



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
CENTRE UNIVERSITAIRE DE TISSEMSILT



MEMOIRE DE MASTER

Présenté par :

- Braik Fatiha.
- Cheboub Fatma.

Filière : PHYSIQUES

Spécialité : Nanostructures Semiconductrices

Intitulé

**l'effet de la température sur la vibration des nanotubes de
carbone**

Devant le jury composé de :

Président	M^f. Merabet Mustapha	MCA. C. Universitaire de Tissemsilt
Directeur de thèse	M^f. Boumia Lakhdar	MAA. C. Universitaire de Tissemsilt
Examineur	M^f. Hadj Zoubir Miloud	MCB. C. Universitaire de Tissemsilt

Année universitaire : 2015/2016

Dédicace

Je dédie ce mémoire à toute ma famille, mon père , ma mère , mes frères Saad et Rachida et toutes mes sœurs.

et ma grand_mère Chafia Fatma

Je dédie particulièrement à ma grand-père , ma grande mère , ma tante Zohra et aicha, et mon oncle Djilali.

Je dédie aussi à tous mes oncles et tantes, cousins et cousines, particulièrement Inass; Firyal ; Manel

Enfin je dédie à tous mes amis que je n'ai pas cités et à tous ceux qui me connaissent.

Qu'ils trouvent à travers ce travail ma sincère reconnaissance.

** FATIHA HOURIA **

Dédicace

Je dédie ce mémoire à toute ma famille, mon père , ma mère , mes frères Saad et Rachida et toutes mes sœurs.

et ma grand_mère Chafia Fatma

Je dédie particulièrement à ma grand-père , ma grande mère , ma tante Zohra et aicha, et mon oncle Djilali.

Je dédie aussi à tous mes oncles et tantes, cousins et cousines, particulièrement Inass; Firyal ; Manel

Enfin je dédie à tous mes amis que je n'ai pas cités et à tous ceux qui me connaissent.

Qu'ils trouvent à travers ce travail ma sincère reconnaissance.

** FATIHA HOURIA**

Table des matières :

Introduction générale.

I.Généralités sur les nanotubes de carbone.

I.1. Introduction	04
I.2 Historique	04
I.3. Les différents types de carbone.....	05
I.3.1. Le graphite	05
I.3.2. Le diamant.....	06
I .3.3. Définition	09
I.3.4. Structure des nanotubes de carbone	09
I.3.5. Nanotubes de carbones monofeuillets, SWNT (Single Walled Nanotube).....	09
I.3.6. Nanotubes de carbone multifeuillets, MWNT (Multi Walled Nanotubes).....	11
I.4. Propriétés des nanotubes de carbone.....	13
I.4.1. Propriétés mécaniques.....	14
I.4 2. Les propriétés électriques.....	15
I.4.3. Les propriétés thermiques.....	18
I.4.4. Propriétés d'adsorption.....	19
I.5. Méthodes de synthèse des NTC.....	21
I.5.1. Arc électrique.....	22
I.5.2. Méthode d'ablation laser.....	23
I.5.3. Synthèse des nanotubes de type HiPCO.....	24
I.5.4. La synthèse par décomposition chimique en phase vapeur.....	25
I.6. Les applications des nanotubes de carbone.....	26
I.6.1. L'électronique.....	26
I.6.2. Le stockage d'énergie.....	27
I.6.3. Les capteurs.....	28
I.7. Conclusion	29
II. Modèle utilisées et formulation	
II.1 .Introduction.....	32
II.2. Les condition de calcul.....	32
II.2.1. Modèle Euler-Bernoulli.....	33
II.2.2 Modèle Timoshenko	35
II.2.2.1 Principe de la théorie.....	35

II.2.2.2. Inertie de rotation	35
II.3. Le modèle élastique nonlocal de nanotubes de carbone double paroi avec l'effet de la Température.....	37
II.4. les solutions mathématique du problème.....	41
II.5 .Données numériques et résultats	43
II.6 .Discussion sur le paramètre non local e_0	44
II.7. CONCLUSION.....	45
III : Interprétations discussion sur les graphes	
III.1. Introduction.....	49
III.2. Discussion sur les résultats	50
III.2. Discussion sur l'effet de changement de température.....	53
III.3.Conclusion.....	54
Conclusion générale.....	56

Liste des Figures :

Figure I. 1- Structure atomique du carbone graphite.....	06
Figure I. 2: Structure atomique du carbone diamant.....	07
Figure I.3: Structure du fullerène C60.....	08
Figure I.4 Structure d'un plan de graphène en deux dimensions.....	10
Figure I.5: Contrainte mécanique qui induit une flexion dans un nanotube de Carbone.....	14
Figure I.6 : La nature des différents types de nanotubes de carbone.....	17
Figure I.7: Production de nanotubes de carbone par la méthode de l'arc électrique...23	
Figure I.8 : Représentation schématique du procédé CVD.....	26
Figure II .1 notation et géométrie d'un élément de la poutre Euler-Bernoulli.....	33
Fuguer II.2 vibration transversale d'une poutre	34
FIG III.1 L'effet de la petite échelle sur la basse fréquence naturelle ω_{nl} du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ dans le cas de la basse température ($\theta=40$ K).....	45
FIG III.2 L'effet thermique sur la basse fréquence naturelle ω_{nl} du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ et $e_0 a=2nm$ dans le cas de la basse température.....	46
FIG III.3 L'effet thermique sur la haute fréquence naturelle ω_{nII} du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ et $e_0 a=2nm$ dans le cas de la basse température.....	47
FIG III.4 L'effet thermique sur la basse fréquence naturelle ω_{nl} du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ et $e_0 a=2nm$ dans le cas de la haute température.....	47

Liste des tableaux :

Tableau I.1 : calcul du diamètre du nanotube à partir de la chiralité.....**11**

Tableau I.2: Propriétés physiques des nanotubes et des nanofibres de carbone.....**13**

Liste des Notations :

MET : microscopie électronique à transmission.

NTC : nanotube de carbone.

F : désigne le nombre de faces.

V : le nombre de sommets.

E : le nombre d'arêtes.

SWCNT : Single Wall Carbone Nanotubes.

MWCNT : Multi Wall Carbone Nanotube.

C_h : est appelé vecteur chiral.

d_t : le diamètre du nanotube.

DWNT : double walled.

d_{002} : la distance entre deux plans de graphite.

CCVD : Catalytic Chemical Vapor Déposition.

EI : la rigidité de flexion.

M : le moment de flexion.

ρ : le poids de matériel de la barre par volume unitaire.

A : la section.

$p(x)$: la force transversale distribuée le long de l'axe x.

$w(x,t)$: la flexion transversale.

ρ : est la densité massique.

Q : est la force de cisaillement résultante sur la coupe.

N_t : est une force axiale.

σ : est la contrainte axiale nonlocale.

E : est le module de Young.

y : est la coordonnée transversale mesurée positivement dans la direction de la fléché.

T : la température.

P_{12} : la pression de Van Der Waals.

δ : L'espace entre couche.

t : l'espacement initiale de couche intercalaire avant la déformation.

(Δw) : exprime le saut de flexion dû à la déformation.

c : le coefficient d'interaction de Van Der Waals.

α_1 et α_2 : les amplitudes des débattements du nanotube intérieur et extérieur.

ω_{nl} : la fréquence normale inférieur

$e_0 a$: paramètre d'effet d'échelle.

Résumé

L'effet d'échelle sur la propagation des vibrations dans les nanotubes de carbone à double paroi (DWCNTs) sous l'effet de la température est étudié en utilisant le modèle de poutre d'Euler Bernoulli. Des équations dynamiques régissant le nanotube de carbone sont formulées sur la base de la Théorie thermique élastique nonlocal. Les effets du changement de la température et des forces de Van Der Waals entre les nanotubes intérieurs et extérieurs sont pris en considération. Les résultats montrent la signification de l'effet d'échelle sur la propagation de vibration dans DWCNTs et que quelques propriétés des vibrations transversales de DWCNTs dépendent de la variation de la température. Les résultats démontrent le grand potentiel de la théorie nonlocale de poutre proposée en étudiant la propagation de vibration dans CNTs comprenant des effets thermiques et indiquent également les limites de la mécanique locale des milieux continus dans l'analyse des effets d'échelle.

Ce travail devrait être utile dans la conception et l'application dans les domaines des nanoélectroniques et des nanoelectromécaniques.

Abstract

The effect of small size on wave propagation in double-walled carbon nanotubes (DWCNTs) under temperature field is investigated using Euler-Bernoulli beam model. Dynamic governing equations of the carbon nanotube are formulated on the basis of nonlocal thermal elastic theory. The effects of temperature change and Van Der Waals forces between the inner and outer nanotubes are taken into account. Results show the significance of the small-scale effect on wave propagation in DWCNTs and that some properties of transverse vibrations of DWCNTs are dependent on the change of temperature. The results demonstrate the great potential of the proposed nonlocal beam theory in studying wave propagation in CNTs including thermal effects and also indicate the limitations of local continuum mechanics in analysis of small-scale effects.

The work should be useful in the design and application of nanoelectronics and nanoelectromechanical devices.

ملخص

ملخص المقياس المصغر على انتشار الموجة في الأنابيب المجهرية الكربونية مزدوجة الغلاف و تحت تأثير المفعول الحراري هي موضوع بحث باستعمال نموذج اولار بار نولي.

المعادلات الديناميكية المطبقة على هذه الأنابيب كتبت و طورت بالاعتماد على النظرية المطاطية الحرارية لغير المحدد. إن مفعول تغير درجة الحرارة و قوى فان دار وولز بين الأنابيب الداخلية و الخارجية اخدت بعين الاعتبار. و نلاحظ كذلك من خلال النتائج المتحصل عليها مدى مفعول المقاييس المصغرة على انتشار الموجة في الأنابيب المجهرية الكربونية المضاعفة, و أن الكثير من خصائص الموجات الجانبية لهذه الأنابيب تتأثر بمفعول التغير الحراري. هذه النتائج تبين مدى أهمية نظرية غير المحدد المقترحة في دراسة انتشار الموجة في الأنبوب المجهرية الكربوني, أخدين بعين الاعتبار التغير الحراري و كذلك إبراز محدودية فيزياء المحدد للوسط المستمر في تحاليل المقياس المصغر.

هذا العمل مستعمل بكثرة في الرسومات الصناعية, و التطبيقات الالكترونية المجهرية و كذلك في الأدوات المجهرية الكهروميكانيكية.

Introduction générale

Introduction général

Introduction général :

Le nanotube de carbone se présente comme un candidat particulièrement prometteur. En effet, depuis les articles de référence de S. Iijima au début des années 90, les nanotubes de carbone ont été largement caractérisés et se sont avérés très intéressants pour le développement de la nanoélectronique. Grâce à leurs nombreuses propriétés remarquables à l'échelle du nanomètre, les nanotubes de carbone font, toujours à l'heure actuelle, l'objet d'un grand intérêt de la part de la communauté scientifique.

Un nanotube de carbone est une structure unidimensionnelle creuse constituée entièrement d'atomes de carbone. On peut modéliser un nanotube de carbone comme une feuille de graphène recourbée sur elle-même pour former un tube. Les atomes de carbone au sein du nanotube sont essentiellement hybridés sp^2 et organisés suivant une structure hexagonale.

On peut distinguer deux grandes familles de nanotubes : les nanotubes mono parois et le nanotube multiparois. Les nanotubes monoparois se composent d'une seule paroi d'atomes de carbone. Ces nanotubes, dénotés SWNTs (Single-Wall Carbon Nanotubes), ont des diamètres typiques de l'ordre du nanomètre et des longueurs caractéristiques de quelques microns ou plus. Une image réalisée par microscopie à effet tunnel (STM) d'un SWNT où on peut observer l'arrangement des atomes de carbone dans le nanotube. Les nanotubes multiparois, appelés communément MWNTs (Multi-Wall Carbon Nanotubes) ont plusieurs configurations possibles, l'une d'elle étant d'être composée de plusieurs feuillets concentriques d'atomes de carbone imbriqués les uns dans les autres à la manière de « poupées russes ». Leurs diamètres sont plus importants que ceux des SWNTs et peuvent varier entre quelques nanomètres et plusieurs centaines de nanomètres.

Selon leur structure, les SWNTs ont notamment la propriété de pouvoir être semi-conducteurs ou métallique. Cette propriété unique fait du nanotube de carbone un candidat intéressant pour la construction d'une nouvelle électronique moléculaire à base de nanotubes.

Le développement des techniques de synthèse et de connectique des nanotubes de carbone réalisé au cours des dernières années a ouvert la voie à de nombreuses études très prometteuses en nanoélectronique. Le nanotube de carbone a en effet des propriétés de transport unidimensionnel quasi-idéales et peut notamment se comporter

Introduction général

comme un guide d'ondes pour les électrons (conducteur balistique). La description du transport électronique diffère alors d'une description classique pour faire intervenir des termes de transmission d'ondes électroniques se propageant dans le nanotube à travers un nombre très restreint de canaux de conduction. D'autre part, l'étude des nanotubes de carbone a permis la réalisation de transistors à effet de champ de diodes ainsi que de circuits logiques. D'autres applications comme la réalisation de mémoires ou de capteurs utilisant des nanotubes de carbone sont également envisagées. Cependant, il reste actuellement plusieurs problèmes majeurs quant à une application éventuelle des nanotubes à une échelle industrielle. En effet, les techniques de synthèse actuelles ne permettent pas de fabriquer de manière contrôlée la croissance de nanotubes ayant des propriétés structurales et électroniques identiques. D'autre part, malgré les progrès importants réalisés pour connecter des nanotubes de carbone à des électrodes métalliques pour réaliser des circuits électroniques, le contrôle du contact électrique de manière parfaitement reproductible reste très délicat et complexe. Par ailleurs, les difficultés quant à la manipulation et le contrôle précis de la position spatiale des nanotubes sur une surface constituent des obstacles supplémentaires pour une application des nanotubes à grande échelle en électronique. Néanmoins, les recherches sur les nanotubes de carbone arrivent à l'heure actuelle à une maturité suffisante pour ouvrir la voie à de nouvelles applications intéressantes dans d'autres domaines.

Les études théoriques et numériques sur les propriétés mécaniques des CNTs ont été largement utilisées pour comprendre les phénomènes et pour compléter les expériences. Le comportement mécanique des (CNTs) a été exploré par des expériences: simulations de la dynamique moléculaire (MD), et la mécanique élastique continue. L'objectif de ce travail est l'étude des vibrations transverses des nanotubes de carbone sous une charge thermique et incorporé dans un milieu élastique. Les nanotubes de carbone sont classifiés comme simples, double ou multi-murés selon le nombre de tubes de carbone.

Cette étude se concentre sur la vibration et propagation d'ondes sur ceux à doubles parois, soit plus précisément les (DWNT).

L'effet thermique sur la propagation des ondes dans les nanotubes à double paroi de carbone (DWNTs) inclus dans une matrice de polymère est étudié par l'intermédiaire de l'élasticité nonlocal. Les effets de petite taille sur des caractéristiques de vibration

Introduction général

des nanotubes de carbone sont explicitement dérivés par un modèle complet de poutre continu.

Chapitre I

Généralités

I) Introduction

Les CNT ont rapidement suscité un grand intérêt dans le monde des Scientifiques. D'une part, il s'agissait là d'une nouvelle forme stable, dérivée du Carbone, ayant des propriétés physiques différentes de celles du graphite, du diamant et des fullerènes tels que le C60. Également de la famille des fullerènes.

I.2) Historique

Les nanotubes de carbone ont pour la première fois été mis en évidence par une observation de microscopie électronique à transmission (MET) en 1952 et ont été décrits dans *Journal of Physical Chemistry of Russia* comme de longs filaments carbonés ayant une structure tubulaire interne. Cependant, cet article n'a été connu du monde occidental que plus tard à cause de sa langue de rédaction et du contexte conflictuel de l'époque.

L'étude des nanotubes de carbone a été poursuivie dans les années 60 où ils ont tout d'abord été considérés comme un sous-produit d'un procédé chimique industriel pour la production de fullerènes par Bacon [1].

Le carbone est un des éléments les plus abondants dans notre univers et dans notre système solaire. Cet élément chimique se forme à l'intérieur des étoiles par des réactions de fusion nucléaire incluant des noyaux d'hélium. Lors de la mort des étoiles, le carbone et d'autres éléments chimiques sont expulsés dans l'univers et ils se trouvent ainsi dans la composition de notre planète.

Le carbone est aussi un élément primordial pour la vie, car il constitue avec l'oxygène, l'azote et l'hydrogène la base de toute matière organique qui compose les êtres vivants.

Il est très abondant sur notre Terre et peut avoir plusieurs formes cristallographiques différentes, appelées aussi formes allotropiques.

Jusqu'aux années 1985, les scientifiques connaissaient deux formes allotropiques de carbone [2].

I.3) Les différents types de carbone

I.3.1) Le graphite

Le graphite est la forme allotropique du carbone la plus stable à température ambiante et à pression atmosphérique, c'est la forme la plus répandue sur Terre, sa structure est composée d'un agencement de plusieurs plans de graphène superposés (arrangement hexagonal des atomes de carbone dans le plan avec une Hybridation sp^2 [3]. (Nid d'abeille), appelé graphène (figure I.1). Ces plans sont espacés de $3,35\text{\AA}$ et reliés entre eux par des forces faibles de type Van der Waals, ce qui fait du graphite un matériau facilement clivable. Le graphite possède des propriétés thermiques et électriques très anisotropes.

Les liaisons covalentes entre les atomes de carbone dans le graphène confèrent une grande vitesse de propagation aux phonons dans la direction parallèle du plan, il possède ainsi une conductivité thermique d'environ $400\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, cette dernière chute à $5\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ dans la direction perpendiculaire. Quant à sa conductivité électrique, elle est assurée par la délocalisation des électrons sur l'ensemble du plan et atteint $1,7 \times 10^5\text{Sm}^{-1}$ dans la direction du plan et chute pareillement dans la direction perpendiculaire à $7 \times 10^4\text{Sm}^{-1}$. Le graphite a un large domaine d'utilisation qui passe de la vie quotidienne, comme mine des crayons à papier aux applications industrielles, comme les lubrifiants, joints d'étanchéité, balis pour moteurs électriques, modérateur de réacteur nucléaire, etc.[4]

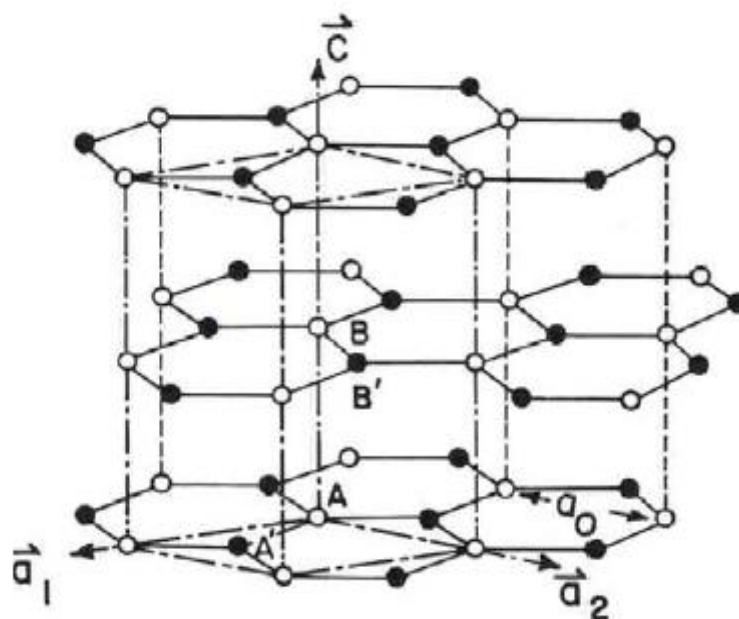


Figure I. 1- Structure atomique du carbone graphite.

I.3.2) 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 [3], comme le diamant hexagonal ou la lonsdaléite, mais la structure la plus courante est de loin le diamant cubique (figure I.2). La maille de cette structure est de type cubique faces centrées, avec un paramètre de maille de 0,356 nm, et une distance interatomique de 0,154 nm [5].

Cette structure lui attribue la plus grande dureté et la conductivité thermique la plus élevée de tous les matériaux d'origine naturelle, d'environ $2200 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. En revanche, et contrairement au graphite, le diamant est un isolant électrique, car il possède une grande bande interdite d'environ 5,4 eV. L'utilisation du diamant est très variée, en plus de son utilisation dans la joaillerie, on le trouve dans l'industrie comme un outil de polissage ou de découpe en raison de ses propriétés mécaniques [6].

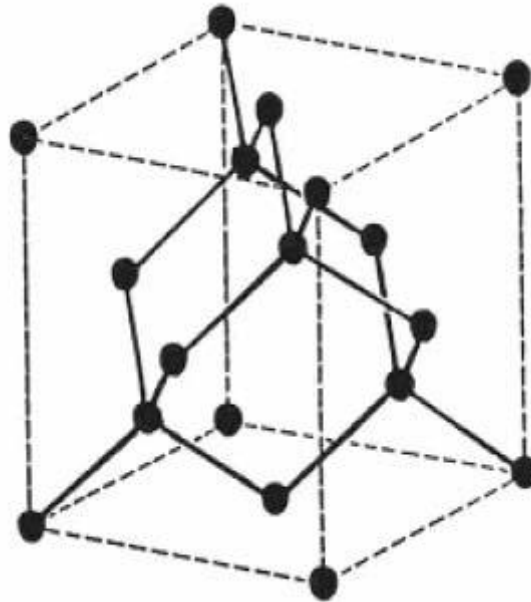


Figure I. 2: Structure atomique du carbone diamant.

En 1985, Kroto et al. ont découvert la troisième structure du carbone appelée Buckminsterfullerène en hommage à l'architecte américain Buckminster Fuller qui

inventa le concept du dôme géodésique. Cette découverte a valu la distinction du prix Nobel de chimie en 1996 à Richard Smalley, Harold Kroto et Robert Curl.

Cette nouvelle structure sphérique est composée alternativement d'hexagones et de pentagones. Le nombre de pentagones est strictement égal à 12, alors que le nombre d'hexagones est arbitraire mais pair. De tels objets satisfont l'équation d'Euler-Poincaré pour les polyèdres :

$$V - E + F = 2$$

Où

F : désigne le nombre de faces.

V : le nombre de sommets.

E : le nombre d'arêtes.

La structure la plus connue des fullerènes est le C₆₀ (Figure I.3), ressemblant à un ballon de football, elle est constituée de 60 atomes de carbone, chaque atome est lié à trois autres par une liaison sp², formant ainsi une sphère comportant 20 hexagones et 12 pentagones d'un diamètre extérieur d'environ 7Å.

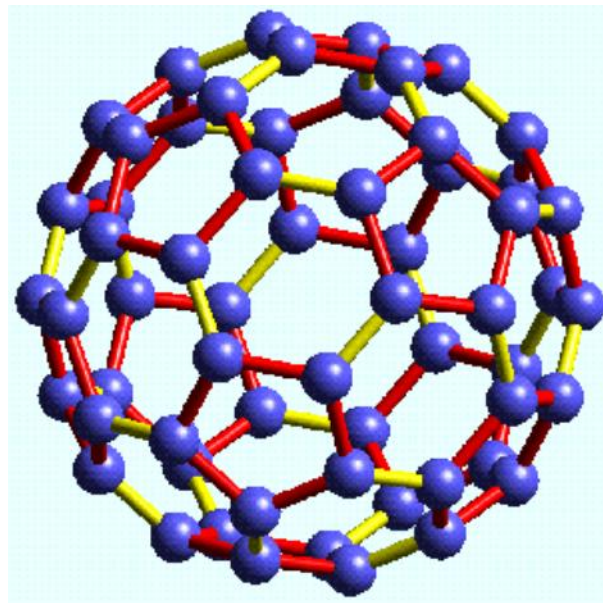


Figure I.3: Structure du fullerène C₆₀

Les fullerènes ont une faible résistivité électrique et peuvent devenir des supraconducteurs lorsqu'ils contiennent certains matériaux alcalins tels que le potassium ou le rubidium. Ils possèdent aussi un module d'incompressibilité supérieur à celui du diamant.

Les nanotubes de carbone représentent une autre forme allotropique de carbone appartenant à la famille des fullerènes. L'histoire de la découverte de cette nouvelle structure est un sujet de controverse. Ainsi, Monthieux et Kuznetsov ont publié dans "Carbone" un article intéressant retraçant l'histoire et la découverte des nanotubes de Carbone. Leur découverte date sans doute des années 50 mais il faudra attendre les années 90 pour que Sumio Iijima, un spécialiste en microscopie chez NEC, redécouvre les nanotubes de carbone.

En s'intéressant aux travaux de Krétschmer et Huffman sur la production par arc électrique de grandes quantités du fullerènes C60 et en utilisant leur méthode de synthèse, Iijima s'aperçoit qu'en plus du carbone amorphe et du fullerène C60 qui se trouve dans la suie qui se condense sur les parois de l'appareil de synthèse, il se produit sur la cathode en graphite une autre forme du carbone représentée par plusieurs cylindres creux emboîtés, appelés MWNT (Multi Wall Nanotube).

Ces observations, rendues possibles par le développement considérable des outils de microscopie, ont été publiées dans la revue "Nature" en 1991 et représentent actuellement l'élément déclencheur de cet engouement grandissant porté pour ces nouveaux matériaux [7].

I.3.3) Définition

Un nanotube de carbone peut être décrit comme un feuillet de graphite constitué uniquement d'atomes de carbone placés au sommet d'un réseau hexagonal. Le feuillet est roulé sur lui-même pour former un petit cylindre fermé à ses extrémités par deux demi sphères.

I.3.4) Structure des nanotubes de carbone

On sait donc qu'un nanotube de carbone résulte de l'enroulement d'une ou plusieurs feuilles de graphène sur elles-mêmes. Dans le cas où il n'y a qu'une seule feuille de graphène, on obtient un nanotube mono-feuillet ou SWCNT (Single Wall Carbone Nanotubes).

Dans le cas contraire où plusieurs feuilles de graphène se sont enroulées sur elles-mêmes et ont donc donné un tube constitué de plusieurs tubes imbriqués concentriquement les uns dans les autres (modèle de la poupée russe), on obtient ce qu'on appelle un nanotube multi feuillets ou MWCNT (Multi Wall Carbone

Nanotube)[8]. Il existe donc deux types de nanotubes de carbone : les monofeuillets et les multi feuilletts.

I.3.5) Nanotubes de carbones monofeuillets, SWNT (Single Walled Nanotube)

Comme leur nom l'indique, ces nanotubes sont composés d'une seule feuille de graphène enroulée sur elle-même. Le diamètre d'un nanotube de carbone mono feuillet est typiquement entre 1 et 2 nm et sa longueur atteint facilement quelques micromètres.

Comme la molécule de fullerène dont il dérive, le nanotube de carbone obéit au théorème de Descartes-Euler. Le tube parfait étant composé d'hexagones (en nombre non limité) et de deux demi-sphères aux extrémités qui correspondent à des demi-fullerènes. Les nanotubes de carbone monofeuillets sont définis par trois paramètres : leur rayon r , leur longueur L et leur angle chiral θ . La structure atomique d'un SWNT, aussi appelée son hélicité, dépend de l'orientation des motifs hexagonaux par rapport à l'axe du tube. En déroulant le feuillet de graphène qui compose un nanotube de carbone monofeuillet, un vecteur chiral C_h ayant une norme égale à la circonférence du nanotube et perpendiculaire à l'axe du nanotube, est défini. Ce vecteur a pour indice (m, n) dans la base vectorielle (a_1, a_2) : $C_h = n.a_1 + m.a_2$

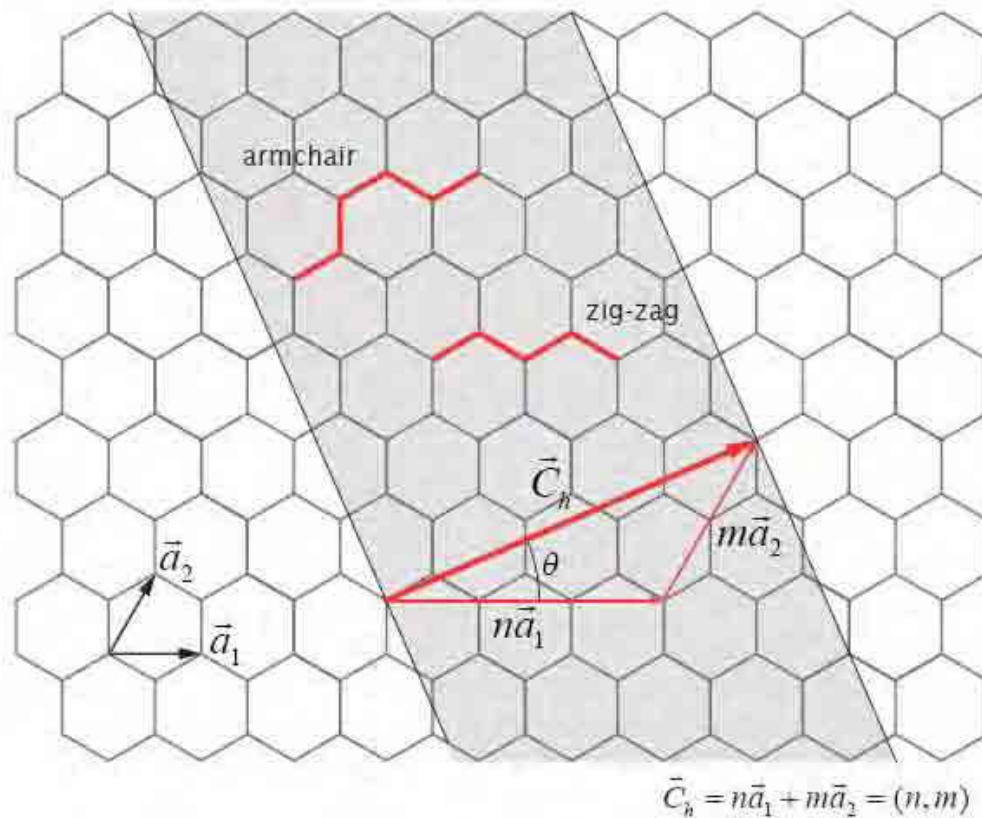


Figure I.4 Structure d'un plan de graphène en deux dimensions. Le réseau hexagonal est décrit à partir des deux vecteurs de base a_1 et a_2 . Ces sont les vecteurs unitaires du réseau de Bravais du graphène, et n et m sont deux entiers appelés indices chiraux du nanotube ou indice de hamada

C_h est appelé vecteur chiral, c'est une combinaison linéaire des deux vecteurs de base d_t le diamètre du nanotube est déterminé par la relation suivante :

$$d_t = \frac{|\vec{c}|}{\pi} = a_{cc} \frac{\sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{\pi}$$

Le vecteur chiral C_h permet de connaître le diamètre du nanotube grâce à la valeur de la distance entre deux atomes de carbone reliés par une liaison covalente (0,142 nm)

En fonction du couple (m, n) il résulte trois types de nanotubes de carbone :

- Les nanotubes Armchair : défini par $n=m$, $\theta = 30^\circ$
- Les nanotubes Chiral: définis par $n \neq m \neq 0$, $\theta \in] 0^\circ, 30^\circ [$
- Les nanotubes Zig-zag: définis par $n=0$. $\theta = 0^\circ$

Symétrie	Indices	Angle de chiralité	Diamètre
zigzag	(n,0) n = 0 ou m = 0	$\theta = 0^\circ$	$D = a_{cc} \frac{\sqrt{3}m}{\pi}$
armchair	(n,n) n = m	$\theta = 30^\circ$	$D = a_{cc} \frac{3n}{\pi}$
chirale	(n,m) n \neq m	$0 < \theta < 30^\circ$ $\text{Arctan}\left(\frac{m\sqrt{3}}{2n+m}\right)$	$d = a_{cc} \frac{\sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{\pi}$

Tableau I.1 : calcul du diamètre du nanotube à partir de la chiralité

I.3.6) Nanotubes de carbone multifeuillets, MWNT (Multi Walled Nanotubes)

Les MWNT correspondent à un agencement de plusieurs nanotubes disposés de manière concentrique. Le nanotube central détermine le diamètre interne du MWNT puis les nanotubes successifs s'arrangent les uns sur les autres, le dernier nanotube représentant le diamètre externe. Un MWNT à deux parois sera souvent différencié des autres MWNT par son appellation DWNT (double walled).

Dans un MWNT, les feuillets de graphite interagissent par les interactions de Van der Waals. La distance inter-feuillets est légèrement supérieure à la distance entre deux plans de graphite ($d_{002} = 0,341$ nm). Cet espace inter-feuillets croît légèrement à mesure que le diamètre du tube diminue via une combinaison de l'effet de courbure et des interactions de Van der Waals pour atteindre 0,36 nm pour les plus petits diamètres. (La différence de nombre d'atomes de carbone entre nanotubes

[ChapitreI Généralités sur les nanotubes de carbon]

concentriques successifs empêche de réaliser l'empilement ABAB du graphite). Le diamètre en question peut varier jusqu'à plusieurs dizaines de nanomètres. La longueur moyenne des tubes est de l'ordre du micromètre et peut cependant atteindre la centaine de micromètres, ce qui leur procure alors un facteur de forme (rapport longueur/diamètre) exceptionnellement grand (de 100 à 100 000). Ces paramètres dépendent fortement des conditions de synthèse des nanotubes [9].

I.4) Propriétés des nanotubes de carbone

Les principales propriétés des nanotubes de carbone sont résumées sur le Tableau I.2

	SWNTCs	MWNTCs
Diamètre ^a (nm)	0,5-2 (1-1,5)	5-200 (10-40)
Longueur	De quelques μm à 20 cm	Quelques centaines de μm
d002 (Å)	-	3,39-3,48
Densité apparente (g/cm ³)	0,5-1 (film)	0,02-0,3
SBET (m ² /g)	400-900	150-450
Porosité (cm ³ /g)	Porosité micro V micro : 0,15-0,3	Porosité de Meso V micro : 0,5-2
Module de Young (TPa)	1,05-1,3	0,5-1,2
Résistance à la traction (GPa)	45 à 150	3-30 à 150 ^b
Résistivité électrique ($\Omega\cdot\text{cm}$)	$6\cdot 10^{-4}$	$0,6-2\cdot 10^{-4}$
Conductivité électrique (S/cm)	550	80-1000
Conductivité Thermique (M/K.m)	1000-6000 ^d	300-3000

Tableau I.2: Propriétés physiques des nanotubes de carbone.

a) Valeurs typiques. b) MWNTCs sans défaut. c) Conductivité thermique à température ambiante. d) Pour un seul faisceau de SWNTCs.

I.4.1) Propriétés mécaniques

La présence de fortes liaisons chimiques C-C dans le graphite rend les propriétés des nanotubes de carbone exceptionnelles. En effet, une importante énergie, équivalente à 348 kJ.mol^{-1} , est nécessaire pour dissocier une telle liaison. Grâce à ces liaisons fortes entre les atomes, les nanotubes de carbone présente un module d'Young équivalent à celui du diamant. De nombreux travaux théoriques entrepris montrent un module d'Young des nanotubes de carbone très élevé. Les calculs de Yakobson et son équipe montrent un module d'Young de l'ordre de 1TPa pour une feuille de graphène. De nombreux calculs théoriques ont d'abord précédé les mesures expérimentales, estimant le module d'Young entre 600 et 5500GPa selon le modèle utilisé. Des mesures expérimentales ont ensuite confirmé des modules d'Young de 1000 à 3000GPa pour des SWNTs et des modules d'Young d'environ 1000GPa pour des MWNTs. Ces valeurs sont environ 25% plus élevées que celles des meilleures fibres de carbone produites à ce jour. La contrainte à la rupture des nanotubes est théoriquement comprise entre 15 et 55 GPa. En comparaison, les fibres commerciales les plus résistantes produites à ce jour sont des fibres de carbone dont la contrainte de rupture est à 6,37GPa (Toray T1000G®). Sous l'effet de la contrainte, les défauts produits sont distribués sur l'ensemble de la structure et les atomes de carbone peuvent changer d'hybridation sp^2 et passer à une géométrie tétraogonale caractéristique d'une hybridation sp^3 et inversement. Le nanotube possède ainsi une grande facilité à se courber ou se tordre selon leur axe.



Figure I.5: *Contrainte mécanique qui induit une flexion dans un nanotube de carbone.*

Selon les calculs du module d'Young réalisés par l'équipe d'Overney sur un SWNTC, le résultat est similaire à celui de Yakobson. En utilisant un modèle empirique, Lu quant à lui, prévoit un module d'Young de 0.97 TPa pour les MWNTCs et de 1.1 TPa pour les SWNTCs. Il indique aussi que le module d'Young,

ainsi que d'autres modules élastiques (cisaillement,...) sont indépendants des caractéristiques géométriques des tubes (chiralité, diamètre,...).

Avec une extrémité libre, les nanotubes vibrent sous l'effet du mouvement brownien. En étudiant leur vibration par MET, il est possible de remonter à leur module d'Young. Krishnan et al. Obtiennent par cette méthode une valeur de 1.25 TPa avec une marge d'erreur de 0.5 TPa pour des nanotubes mono-paroi. Récemment, Huang et al. ont montré expérimentalement que des SWNTCs pouvaient présenter des caractéristiques de superplasticité. Un nanotube peut ainsi s'étendre jusqu'à 80% de sa longueur [10].

Les nanotubes exhibent donc des propriétés mécaniques uniques. Leur grande flexibilité associée à un module d'Young élevé leur confèrent un comportement que certains n'hésitent pas à décrire comme étant un comportement super élastique. Au niveau des NEMS (Nano electromechanical system ou système électromécanique nanométrique) les nanotubes de carbone permettent d'obtenir des systèmes non seulement résistants, donc présentant d'excellentes durées de vie, mais aussi facilement actionnables. Ce sont donc vraiment des candidats idéaux pour ce type de fonctions électromécaniques. Toutefois, cela nécessite que trois types de contraintes soient remplis

- Prédire le comportement d'un nanotube en fonction de ces paramètres géométriques afin de concevoir le composant idéal pour telles ou telles applications.
- Sélectionner les nanotubes en fonction de leur diamètre et de leur longueur pour l'application requise.
- Positionner de manière précise ces nanotubes dans le système en question[11].

I.4.2) Les propriétés électriques

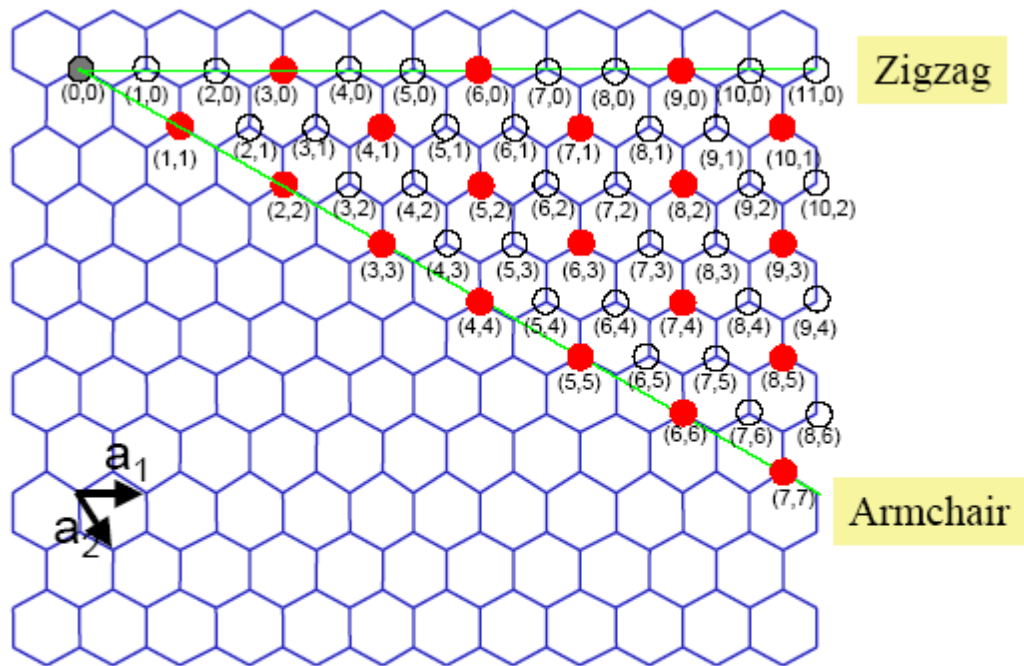
Tout comme les propriétés mécaniques, les nanotubes de carbone possèdent des propriétés électriques très intéressantes pour des applications électroniques.

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

Toute fois il est à noter que les nanotubes possédant plusieurs parois auront beaucoup plus de probabilité d'avoir un comportement métallique. En effet, il a été démontré

que la bande de valence d'un nanotube de carbone suivait une relation inversement proportionnelle à son diamètre (une bande de valence nulle entraînant un comportement au niveau du nanotube de carbone de type métallique). Des mesures réalisées sous champ magnétique ont été réalisées par M. Sagnès et al. Afin d'estimer le comportement de nanotubes multi feuillets. De ces expériences, a été déduit qu'il existe 75 % de probabilité d'avoir un nanotube de carbone multi feuillets métalliques. En ce qui concerne les nanotubes mono-feuillet, une règle sur le vecteur chiral a été établie afin de savoir quelles sont propriétés électriques du nanotube de carbone correspondant [12].

Les différentes études réalisées sur les nanotubes de carbone montrent que les tubes armchair sont conducteurs électriques (type métallique). Il en est de même pour les tubes zig-zag pour lesquels l'indice n est un multiple de 3. Plus généralement tous les tubes pour lesquels n prend une valeur entière sont des conducteurs de type métallique (il s'agit en fait de semi-conducteurs avec un très faible gap). Si cette formule ne donne pas un entier alors le nanotube de carbone est semi-conducteur. Les différentes études théoriques sur la conductivité électrique des nanotubes de carbone ont été validées par des approches expérimentales (valeurs pouvant aller de 1,5104 à 2,107 S.m⁻¹). La principale difficulté résidant dans le fait qu'il est très difficile d'effectuer ce type de mesure sur un nanotube unique (de la même façon que pour une caractérisation du comportement mécanique). Dohn et al ont utilisé une méthode de mesure quatre pointes alors que les équipes de Wilder et Odom ont réalisé cette mesure par microscopie à effet tunnel (STM) et par spectroscopie sur des nano composites à base de nanotubes de carbone. Des approches théoriques prédisent une densité de courant électrique de 4.109A.cm⁻² pour un nanotubes de type SWNT métallique, c'est à dire supérieure à celle du cuivre de près de trois ordres de grandeur. Wei et al ont vérifié expérimentalement les valeurs des densités de courant dans les nanotubes de carbone ainsi que l'influence du temps et de la température sur ce paramètre[13].



$n - m = 3q$ (q : entier): métallique

$n - m$ non égal à $3q$ (q : entier): semiconducteur

Figure I.6 : La nature des différents types de nanotubes de carbone.

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

Toutefois, les nanotubes possèdent une contrainte assez lourde : leur résistance de contact. Dans cette relation, le premier terme ($h/4e^2$) représente la résistance quantique des nanotubes (6.5 k Ω) et λ le parcours libre moyen (mean free path), qui correspond à la distance de parcours balistique des électrons qui varie selon la longueur et le diamètre des nanotubes. On obtient donc des valeurs de résistances de contact allant de 6 à 100 k Ω , ce qui est un problème majeur dans l'intégration de systèmes pour lesquels les pertes (dont celles par les résistances) sont critiques. Une solution que nous allons utiliser afin de palier à ce problème majeur est l'utilisation de réseaux de nanotubes. Un réseau de nanotubes permettra alors de connecter des nanotubes en parallèle et donc d'obtenir une résistance de contact équivalente à celle

d'un nanotube divisée par le nombre de NTC. Par exemple si l'on arrive à placer sur une même ligne un million de nanotubes, un calcul simple nous permet de trouver une résistance de contact équivalente à 0.1Ω dans le pire des cas (c'est-à-dire $100\text{ k}\Omega$ par NTC). Dans ce cas, les nanotubes deviennent de très bons candidats pour des applications hyperfréquences où l'on veut que les pertes, notamment ohmiques, soient les plus faibles possible [12].

I.4.3) Les propriétés thermiques

La conductivité thermique d'un matériau résulte de l'échange de phonons (générés par vibrations moléculaires) et du déplacement d'électrons dans le matériau. Dans le cas des NTCs, c'est le déplacement d'électrons qui est le principal responsable de la conductivité thermique. Comme dans le cas de la conductivité électrique, la conductivité thermique des NTCs est linéaire et elle est liée à la courbure des NTCs. La chiralité est donc importante. Le diamant (à base de carbone) présente la conductivité thermique la plus élevée de tous les matériaux connus à ce jour (environ $103\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ à 300 K). Un plan de graphène possède une conductivité comparable. La structure particulière des nanotubes permet de penser que leur conductivité doit également être importante le long de l'axe du nanotube.

La conductivité thermique théorique des nanotubes de carbone a été calculée dans le sens longitudinal pour un SWNT armchair par Berber et al à température ambiante. Une valeur voisine de $6\,600\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ a été obtenue mais la structure des nanotubes était alors supposée sans défaut. Che et al ont démontré que les défauts altéraient fortement cette grandeur qui peut alors chuter de plus de 50% si les calculs les prennent alors en considération.

C'est avec ces valeurs théoriques « corrigées » que les valeurs expérimentales sont les plus cohérentes. Small et al et Fujii et al ont respectivement mesuré des conductivités de $3\,000$ et $2\,069\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ pour des MWNT de diamètres compris entre 14 et $9,8\text{ nm}$. Fujii et al ont d'ailleurs tiré la conclusion que cette conductivité augmentait à mesure que le diamètre du tube isolé diminuait. Cependant, ces valeurs impressionnantes de conductivité thermique (égales voir supérieures à celle du diamant pur entre 2000 et $2500\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) chutent lorsque celles-ci ne sont pas calculées dans le sens longitudinal des nanotubes de carbone. Che et al ont effectué la mesure théorique sur un fagot de SWNT de configuration chirale $(10,10)$, dans le sens longitudinale et transversale (pour des valeurs respectives de 950 et $5,6\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$).

Les valeurs obtenues sont donc fortement anisotropes et du même ordre que celles du graphite qui présentent le même type d'anisotropie [14].

I.4.4) Propriétés d'adsorption

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés chimiques très attrayantes. Il est en effet possible de fonctionnaliser leur surface par greffage moléculaire, d'intercaler des atomes ou molécules (dopage) entre les nanotubes monoparois d'un faisceau (intercalation inter tubulaire) ainsi qu'entre les différentes parois d'un nanotube multiparois (intercalation inter planaire), et aussi de remplir par capillarité le canal central des nanotubes de carbone mono et multiparois par des atomes ou des composés de façon à obtenir des nano fils encapsulés. La surface spécifique des nanotubes de carbone est de surcroît élevée, ce qui leur confère de très bonne capacité d'adsorption. Elle est voisine de 1000 m²/g pour les SWNTCs et en générale inférieure à 500 m²/g pour les MWNTCs. Par ailleurs, les nanotubes de carbone présentent une excellente inertie chimique et une très bonne stabilité à haute température sous atmosphère inerte. L'interaction des NTCs avec leur environnement, particulièrement avec des gaz ou des liquides adsorbés sur leurs surfaces internes ou externes, attire une attention croissante. Les NTCs sont généralement associés à d'autres nanotubes en faisceaux, fibres, films, papiers, et ainsi de suite, plutôt que comme une seule entité. Chacune de ces associations a une gamme spécifique de porosités qui détermine ses propriétés d'adsorption.[15]

- Les nanotubes de carbone présentent aussi des propriétés électromécaniques intéressantes puisqu'ils ont la capacité de se déformer et de générer une contrainte en réponse à une injection de charge. Les applications visées sont les dispositifs actionneurs notamment en robotique. Les dispositifs actuellement employés sont à base de céramiques piézo-électriques ou de polymères conducteurs.

D'autres caractéristiques telles que les propriétés d'émission de champ ou le transport thermique dans les nanotubes sont très étudiées. Des écrans à émission de champ (FED – Field Emission Display) dont les dalles sont constituées de nanotubes de carbone ont par exemple déjà été développés par le Commissariat à l'Energie Atomique (CEA-LETI) et par Samsung. La forte densité de courant que peuvent supporter les nanotubes, ainsi que les faibles tensions auxquelles ils pourraient opérer intéressent vivement les chercheurs universitaires et industriels. Par ailleurs, l'intérêt

pour les nanotubes de carbone ne réside pas uniquement dans des applications liées à la physique, mais aussi dans la chimie ou dans des applications à l'interface avec la biologie. Ils peuvent par exemple servir à la cristallisation de protéines. La forte courbure d'un feuillet de graphène dans un nanotube induit de plus une réactivité plus forte que dans le cas du graphite et autorise le greffage de nombreuses molécules. Ces molécules peuvent avoir des fonctions de reconnaissance moléculaire et fournir ainsi aux nanotubes un intérêt pour des applications de types micro ou nano-capteurs, pour la détection de molécules d'origine biologique par exemple. Nous venons de voir que, d'un point de vue théorique, les propriétés riches et originales des nanotubes de carbone en font un candidat idéal pour de nombreuses applications, notamment le renfort mécanique et l'apport de conductivité. Les caractérisations des propriétés mécaniques des nanotubes confirment leur caractère exceptionnel à l'échelle individuelle, bien que les valeurs expérimentales soient souvent en dessous des valeurs théoriques. Cependant, il reste beaucoup de conditions à remplir pour espérer pouvoir exploiter de manière optimale leurs propriétés par l'intermédiaire d'un matériau macroscopique. En effet, les nanotubes bruts se présentent le plus souvent sous forme d'une poudre désorganisée. Les nanotubes de carbone ne peuvent pas être directement incorporés dans une matrice. Il est donc nécessaire de développer de nouveaux procédés pour les incorporer de façon optimale dans des matrices à renforcer. On peut distinguer cinq facteurs déterminants pour l'optimisation du renfort :

- la qualité des nanotubes : présence d'impuretés, quantité de défauts, etc.,
- le rapport d'aspect des nanotubes,
- l'état de dispersion des nanotubes au sein de la matrice à renforcer,
- le degré d'alignement des nanotubes,
- les liaisons nanotube/matrice pour un transfert de contrainte optimal.

Une mise en forme macroscopique pouvant répondre à ces exigences est l'assemblage des nanotubes de carbone sous forme de fibres. Le paragraphe suivant étudiera en détails les différentes technologies de filage conduisant à l'obtention de fibres composites polymère / nanotubes de carbone [16].

1.5) Méthodes de synthèse des NTC

Les nanotubes de carbone ont été découverts en 1991. Cette première observation a mis en évidence des nanotubes de carbones multiparois. Les nanotubes multiparois

sont plusieurs feuilles de graphite enroulées les unes sur les autres. La forme monoparoi (une seule feuille de graphite enroulée) des nanotubes de carbone a été observée en 1993. La différence majeure entre la production de nanotubes multiparois et de nanotubes monoparoi est la nécessité d'utiliser un ou plusieurs catalyseurs pour obtenir la forme monoparoi des nanotubes de carbone. Les recherches sur la synthèse conditionnent toutes les études et les éventuelles applications des nanotubes de carbone, il est donc important de pouvoir comparer les résultats des différentes méthodes de synthèse.

Il existe plusieurs enjeux dans la production des nanotubes de carbone monoparoi. Tout d'abord, il faut avoir un contrôle de la distribution en diamètre et de la chiralité des échantillons. La chiralité, comme nous le verrons plus loin, représente la façon dont la feuille de graphite est enroulée. De plus, il est nécessaire d'avoir un contrôle sur la "pureté" des échantillons. Enfin, pour ce qui est d'éventuelles applications industrielles, la production de nanotubes en grandes quantités (kg/jour) est la première étape à réaliser [17].

Il existe deux principales méthodes de synthèse des NTC :

- la méthode physique, c'est la première méthode utilisée pour la synthèse des NTC. Dans cette méthode, les atomes de carbone qui constituent les feuillets des NTC viennent de l'évaporation d'une cible de graphite. On distingue principalement deux techniques :
- l'arc électrique où l'évaporation de la cible en graphite s'effectue à l'aide d'un courant électrique
- l'ablation laser est, comme son nom l'indique, la sublimation de la source en graphite à l'aide d'une puissante source laser.

Cette méthode a l'avantage de produire des NTC de haute qualité structurale, mais présente l'inconvénient de ne pas permettre un contrôle des caractéristiques des NTC (diamètre, longueur) et n'a qu'un faible rendement.

- la méthode chimique ou CCVD (Catalytic Chemical Vapor Déposition), est basée sur la décomposition d'un gaz carboné sur des particules catalytiques portées à moyenne température dans une atmosphère inerte.

Elle reste la méthode la plus utilisée actuellement car elle présente un meilleur rendement avec un meilleur contrôle sur les caractéristiques des NTC produits.

Cependant, les NTC produits par cette méthode présentent plus de défauts structuraux que ceux produits par la méthode physique [18]

I.5.1) Arc électrique

Cette méthode a été initialement développée par Kraschmer et al pour la synthèse en grande quantité de fullerènes C₆₀, elle a été aussi utilisée par Iijima dans la découverte des premiers nanotubes de carbone en 1991 .Cette technique consiste à faire passer un fort courant électrique (80-100 A) à travers deux électrodes de graphite espacées de quelques millimètres plongées dans une atmosphère inerte (He, Ar). Durant le passage du courant, un arc électrique s'établit entre l'anode et la cathode permettant aux particules de carbone évaporées de l'anode de se condenser au niveau de la cathode.

La suie ainsi obtenue est formée de fines particules métalliques, du carbone amorphe et des nanotubes de carbone sous forme d'amas (figure 1.6).

Les premières expériences sur la synthèse des nanotubes de carbone par cette technique en utilisant des électrodes de graphite pur permettaient d'avoir essentiellement des MWNT en très faible quantité. En 1992, Ebbesen et al. du même laboratoire que Iijima,

ont optimisé cette technique pour une production de nanotubes de carbone multifeuillets à l'échelle du gramme en mettant en avant le rôle de certains paramètres comme la pression du gaz inerte et de l'intensité du courant électrique dans l'amélioration du rendement .En 1993, Bethune et al. du laboratoire américain IBM travaillant sur l'encapsulation des nanoparticules ferromagnétiques par des fullerènes, pour des applications dans la mémorisation des données, ont observé que l'utilisation des électrodes de graphite imprégnées par des métaux de transitions (Fe, Ni, Co) permettent d'obtenir un nouveau type de nanotube de carbone avec un seul feuillet (SWNT), ce phénomène à été observé simultanément par Iijima au laboratoire NEC.

L'arc électrique reste la technique la plus adaptée pour la synthèse des NTC de haute qualité structurale à cause de la température mise en jeu (> 3000 C température de fusion du graphite). En revanche elle a plusieurs inconvénients, un faible rendement car une partie du carbone évaporé de l'anode se trouve aussi condensé sur les parois de l'appareil ajoutant à cela la discontinuité de la production et la nécessité d'une grande maîtrise des conditions expérimentales de synthèse[18].

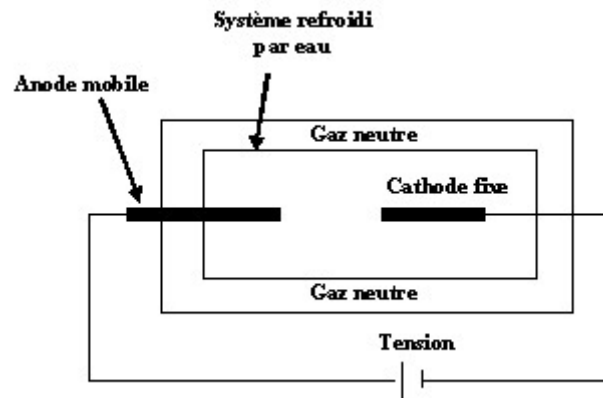


Figure I.7: Production de nanotubes de carbone par la méthode de l'arc électrique

I.5.2) Méthode d'ablation laser

La synthèse de nanotubes de carbone par la méthode d'ablation laser a été décrite pour la première fois en 1996. Les nanotubes de carbone sont produits lors de la vaporisation d'une cible, composée de graphite et de catalyseurs métalliques, sous l'effet d'une forte irradiation laser.

La cible de graphite dopée est placée dans un four (autour de 1200°C). Sous l'effet du laser (un laser Nd-YAP à 1,08 μm avec une fréquence de répétition de 15 Hz, des impulsions de 20 ns et une énergie par impulsion de 300 mJ par exemple), la cible de graphite est vaporisée et les nanotubes se forment.

A l'aide d'un flux de gaz inerte (flux d'argon à 1,6 Lh^{-1} par exemple) la suie produite est transportée jusqu'à un collecteur en cuivre sur lequel elle se condense. C'est ce condensat qui constitue le produit de la synthèse. Les catalyseurs additionnés à la cible de graphite sont le plus souvent le nickel et le cobalt. Le travail "titanesque" qu'effectuent les producteurs de nanotubes de carbone est de faire varier de façon systématique les différents paramètres de synthèse afin d'améliorer le rendement, le contrôle de la chiralité, la pureté etc...

Ils font notamment varier la nature des catalyseurs, leur proportion, la puissance du laser, son taux de répétition, la température du four, le flux de gaz inerte.

Cette méthode produit des nanotubes de carbone monoparoi

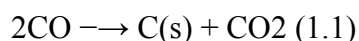
. Au sein d'une corde, les nanotubes sont liés les uns aux autres par des liaisons de Van-der-Waals de l'ordre de 500 eV par micron de contact inter-tubes et la distance entre nanotubes est de l'ordre de 0,315 nm.

Un des avantages de la méthode de synthèse par ablation laser est qu'elle permet de produire d'assez grandes quantités de nanotubes monoparoi (g/Jour).

Les rendements sont très élevés, 70% à 90% de la masse de graphite de départ est convertie en nanotubes. Un autre avantage est qu'elle permet aujourd'hui un contrôle de la distribution en diamètre avec une précision de l'ordre de ~ 5%. En revanche, un des gros inconvénients de cette méthode est qu'elle nécessite, pour l'instant, une purification du produit brut afin de disposer d'échantillons ne contenant que des nanotubes de carbone. En effet, la suie issue de la synthèse contient de nanotubes de carbone monoparoi, mais aussi du carbone amorphe, des restes de catalyseurs et éventuellement des fullerènes. Les méthodes de purification les plus utilisées sont toutes à base de traitements acides et engendrent des défauts dans les nanotubes. Le travail actuel est encore et toujours d'améliorer le contrôle de la distribution en diamètre et d'obtenir un produit brut plus "propre" [17]

1.5.3) Synthèse des nanotubes de type HiPCO

La méthode de synthèse de nanotube dite "HiPCO", pour monoxyde de carbone haute pression, a été développée à l'université de Rice par le groupe de R. Smalley. C'est un procédé CVD à haute en température (900-1100 °C). Les nanotubes sont formés par décomposition catalytique du monoxyde de carbone sur des agrégats de fer selon la réaction chimique suivante :



Les agrégats de fer sont formés in situ en phase gazeuse. Le fer sous la forme d'un penta carbonyle $\text{Fe}(\text{CO})_5$ est ajouté dans un flux de CO à température ambiante injecté directement dans le four. Le penta carbonyle se décompose et les atomes de fer se condensent en agrégats. La décomposition du CO, amené par un autre flux gazeux à haute pression et haute température a lieu sur les agrégats de fer. Les nanotubes croissent à partir de ces agrégats puis sont entraînés une fois formés hors de l'enceinte par le flux de CO.

La méthode HiPCO permet d'obtenir des échantillons de nanotubes mono feuillets avec une grande distribution en diamètres (entre 0,7 et 1,2 nm). Au total, une dizaine de chiralités sont accessibles avec notre détecteur. L'échantillon que nous avons utilisé n'a pas subi de purification [19].

1.5.4) La synthèse par décomposition chimique en phase vapeur

La décomposition chimique en phase vapeur (CVD) consiste à décomposer des précurseurs carbonés (hydrocarbures par exemple) sur des particules catalytiques, à des températures variant entre 800 et 1200°C. Ce procédé conduit à l'obtention de

SWNTs et MWNTs. Selon les conditions expérimentales, il est toutefois possible de ne produire qu'un seul des deux types de nanotubes. Il est même également possible d'obtenir des nanotubes doubles ou triples parois. Un des avantages du procédé CVD réside dans la possibilité d'un apport continu en molécules précurseurs, ce qui autorise des productions de nanotubes à grande échelle. Une des variantes de ce genre de procédé de synthèse est le procédé HiPCO (High Pressure CO (carbone monoxyde)). Il consiste à décomposer un précurseur carbonyle ($\text{Fe}(\text{CO})_5$) dans un flux de monoxyde de carbone à des pressions pouvant atteindre 10atm et des températures comprises entre 800 et 1200°C. En se décomposant, le précurseur forme des particules de fer à partir desquelles des faisceaux de SWNTs croissent. Cette méthode a comme avantage de produire une suie exempte d'impuretés carbonées et dans laquelle les particules catalytiques (fer) peuvent être relativement facilement éliminées.

Les mécanismes de synthèse impliqués sont complexes et parfois encore mal compris.

Il faut

Toutefois noter que les nombreuses études à ce sujet apportent une contribution significative à la production des nanotubes, notamment au niveau des rendements de fabrication. De grandes marges de progression sont encore accessibles en ce qui concerne la qualité des nanotubes, notamment pour avoir des nanotubes avec moins de défauts ou plus anisotropes [20].

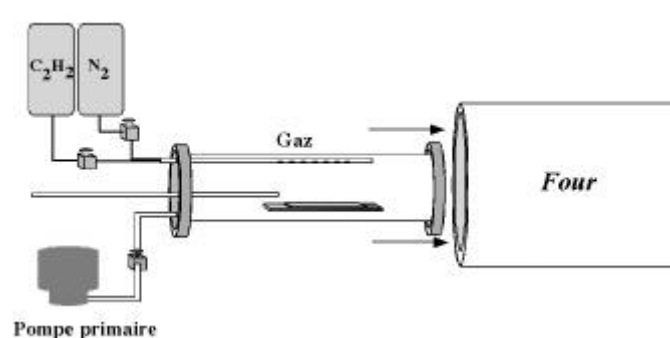


Figure I.8: Représentation schématique du procédé CVD.

I.6) Les applications des nanotubes de carbone

De par leurs propriétés intrinsèques remarquables (taille, conductivité, facteur d'aspect. . .), de nombreuses applications ont été envisagées dans différents domaines.

Dans cette partie, nous présentons les principaux domaines d'applications des nanotubes de carbone.

I.6.1) L'électronique

Parmi les domaines d'applications potentielles des nanotubes de carbone, la microélectronique est en très grand développement en raison de la course perpétuelle vers la miniaturisation. Ainsi, des diodes de dimensions nanométriques ont pu être fabriquées en utilisant la propriété remarquable de semi-conductivité des NTC. En dopant la moitié d'un SWNT semi-conducteur de type p par du potassium, Zhou et al. On réussit la création d'une jonction p n sur un seul nanotube.

La propriété remarquable des NTC de supporter de forts courants a été exploitée par Seidel et al. qui à leur tour ont réussi à l'aide des SWNT alignés la fabrication d'un transistor à effet de champ capable de délivrer un courant de l'ordre du mA qui peut commander des électromoteurs ou des LED. La fabrication des circuits logiques et des oscillateurs à base de transistors à effet de champ fabriqués par des NTC a été aussi rapportée par plusieurs auteurs.

Une propriété aussi intéressante a retenu l'attention de la communauté scientifique, elle concerne l'utilisation des NTC comme sources émettrices par effet de champ à cause de leur structure nanométrique, leur forte conductivité électrique, leur stabilité chimique, les NTC sont de bons candidats pour remplacer les matériaux actuels dans la fabrication de canons à électrons dans différentes applications, source de lumière pour écrans plat, source de rayons X, les microscopes électroniques, etc.

Actuellement, ces nombreuses applications prometteuses se heurtent à un grand défi technologique concernant la maîtrise de fabrication de structures bien définies des NTC ainsi que leur manipulation pour la création des circuits complexes.

I.6.2) Le stockage d'énergie

À cause d'une géométrie creuse, un grand rapport d'aspect et de bonnes propriétés mécaniques, beaucoup d'études se sont intéressées à l'utilisation de ces nanotubes de carbone dans le stockage des gaz et en particulier l'hydrogène, surtout après l'annonce du laboratoire national des énergies renouvelables américain (NREL) que les NTC pourraient stocker jusqu'à 8% de leur masse en hydrogène, sachant que la limite fixée par le département d'énergie américain pour une éventuelle utilisation

dans le domaine automobile est de 6,5 %. Le stockage d'hydrogène présente un grand enjeu économique car il reste le problème majeur qui entrave le développement des nouveaux véhicules utilisant les piles à combustible. L'utilisation des NTC permettrait donc de fabriquer des conteneurs de petites dimensions (faible poids) avec de bonnes propriétés mécaniques.

Cependant, les études actuelles sont très divergentes concernant la capacité réelle du stockage d'hydrogène avec les NTC, ainsi des pourcentages massiques entre 1,5 et 67% ont été rapportés.

Toujours dans le domaine du stockage d'énergie, les batteries à base d'ions de lithium présentent actuellement les meilleures performances (légereté, capacité de stockage) et les recherches se poursuivent pour leur amélioration. Parmi ces recherches, plusieurs d'entre elles ont rapporté la possibilité de l'amélioration de la capacité de ces batteries en utilisant des anodes à base de nanotubes de carbone

I.6.3) Les capteurs

Les NTC avec leurs propriétés remarquables offrent actuellement un grand potentiel de développement de nouvelles méthodes d'imagerie, de mesure et de détection utilisées dans la recherche moderne. En exploitant leur grande rigidité mécanique et leur dimension nanométrique, des pointes de microscope à force atomique ont été réalisées à base de NTC pour remplacer les pointes pyramidales à base de silicium utilisées actuellement.

La longueur des NTC et leur faible diamètre permettent donc de sonder des fissures plus étroites sur les surfaces et d'obtenir ainsi une meilleure résolution que les pointes actuelles. L'équipe de Cheung et al. pionnière dans ce domaine, a réussi expérimentalement, à l'aide d'un AFM utilisant des pointes en NTC, de sonder avec une bonne résolution la structure des protéines alors que les autres types de pointes ne distinguaient pas ces structures.

L'utilisation des NTC pour la détection des espèces chimiques ou biologiques présente beaucoup d'applications potentielles. Parmi les réalisations pratiques dans la détection des gaz, un détecteur de NO pour le contrôle d'asthme, fabriqué à base d'un transistor à effet de champ utilisant un canal à base de SWNT a été rapporté par Kuzmych et al. Ce détecteur est sensible à des concentrations entre 2 et 5 ppb.

Des applications semblables dans le domaine biologique ont été rapportées. Ainsi, sur le même principe de changement de conductivité électrique, Besteman et al. ont fabriqué à l'aide d'un SWNT semi-conducteur fonctionnalisé placé entre deux électrodes un détecteur de glucose [21].

I.7)Conclusion

Dans cet chapitre nous avons rappelé quelques généralités sur les nanotube de carbone . La première partie consacré à une présentation générale des nanotubes de carbone et la structure, et les méthodes de synthèse les plus répandues des nanotubes de carbone. La seconde partie nous présentons les différentes propriétés des nanotube de carbone et la dernière partie concerne les domaine d'application de nanotube de carbone

Références

[1]Thibault. Ricart. Thèse Etudes de nano systèmes électromécaniques (NEMS) à base de nanotubes de carbone pour applications hyperfréquences. Le 18 décembre 2008.p 18-19.

[2]Aoumeur Boulrouah. Thèse : Propriétés thermiques et électriques de composites à base de nanotubes de carbone et application à la détection de gaz. Le 08 décembre 2011.p 3

[3]Maxime PRAS. Thèse Influence de l'état de dispersion de nanotubes de carbone sur leur relargage et aérosolisation lors de la sollicitation tribologique de nanocomposites MWNT/Polymère. *Le 28 mars 2013.p7*

[4][6][7] Aoumeur Boulrouah. Thèse : Propriétés thermiques. Et application à la détection de gaz. Le 08 décembre 2011.P 3-6.

[5] .Charlotte BERNARD. Thèse Propriétés mécaniques des nanotubes de carbone en tant que nano sondes et leur fonctionnalisation par bio-nanoparticules .le 30 Octobre 2007.p15-16

[8] Thibault RICART. Thèse Etudes de nano systèmes électromécaniques (NEMS) à base de nanotubes de carbone pour applications hyperfréquences. Le 18 décembre 2008.p 16

[9] Maxime PRAS. Thèse Influence de l'état de dispersion de nanotubes de carbone sur leur relargage et aérosolisation lors de la sollicitation tribologique de nanocomposites MWNT/Polymère .*le 28 mars 2013.p 9-11.*

[10] TuyetTrang Nguyen .Utilisation de nanotubes de carbone pour la préparation de catalyseurs confinés l'université de Toulouse. Le mardi 23 juillet 2013.p 10-11

[11] *RICART Thibault. Etude de nano-systèmes électromécaniques(NEMS) à base de nanotubes de carbone pour applications hyperfréquences. L'Université Toulouse III - Paul Sabatier. Le 18décembre 2008.p 18.*

[12] *RICART Thibault. Etude de nano-systèmes électromécaniques (NEMS) à base de nanotubes de carbone pour applications (hyperfréquences. l'Université Toulouse III - Paul Sabatier. Le 18 décembre 2008.p 18-20.*

[13] Maxime PRAS .Thèse Influence de l'état de dispersion de nanotubes de carbone sur leur relargage et aérosolisation lors de la sollicitation tribologique de nanocomposites MWNT/Polymère. L'Institut National des Sciences Appliquées De Lyon. *Le 28 mars 2013.p14-15*

[14] Maxime PRAS .Thèse Influence de l'état de dispersion de nanotubes de carbone sur leur relargage et aérosolisation lors de la sollicitation tribologique de nanocomposites MWNT/Polymère. L'Institut National des Sciences Appliquées De Lyon. *le 28 mars 2013.p16.*

[15]TuyetTrang Nguyen .Utilisation de nanotubes de carbone pour la préparation de catalyseurs confinés. L'université de Toulouse. Le mardi 23 juillet 2013.p13.

[16] Celia Mercader. Filage continu de fibres de nanotubes de carbone : de la solidification aux propriétés finales. L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1. 16 Novembre 2010.p 33-35.

- [17] Jean Sébastien Lauret. Etude des propriétés optiques des nanotubes de carbone. Physics. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2003. French.p20-23.
- [18] Aoumeur BOULEROUAH. Propriétés thermiques et électriques de composites à base de nanotubes de carbone et application à la détection de gaz. L'Université du Littoral-Côte d'Opale. Le 08 décembre 2011.p 11-13.
- [19] Cyrielle Roquelet. Transfert d'énergie dans des composés nanotube de carbone/porphyrine. Le 11 Janvier 2012.p14.
- [20] Pierre Miaudet. Structure et propriétés de fibres de nanotubes de carbone à haute énergie de rupture. L'université Bordeaux I. le 11 Octobre 2007.p30-31.
- [21] Aoumeur Boulrouah. Propriétés thermiques et électriques de composites à base de nanotubes de carbone et application à la détection de gaz. L'Université du Littoral-Côte d'Opale. Le 08 décembre 2011.p 14-16.

Chapitre II

modèles utilisés et formulations

II.1) Introduction :

Les études théoriques et numériques sur les propriétés mécaniques des CNTs ont été largement utilisées pour comprendre les phénomènes et pour compléter les expériences.

Le comportement mécanique des (CNTs) a été exploré par des expériences: simulations de la dynamique moléculaire (MD), et la mécanique élastique continue. L'objectif de ce travail est l'étude des vibrations transverses des nanotubes de carbone sous une charge thermique et incorporé dans un milieu élastique. Les nanotubes de carbone sont classifiés comme simples, double ou multi -muré selon le nombre de tubes de carbone.

Cette étude se concentre sur la vibration et propagation d'ondes sur ceux à doubles parois, soit plus précisément les (DWNT).

L'effet thermique sur la propagation des ondes dans les nanotubes à double paroi de carbone (DWNTs) inclus dans une matrice de polymère est étudié par l'intermédiaire de l'élasticité nonlocal. Les effets de petite taille sur des caractéristiques de vibration des nanotubes de carbone sont explicitement dérivés par un modèle complet de poutre continu.

- La théorie d'Euler-Bernoulli, qui néglige l'influence du cisaillement ;
- La théorie de Timoshenko qui prend en compte l'effet du cisaillement

II.2) Les conditions de calcul :

Considérons une barre homogène de section constante A . La barre est soutenue par deux appuis et est soumise à un changement réparti $p(x)$. La vibration transversale de la barre est donnée par sa flèche $y(x,t)$ par rapport à l'axe neutre longitudinal x et au temps t .

II.2.1) Modèle Euler-Bernoulli :

La vibration se produit dans un des principaux plans de la flexion de la barre et dont les dimensions en coupe sont petites en comparaisons de la longueur de la barre, l'équation bien connue de la courbe de déflexion est :

$$E.I. \frac{d^2y}{dx^2} = -M \tag{II.1}$$

EI est la rigidité de flexion, et M est le moment de flexion.

La convention de signes pour les directions positives des moments de flexion et flexion et des forces de cisaillement est illustrée dans la figure II .1.

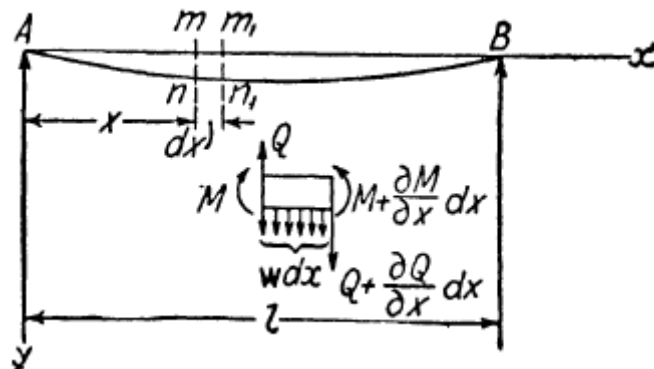


Figure-II .1 notation et géométrie d'un élément de la poutre Euler-Bernoulli

Différencier l'équation (II.1) deux fois nous obtenons :

$$\frac{d}{dx} \left(E.I. \frac{d^2y}{dx^2} \right) = -\frac{dM}{dx} = -Q$$

(II.2)

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(E.I. \frac{d^2y}{dx^2} \right) = -\frac{dQ}{dx} = -P$$

Cette dernière équation représente l'équation d'une barre soumise à une charge continue d'intensité $P(x)$ et peut être employée également pour obtenir l'équation de la vibration latérale.



Figure.II.2 -Vibration transversale d'une poutre

Il est seulement nécessaire d'appliquer le principe d'Alembert et d'imaginer que la barre vibrante est chargée par des forces d'inertie, dont l'inertie, dont l'intensité change sur la longueur de la barre et est indiquée par

$$P(x) = -\rho \cdot A \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad (\text{II.3})$$

Là où ρ est le poids de matériel de la barre par volume unitaire, et A est la section. Substituant (II.3) à $p(x)$ dans équation(II.2) l'équation générale pour la vibration latérale de la barre devient :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(E \cdot I \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \right) = -\rho \cdot A \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad (\text{II.4})$$

En cas particulier d'un barre prismatique, EI la rigidité de flexion est constante sur la longueur de la barre et nous obtenons à partir de l'équation (II.4).

$$E \cdot I \cdot \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} = -\rho \cdot A \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

Où:

$$E \cdot I \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} + \rho \cdot A \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{II.5})$$

$$E \cdot I \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} + \rho \cdot A \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0$$

Cette équation représente l'équation de vibration pour le modèle Euler-Bernoulli.

II.2.2) Modèle Timoshenko :

II.2.2.1) Principe de la théorie :

Cette théorie est une amélioration du modèle d'Euler-Bernoulli puisqu'elle tient compte également de l'inertie de rotation et de la déformation de cisaillement qui se produit dans une barre pendant qu'elle vibre .le modèle implique deux équations d'ondes couplées.

La théorie de Timoshenko explique tous les deux l'effet de la déformation rotatoire d'inertie et de cisaillement, qui est négligée une fois appliqué à la théorie une barre d'Euler-Bernoulli appelée aussi la théorie mince de barre.

Dans le paragraphe précédent les dimension en coupe de la barre ont été considérées comme très petites en comparaison de la longueur et l'équation (II.1) a été employée pour la courbe de déflexion. Des corrections seront maintenant données, tenant compte de l'effet des dimension en coupe sur la fréquence. Ces corrections peuvent être d'importance considérable en étudiant les modes de la vibration des fréquences plus élevées quand une barre vibrante est subdivisée par les coupes nodales en parties comparativement courtes

II.2.2.2) Inertie de rotation :

Il est facile de voir que pendant la vibration les éléments de la barre tels que le mm_1n_1 (voir la fig. II2) exécutent non seulement un mouvement de translation mais également de rotation, l'angle variable de la rotation qui est égale à la pente de la courbe de déflexion sera exprimé par dy/dx et la vitesse et l'accélération angulaire correspondant seront donnés par :

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x \partial t} \text{ et } \frac{\partial^3 y}{\partial x \partial t^2}$$

Par conséquent le moment des forces d'inertie de l'élément mm_1n_1 autour de l'axe par son centre de gravité et la perpendiculaire au plan xy sera :

$$-I \cdot \rho \frac{\partial^3 y}{\partial x \partial t^2} dx$$

Le moment est pris positif quand c'est un sens horaire.

Ce moment devrait être pris en considérant la variation du moment de flexion le long de l'axe de la barre. puis, au lieu de la première équation (II.2), nous aurons :

$$\frac{dM}{dx} = Q - I \cdot \rho \frac{\partial^3 y}{\partial x \partial t^2} \quad (\text{II.6})$$

Substitution cette valeur de dM/dx dans l'équation à la courbe de déflexion :

$$E \cdot I \cdot \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} = \frac{d^2 M}{dx^2}$$

Et en utilisant l'équation (II.3), nous obtenons :

$$E \cdot I \cdot \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} = -\rho \cdot A \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} + I \cdot \rho \cdot \frac{\partial^4 y}{\partial x^2 \partial t^2} \quad (\text{II.7})$$

C'est l'équation pour la vibration latérale des poutres dans laquelle la deuxième limite du bon côté représente l'effet de l'inertie rotatoire.

II.3) Le modèle élastique nonlocal de nanotubes de carbone double paroi avec l'effet de la température :

Les équations du mouvement de vibration transversal de nanotubes selon la théorie d'Euler peuvent être obtenues en tant que [22,23,24]

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + p(x) = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \quad (\text{II. 8})$$

Où $p(x)$ est la force transversale distribuée le long de l'axe x , $w(x,t)$ est la flexion transversale, ρ est la densité massique, A est la section de coupe du nanotube. et Q est la force de cisaillement résultante sur la coupe, qui satisfait la condition d'équilibre de moment suivante :

$$Q = \frac{\partial M}{\partial x} \quad (\text{II.9})$$

N_t est une force axiale additionnelle qui dépend de la température T et de coefficient de dilatation thermique de nanotube α . Cette force peut être exprimée comme suit :

$$N_t = -E A \alpha T \quad (\text{II.10})$$

Le moment de flexion résultant M dans l'équation (II.9) est défini ci-après :

$$M = \int_A y \sigma dA$$

Où σ est la contrainte axiale nonlocal de la théorie nonlocal [25] des milieux continus [26].

La relation constitutive nonlocal unidimensionnelle pour la barre peut être écrite en tant que : [25,26,27,28]

$$\sigma - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} = E \varepsilon \quad (\text{II.12})$$

Pour le cas où l'effet thermique est pris en considération, l'équation (II.12) devient :

$$\sigma - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} = E \varepsilon - E \alpha T \quad (\text{II.13})$$

Où E est le module de Young, a est une longueur caractéristique interne, e_0 est une constante propre à chaque matériel. Avec l'hypothèse d'Euler Bernoulli pour la petite flexion, la déformation axiale est donnée par [29] :

$$\varepsilon = -y \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} \quad (\text{II.14})$$

Où y est la coordonnée transversale mesurée positivement dans la direction de la flèche selon l'Eqs. (II.13) et (II.14), la relation (II.11) peut être exprimée ainsi :

$$M = (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} - EI \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} \quad (\text{II.15})$$

Ou $I = \int_A y^2$ est le moment de l'inertie.

Par substitution équation (II.8) (II.9) et (II.10) dans (II.15), le moment de flexion M et la force de cisaillement nonlocal Q peuvent être obtenus dans égalités suivantes :

$$M = -EI \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + (e_0 a)^2 \left[\rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - P(x) + EA \alpha T \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right] \quad (\text{II.16})$$

$$Q = -EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + (e_0 a)^2 \left[\rho A \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial t^2} - \frac{\partial P(x)}{\partial x} + EA \alpha T \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right] \quad (\text{II.17})$$

L'équation du mouvement (II.8) peut être exprimée ainsi par la flexion transversale comme suit :

$$P(x) = EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + EA \alpha T \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \left(\rho A \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} + EA \alpha T \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} - \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \right) \quad (\text{II.18})$$

C'est l'équation générale pour des vibrations transversales d'une poutre élastique sous la pression transversale répartie et l'effet thermique sur la base d'élasticité nonlocal.

On note que quand le paramètre α tend vers zéro, l'équation ci-dessus se réduit à l'expression classique d'Euler Bernoulli (II.8).

On sait que les nanotubes de carbones doubles parois distinguées de la barre élastique traditionnelle par leur couche creuse double structures et les forces associées de van der Waals d'intube. Puisque les CNT_S ont la conductivité thermique élevée, on peut considérer que la variation de température est uniformément distribuée dans CNT.

Cette équation (II.18), peut être employée à chacun des nanotubes intérieurs et extérieurs des nanotubes de carbone double parois. Supposant que les nanotubes intérieurs et extérieurs ont la même épaisseur et constantes matérielles efficaces, nous avons alors :

$$P_{12} = EI_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} + \rho A_1 \frac{\partial^2 w_1}{\partial t^2} + EA_1 \alpha T \frac{\partial^2 w_1}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \left(\rho A_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^2 \partial t^2} + EA_1 \alpha T \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} - \frac{\partial^2 P_{12}}{\partial x^2} \right) \quad (\text{II.19a})$$

$$-P_{12} = EI_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \rho A_2 \frac{\partial^2 w_2}{\partial t^2} + EA_2 \alpha T \frac{\partial^2 w_2}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \left(\rho A_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^2 \partial t^2} + EA_2 \alpha T \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \frac{\partial^2 P_{12}}{\partial x^2} \right) \quad (\text{II.19b})$$

Ou les indices inférieur 1 et 2 sont employés pour désigner les quantités liées aux nanotubes intérieurs et extérieurs, respectivement, P_{12} est la pression de Van Der

Waals par unité de longueur axiale exercée sur le nanotube intérieur par le nanotube extérieur.

La flexion de deux nanotubes est couplée par la force [30] de Van Der Waals. Le potentiel d'interaction de Van Der Waals, en fonction de l'espacement de couche intercalaire entre deux nanotubes adjacents, peut être estimé par le modèle de Lennard Jones. Le potentiel d'interaction de couche intercalaire entre deux nanotubes adjacents peut être simplement rapproché par le potentiel obtenu pour deux monocouches plates de graphite, noté $g(\delta)$, où δ est l'espace entre couche [31,32]. Pour la pression de vibration actuelle dans les nanotubes de carbone sous de petites déformations, La pression de Van Der Waals $P_V(x, \theta)$ à un point quelconque entre deux nanotubes adjacents devrait être un fonction linéaire du saut de flexion à ce point, ainsi nous avons :

$$\left[\frac{dg(\delta)}{d\delta} \right] + c(\Delta w)$$

$$C = \frac{d^2 g}{d\delta^2}$$

t est l'espacement initiale de couche intercalaire avant la déformation, qui est égale ou très près de l'épaisseur représentative d'un CNT, (Δw) exprime le saut de flexion dû à la déformation, et c est le coefficient d'interaction de Van Der Waals. Dans l'Eq. (II.20) les énergies potentielle d'interaction entre deux nanotubes adjacents d'un CNT s sont écrites par le potentiel [33] de Lennard Jones de milieu continu (LJ), qui peut être exprimé approximativement en termes d'espacement de couche intercalaire δ comme le suivant :

$$g(\delta) = K \left[\left(\frac{\delta_0}{\delta} \right)^4 - 0.4 \left(\frac{\delta_0}{\delta} \right)^{10} \right] \quad (\text{II.21})$$

Où $\delta_0 = 0.34 \text{ nm}$ est l'espacement inter couche. Substitution des données obtenues en référence [34] pour deux SWNT s concentrique dans l'équation (II.21), nous obtenons la valeur suivante :

$$K = -61.665 \text{ meV / atome.} \quad (\text{II.22})$$

Puisque l'espacement initial de couche intercalaire est très près de l'espacement de couche intercalaire d'équilibre auquel $dg(\delta)/d\delta = 0$ décrit par Girifalco, [31,32] le premier terme de l'Eq. (II.20a) est négligeable, reflétant le fait que toutes les pressions initiales de couche intercalaire disparaissent. Ici, le coefficient d'interaction c est calculé à l'espacement initial de couche intercalaire (environ 0.34nm) le

coefficient d'interaction de Van Der Waals par unité de longueur entre deux nanotubes, qui peuvent être estimés par [35] :

$$C = \frac{320(2R_1)erg/cm^3}{0.16d^2} \quad (d=0.142nm) \quad (II.23)$$

Pour des vibrations de petite amplitude, la pression de Van Der Waals devrait être une fonction linéaire de la différence des débattements des deux couches adjacentes au point comme suit :

$$P_{12} = c(w_2 - w_1) \quad (II.24)$$

Introduction d'Eq.(II.23) dans l'Eq.(II.19a) et (II.19b) nous aurons :

$$c(w_2 - w_1) = EI_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} + \rho A_1 \frac{\partial^2 w_1}{\partial t^2} + EA_1 \alpha T \frac{\partial^2 w_1}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 (\rho A_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^2 \partial t^2} + EA_1 \alpha T \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} - c \frac{\partial^2}{\partial x^2} (w_2 - w_1)) \quad (II.25a)$$

$$-c(w_2 - w_1) = EI_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \rho A_1 \frac{\partial^2 w_2}{\partial t^2} + EA_1 \alpha T \frac{\partial^2 w_2}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 (\rho A_1 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^2 \partial t^2} + EA_1 \alpha T \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + c \frac{\partial^2}{\partial x^2} (w_2 - w_1)) \quad (II.25b)$$

Avec l'effet de la petite échelle de longueur incluse, ces deux équations décrivent les vibrations transversales libres de nanotubes de carbone double paroi sous l'effet thermique, et elles sont couplées ensemble par l'interaction de Van Der Waals. On note que ces deux équations(II.25a) et (II.25b) sont semblables à ceux obtenues par Heireche et al [22].

II.4) les solutions mathématique du problème :

Considérons un nanotube de carbone double paroi de longueur L dont les deux extrémités sont simplement soutenues, ainsi les modes vibratoires du DWCNT sont de la forme [22]

$$w_1 = a_1 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x, w_2 = e^{i\omega t} \sin \lambda_n x \text{ et } \lambda_n = \frac{n\pi}{L} \quad (n=1,2,3,\dots)$$

$$(II.26)$$

Ou a_1 et a_2 sont les amplitudes des débattements du nanotube intérieur et extérieur. Ainsi les deux fréquences de résonance d'ordre n du DWCNT avec l'effet thermique peuvent être obtenues par l'intermédiaire du modèle nonlocal par substitution de l'Eq.(II.26) dans les Eqs.(II.25a) (II.25b), qui nous donnent :

$$\omega_{nI}^2 = \frac{1}{2} \left(\alpha_n - \sqrt{\alpha_n^2 - 4\beta_n} \right), \quad \omega_{nII}^2 = \frac{1}{2} \left(\alpha_n + \sqrt{\alpha_n^2 - 4\beta_n} \right) \quad (\text{II.27})$$

Avec

$$\alpha_n = \frac{c(A_1 A_2)}{\rho A_1 A_2} - \frac{2E\alpha T \lambda_n^2}{\rho} + \frac{E\lambda_n^4 (A_1 I_2 + A_2 I_1)}{\rho A_1 A_2 (1 + (e_0 \alpha)^2 \lambda_n^2)}$$

(II.28)

$$\beta_n = \frac{E^2 \alpha^2 T^2 \lambda_n^4}{\rho^2} + cE\alpha T \lambda_n^2 \frac{A_1 + A_2}{\rho^2 A_1 A_2} - E^2 \alpha T \lambda_n^6 \frac{A_2 I_1 + A_1 I_2}{\rho^2 A_1 A_2 (1 + (e_0 \alpha)^2 \lambda_n^2)} + c\lambda_n^4 \frac{EI_1 + EI_2}{\rho^2 A_1 A_2 (1 + (e_0 \alpha)^2 \lambda_n^2)} + \lambda_n^8 \frac{EI_1 + EI_2}{\rho^2 A_1 A_2 (1 + (e_0 \alpha)^2 \lambda_n^2)^2} \quad (\text{II.29})$$

Où ω_{nI} est la fréquence normale inférieure ω_{nII} , est la plus haute fréquence normale.

Car on la première solution :

$$w_1 = a_1 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x$$

Donc nous aurons par dérivation de w_1 et w_2 par rapport à jusqu'au quatrième degré

nous aurons :

$$\frac{\partial \omega_1}{\partial x} = a_1 \lambda_n e^{i\omega t} \cos \lambda_n x, \quad \frac{\partial^2 \omega_1}{\partial x^2} = -a_1 \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x, \quad \frac{\partial^3 \omega_1}{\partial x^3} = -a_1 \lambda_n^3 e^{i\omega t} \cos \lambda_n x$$

$$\frac{\partial^4 \omega_1}{\partial x^4} = -a_1 \lambda_n^4 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x,$$

$$\frac{\partial \omega_1}{\partial t} = a_1 i \omega e^{i\omega t} \sin \lambda_n x, \quad \frac{\partial^2 \omega_1}{\partial t^2} = -a_1 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x$$

$$\frac{\partial \omega_2}{\partial x} = a_2 \lambda_n e^{i\omega t} \cos \lambda_n x, \quad \frac{\partial^2 \omega_2}{\partial x^2} = -a_2 \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x$$

En dérivant ω_1 et ω_2 deux fois par rapport à x et a-t-on au

$$\frac{\partial^3 \omega_1}{\partial x^2 \partial t} = -a_1 i \omega \lambda_n e^{i\omega t} \sin \lambda_n x, \quad \frac{\partial^4 \omega_1}{\partial x^2 \partial t^2} = a_1 \omega^2 \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x$$

$$\frac{\partial^3 \omega_2}{\partial x^2 \partial t} = -a_2 i \omega \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x, \quad \frac{\partial^4 \omega_2}{\partial x^2 \partial t^2} = a_2 \omega^2 \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x$$

En remplaçant dans l'Eq suivante :

$$C(\omega_1 - \omega_2) = EI_1 \frac{\partial^4 \omega_1}{\partial x^4} + \rho A_1 \frac{\partial^2 \omega_1}{\partial t^2} + EA_1 \alpha T \frac{\partial^2 \omega_1}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \left[\rho A \frac{\partial^4 \omega_1}{\partial x^2 \partial t^2} + EA_1 \alpha T \frac{\partial^4 \omega_1}{\partial x^2} \right] - C \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\omega_2 - \omega_1)$$

Nous aurons :

$$C(a_2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x - a_1 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x) = EI_1 a_1 \lambda_n^4 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x - A a_1 \omega^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x - EA_1 \alpha T a_1 \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x - (e_0 a)^2 (\rho A_1 a_1 \omega^2 \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x + EA_1 \alpha T a_1 \lambda_n^4 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x - c(-a_2 \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x + a_1 \lambda_n^2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x))$$

Si on simplifie le facteur commun, on aura le suivant :

$$C(-a_2 - a_1) = EI_1 a_1 \lambda_n^4 - \rho A_1 a_1 \omega^2 - E A_1 \alpha T a_1 \lambda_n^2 - (e_0 a)^2 (\rho A_1 a_1 \omega^2 \lambda_n^2 + EA_1 \alpha T a_1 \lambda_n^4 - c(-a_2 \lambda_n^2 + a_1 \lambda_n^2))$$

Ou bien :

$$\rho A_1 a_1 \omega^2 + E A_1 \alpha T a_1 \lambda_n^2 - EI_1 a_1 \lambda_n^4 + (e_0 a)^2 (\rho A_1 a_1 \omega^2 \lambda_n^2 + E A_1 \alpha T a_1 \lambda_n^4 - c(-a_2 \lambda_n^2 + a_1 \lambda_n^2)) - C(a_2 - a_1) = 0$$

II.5) Données numériques et résultats :

Sur la base des équations ci-dessus, nous étudions l'effet de paramètre nonlocal et du changement de température sur la fréquence avec des exemples numériques. Comme précédemment mentionnés Jiang et al [36] a constaté que les coefficients de dilatation thermique pour CNTS sont négatifs à la basse température et devient positif à température élevée.

Les paramètres utilisés dans les calculs pour le DWCNT sont donnés comme suit :

Le module de Young $E=1$ TPa

Avec l'épaisseur efficace des nanotubes de carbone mono-paroi $t=0.35$ nm,

La densité de masse $\rho=2.3$ g/cm³ [37, 38, 39]

Le diamètre intérieur $d_1=0.7$ nm et le diamètre extérieur $d_2=1.4$ nm

Pour étudier l'effet de paramètre d'échelle et du changement de température sur les vibrations des nanotubes à double parois, les résultats incluant et excluant le paramètre nonlocal et l'effet thermique sont comparés. Il suit que les rapports des résultats non locaux des résultats non locaux aux résultats locaux correspondants et les rapports des résultats avec le changement de température à ceux sans changement de température, respectivement, sont donnés ci-après :

$$\chi_I = \frac{(\omega_{nl})_N}{(\omega_{nl})_L}, \quad \chi_{II} = \frac{(\omega_{nII})_N}{(\omega_{nII})_L}, \quad \zeta_I = \frac{(\omega_{nl})_N}{(\omega_{nl})_N^0}, \quad \zeta_{II} = \frac{(\omega_{nII})_N}{(\omega_{nII})_N^0}$$

Où $(\omega_n)_L$ est la fréquence basée sur le modèle local de poutre d'Euler-Bernoulli comprenant l'effet thermique et $(\omega_n)_{N0}$ est la fréquence basée sur le modèle nonlocal sans l'effet thermique ($\theta=0$).

II.6)Discussion sur le paramètre nonlocal e_0 :

L'importance du paramètre nonlocal, e_0 est de déterminer l'effet nonlocal. Ainsi comme définie par Eringen [40], e_0 est une constante appropriée à chaque matériel. Par exemple, pour une certaine classe des matériaux, en comparant les résultats de la dynamique de réseau à la théorie nonlocal, on a constaté que [40]. $e_0 = 0.39$, mais pour Sudak [35], les valeurs de e_0 ont besoin d'être déterminées à partir des résultats expérimentaux. Sur la base des résultats présentés dans la référence [35], nous avons conclu que L/a et e_0 pris du même ordre ou d'un ordre moins pour avoir n'importe quel effet nonlocal significatif. Zhang et al [36] a estimé la valeur de e_0 par l'ajustement de courbe des résultats théorique obtenu en utilisant l'élasticité nonlocal à ceux des simulations pour l'effet de flambement axial critique de nanotube de carbone simple pavois. Les résultats obtenus par Sears et Batra [37] ont été comparé à ceux obtenus pour un nanotube modelé comme coque cylindrique élastique non local en utilisant la théorie de Donnell et e_0 égal à 0.82. Wang et al [38] a employé une Valeur de e_0 comprise entre 0 et 7 pour on analyse. Zhang et al [39] a déterminé les valeurs de e_0 pour différents angles chiraux (m,n), par l'ajustement de courbe des résultats obtenus par de simulations et l'analyse non locale des résultats obtenus en utilisant le modèle de Donnell de coque les valeurs obtenues ont changé d'un minimum de 0.546 pour (15,4) une coque chiral à un maximum de 1.043 pour (11,9) une coque. Zhang et al [40] a exécuté l'analyse de l'interaction élastique entre les grains et les défauts qui courent le graphène. Ils ont conclu que le champ de déplacement autour des défauts obtenus à partir du modèle du milieu et de modèle nonlocal peut s'assortir très bien si e_0 est choisi égale à 8.79. Wang et Hu [34], qui a adopté la relation constitutive du second degré de gradient de contrainte, a proposé que $e_0 = 1 / \sqrt{12} = 0.288$ doit être employé dans la détermination des courbes de dispersion par l'intermédiaire des théories élastiques de poutre et de la méthode de la

dynamique moléculaire. Ils ont obtenu leur valeur e_0 par une étude comparative de la méthode de gradient avec la dynamique atomique d'un unidimensionnel.

Par conséquent, on peut conclure que la valeur adoptée du coefficient e_0 dépend de la structure du cristal dans la dynamique de réseau et la physique à l'étude. Il est clair qu'une gamme étendue de valeurs pour le paramètre d'échelle $e_0 a$ soit possible due aux différentes fréquences de vibration. Plusieurs travaux, particulièrement les essais expérimentaux, sont exigés pour déterminer $e_0 a$ plus exactement pour CNTs. Dans ce travail, nous adoptons le même paramètre d'effet d'échelle $0 \leq e_0 a \leq 2nm$ employé par Wangs et al. [41] dans notre recherche d'effet d'échelle dans le comportement de vibration CNTS.

I.7) CONCLUSION :

Nous avons essayé dans ce chapitre de parler un peu de quelques modèles de calculs dans les vibrations des nanotubes, en montrant toutes les forces qui peuvent donner naissance à ces vibrations ou les amortissent, aussi, nous avons développés les différentes équations et donné les solutions à ces équations différentielles. Aussi, nous avons parlé des paramètres d'échelle et leurs effets sur les vibrations de nanotubes en carbone.

Enfin, nous avons expliqué en détail les différentes conditions, pour choisir un paramètre d'échelle selon plusieurs expériences citées par des scientifiques spécialisés dans le domaine des nanotubes et leur comportement dans divers milieux, et pour les effets de chaque paramètre indépendant, aussi que des paramètres associés tels que la vibration du nanotube de carbone à double parois sur l'effet de la température.

Références :

- [22] H. Heireche, A.Tounsi, A. Benzair, Nanotechnology. 19, 185703 (2008).
- [23] <http://cnst.rice.edu/pics.html>.
- [24] G. Overney, W. Zhong, D. Tománek, Z. Phys. D, 1993, 27, 93. 51
- [25] J. Peddieson, R. Buchanan, et R.P. McNitt, J. Eng.Sci interne. 41, 305 (2003).
- [26] A.C. Eringen, J. Appl. Phys. 54, 4703 (1983).
- [27] Y. Q. Zhang, G. R. Liu, et X.Y. Xie, Phys. Tour. B. 71, 195404 (2005).
- [28] H. Heireche, A.Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. Adda Bedia, Physica. E 40, 2791 (2008).
- [29] Trigonal warping effect of carbon nanotubes, R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B, 2000, 61, 2981-2990.
- [30] B. Reulet *et al*, Phys. Rev. Lett. 85, 2829 (2000).
- [31] M. M. Treacy, T. W. Ebbesen, J. M. Gibson, Nature, 1996, 381, 678.
- [32] Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties, M.-F. Yu, B. S. Files, S. Arepalli, R. S. Ruoff, Phys. Rev. Lett., 2000, 84, 5552-5555.
- [33] Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties, M.-F. Yu, B. S. Files, S. Arepalli, R. S. Ruoff, Phys. Rev. Lett., 2000, 84, 5552-5555.
- [34] Trigonal warping effect of carbon nanotubes, R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B, 2000, 61, 2981-2990.
- [35] L.J. Sudak, J. Appl. Phys. 94, 7281 (2003).
- [36] H. Jiang, R. Liu, Y. Huang et K.C. Hwang, J. Eng. Mater. Technol. 126, 265 (2004).
- [37] H. Heireche, A.Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. Adda Bedia, Physica. E 40, 2791 (2008).
- [38] Figure de J.P. Fluxench, GDPC, Montpellier.
- [39] Varioptic. Drop centering device (5 Octobre 2000). Patent N° WO 00/58763.
- [40] A.C. Eringen, J. Appl. Phys. 54, 4703 (1983).
- [41] L.F. Wang, et H. Y. Hu, Phys. Rev. B 71, 195412 (2005).
- [42] Production of carbon nanotubes, C. Journet, P. Bernier, Applied Physics A: Materials Science & Processing, 1998, A 67, 1-9.

Résultats
et
discussions

III.1 Introduction :

Sur la base des équations développées dans le chapitre II, nous étudions l'effet du paramètre nonlocal et du changement de température sur la fréquence avec des exemples numériques. Comme précédemment mentionnés, Jiang et al [36] a constaté que les coefficients de dilatation thermique pour CNTs sont négatifs à la basse ou à la température ambiante et devient positif à température élevée.

Pour étudier l'effet de paramètre d'échelle et du changement de température sur les vibrations des nanotubes à double paroi, les résultats incluant et excluant le paramètre nonlocal et l'effet thermique sont comparés. Il suit que les rapports des résultats nonlocaux aux résultats correspondants et les rapports des résultats avec le changement de température à ceux sans changement de température, respectivement, sont donnés ci-après :

$$\chi_I = \frac{(\omega_{nl})_N}{(\omega_{nl})_L} \quad \chi_{II} = \frac{(\omega_{nII})_N}{(\omega_{nII})_L}, \quad \zeta_I = \frac{(\omega_{nl})_N}{(\omega_{nl})_N^0}, \quad \zeta_{II} = \frac{(\omega_{nII})_N}{(\omega_{nII})_N^0}$$

Où $(\omega_n)_L$ est la fréquence basée sur le modèle local de poutre d'Euler Bernoulli comprenant l'effet thermique et $(\omega_n)_N^0$ est la fréquence basée sur le nonlocal modèle sans l'effet thermique ($\theta = 0$).

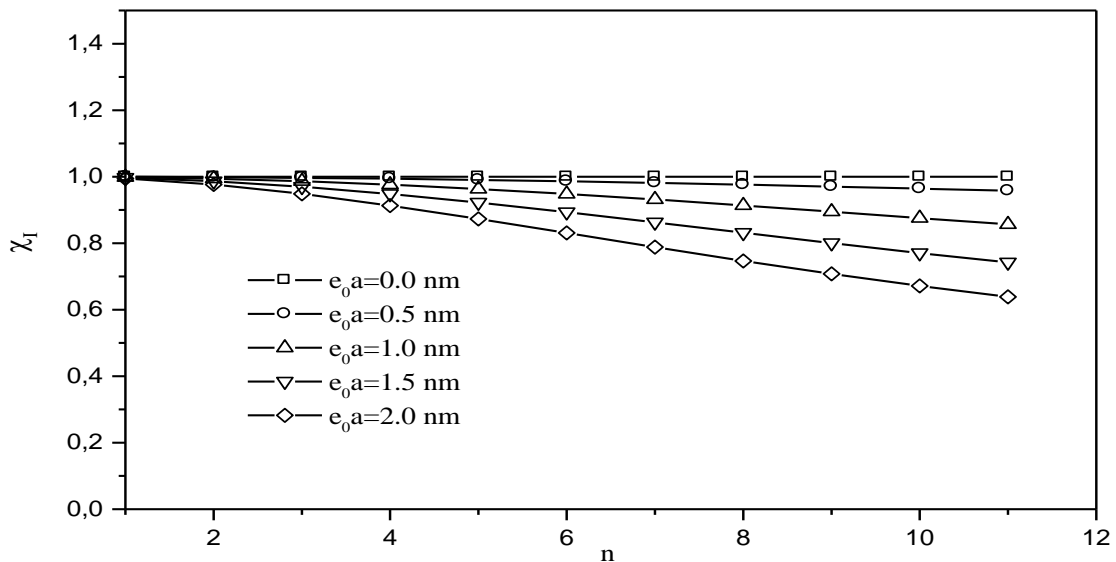


FIG III.1L l'effet de la petite échelle sur la basse fréquence naturelle ω_{nl} du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ dans le cas de la basse température ($\theta =40$ K)

III.2. Discussion sur les résultats :

Pour le cas de la basse température, nous supposons $\alpha = -1.6 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [43,44]. Avec l'allongement $L/d_2 = 40$ et le changement de température $\theta = 40 \text{ K}$, les rapports χ_I et χ_{II} , le paramètre d'échelle $e_0 a$ et le nombre de mode vibratoire n sont indiqués dans la figure (III.1). Avec $n = 2$ et $\theta = 40 \text{ K}$, les rapports χ_I , servent d'index pour évaluer quantitativement l'effet à échelle réduite sur la propagation de vibrations dans DWCNT. On le voit clairement des figures. (III.1) que les rapports χ_I sont moins que l'unité. Ceci signifie que l'application du modèle local de poutre d'Euler-Bernoulli pour l'analyse de CNT mènerait à une grande prédiction des fréquences normales si l'effet de la petite échelle de longueur entre les différents atomes de carbone dans CNTs est négligé. Comme peut être vu, le léger effet de taille sur la fréquence normale inférieure ω_{nI} est significatif tandis que la haute fréquence normale ω_{nII} est peu sensible à l'effet d'échelle. À mesure que le paramètre de réseau $e_0 a$ augmente, les rapports χ_I obtenus pour la théorie nonlocal de poutre deviennent plus petits que ceux de la théorie locale. Cette réduction est particulièrement significative pour des valeurs plus élevées du nombre de mode vibratoire n , et l'effet à échelle réduite ne peut pas être négligé ainsi. La réduction peut être expliquée comme suit ; L'effet à échelle réduite rend le CNTs plus flexible pendant que le modèle nonlocal peut être regardé comme des atomes liés par les ressorts élastiques [34] tandis que le modèle local de milieu continu considère le ressort constant pour prendre une valeur infinie. Dans l'ensemble, la théorie nonlocal de poutre devrait être employée si on a besoin des prévisions précises des caractéristiques vibratoires des nanotubes de carbone.

Maintenant, nous allons voir l'effet que va faire le changement de la température sur les vibrations dans les nanotubes de carbone à doubles parois en présentant les graphes suivants, avec l'application des changements qui varient de 20 jusqu'à 60 °K et en changeant les valeurs du nombre vibratoire ainsi que le rapport L/d_2 .

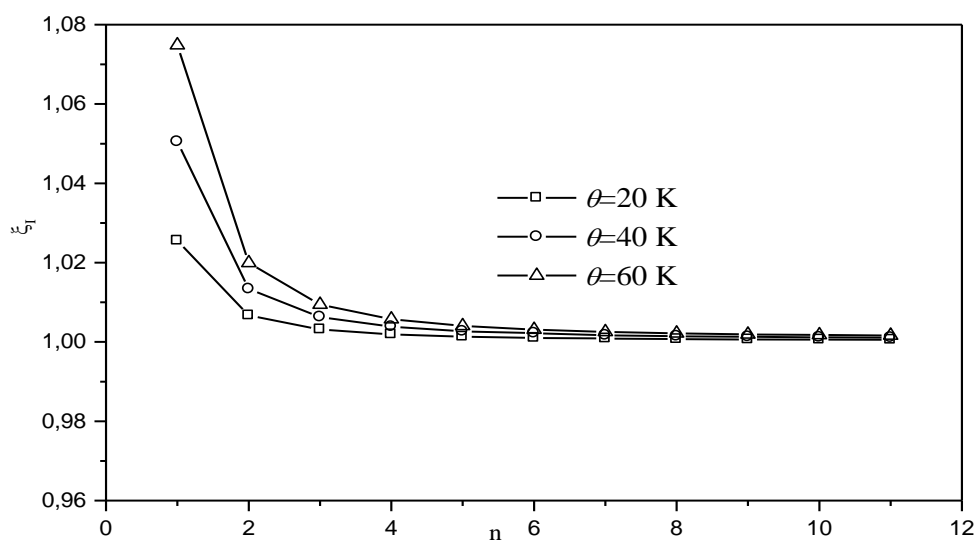


FIG III.2 L'effet thermique sur la basse fréquence naturelle ω_{nI} du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ et $e_0 a=2\text{nm}$ dans le cas de la basse température.

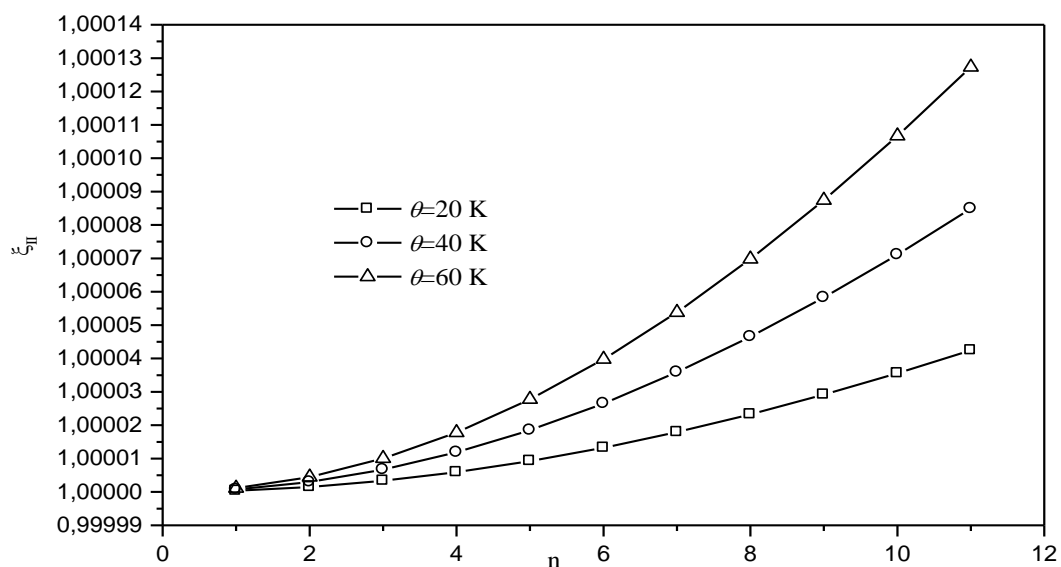


FIG III.3 L'effet thermique sur la haute fréquence naturelle ω_{nII} du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ et $e_0 a=2\text{nm}$ dans le cas de la basse température.

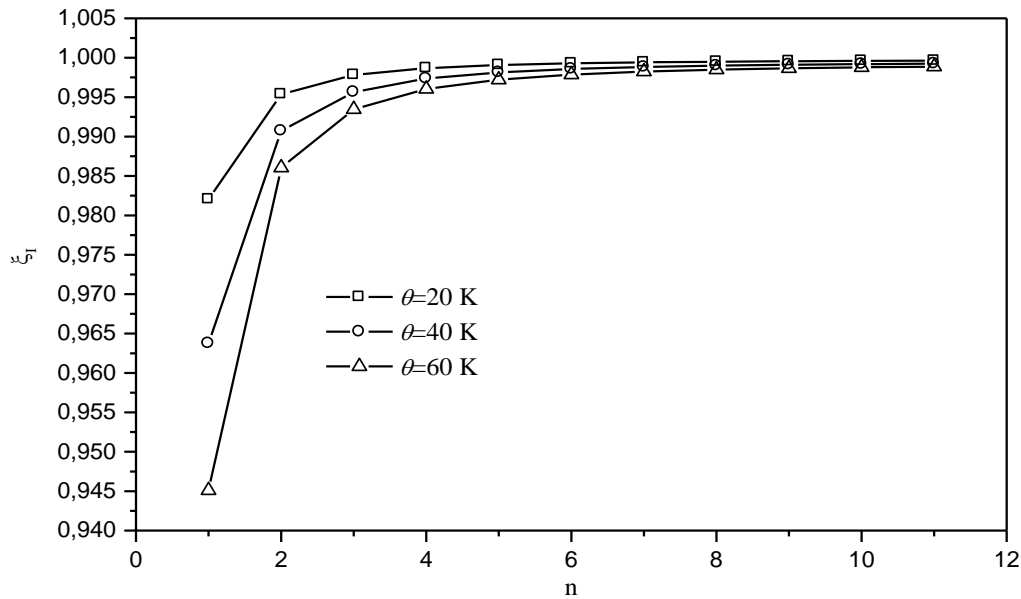


FIG III.4 L'effet thermique sur la basse fréquence naturelle ω_{nI} du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ et $e_0 a=2nm$ dans le cas de la haute température.

III.2. Discussion sur l'effet de changement de température :

Pour le cas de la basse température, les rapports ζ_I et ζ_{II} , le changement de température θ et le nombre de mode vibratoire n sont indiqués dans les figures (III.2 et III.3). Avec le mode vibratoire $n = 2$ et $e_0 a = 2nm$, les rapports ζ_I et ζ_{II} , le changement de température θ . Les rapports ζ_I et ζ_{II} servent d'index pour évaluer quantitativement l'influence du changement de température sur la propagation de vibration dans DWCNT. Comme on peut voir, l'effet thermique sur la fréquence normale inférieure ω_{nI} est significatif tandis que la haute fréquence normale ω_{nII} est peu sensible au changement de température. L'effet thermique sur la fréquence normale inférieure ω_{nI} diminue avec l'augmentation du nombre n et devient plus significatif avec l'augmentation de l'allongement L/d (rapports de longueur à diamètre) et du changement de température θ . D'ailleurs, on peut observer la figure (III.3) que la présence de la température doit augmenter les valeurs de ω_{nI} et ω_{nII} . Cependant, nous observons de fig. (III.2) que l'effet du changement de température sur la fréquence normale inférieure ω_{nI} peut être négligé quand $n \geq 8$.

Pour le cas de la haute température, fig. (III.4) présentent les effets thermiques sur la fréquence normale inférieure ω_{nl} , respectivement. Avec le nombre de mode vibratoire $n = 2$, les effets thermiques sur ω_{nl} sont calculés.

On trouve dans la fig. (III.4) que l'effet thermique sur la fréquence normale inférieure ω_{nl} est significatif tandis que l'influence du changement de température sur la haute fréquence normale ω_{nH} est très insignifiante. C'est conformé au cas de la basse température. Nous pouvons également tirer une conclusion semblable au cas de la basse température que l'effet thermique sur la fréquence normale inférieure ω_{nl} devient moins significatif avec l'augmentation du nombre de mode vibratoire n et augmente avec l'augmentation de l'allongement L/d_2 et du changement de température θ . En outre, on voit de la figure.(III.4) dont les valeurs ω_{nl} prennent en considération l'effet thermique sont plus petites que ceux qui exclus l'influence du changement de température, qui est contraire au cas à la basse température.

On peut observer des résultats pour les deux cas de basse température et de haute température que l'effet du changement de température sur des fréquences de vibration de DWCNTs employant le modèle nonlocal de poutre d'Euler-Bernoulli confirment les résultats montrés par Zhang et al [45]. La différence est due au paramètre nonlocal qui mène à une réduction des fréquences de vibration.

III.3) Conclusion :

Nous avons vue donc dans ce troisième chapitre les effets du paramètre d'échelle et du changement de la température d'une manière illustrée graphiquement, dans les deux cas ; le premier cas est celui de la basse fréquence et le deuxième cas de la haute fréquence, sans oublier de donner plusieurs valeurs à ces paramètres dans un milieu thermique a basse température ainsi que la haute température. Enfin, nous avons expliqués tous les résultats graphiquement en détail.

Référence :

[43] X.H. Yao et Q. Han, J. Eng. Mater. Technol. **128**, 419 (2006).

[44] X.H. Yao et Q. Han, compos. Sci. Technol. **67**, 125 (2007).

[45] Y.Q. Zhang, X. Liu, G.R. Liu, Nanotechnology 18, 445701 (2007).