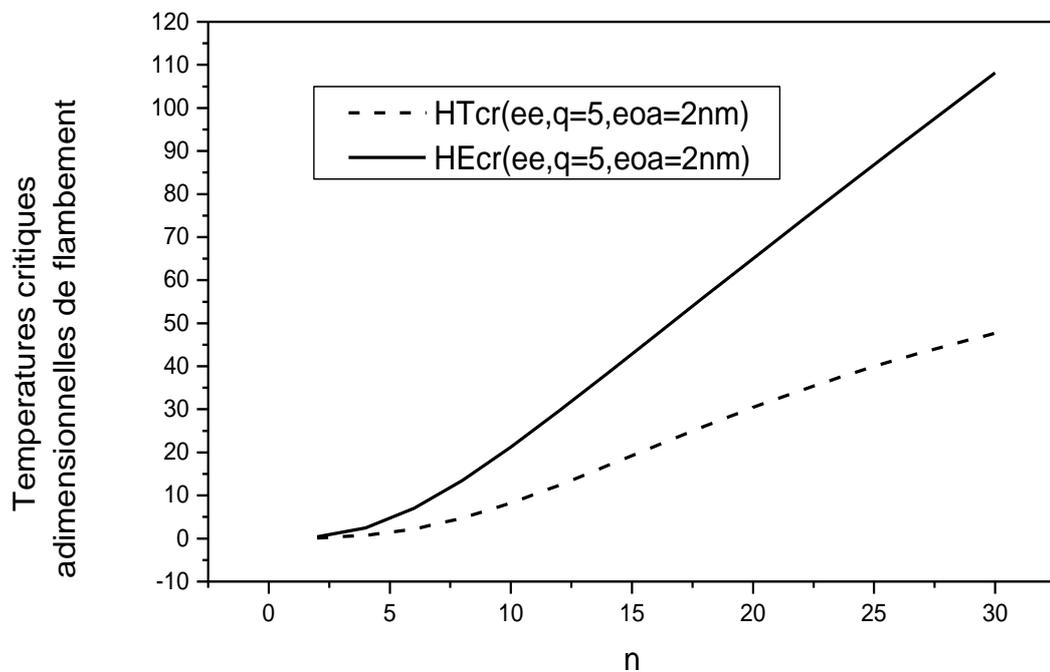


Fig.IV. 13- Températures critiques adimensionnelles de flambement **non local** de Timochenko et d'Euler en fonction de la chiralité n pour des extrémités encastrée-encastrée

RESULTATS ET DISCUSSIONS

Dans les figures (IV. 12 et IV. 13) , les conditions au limites détermine un nanotube de carbone de type armchair dont les deux extrémités sont encastrées .en appliquant une élévation de température ,on peut constater que les températures critiques de flambement sont basses pour les nanotubes de petites tailles ($n < 10$), et l'effet d'échelle a une influence importante .

L'écart de températures critiques prévues par la théorie d'Euler dont la fonction varie presque linéairement avec (n), et celles prévues par la théorie de Timochenko est large, avec une supériorité de l'estimation d'Euler .cet écart est plus important pour les tubes de grandes tailles ($n > 10$).

c-Extrémités encastrée – libre :

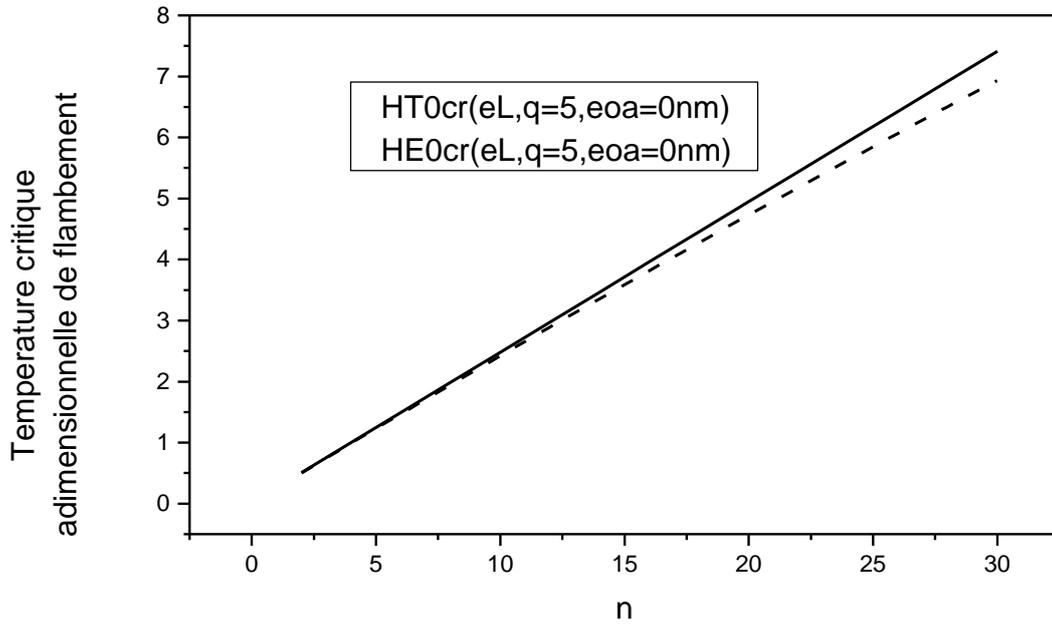


Fig.IV. 14- Températures critiques adimensionnelles de flambement **local** de Timochenko et d'Euler en fonction de la chiralité **n** pour extrémités **encastrée-libre**

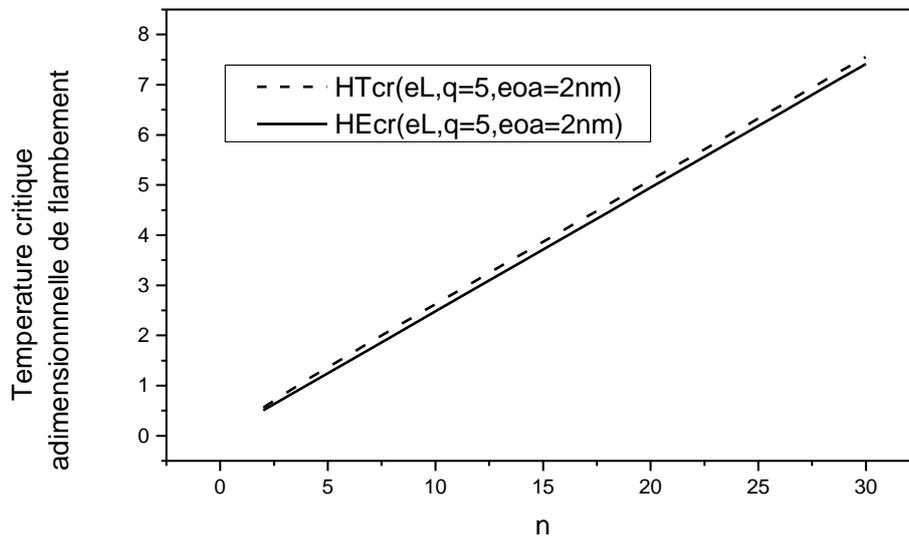


Fig.IV. 15 - Températures critiques adimensionnelles de flambement **non local** de Timochenko et d'Euler en fonction de la chiralité **n** pour extrémité **encastrée-libre**

RESULTATS ET DISCUSSIONS

Dans les figures (IV. 14 et IV. 15) , les conditions au limites détermine un nanotube de carbone de type armchair dont l'une des deux extrémités est encastrée, l'autre est libre .en appliquant une élévation de température ,on peut constater que les températures critiques de flambement varient d'une façon linéaire en fonction de la caractéristique n du nanotube, et l'effet d'échelle n'a presque aucune influence .

L'écart de températures critiques prévues par la théorie d'Euler, et celles prévues par la théorie de Timochenko est très petit , avec une supériorité claire de l'estimation de Timochenko sur celle d'Euler si on prend en considération l'effet d'échelle eoa, et l'inverse au cas de l'effet locale(eoa=0nm).

Conclusion

Selon cette étude les nanotubes de carbone peuvent résister à d'énormes changements mécaniques ou calorifiques, en plus de leur légèreté et leur coût moins cher si on les compare à d'autres matériaux largement utilisés tels que le cuivre et l'aluminium dans le domaine électronique ; ce qui justifie l'importance technologique donnée à ces nouvelles formes de matériaux.

CONCLUSION GENERALE

Cette thèse avait pour but d'étudier les propriétés physiques des nanotubes de carbone mono parois de types armchair et zigzag et puis analyser leurs caractéristiques vibratoires et faire une comparaison. Cette étude a été basée sur La théorie non locale des milieux continus proposée par Eringen, mais cette fois en utilisant le model de Reddy. Les formulations Théoriques comprennent l'effet d'échelle représenté par le paramètre $e_0 a$, la variation de température (θ) et la chiralité des nanotubes caractérisée par le nombre entier (n). Les résultats de cette étude montrent que les nanotubes de petit diamètre (inférieur à 1nm) ont une rigidité un peut faible par rapport aux autres nanotubes (diamètre supérieur à 1nm). D'autre par les nanotubes de carbone type armchair sont plus rigide que les nanotubes du type zigzag.

Les caractéristiques de vibration représentées par le rapport de fréquence (χ_N) dépendent de la chiralité (n) des nanotubes. D'autre paramètres influent sur le rapport de fréquences (χ_N): on voit qu'il diminue avec l'augmentation du nombre de mode (k) et augmentent avec l'augmentation du rapport (L/d). L'effet thermique sur les fréquences pour une basse température diminue avec l'augmentation du nombre de mode (k) et augmente avec l'augmentation du rapport (L/d), l'indice de chiralité (n) et le changement de température (θ). Tandis qu'à haute température l'effet thermique augmente si le nombre de mode (k) augmente

et diminue si le rapport (L/d), l'indice de chiralité (n) et le changement de température (θ) augmentent. Pour un nanotube type Armchair avec une chiralité (n) plus grande, la dépendance devient très faible. Ce phénomène signifie que pour un nanotube de carbone avec des indices de maille plus petites (n) a une grande courbure, ce qui entraîne une déformation plus importante de liaisons (C-C) du nanotube. Tandis que l'effet d'échelle devient moins important avec l'augmentation du rapport (L/d) Par conséquent, il est clair que l'effet à petite échelle est important pour les nanotubes courts.

Concernant le phénomène de flambement d'un CNT de type armchair, dû à l'effet de température, étudié à travers la théorie de Timochenko, il dépend des conditions initiales et de la caractéristique (n) du nanotube.

Enfin, cette étude peut servir comme une base de données pour les futurs chercheurs dans le but de développer et d'approfondir les connaissances dans le domaine d'utilisation des nanotubes de carbone.

A titre d'exemple ,si on voit l'évolution des connaissances dans domaine des propriétés électroniques de ces nanotubes ,et lors de dernières recherches, les chercheurs avaient observé une transmission de courant électrique dans le spectre des micro-ondes (de 1 à 10 GHz) dans des SWNT de 10 et 100 micromètres, sans toutefois réussir à évaluer la conductance de ces nanotubes. Leurs travaux , publiés dans la revue Nano Letters, ont permis de déterminer ce paramètre.

CONCLUSION GENERALE

L'équipe a ainsi découvert que la conductance en AC est sensiblement égale aux conductances en DC pour des fréquences allant jusqu'à 10 GHz. Ceci implique que les SWNT sont capables de propager le signal électrique dans un régime de haute fréquence.

Cette démonstration est un pas supplémentaire vers la mise au point d'interconnexions très rapides (bien plus rapides qu'avec le cuivre actuellement utilisé) à l'aide de connecteurs en nanotubes dans les circuits intégrés, sans atteindre les températures critiques de flambement qui peuvent leur causer des déformations influençant ainsi leurs fonctions.

BIBLIOGRAPHIE

-A-

- 1- [Ajayan 1993 (1)] P. M. Ajayan, S. Iijima, Capillarity-induced filling of carbon nanotubes, Nature 333-361 (1993).
- 2- [Arash 2010] Arash, B., Ansari, R. (2010). "Evaluation of nonlocal parameter in the vibrations of single-walled carbon nanotubes with initial strain." Physica E, 42, 2058–2064.
- 3- [Arash 2012] B. Arash, Q. Wang, *Comp. Mater. Sci.*, 51(2012) 303–313.
- 4- [Avouris 2003] P. Avouris, J. Appenzeller, R. Martel, S.J. Wind, Proc. IEEE 91 (11) (2003) 1772.

-B-

- 5- [Benzair 2008] A. Benzair, A. Tounsi, A. Besseghier, H. Heireche, N. Moulay, and L. Boumia, J. Phys. D. 41 (2008) 225404.
- 6- [Berber 2000] S. Berber, Y.-K. Kwon, D. Tománek, Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes, Phys. Rev. Lett., (2000), 84, 4613-4616.
- 7- [Bernard 2007] C. Bernard, Propriétés mécaniques des nanotubes de carbone en tant que nanosondes et leur fonctionnalisation par bio-nanoparticules, thèse de doctorat, l'Université Bordeaux I, (2007).

-C-

- 8- [Charlier 2003] J. C. Charlier, Propriétés électroniques des nanotubes de carbone, Cours Ecole Nanotube Aussois, (Mai 2003).
- 9- [Cornwell 1998] C.F. Cornwell, L.T. Wille. Simulations of the elastic response of single-walled carbon nanotubes. *Comput Mater Sci* 1998(10):42–5.
- 10- [Cornell 1995] W.D. Cornell, P. Cieplak, C.I. Bayly, et al., J Am Chem Soc 117, 5179–97 (1995).

-D-

- 11- [Dai 1996] H. Dai, J.H. Hafner, A.G. Rinzler, D.T. Colbert, R.E. Smalley, Nature 384 (1996) 147.
- 12- [Dalton 2003] A.B. Dalton, S. Collins, E. Muñoz, J.M. Razal, V.H. Ebron, J.P. Ferraris, J.N. Coleman, B.G. Kim, R.H. Baughman, Super-tough carbon-nanotube fibres, Nature, 423 (2003) 703.
- 13- [Dharap 2004] P. Dharap, Nanotechnology 15 (2004) 379.

- 14- [Ducastelle 2003]F. Ducastelle, Propriétés électroniques, Cours Ecole Nanotube Aussois (Mai 2003).
- 15- [Dunlap 1992]B. I. Dunlap. Physical Review B, 46: 1933 (1992).

-E-

- 16- [Eringen 1983]A.C. Eringen, J. Appl. Phys. 54 (1983) 4703.
- 17- [Eringen 2002]A.C. Eringen, Nonlocal Continuum Field Theories, Springer, New York, 2002.

-G-

- 18- [Gao 2001]Y. Gao, X. Shi, Y. Zhao. Mechanical behaviour of carbon nanotubes. J. MechStrength 2001;23(4):402–12.
- 19- [Gohier 2007] A. Gohier, Cinétique de Croissance de Nanotube de Carbone Mono-Parois et Multi-Parois Orientes par Procède Plasma, Thèse de Doctorat, l'Université de Nantes (Sciences des Matériaux), 2007.
- 20- [Grobert 1999] N. Grobert, W.K. Hsu, Y.Q. Zhu, J.P. Hare, H.W. Kroto, D.R.M. Walton, M. Terrones, H. Terrones, Ph. Redlich, M. Rühle, R. Escudero, F. Morales, Enhanced magnetic coercivities in Fe nanowires, Applied Physics Letters, 75 (1999) 3363.
- 21- [Guo 2004]L. Guo, J. Liang, S. Dong, Z. Xu, Q. Zhao, Property of carbon nanotube tip for surface topography characterization, Applied Surface Science, 228 (2004) 53.

-H-

- 22- [Hafner 1999]J.H. Hafner, C.L. Cheung, C.M. Lieber, Direct Growth of Single-Walled Carbon Nanotube Scanning Probe Microscopy Tip, Journal of the American Chemical Society, 121 (1999) 9750.
- 23- [Hamada 1992]N. Hamada, S. Sawada, A. Oshiyama, New one-dimensional conductors – graphitic microtubules, Phys. Rev. Lett., 68, 1579 (1992).
- 24- [He 2005]X.Q. He, S. Kitipornchaia, K.M. Liewb, J. Mech. Phys. Solids 53 (2005) 303
- 25- [Heath 1985],J. R. Heath, S. C. O'Brien, Q. Zhang, Y. Liu, R. F. Curl, H. W. Kroto, F. K. Tittel, R. E. Smalley, J. Am. Lanthanum complexes of spheroidal carbon shells, Chem. Soc., 107 7780 (1985).
- 26- [Hernandez 1998]E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio. Elastic properties of C and BXCYNZ composite nanotubes. Phys Rev Lett 1998;80:4502–5.
- 27- [Heyliger1988] PR.Heyliger, JN. Reddy. A higher order beam finite element for bending and vibration problems. J Sound Vib 1988;126(2):309–26.
- 28- [Heireche 2008]H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. Adda Bedia, Physica E 40 (2008) 2791.

- 29- [Hone 1999]J. Hone, M. Whitney, A. Zettl, Thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes, *Synth. Met.*, (1999), 103, 2498-2499.
- 30- [Houdyp 2006]P.Houdyp, C.Brechignac, M.Lahmani, *Les nanosciences, Nanomatériaux et nanochimie: La collection Échelles*, Éditions Belin, (2006), p.687.
- 31- [Hure 2002] P. Hure, M. Guimon, *Les appareils de protection respiratoire: Choix et utilisation*. INRS, ED 780, (2002).

-I-

- 32- [Iijima, 1991]S. Iijima, *Nature* **354** :56 (1991).
- 33- [Izard 2004] N. Izard, *nanotubes de carbone : Systèmes pour la limitation optique*, thèse de doctorat, l'Université Montpellier II, (2004).

-J-

- 34- [Jiang 2002]K. Jiang, Q. Li, S. Fan, Spinning continuous carbon nanotube yarns, *Nature*, 419 (2002) 801.
- 35- [Jiang 2004]H. Jiang, R. Liu, Y. Huang and K.C. Hwang, *J. Eng. Mater. Technol.* 126, 265 (2004).

-K-

- 36- [Krishnan 1998]A. Krishnan, E. Dujardin, TW. Ebbesen, et al. Young's modulus of single-walled nanotubes. *Phys Rev B* 1998;58(20):14013–9.
- 37- [Kroto 1985]H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature*, 318 :162 (1985).
- 38- [Kumar 2002] S. Kumar, T.D. Dang, F.E. Arnold, A.R. Bhattacharyya, B.G. Min, X. Zhang, R.A. Vaia, C. Park, W.W. Adams, R.H. Hauge, R.E. Smalley, S. Ramesh, P.A. Willis, *Synthesis, Structure, and Properties of PBO/SWNT Composites*, *Macromolecules*, 35 (2002) 9039.

- 39- . [Kitipornchaia 2005]X.Q. He, S. Kitipornchaia, K.M. Liewb, *J. Mech. Phys. Solids* 53 (2005) 303.

-L-

- 40- [Lassagne 2006] B. Lassagne, *Transport électronique dans les nanotubes de carbone: étude sous champ magnétique*, thèse de doctorat, l'Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, (2006).

- 41- [Li 2003] C. Li, T.W. Chou, Int. J. Solids Struct. 40 (2003) 2487.
- 42- [Li 2004] Y.-L. Li, I.A. Kinloch, A.H. Windle, Direct Spinning of Carbon Nanotube Fibers from Chemical Vapor Deposition Synthesis, Science, 304 (2004) 276.
- 43- [Lu 1997] J. Lu, Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes. Phys Rev Lett 1997;79:1297–300.
- 44- [Ludovic 2014] Ludovic Robin. « *Pointes AFM à nanotubes de carbone pour la métrologie in-line des procédés de fonctionnalisation de surface* » à Bordeaux. 2014

-M-

- 45- [Mahmood 2010] Mahmood M. Shokrieh, R. Rafiee, Prediction of Young's modulus of graphene sheets and carbon nanotubes using nanoscale continuum mechanics approach, Materials and Design 31 (2010) 790–795
- 46- [Mallick 1997] P.K. Mallick, Composites Engineering Handbook, Marcel Dekker, USA, 1997.
- 47- [Marcoux 2002] P. Marcoux, Réactivité et manipulation de nanotubes de carbone monocouches : fonctionnalisation de surface par greffage covalent et mise en oeuvre comme agent structurant, thèse de doctorat, Université d'Angers, (2002).
- 48- [Mintmire 1993] J. W. Mintmire, D. H. Robertson, C. T. White, J. Phys. Chem. Solids, (1993), 54, 1835.
- 49- [Mishra 2000] S. R. Mishra, H. S. Rawat, S. C. Mehendale, K. C. Rustagi, A. K. Sood, R. Bandyopadhyay, A. Govindaraj, C. N. R. Rao, Optical limiting in single-walled carbon nanotube suspensions, Chem. Phys. Lett., (2000), 317, 510-514.

-P-

- 50- [Popov 2000] V.N. Popov, V.E. Van Doren, M. Balkanski: Phys. Rev. B 61, 3078 (2000).

-R-

- 51- [Rappe 1992] A.K. Rappe, C.J. Casewit, K.S. Colwell, et al. A full periodic-table forcefield for molecular mechanics and molecular dynamics simulation. J Am Chem Soc 1992;114:10024–35.
- 52- [Reddy 2007] J.N. Reddy, Int. J. Eng. Sci. 45 (2007) 288.
- 53- [Reddy 1984] J.N. Reddy, J. Appl. Mech. 51 (1984) 745–52.
- 54- [Reddy 2007] J.N. Reddy, Int. J. Eng. Sci. 45 (2007) 288.
- 55- [Ricaud 2008] M. Ricaud, F. R. D. Lafon, Les nanotubes de carbone : quels risques, quelle prévention?, INRS-Cahiers de notes documentaires ND 2286-210-08, 210, 43 (2008).

- 56- [Ru 2000] C.Q. Ru, Phys. Rev. B 62 (2000) 10405.
- 57- [Ruoff 1995]R. S. Ruoff, D. C. Lorents, Carbon, (1995), 33, 925.
- S-
- 58- [Saint-aubin 2010] K. Saint-aubin, Etude de dispersions de nanotubes de carbone par des polymères pour l'élaboration de composites conducteurs et structurés, thèse de doctorat, l'Université Bordeaux I, (2010).
- 59- [Saito 1998]R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, Physical Properties of Carbon Nanotubes. Imperial College Press, (1998). ISBN N° 1-86094-093-5.
- 60- [Salvetat 1999 (1)] JP. Salvetat, AJ. Kulik, JM. Bonard, et al. Elastic modulus of ordered and disordered multiwalled carbon nanotubes. Advanced Materials 1999;11(2):161–5.
- 61- [Salvetat 1999 (2)]JP. Salvetat, GAD. Briggs, JM. Bonard, et al. Elastic and shear modulus of single-walled carbon nanotube ropes. Phys Rev Lett 1999;82(5):944–7.
- 62- [Shen 2001]H.S. Shen, Int. J. Solids Struct. 43 (2001) 1259.
- 63- [Shintani 2003]K. Shintani, T. Narita. Atomistic study of strain dependence of Poisson's ratio of single-walled carbon nanotubes. Surf Sci 2003;532-535:862–8.
- 64- [Smith 1998]B.W. Smith, M. Monthieux, D.E. Luzzi, Nature, 396, 323 (1998).
- 65- [Stones 1986]A. J. Stones, D. J. Wales, Chem. Phys. Lett., (1986), 128, 501.
- 66- [Strutt 1945]J.S. Strutt (Lord Rayleigh). Theory of sound. Dover publications, 1945.
- 67- [Suenaga1 2000]K. Suenaga1, M. Tencé, C. Mory, C. Colliex, H. Kato, T. Okazaki, H. Shinohara, K. Hirahara, S. Bandow, S. Iijima, Element-Selective Single Atom Imaging, Science, 290 (2000) 2280.
- 68- [Suenaga1 2001]K. Suenaga1, E. Sandré, C. Colliex, C. J. Pickard, H. Kataura, S. Iijima, Physical Review B, 63 (2001) 165408.
- 69- [Sun 1998]X. Sun, R. Q. Yu, G. Q. Xu, T. S. A. Hor, W. Ji, Broadband optical limiting with multiwalled carbon nanotubes, Appl. Phys. Lett., (1998), 73, 3632-3634.

-T-

- 70- [Tans 1997] S.J.Tans, M.H.DevoretH.DaiA.ThessR.E.SmalleyL.J.GeerligsC.DekkerIndividual Single-wallcarbon nanotubes as quantum wires, Nature, 386, 474-477 (1997).
- 71- [Thostenson 1899] Thostenson ET, Ren Z, Chou TW. Advances in the science and technology of carbon nanotubes and their composites: a review. Compos Sci Technol 2001;61:1899–912.

- 72- [Tounsi 2013] A. Tounsi, A. Semmah, A.A. Bousahla, *Journal of Nanomechanics and Micromechanics (ASCE)* (2013) In press
- 73- [Tounsi 2013] A. Tounsi, S. Benguediab, E.A. AddaBedia, A. Semmah, M. Zidour, *Advance in Nano Research* (2013) In press.
- 74- [Tserpes 2005] K.I. Tserpes, P. Papanikos, *Composites Part B* 36 (2005) 468.

-V-

- 75- [Vigolo 2000] B. Vigolo, A. Pénicaud, C. Coulon, C. Sauder, R. Pailler, C. Journet, P. Bernier, P. Poulin, *Macroscopic fibers and ribbons of oriented carbon nanotubes*, *Science*, 290, 1331-1334 (2000).
- 76- [Vivien 1999] L. Vivien, E. Anglaret, D. Riehl, F. Bacou, C. Journet, C. Goze, M. Andrieux, M. Brunet, F. Lafonta, P. Bernier, F. Hache, *Single-wall carbon nanotubes for optical limiting*, *Chem. Phys. Lett.*, (1999), 307, 317-319 et *ibid* (1999), 312, 617.
- 77-

-W-

- 78- [Wang 2007] Q. Wang, C.M. Wang, *Nanotechnology* 18 (2007) 075702.
- 79- [Wei 2001] B.Q. Wei, R. Vajtai, P.M. Ajayan, , *Applied Physics Letters*, 79, no. 8 (2001) 1172-1174.
- 80- [Wildöer 1998] J. W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, C. Dekker, *Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes* *Nature (London)*, 391, 59-61 (1998).
- 81- [Wu 2006] Y. Wu, X. Zhang, A.Y.T. Leung, W. Zhong, *Thin-Walled Structures* 44 (2006) 667 – 676.

-X-

- 82- [Xiao 2005] J.R. Xiao, B.A. Gama, Jr, J.W. Gillespie, *Int J Solids Struct* 42, 3075 (2005).
- 83- [Xu 2001] J. M. Xu, *Highly ordered carbon nanotubes arrays and IR detection*, *Infrared Physics & Technology*, (2001), 42, 485-491.

-Y-

- 84- [Yakobson 1996] B.I. Yakobson, C.J. Brabec, J. Bernholc, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 2511.
- 85- [Yao 2002] Z. Yao, C. Zhu, M. Cheng, et al. *Research on mechanical properties of carbon nanotube using molecular dynamics*. *Vac Electron* 2002;5:5-7.

- 86- [Yao 2006]X.H. Yao and Q. Han, J. Eng. Mater. Technol. 128, 419 (2006).
- 87- [Yao 2007] X.H. Yao and Q. Han, Compos.Sci. Technol. 67, 125 (2007).
- 88- [Yongdong 2006]W.Yongdong, Z. Xiaochun, University of Hong Kong, Thin-Walled Structures 44 (2006) 667–676.
- Z-
- 89- [Zhang 2004]M. Zhang, K.R. Atkinson, R.H. Baughman, Multifunctional Carbon Nanotube Yarns by Downsizing an Ancient Technology, Science 306 (2004) 1358.
- 90- [Zhang 2005] Y.Q. Zhang, G.R. Liu, X.Y. Xie, Phys. Rev. B 71.195404 (2005) 71.195404.
- 91- [Zhang 2006]Y. Wu, X. Zhang, A.Y.T. Leung, W. Zhong, Thin-Walled Structures 44 (2006) 667 – 676.
- 92- [Zhang 2009] Y.Y. Zhang, C.M. Wang, V.B.C. Tan, Adv. Appl. Math. Mech. 1 (1) (2009) 89.