



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE



MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE

CENTRE UNIVERSITAIRE DE TISSEMSILT

## ***MEMOIRE DE MASTER***

*Présenté par :*

➤ ROUICHER Soumia

*Filière : PHYSIQUE*

*Spécialité : Nanostructures Semiconductrices*

Intitulé

***L'effet des vibrations sur les  
nanotubes du carbone***

*Devant le jury composé de :*

**Président : Mr Djoudi Lakhdar.....MCA. Centre Universitaire de Tissemsilt**

**Directeur de thèse : Mr Boumia Lakhdar.... MCB. Centre Universitaire de Tissemsilt**

**Examineur : Mr Hadj Zoubir Miloud.....MAA. Centre Universitaire de Tissemsilt**

**Examinatur : Mr Boucharef Mohamed.....MCB. Centre Universitaire de Tissemsilt**

Année universitaire : 2016 /2017

*Merci*

## Remerciements

*Nous tenons tout d'abord à remercier Allah le tout puissant qui nous a donné la force et la patience d'accomplir ce modeste travail.*

*Il m'est très difficile d'exprimer en ces quelques lignes toute ma gratitude et reconnaissance à Monsieur BOUMIA Lakhdar, à Centre Universitaire de Tissemsilt, qui a dirigé ce travail, de m'avoir encadré et proposé un sujet aussi passionnant et intéressant. Sa disponibilité permanente et son aide m'ont été d'un soutien dont je lui suis particulièrement reconnaissant. Sa compétence et ses conseils m'ont été d'un grand secours.*

*Je tiens à adresser tous mes remerciements aux membres du jury d'avoir voulu accepté de faire partie de la commission d'examineurs.*

*Je tiens à exprimer non sincères remerciements à tous nos enseignants de l'institut des Sciences et Technologie, en particulier les enseignants de département des sciences de la matière (SM), qui nous ont éclairé le chemin de la recherche et qui par leurs compétences nous ont soutenu dans la poursuite de nos études.*

*Je représente tous mes remerciements à ma famille, mes collègues et amis ainsi qu'à tous les membres du Département des Sciences de la matière.*

*Je témoigne enfin toute ma reconnaissance à tous ceux et celles que je n'ai pas cités ici et ils sont nombreux dont la présence et le soutien m'ont donné la volonté d'aller jusqu'au bout de ce travail.*

# SOMMAIRE

ملخص.....	
Résumé.....	
Abstract.....	
Liste des notations.....	
Abréviation.....	
Liste des figures.....	
INTRODUCTION GENERALE.....	01
<b>Chapitre I : Généralités sur les nanotubes de carbone</b>	
I.1/Introduction.....	03
I.2/Définition des matériaux.....	03
I.3/Déferèrent types des matériaux.....	04
I.3-1/les matériaux métalliques.....	04
I.3-1.1/ Définition.....	04
I.3-1.2/ Propriétés caractéristiques des métaux.....	04
I.3-2/Les polymères ou matériaux plastiques.....	05
I.3-2.1/Définition.....	05
I.3-2.2/Types des matières plastiques.....	05
I.3-2.3/les propriétés physiques de matériaux polymères.....	06
I.3-2.3/1)les polymères thermoplastiques.....	06
I.3-2.3/2) Les polymères thermodurcis.....	07
I.3-3/Les matériaux céramiques.....	07
I.3-3.1/Définition.....	07
I.3-3.2/Classification et caractéristiques des céramiques.....	08
I.3-3.2/1)les silicates.....	08
I.3-3.2/2)Les verres minéraux et vitrocéramiques.....	08
I.3-3.2/3) Les vitrocéramique.....	09
I.3-3.2/4) Béton de ciment .....	09

I.3-3.2/5) Céramiques techniques a haute résistance mécanique et thermique.....	10
I.3-4/ Les matériaux composites.....	11
I.3.4.1/Définition.....	11
I.3-4.2/ Caractéristiques des matériaux composites.....	12
I.4/ Les formes traditionnelles du carbone.....	13
I.4.1/ Le graphite.....	13
I.4.2/ Le diamant.....	13
I.4.3/ Les carbones <<mal organisés>>.....	14
I.5/ Les nouvelles formes du carbone.....	15
I.5.1/ Fullerènes et dérivés.....	15
I.5.2/ Nanotubes multifeuillets (ou multiparois) .....	16
I.5.3/ Nanotubes monofeuillets (ou monoparois).....	17
I.6/ Propriétés des nanotubes de carbone.....	19
I.6.1/Propriétés mécaniques.....	19
I.6.2/ Propriétés électroniques.....	20
I.6.3 /Propriétés thermiques.....	21
I.6.4/ Propriétés optiques.....	21
I.6.5/ Propriétés émissives.....	21
I.7/ Applications des nanotubes de carbone.....	21
References bibliographiques.....	23

## **Chapitre II : Développements analytiques et formulation**

II.1 Introduction .....	25
II.2 Les conditions de calcul .....	25
II.2.1 Modèle Euler- Bernoulli.....	25
II.2.2 Modèle Timoshenko.....	27
II.2.2.1 Principe de la théorie.....	27
II.2.2.2 Inertie rotationnelle.....	28
II.3 Modèle non locale de poutre double élastique avec l'effet thermique .....	28
II.4. Résultats mathématiques du modèle vibratoire .....	31

Références.....	35
-----------------	----

### **Chapitre III : Interprétations et discussion sur les graphes**

III.1 Introduction.....	36
III.2 discussion des résultats et interprétation des graphes.....	37
III.3 Discussion sur l'effet d'échelle.....	38
III.4 Discussion sur l'effet de changement de température.....	39
III.5 Conclusion.....	41
Références bibliographiques.....	42
CONCLUSION GENERALE.....	43

## LISTE DES FIGURES

<b>Figure I.1:</b> Principales familles de matériaux.....	3
<b>Figure I.2:</b> Structure cristalline des métaux.....	5
<b>Figure I.3:</b> Représentation schématique des structures de la chaîne de polyéthylène.....	6
<b>Figure I.4:</b> Structures simples des silicates.....	8
<b>Figure I.5:</b> structure amorphe du verre de silice SiO <sub>2</sub> .....	9
<b>Figure I.6:</b> Schéma illustratif d'un matériau composite .....	11
<b>Figure I.7:</b> Principaux constituants des matériaux composites.....	12
<b>Figure I.8:</b> Structure du graphite hexagonal.....	13
<b>Figure I.9 :</b> Structure du diamant.....	14
<b>Figure I.10:</b> Fullerène C <sub>60</sub> .....	16
<b>Figure I.11:</b> Structure schématique d'un MWNT, où l'on voit bien l'arrangement concentrique des feuilles de graphène.....	16
<b>Figure I.12.</b> Exemples d'hélices dessinées à la surface des nanotubes.....	18
<b>Figure I.13 :</b> Nanotubes de carbone monofeuillet.....	18
<b>Figure I.14:</b> Energie de valence et de conduction en fonction du vecteur d'onde k .....	20
<b>Figure II.1 :</b> Vibration transversale d'un nanotube de carbone.....	25
<b>Figure II.2 :</b> Notation et géométrie d'un élément du modèle Euler-Bernoulli.....	26
<b>Figure III.1</b> L'effet de la petite échelle sur la basse fréquence naturelle $\omega_{nI}$ du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ dans le cas de la basse température ( $\theta=40$ K) .....	37
<b>Figure III.2</b> L'effet de la petite échelle sur la haute fréquence naturelle $\omega_{nII}$ du nanotube de carbone double parois avec le rapport $L/d_2=40$ dans le cas de la basse température ( $\theta=40$ K) .....	38

**Figure III.3** L'effet de la petite échelle sur la basse fréquence naturelle  $\omega_{nl}$  du nanotube de carbone double parois avec le rapport  $L/d_2=40$  dans le cas de la haute température

( $\theta=40K$ ) .....**39**

**Figure III.4** L'effet de la petite échelle sur la haute fréquence naturelle  $\omega_{nII}$  du nanotube de carbone double parois avec le rapport  $L/d_2=40$  dans le cas de la haute température ( $\theta=40K$ ).....**40**

## **LISTE DES ABRÉVIATIONS**

CNT : Nanotube de carbone.

CNT's : Plusieurs nanotubes de carbone.

MWCNTs : Un ensemble de nanotubes de carbone multi-parois.

CTE : Coefficient de la dilatation thermique.

SWNTs : Single wall nanotube en anglais. (Le petit s désigne plusieurs)

DWCNT : Nanotube de carbone double-parois.

MM : Mécanique moléculaire.

MD : Dynamique moléculaire.

MDS : Simulation de la dynamique moléculaire.

## LISTE DES NOTATIONS

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

$t$  est le paramètre temps.

$I_1$  moment d'inertie du nanotube intérieur.

$I_2$  moment d'inertie du nanotube extérieur.

$M$  moment de flexion résultant du nanotube.

$\rho$  masse volumique du nanotube.

$w(x, t)$  La flèche.

$A_1, A_2$  les sections, intérieure et extérieure respectivement.

$Q$  Force résultante de cisaillement sur la coupe qui satisfait la condition d'équilibre de moment.

$N_t$  Force axiale additionnelle qui dépend de la température.

$T$  Température.

$\alpha$  Coefficient de dilatation thermique du nanotube.

$\sigma$  Contrainte axiale non locale.

$p_{12}$  Pression de Van Der Waals.

$g(\delta)$  Potentiel d'interaction des couches.

$\delta$  Epaisseur du nanotube.

$p_V(x, \theta)$  Pression de Van Der Waals à un point quelconque.

$\Delta w$  Le saut de flexion du nanotube dû à la déformation.

$c$  Constante de van Der Waals.

$K$  est une constante.

$L$  La longueur du nanotube.

$a_1, a_2$  Amplitudes des flexions des nanotubes intérieurs et extérieurs.

$n$  le numéro de mode vibratoire.

$\omega_{nI}$  Fréquence normale inférieure.

$\omega_{nII}$  Fréquence normale supérieure.

$w_2, w_1$  Solutions du premier mode vibratoire d'un DWCNT.

$E$  Module de Young.

$(\omega_n)_L$  Fréquence normale basée sur la théorie locale d'Euler-Bernoulli.

$(\omega_n)_N^0$  Fréquence normale basée sur la théorie non locale d'Euler-Bernoulli sans l'effet de température.

$e_0$  Paramètre d'échelle spécifique à chaque matériau.

$(m, n)$  Les nombres chiraux.

$e_0 a$  Paramètre de réseau.

$\chi_I$  Rapport de la fréquence normale inférieure non locale sur la fréquence normale inférieure locale.

$\chi_{II}$  Rapport de la haute fréquence normale non locale sur la haute fréquence normale locale.

$\zeta_I$  Rapport de la fréquence normale inférieure non locale sur la fréquence normale inférieure locale à température nulle.

$\zeta_{II}$  Rapport de la haute fréquence normale non locale sur la haute fréquence normale locale à température nulle.

$\theta$  Changement de température.

$d_1, d_2$  Diamètre intérieur et extérieur respectivement.

$c(w_2 - w_1)$  Pression axiale de Van Der Waals par unité de longueur exercée sur le nanotube intérieur par le nanotube extérieur.

### Résumé

L'effet de la petite échelle sur la propagation d'onde dans les nanotubes de carbone à double paroi (DWCNTs) sous l'effet de la température est étudié en utilisant le modèle de faisceau d'Euler Bernoulli. Des équations régissant dynamiques du nanotube de carbone sont formulées sur la base du Théorie nonlocale de l'élastique thermique. Les effets du changement de 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 de la petite 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 faisceau 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 de petite échelle.

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



## INTRODUCTION GENERALE

Les avancés scientifiques ont toujours permis de manipuler la matière et d'analyser sa structure et ses propriétés à des dimensions toujours plus faibles. Ainsi, au regard des travaux menés durant cette dernière décennie, les nanotechnologies sont de plus en plus présentes dans notre quotidien et les matériaux qui en dérivent ainsi que leurs propriétés intéressent des domaines toujours plus vastes et plus variés.

Parmi les différents secteurs auxquels s'appliquent ces nanotechnologies, les nanocomposites constituent un domaine en pleine expansion. Ces nanomatériaux sont le plus souvent synthétisés à partir de nanoparticules préformées distribuées dans une Matrice (polymère, métallique, céramique). Le comportement du nanocomposite sera alors dépendant des propriétés intrinsèques des nanoparticules, de celles de la matrice ainsi que de la qualité de leurs interfaces.

La comparaison avec des composites traditionnels à fibres micrométriques démontre que des propriétés physiques peuvent être atteintes pour les nanocomposites à des fractions massiques bien inférieures à celles nécessaires pour les composites à renforts fibreux (ce qui implique un gain de poids) associé à une mise en œuvre plus simple (injection directe de mélanges-mâtres dilués).

Les nanocomposites sont donc amenés à se démocratiser et à être de plus en plus présents dans notre environnement.

Ces matériaux qui tendent à devenir incontournables dans un futur très proche ne doivent pas, en revanche, présenter le moindre risque pour l'homme et son environnement, que ce soit lors de leur mise en œuvre, de leur utilisation ou encore de leur recyclage.

Au regard de leurs dimensions, les nanoparticules présentent la particularité d'avoir de potentielles propriétés toxicologiques liées à leur surface spécifique très élevée.

On est donc en plein sur du débat « size does matter » et il est important de considérer les dangers potentiels liés à la dimension de ces nanoparticules. La toxicité d'une grande majorité de celles-ci, dont les nanotubes de carbone (NTC), est actuellement toujours à l'étude et c'est alors le principe de précaution qui prévaut traditionnellement. Les nanotubes de carbone représentent l'exemple typique des nanoparticules divisant l'opinion public entre promesses technologiques et craintes toxicologiques. Leurs propriétés intrinsèques exceptionnelles en font des nano charges de choix dans le but de conférer aux nanocomposites, résistance mécanique, conductivité électrique ou encore conductivité thermique exacerbée. Leur



diamètre nanométrique et leur grand facteur de forme en font en revanche des objets capables de pénétrer les tissus humains en volume, et rester confinées. Il est donc extrêmement important de comprendre et de maîtriser les risques représentés par ces nanoparticules.

Dans le cas de nanocomposites chargés par des nanotubes de carbone, le risque représenté par ces matériaux est défini comme le produit de deux composantes : le danger toxicologique représenté par ces nanoparticules multiplié par l'exposition de l'homme à ces mêmes nanoparticules. Si l'une de ces composantes tend vers zéro, alors le risque est fortement réduit [1].

Ce travail est subdivisé en trois chapitres, le premier est consacré aux généralités sur les différents types des matériaux ainsi que les nanotubes de carbone et leurs propriétés et leurs applications, le deuxième chapitre traite d'une manière plus ou moins détaillés les conditions de calcul sur les nanotubes de carbone par le modèle de poutre d'Euler-Bernoulli et le modèle Timoshenko, le troisième chapitre contient nos résultats avec leurs interprétations et nous avons terminé ce mémoire par une conclusion.

# Chapitre I.....Généralités.

## Chapitre I. Généralités

### I.1 Introduction

Les matériaux sont à la source de la technologie et du monde industriel. La réussite technique et le succès commercial d'un produit fabriqué dépendent en grande partie du ou des matériaux choisis.

Sélectionner un matériau n'est généralement pas une opération simple compte tenu de la grande variété proposée. Le choix dépend autant du prix que des qualités propres du matériau et du procédé de fabrication retenu pour la réalisation. La sélection est le plus souvent effectuée en équipe, client et concepteur étant associés aux techniciens de fabrication.

### I.2/ Définition des matériaux

Un matériau est la forme marchande d'une matière première choisie en raison de propriétés d'usage spécifiques et mise en œuvre par de techniques appropriées pour l'obtention d'un objet de géométrie donnée à fonction préméditée [2].

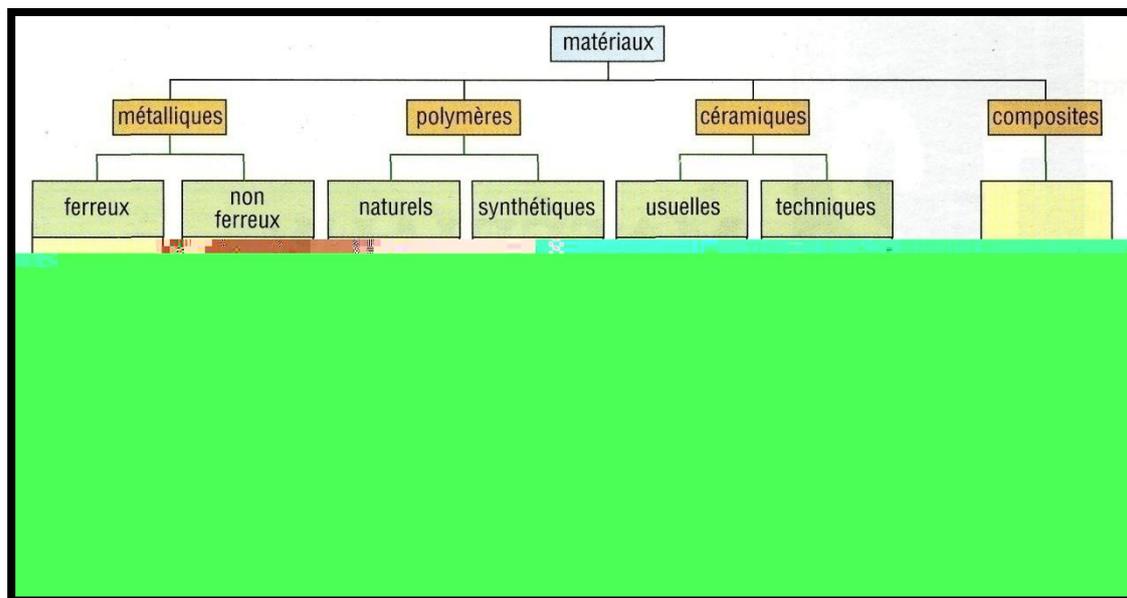


Figure I.1.Principales familles de matériaux [3]

## Chapitre I.....Généralités.

### I.3/ Différent types des matériaux

#### I.3-1/ les matériaux métalliques

##### I.3-1.1/ Définition

Il existe deux grandes familles de métaux

1. les métaux ferreux correspondants aux déchets de fabrication et de transformation des métaux et des objets métalliques en fin de vie et mis au rebus
- b) les métaux non ferreux comprenant tous les métaux sauf le fer à l'état pur ou faiblement allié (inférieur à 10%). Ce sont principalement le cuivre, l'aluminium, le zinc, le plomb, l'étain, le chrome et le nickel [4].

##### I.3-1.2/ Propriétés caractéristiques des métaux

Parmi les 106 éléments du tableau périodique 76 sont des métaux. Les métaux se distinguent des autres éléments par plusieurs caractéristiques.

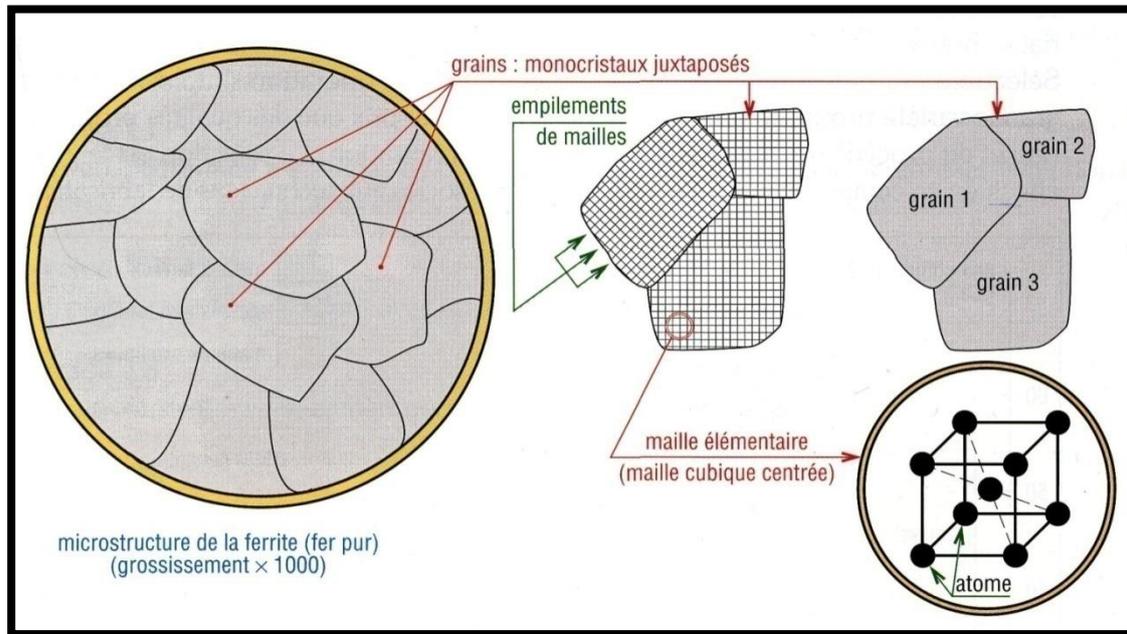
1. Conductibilité thermique et électrique élevée due aux électrons libres qui se déplacent dans le champ potentiel du réseau.
2. Coefficient de température de résistivité positif, cela signifie que la résistivité de métaux purs s'accroît avec l'élévation de la température ; à très basse température un grand nombre de métaux.
3. (30) passent à l'état supra-conducteur à l'approche du zéro absolu, la résistivité de ces métaux tombe par sauts jusqu'à une valeur très faible.
4. Emission thermo-électrique-a-d l'aptitude d'émettre des électrons sous l'effet de la température.
5. Bonne aptitude à la réflexion ; les métaux sont opaques et ont un éclat métallique particulier.
6. Capacité élevée à la déformation plastique, due à la périodicité de leur structure atomique, lorsque certains volumes du métal se déplacent par rapport à d'autres volumes, la liaison entre les atomes ne se rompt pas.
7. Tous les métaux et alliages métalliques ont la structure cristalline, l'arrangement de leurs atomes (ions) est régulier et périodique à la différence des corps amorphes dont les atomes sont disposés d'une manière chaotique.

Donc toutes ces propriétés caractérisant l'état métallique, qui est caractérisé par l'énergie élevée de la liaison entre les atomes. La mesure de cette liaison est donnée par l'intensité de la chaleur de sublimation, thermique qui traduit l'énergie totale nécessaire pour passer d'un système condensé, c.-à-d. d'un métal solide, à l'état de vapeur, lorsque les atomes isolés ne sont plus liés entre eux par l'énergie d'ionisation dans ce dernier cas les atomes étant électriquement neutres.

A l'état structural ordinaire, les métaux purs ont une résistance faible et, dans de nombreux cas, n'assurent pas les propriétés physico-chimiques et technologiques

## Chapitre I.....Généralités.

requis. C'est ce qui définit leur utilisation relativement rare et la grande extension des alliages élaborés par fusion ou frittage de deux ou plus de métaux avec des métalloïdes. Leurs propriétés caractéristiques sont celles de l'état métallique. Les éléments chimiques constitutifs des alliages s'appellent composants. Un alliage peut avoir deux composants et plus binaire, ternaire etc...



**Figure I.2.** Structure cristalline des métaux. [5]

### I.3-2/ Les polymères ou matériaux plastiques

#### I .3-2.1/ Définition

Les matières plastiques sont des matériaux organiques composés de macromolécules; elles sont produites selon un processus de fabrication entièrement ou partiellement synthétique et transformées en objets utilisables par le biais du façonnage plastique.

#### I .3-2.2/ Types des matières plastiques

On peut classer la centaine de matières plastiques de différentes manières, par exemple en fonction de leur origine ou de leur parenté chimique.

Sur la base de leur structure, on distingue trois types:

1. les élastomères,
1. les thermodurcissables,
1. les thermoplastiques.

### I .3.2.3/ les propriétés physiques de matériaux polymères

Les propriétés physiques des polymères dépendent fortement de leur configuration.il existe deux grandes classe de matériaux polymères:

#### I.3.2.3/1) les polymères thermoplastiques

Sont constitués de macromolécules de taille limitée, linéaire ou ramifiée. La structure de ce type de polymères est schématisée à la figure (figure I.3) pour le polyéthylène. Cette catégorie de matériaux est composée de macromolécules qui sont en règle générale solubles dans les solvants organiques qui sont capables de séparer les chaînes de polymères les unes des autres. À l'état solide, en dessous de 100-150°C environ, les polymères thermoplastiques existent sous la forme amorphe d'un verre organique ou sous une forme semi-cristalline. L'aptitude des polymères à cristalliser est en relation directe avec leur structure moléculaire. Pour qu'un polymère puisse se cristalliser, il faut que sa chaîne soit d'une très grande régularité de structure. Les polymères ne forment presque jamais de monocristaux. Ils sont en général caractérisés par une structure microcristalline dispersée dans une phase amorphe. L'importance de la fraction cristalline varie fortement d'un polymère à l'autre. Ainsi, le polyéthylène linéaire (figure I.3) atteint un taux de cristallinité est de l'ordre de 30 à 40 %. A haute température (de 150-350 °C maximum suivant le type de polymères), les polymères thermoplastiques passent à l'état fondu et ils sont mis en forme par coulage (extrusion, injection,....). Ce processus est réversible; il peut, en principe, être répété un grand nombre de fois sans modification de la structure moléculaire du polymère et sans altération de ses propriétés.



**Figure I.3.** Représentation schématique des structures de la chaîne de polyéthylène. [6]

### I.3.2.3/2) Les polymères thermodurcis

Sont une structure réticulé tridimensionnelle, sont composés de chaînes de polymères reliées entre elles par des liaisons pontales pour le polyéthylène. Lorsqu'ils sont réticulés, les polymères ne sont constitués que d'une seule macromolécule de taille infiniment grande à l'échelle atomique. Ce super macromolécule atteint des dimensions macroscopiques. Ainsi, après vulcanisation, les chaînes de polymères qui a les mêmes dimensions que le pneumatique. Pour ce type de polymères, la réticulation s'effectue en général à température élevée (environ 150-200°C) [7].

### I.3.3/ Les matériaux céramiques

#### I.3.3.1/ Définition

Les céramiques sont parmi les matériaux les plus anciens utilisés par l'homme, puisque les céramiques naturelles (roches) sont des constituants essentiels de la couche terrestre. Leur nom, qui provient du grec (keramo) signifie matière cuite. L'argile était la matière première (kaolin) utilisée pour fabriquer les premières céramiques synthétiques (poterie). Le kaolin est un silicate ayant comme formule globale  $(Si_2O_5) Al(OH)_4$  [8].

## Chapitre I.....Généralités.

Céramiques traditionnelles				
nuances		matières premières		exemples d'emploi
produits poreux	terre-cuite	marnes, argiles		tuiles, briques, horticulture, art
	faïence	argile, silice, quartz		vaisselle, carrelage (mur), art
	produits grésés	argile, kaolin, feldspath		carrelage (sol)
	réfractaires	argile réfractaire, silice, chamotte, alumine, magnésie, carbone-graphite...		ciment, béton, brique pour four, produits frittés
produits vitrifiés	grès cérame	argile, chamotte, silice		évier, lavabos, baignoires
	vitreux	argile, kaolin, feldspath, silice		
	porcelaine	kaolin, argile, feldspath, quartz		vaisselle, art, génie électrique
verres		silice SiO <sub>2</sub> alumine Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> oxydes chaux Na <sub>2</sub> O... magnésie MgO	sodico-calcique	vitres, flacons, ampoules
			crystal (oxyde de plomb)	vaisselle, art, optique
			borosilicate	résistant aux chocs thermiques
			aluminosilicate	résistance à la chaleur
			spéciaux	optique, laser, fibre optique

Tableau I.3 Les céramique

### I.3.3.2/ Classification et caractéristiques des céramiques

#### I.3.3.2/1) les silicates

Les silicates naturels ou synthétiques constituent une classe importante des matériaux céramiques. L'élément de base de leur structure est le tétraèdre SiO<sub>4</sub>. Dans les silicates les plus simples, les tétraèdres sont présents dans la structure sous forme d'ions (SiO<sub>4</sub>)<sup>-4</sup> associés à des cations métalliques qui forment avec l'oxygène des liaisons ioniques fortes. Deux exemples de ce type de silicate: la forsterite (Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>) et le zircon (ZrSiO<sub>4</sub>). Les tétraèdres SiO<sub>4</sub> peuvent mettre en commun un certain nombre d'atomes d'oxygène pour former des structures de petite dimension ou de taille très grande (polymères). On distingue ainsi les disilicates ou deux tétraèdres SiO<sub>4</sub> s'associent partageant un oxygène, et qui sont caractérisés par la présence de l'anion (Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>)<sup>-6</sup>. Chaque tétraèdre SiO<sub>4</sub> peut aussi partager deux oxygènes avec deux tétraèdres voisins pour former des structures en chaînes linéaires simples (pyroxène).



**Figure I.4.** Structures simples des silicates. [9]

### **I.3.3.2/2) Les verres minéraux et vitrocéramiques**

Les verres minéraux constituent une classe très importante des matériaux céramiques d'un point de vue technologique. Ils sont caractérisés par la présence d'une structure de type polymère tridimensionnelle. La structure vitreuse la plus simple est celle de la silice amorphe (figure I.5) qui peut s'obtenir par refroidissement de la silice fondue. Celle-ci s'obtient par fusion du quartz à 1610°C qui est une des formes de la silice cristallisée. Comme nous l'avons vu à la figure, la silice amorphe possède une structure tridimensionnelle constituée de tétraèdres  $\text{SiO}_4$  accolés par le sommet. La viscosité extrêmement élevée de la silice fondue résulte de sa structure tridimensionnelle.



**Figure I.5.**structure amorphe du verre de silice  $\text{SiO}_2$  .[10]

### **I.3.3.2/3) Les vitrocéramique**

Les vitrocéramiques constituent une classe relativement nouvelle de céramique obtenues par cristallisation (dévitrification) d'objets en verre déjà formés. En effet, certains verres minéraux cristallisent lorsqu'ils sont soumis à un cycle thermique bien précis qui favorise d'abord l'apparition de germes cristallins et ensuite leur croissance. Les vitrocéramiques ont une structure microcristalline dispersée dans une phase vitreuse. Ces matériaux caractérisés par un coefficient de dilatation extrêmement faibles sont connus pour leur résistance exceptionnelle au choc thermique (pyrocéram). Ils sont également utilisés dans une série d'applications techniques importantes: isolants électrique, composants de corps pompe, supports de miroirs de télescope, etc. Notons qu'en raison de la différence d'indice de réfraction entre phases vitreuses et cristallines les vitrocéramiques ne sont généralement pas transparentes.

### **I .3.3.2/4) Béton de ciment**

Le béton de ciment qui est le matériau de construction le plus utilisé actuellement est un mélange complexe de gravies, de sable (quartz), qui sont des céramiques naturelles, et de ciment hydraulique (liant) qui est mis en œuvre par coulage ou projection. Le ciment hydraulique liant représente de 20 à 40 % du volume du béton. Si on omet le gravier dans mélange, on obtient un mortier. Les ciments hydrauliques (liants) sont des matériaux céramiques qui ont la propriété de durcir sous eau et de résister à l'action de l'eau. Les premiers ciments hydrauliques ont été utilisés dès l'Antiquité par les Romains. Ceux-ci ont notamment découvert que certaines roches éruptives (pouzzolanes) réagissent avec l'hydroxyde de calcium ( $\text{Ca(OH)}_2$ ) en formant un produit pratiquement insoluble dans l'eau qui constitue un ciment hydraulique. La

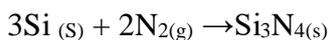
## Chapitre I.....Généralités.

découverte des ciments hydraulique (Portland) utilisés actuellement en construction civile est assez récente puisqu'elle remonte à 150 ans environ.

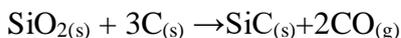
### I.3.3.2/5) Céramiques techniques a haute résistance mécanique et thermique

Pour optimiser les cycles de transformation d'énergie thermique en énergie mécanique ou électrique, on travaille à des températures de plus en plus élevées. Jusqu'à présent, en raison de leur caractère ductile et de leur aptitude à subir des chocs thermiques importants, les alliages métalliques ont été quasi exclusivement utilisés pour résoudre les problèmes technologiques qui imposent des contraintes mécaniques importantes. A cause de leur manque de ténacité, les céramiques sont restées confinées dans un rôle d'isolant thermique sous forme de couche rapportées ou de pièces statiques. La limite thermique d'utilisation des alliages métalliques (environ 1000 à 1100 °C) pour les applications à température élevée et dans une atmosphère oxydante est atteinte dans l'équipement actuels, et on se tourne de plus en plus vers les céramiques en raison de leur caractère réfractaire.

Les céramiques envisagées pour ces applications techniques à température élevée (1300- 1800 °C) ne sont plus uniquement des céramiques basées sur des combinaisons d'oxyde qui sont en général trop sensibles au choc thermique ou mécanique. Au cours de ces vingt dernières années, a été développée une série de céramiques techniques, tels que l'oxyde de zirconium, carbure et nitrure de silicium. Ces derniers composés ( $\text{SiC}$ ,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ), qui ne sont plus basés sur les oxydes, s'obtiennent par des réactions chimiques élémentaires mais qui ne se déroulent qu'à très haute température. Le nitrure de silicium s'obtient par un procédé de synthèse directe entre la poudre de silicium avec l'azote gazeux 1200°C:



Le carbure de silicium est synthétisé par rééducation du sable ( $\text{SiO}_2$ ) par le coke (carbone) au four électrique à une température de 2700°C:



Ces céramiques sont mises en forme en général par un frittage chimique à haute température au départ d'un mélange préformé de poudres.

Les céramiques possèdent une résistance à la température très élevée (1300-1500°C) et une très grande dureté (le carbure de silicium est le solide le plus dur après le diamant). Le carbure de silicium est caractérisé par une conductivité thermique comparable à celle de certains alliages métalliques. Ce cas est assez exceptionnel car la plupart des céramiques sont des matériaux isolants. Par contre, le nitrure de silicium avec une conductivité thermique environ quinze fois plus faibles que le carbure de silicium est un isolant. Ces deux matériaux sont caractérisés par une faible

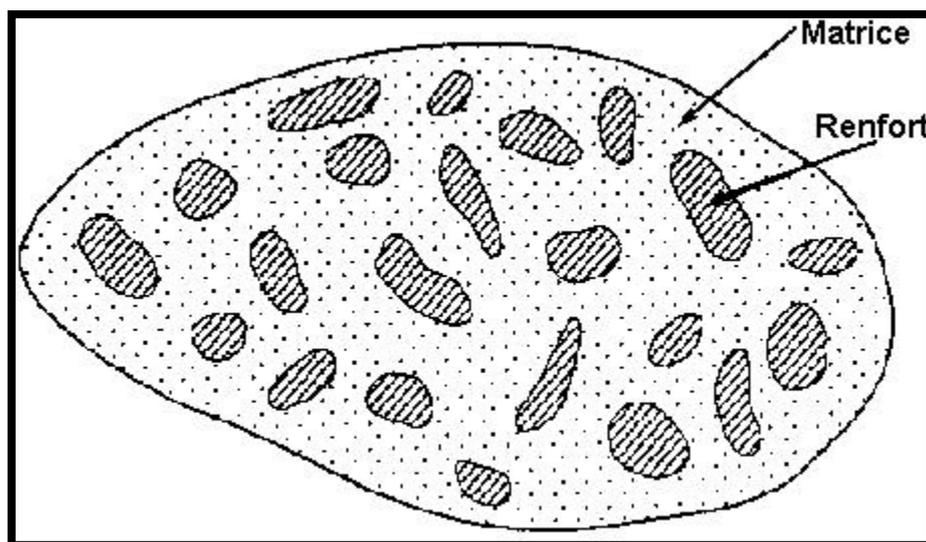
## Chapitre I.....Généralités.

densité (2,5 à 3,6). Cependant, ces céramiques restent encore limitées en raison de leur fragilité qui est en grande partie le résultat de la nature de leurs liens chimiques à forte prédominance covalente qui empêche, à basse température, tout mouvement des dislocations [11].

### I.3.4/ Les matériaux composites

#### I.3.4.1/ Définition

Un matériau composite est constitué de l'assemblage de deux ou plusieurs matériaux de natures différentes. Leur association est complémentaire et permet d'aboutir à un matériau dont les performances recherchées seront supérieures à celles des composants pris séparément. Un matériau composite est constitué dans le cas le plus général d'une ou plusieurs phases discontinues réparties dans une phase continue. La phase discontinue, appelée renfort ou matériau renforçant, est habituellement plus dure avec des propriétés mécaniques supérieures à celles de la phase continue, appelée matrice [12].



**Figure I.6.**Schéma illustratif d'un matériau composite [13].

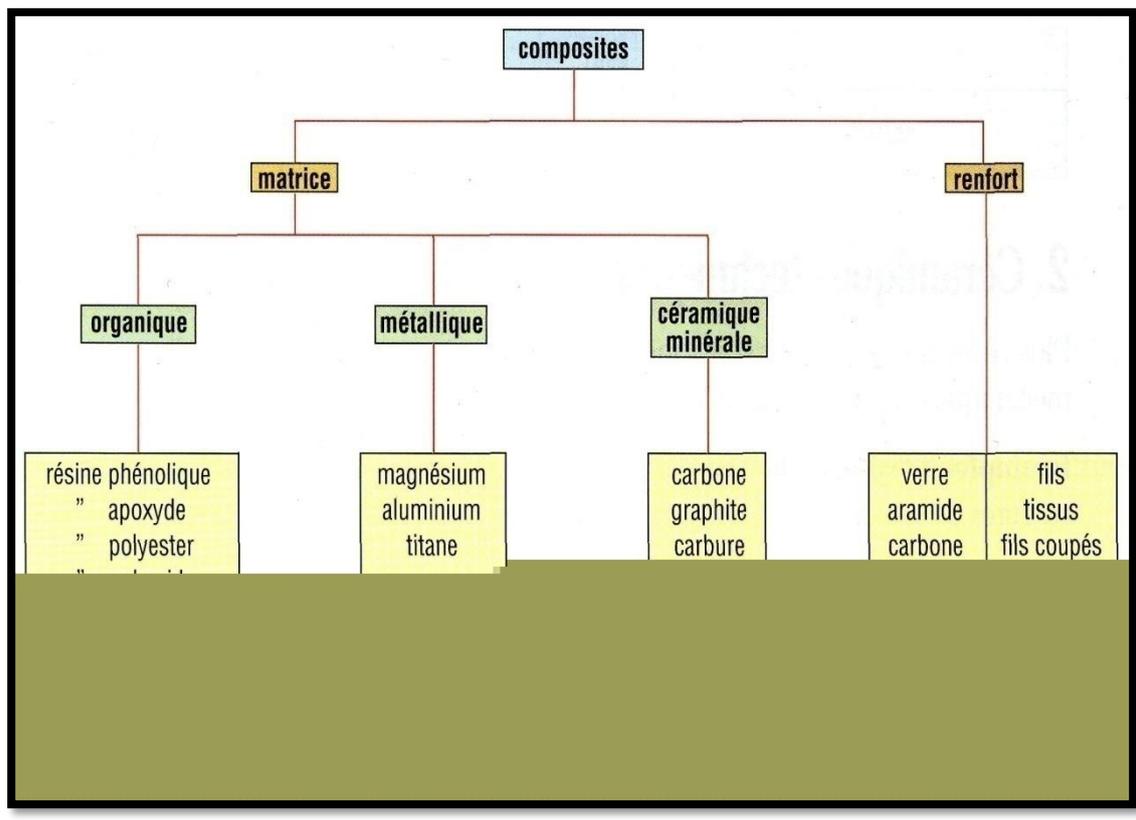


Figure I.7: Principaux constituants des matériaux composites.

### I .3.4/2) Caractéristiques des matériaux composites

Les propriétés des matériaux composites dépendent de beaucoup de facteurs et sont différentes selon les divers types de matériaux composites.

Ces propriétés résultent :

1. des propriétés, de la nature et de la quantité des matériaux constitutifs.
2. des constituants, de la géométrie et de la distribution du renfort
3. de leurs interactions, de la nature de l'interface matrice-renfort, etc.

Les principales caractéristiques des pièces fabriquées en matériaux composites sont :

1. le gain de masse,
2. la bonne tenue en fatigue (durée de vie augmentée),
3. l'absence de corrosion,

## Chapitre I.....Généralités.

4. l'absence de plasticité (leur limite élastique correspond à la limite de rupture)
5. le vieillissement sous l'action de l'humidité et de la chaleur,
6. l'insensibilité à certains produits chimiques courants (solvants, peinture, huiles, pétroles,...),
7. tenue aux impacts et aux chocs très moyenne,

Très forte anisotropie [14].

### I.4/ Les formes traditionnelles du carbone

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

#### I.4.1/ Le graphite

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

La forme cristalline stable est le graphite hexagonal [15]. Les plans de graphène sont empilés, comme sur la figure 2.1. La distance inter-feuillets est de 0,335 nm.

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

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



**Figure I.8:** Structure du graphite hexagonal.

### I.4.2/ 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 [16], 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.



Figure I.9. Structure du diamant.

### I.4.3/ Les carbones (mal organisés)

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

De l'atmosphère des étoiles froides, appelées poussières d'étoiles. Et encore, le carbone amorphe n'est présent que dans les poussières d'étoiles carbonées, qui sont des étoiles particulières à la composition chimique anormale, où le carbone est en quantité supérieure à l'oxygène. Plus proche de nous, le carbone amorphe est synthétisé sous forme de couches minces, obtenues généralement par dépôt plasma. Il sert de revêtement, apportant une tenue mécanique supplémentaire à des pièces industrielles.

De plus, son caractère hydrophobe lui permet d'être utilisé en tant que couche de protection.

Le graphite peut également se rencontrer sous une forme partiellement organisée. Le désordre structural est créé par des défauts d'empilement des plans de graphène, ce qui éloigne la structure de ce graphite des formes ordonnées vues précédemment, en perdant l'ordre orientationnel et en augmentant la distance inter-feuillets. Pour le

## Chapitre I.....Généralités.

différencier des graphites hexagonal et rhomboédrique, on parle de graphite turbostratique.

Le noir de carbone, utilisé notamment dans l'encre de chine, est une autre forme de carbone mal organisé. Il est constitué de nanoparticules sphériques carbonées. Ces particules sont constituées de cristallites, de deux à trois plans réticulaires d'épaisseur, d'une structure similaire à celle du graphite. Les cristallites sont liées entre eux par des atomes de carbone non engagés dans les plans cristallins, et formant une phase amorphe. Notons que le carbone amorphe est souvent majoritaire.

### I.5/ Les nouvelles formes du carbone

#### I.5.1/ Fullerènes et dérivés

L'élément principal du graphite, et également point de départ pour la construction de nouvelles nanostructures carbonées, est le plan de graphène, que l'on peut se représenter comme une feuille plane pavée d'hexagones. Il est possible de briser virtuellement la planéité de la feuille de graphène en insérant des défauts dans la structure, de type pentagone ou heptagone [17]. L'ajout d'un pentagone dans un plan d'hexagones crée une courbure positive. L'ajout d'un heptagone créera, dans le même plan, une courbure négative. La courbure créée par chaque type de défaut s'annule, et une feuille de graphène dans laquelle on aurait inséré un pentagone et un heptagone resterait globalement plane.

En 1985, Curl, Kroto et Smalley ont réussi à isoler une forme majoritaire constituée de 60 atomes de carbone. Cette molécule, refermée sur elle-même comme une cage, a la forme d'un icosaèdre tronqué dont tous les sommets sont occupés par des atomes de carbone. Sa structure est alors constituée de 12 pentagones et de 20 hexagones (figure I.3).

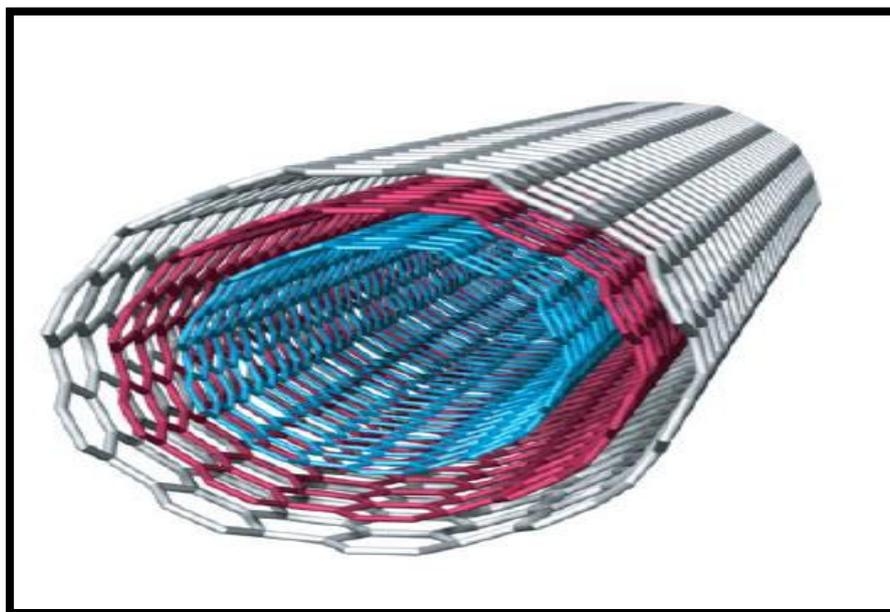
Cette nouvelle molécule de 60 atomes de carbone, ou C<sub>60</sub>, a été appelée buckminsterfullerène, par analogie avec les dômes géodésiques de l'architecte R. Buckminster Fuller. Depuis, le nom a évolué, et nous nous référons maintenant à cette molécule en tant que fullerène, ou plus simplement C<sub>60</sub>. Le fullerène C<sub>60</sub> est le représentant le plus connu de la famille des fullerènes, molécules <<cages>> de plus de 60 atomes de carbone [18]. Les fullerènes doivent obéir à de fortes conditions de stabilité chimique ; toutes les structures géométriquement possibles n'existent donc pas. Les fullerènes les plus connus sont les C<sub>60</sub> et C<sub>70</sub>, mais il existe également les C<sub>76</sub>, C<sub>78</sub>, C<sub>82</sub>, C<sub>84</sub>... Depuis leur synthèse initiale par ablation laser, les moyens de production de fullerènes ont progressé. En 1990, Krätschmer réussit la première synthèse à grande échelle de fullerènes par la sublimation d'une électrode en graphite par arc électrique [19]. Aujourd'hui, des méthodes de synthèse du C<sub>60</sub> par voie organique existent, ouvrant la voie à une production de masse des fullerènes [20].



**Figure I.10:** Fullerène C60.

### **I.5.2/ Nanotubes multifeuillets (ou multiparois)**

La découverte des fullerènes en 1985 créa un véritable engouement pour la recherche et la caractérisation de nouvelles nanostructures carbonées. Les techniques de caractérisation, et notamment la microscopie électronique, permirent à Sumio Iijima de mettre en évidence en 1991[21], dans le produit d'évaporation du graphite par arc électrique, des nanostructures graphitiques unidimensionnelles, baptisées nanotubes multifeuillets (Multi Wall Nano Tubes, MWNT).



**Figure I.11.**Structure schématique d'un MWNT, où l'on voit bien l'arrangement concentrique des feuilles de graphène.

## Chapitre I.....Généralités.

Ces nanotubes multifeuillets sont constitués d'un arrangement concentrique de feuilles de graphène, repliées sur elles-mêmes de manière à former des cylindres (figure I.4). Cette structure est communément appelée poupée russe, par analogie avec le jeu de poupées qui s'emboîtent les unes dans les autres. Le diamètre du plus petit tube interne détermine la taille du canal central du nanotube. Le diamètre interne d'un nanotube multifeuillet est de l'ordre de deux nanomètres, tandis que le diamètre externe est de l'ordre d'une vingtaine de nanomètres. Cependant, les diamètres des nanotubes multifeuillets peuvent aller jusqu'à la centaine de nanomètres de diamètre.

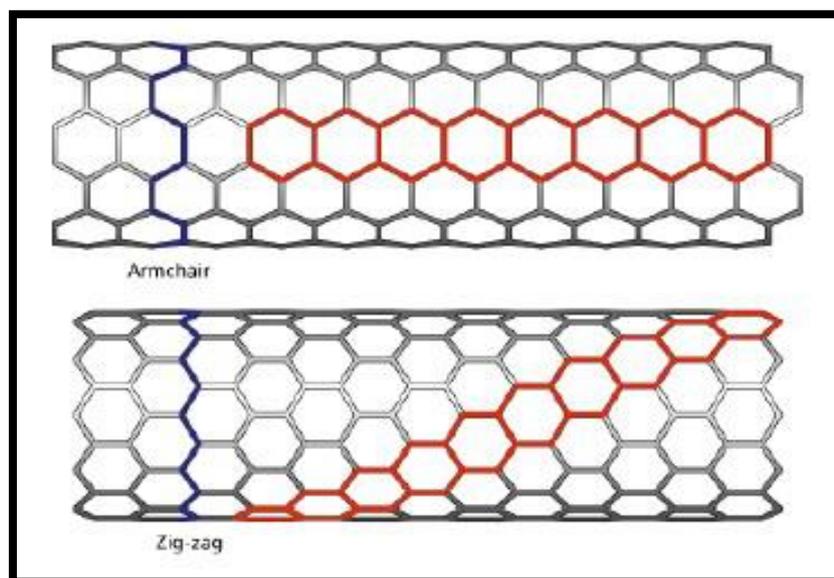
La façon dont les différentes couches graphitiques des nanotubes multifeuillets s'empilent est a priori aléatoire. Il n'a pas été mis en évidence un empilement selon des règles préférentielles entre les différents feuillets. La distance moyenne inter-feuillets est de 0,344 nm, ce qui rapproche sa structure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

La structure des nanotubes multifeuillets de type poupée russe décrite précédemment est communément admise, mais ce n'est pas la seule structure possible. Ainsi, certaines études expérimentales [22] laissent envisager que les nanotubes multifeuillets pourraient avoir une structure de type rouleau de parchemin. D'autres études [23] suggèrent, surtout dans le cas des gros nanotubes, que les deux types de structure coexistent au sein des tubes multifeuillets, les tubes de petit diamètre, au centre, présentant une structure de type poupée russe, tandis que les tubes extérieurs possèdent une structure plus défectueuse de type rouleau de parchemin. Enfin, une étude postérieure [24] montre que la structure de type poupée russe est la plus fréquemment rencontrée, les nanotubes ne croissant selon le type rouleau de parchemin que dans des conditions Particulières.

### **I.5.3/ Nanotubes monofeuillets (ou monoparois)**

Les nanotubes de carbones monofeuillets (Single Wall Nano Tubes, SWNT) ont été découverts en parallèle par Béthune [25] et Iijima [26] en 1993.

Un nanotube monofeuillet est une feuille de graphène enroulée sur elle-même, de manière à former un cylindre unique. Le nano-objet obtenu est alors unidimensionnel. Les atomes de carbone restent dans un état d'hybridation  $sp^2$ . Le nanotube idéal ainsi formé présente deux extrémités, qui peuvent être fermées par deux dômes, comme des demi-fullerènes, mais pouvant comporter des défauts dans le cas d'un nanotube réel.



**Figure I.12.** Exemples d'hélices dessinées à la surface des nanotubes.



**Figure I.13.** Nanotubes de carbone monofeuillet.

À gauche : nanotube chiral (6,4)

Au centre : nanotube non chiral, de type zigzag (10,0)

À droite : nanotube non chiral, de type chaise (10,10).

Les tubes sont représentés à l'échelle et ont pour diamètres respectifs 0.68 nm, 0.78 nm et 1.36 nm. Cette figure est adaptée de la référence [27].

### I.6/ Propriétés des nanotubes de carbone

#### I.6.1/Propriétés mécaniques

Il s'agit vraisemblablement du domaine présentant les propriétés les plus impressionnantes des nanotubes de carbone. Des calculs théoriques mais également des mesures expérimentales ont démontré que les nanotubes de carbone étaient des matériaux extrêmement rigides et résistants. Bien que de densité faible (autour de 2 g/cm<sup>3</sup>), ceux-ci présentent un module d'Young ainsi qu'une résistance à la traction très élevés.

Leur module d'Young, déterminé théoriquement par Lu *et al* [28], est voisin de 1TPa pour les SWNT comme pour les MWNT. Les premières mesures expérimentales réalisées à la fin des années 90 sont en accord avec la théorie en rapportant des valeurs de module allant de 0,4 à 3,7 TPa (moyenne de 1,8 TPa, supérieure au module du diamant de 1,2 TPa). Les mesures sont réalisées par microscopie à force atomique (AFM) [29], ainsi qu'en utilisant la fréquence de vibration thermique des nanotubes de carbone dans un microscope électronique à transmission (Treacy *et al* [30]).Salvetat *et al* [31] ont démontré que ce module est indépendants du diamètre des nanotubes pour les MWNT mais que les défauts dans un nanotube affectaient et dégradait de manière considérable sa valeur. Malgré cette grande rigidité, les nanotubes peuvent, sous une certaine contrainte, se déformer de manière réversible en flexion en formant un angle pouvant atteindre jusqu'à 110° pour un SWNT [32, 33]. Les nanotubes présentent donc une grande aptitude à la déformation qui interviendra non seulement dans les propriétés des nanocomposites à l'état solide mais également pour expliquer le comportement de suspensions de NTC dans des pré-polymères (thermodurcissables) et des polymères fondus (thermoplastiques).

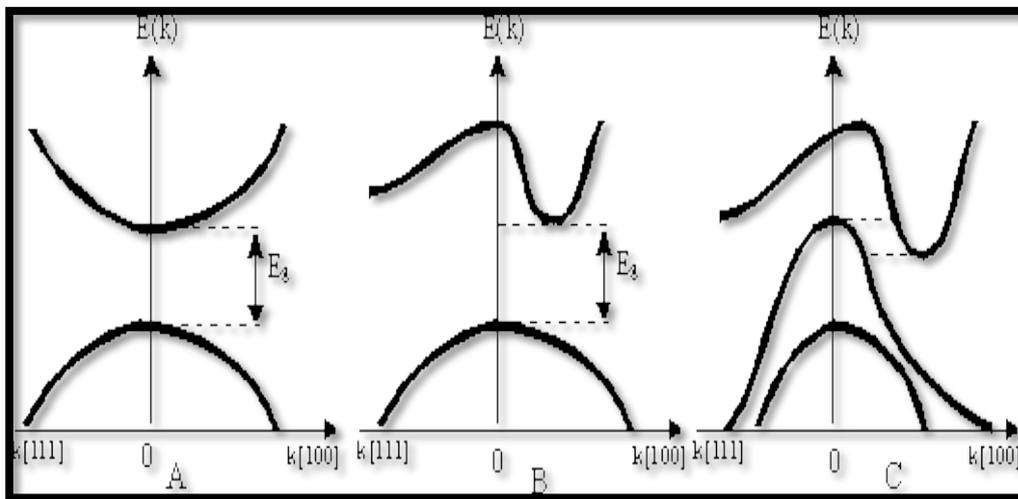
Au-delà de leur raideur significative, les nanotubes de carbone présentent également une grande résistance à la traction. Yu *et al* [34] ont calculé cette résistance en sollicitant un MWNT entre deux pointes d'un AFM. Il est alors apparu que seul le feuillet extérieur intervient et supporte la sollicitation contrainte de rupture en traction comprise entre 11 et 63 GPa). Les travaux de Lourie *et al* [35] rapportent une contrainte de rupture en compression de MWNT comprise entre 110 et 150 GPa (en compression, tous les feuillets supportent la contrainte appliquée). Toujours grâce à un dispositif AFM, Walters *et al* [36] ont calculé une contrainte de rupture en traction moyenne de 45 (+/- 7) GPa. Wagner *et al*

[37] ont utilisé une méthode de calcul indirecte considérant un nanocomposite (NTC dans une matrice polymère) et ont ainsi mesuré une contrainte de rupture en traction moyenne de 55 GPa pour des SWNT.

Les méthodes de calculs théoriques (notamment par modélisation numérique) ont également permis de rapporter des valeurs de contraintes à rupture en traction. Ainsi Yakobson [38] *et al* et Belytshko *et al* [39] mentionnent des contraintes à rupture des NTC de 150 GPa et comprises entre 93 et 112 GPa respectivement. Il est nécessaire de préciser que, dans ce type d'approches de modélisation, les structures des nanotubes sont considérées comme parfaites.

### I.6.2/ Propriétés électroniques

La structure électronique d'un nanotube de carbone est une conséquence directe de la structure hexagonale d'un monofeuillet de graphite dont la surface de Fermi se trouve être réduite à 6 points, sommets de la zone de Brillouin. En effet, dans un métal on appelle énergie de Fermi l'énergie maximum des états électroniques occupés. Ces états participent à la conduction si, de surcroît, ils sont délocalisés à travers l'échantillon. Un plan de graphite ne contient que six états de conduction à l'énergie de Fermi. Leurs vecteurs d'onde ( $k_x, k_y$ ) pointent les sommets de l'hexagone rouge sur la figure ci-dessous (Figure I.7).



**Figure I.14.** Energie de valence et de conduction en fonction du vecteur d'onde  $k$  [40].

Le repliement du plan de graphite pour former un nanotube impose une périodicité qui quantifie le vecteur d'onde dans la direction perpendiculaire à l'axe du tube :  $k_x = n/d$ , où  $d$  est le diamètre du tube et  $n$  est un entier. Un nanotube ne sera conducteur que si un au moins des six états conducteurs du graphite obéit à cette contrainte supplémentaire. Cela ne se produit que pour certains diamètres de tubes et certains angles de repliement. Par exemple, les tubes « en chaise longue » (repliés de telle sorte que la succession des atomes autour de la circonférence du tube dessinent des chaises longues) possèdent toujours un état conducteur, qui est doublement dégénéré. Ils comportent donc deux modes de conduction. Des nanotubes avec d'autres angles de repliement seront semi-conducteurs, avec une bande interdite inversement proportionnelle au diamètre du tube et égale à quelques milli électronvolts. Compte tenu de tous les angles possibles de repliement, un tiers des nanotubes est conducteur et deux tiers sont semi-conducteurs.

## Chapitre I.....Généralités.

Suivant la valeur des deux paramètres caractérisant un nanotube de carbone, à savoir l'hélicité et le diamètre du tube, le nanotube monofeuillet est soit semi-conducteur avec une bande d'énergie interdite de quelques milli électronvolts, soit métallique avec seulement deux états électroniques au niveau de Fermi. Ces deux « modes de conduction », orbitales électroniques délocalisées pouvant participer à la conduction électrique le long du tube, en font un système modèle pour l'étude du transport électronique à une dimension.

### I.6.3 /Propriétés thermiques

Le diamant présente la conductivité thermique la plus élevée de tous les matériaux connus à ce jour (environ  $103 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  à 300 K). Le plan de graphène possède une conductivité comparable. La structure particulière des nanotubes permet de penser que leur conductivité doit également être importante le long de l'axe du nanotube.

La mesure des propriétés thermiques d'un nano-objet comme le nanotube est délicate. Cependant, quelques études expérimentales ont permis de mesurer la conductivité thermique des nanotubes multifeuillets.

Leur conductivité est grande (de 600 à  $2000 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ), mais significativement plus faible que celle du graphite. Ces résultats sont a priori décevants, mais ils peuvent s'expliquer en considérant le fait que tous les feuillets ont participé à la conduction thermique alors que seul le feuillet externe a été utilisé pour les mesures. Ces considérations permettent d'estimer la magnitude de la conduction d'un tube monofeuillet au même ordre de grandeur que celle du graphite.

### I.6.4/ Propriétés optiques

Les nanotubes de carbone présentent des propriétés de limitation optique dans une très large gamme de longueurs d'onde (du visible au proche infrarouge). Des densités optiques égales voire supérieures à celles d'autres bons limiteurs optiques (C60 ou noir de carbone) ont été obtenues avec des SWNT en suspension dans des solutions aqueuses [41]. Ce type de dispersion s'avère donc être un excellent système de limitation optique à bande large. Il faut noter que ce phénomène peut aussi s'observer dans un film polymère [42].

### I.6.5/ Propriétés émissives

Les nanotubes de carbone sont capables d'émettre des électrons par effet tunnel via leur pointe lorsqu'ils sont placés parallèlement aux lignes d'un champ électrique. Avec des tensions relativement faibles, il est possible de générer à leurs extrémités des champs électriques importants, capables d'arracher les électrons de la matière et de les émettre vers l'extérieur [43]. Cette émission est extrêmement localisée (à l'extrémité du tube) et peut servir à envoyer des électrons sur un endroit bien précis.

## I.7/ Applications des nanotubes de carbone

## Chapitre I.....Généralités.

Les applications des nanotubes de carbone sont nombreuses car leurs propriétés exceptionnelles énoncées précédemment ouvrent de nombreuses perspectives.

Les propriétés électriques des nanotubes de carbone semblent en faire un matériau de choix pour l'électronique, la miniaturisation dans ce domaine étant très importante. Les nanotubes conducteurs et pouvant supporter des courants qui font fondre un fil de cuivre de mêmes dimensions, peuvent être considérés un modèle de ce que seront les fils conducteurs utilisés en connectique dans les années à venir.

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

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

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

Ils peuvent stocker une quantité importante d'hydrogène et intéressent donc l'industrie des batteries [44].

Les propriétés mécaniques des nanotubes de carbone sont également utilisées pour réaliser des NEMS (Nano Electro Mechanical Systems).

Citons par exemple les RAM (Random Access Memory) [45], les vérins de rotation [46], les nano leviers avec feedback [47], les actionneurs photomécaniques [48], les électrodes transparents résistantes, les LED flexibles et autres [49].

En outre, les nanotubes sont d'excellents matériaux pour le renforcement de matrices polymères par exemple. Ils seraient également susceptibles d'être employés comme muscles artificiels.

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

### Références bibliographies

- [1]:<http://theses.insa-lyon.fr/publication/2013ISAL0020/these.pdf> © [M. Pras], [2013], INSA de Lyon.
- [2]:[feuilleter.pdf](#).page 2.
- [3] : web (Matériaux : Généralité)
- [4] : ELABORATION DES METAUXFERREUX (FONTES ET ACIERS) L'auteur Dr.S.Bensaada page 11.
- [5]:FEDEREC : fédération de la récupération, du recyclage et de la valorisation.
- [6] : livre :introduction à la science des materiaux\_troisième édition entièrement revue et augmenté page 94 .
- [7] : livre : introduction à la science des matériaux troisieme edition entierment revue et augmenté page 113.
- [8]:L.H VAN VLACK ,physical ceramics for Engineers , ADDISON –Wesley , Reading, MASS 1994
- [9] : Web
- [10] : Web
- [11] : livre : introduction à la science des materiaux\_troisieme édition entierment revue et augmenté page 129.
- [12]:Chapitre 01 : generalites sur les materiaux composites pdf. Page 3
- [13]:Schéma illustratif d'un matériau composite [Web].
- [14]: document d'internet.
- [15]: Park B., Shim J.W., Choi H.J., Park Y.W. Synthetic Metals, 56 :3258 (1993).
- [16]: Yin M.T. et Cohen M.L. Physical Review Letter, 50 :2006 (1983).
- [17]: Daedulus.New Scientist (1966).
- [18]: Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C., Curl R.F. et Smalley R.E. Nature, 318 :162 (1985).
- [19]:Krätshmer W., Lamb L.D., Fostiropoulos K. et Human D.R. Nature, 347 :354 (1990).
- [20]:Scott L.T., Boorum M.M., McMahon B.J., Hagen S., Mack J., Blank J., Wegner H. et deMeijere A. Science, 295 :1500 (2002).
- [21]:\_Iijima S. Nature, 354 :56 (1991).
- [22]: Zhou O., Fleming R.M., Murphy D.W., Chen C.H., Haddon R.C., Ramirez A.P. et GlarumS.H. Science, 263 :1744 (1994).
- [23]:Amelinckx S., Bernaerts D., Zhang X.B., Van Tendeloo G. et Van Landuyt J. Science,267 :1334 (1995).
- [24]:Ruland W., Schaper A.K., Hou H. et Greiner A. Carbon, 41 :423 (2003).
- [25]:Bethune D.S., Kiang C.H., de Vries M.S., Gorman G., Vasquez J. et Beyers R. Nature,363 :605 (1993).
- [26]:Iijima S. et Ichihashi T. Nature, 363 :603 (1993).
- [27]:Izard Nicolas, Nanotubes de carbone : systèmes pour la limitation optique, Thèse de Doctorat, Université Montpellier II (2004).
- [28]: [14].ENDO M., et al., *Stacking nature of graphene layers in carbon nanotubes and nanofibres*,Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1997, **58**, (11), 1707-1712.

## Chapitre I.....Généralités.

- [29]: LU J. P., *Elastic Properties of Carbon Nanotubes and Nanoropes*, Physical Review Letters, 1997, **79**, (7), 1297-1300.
- [30]: WONG E. W., et al., *Nano beam mechanics : Elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes*, Science, 1997, **277**, (5334).
- [31]: TREACY M. M. J., et al., *Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes*, Nature, 1996, **381**, (6584).
- [32]: SALVETAT J. P., et al., *Elastic Modulus of Ordered and Disordered Multiwalled Carbon Nanotubes*, Advanced Materials, 1999, **11**, (2), 161-165.
- [33]: IJIMA S., et al., *Structural flexibility of carbon nanotubes*, The Journal of Chemical Physics, 1996, **104**, (5), 2089-2092.
- [34]: DESPRES J. F., et al., *Flexibility of graphene layers in carbon nanotubes*, Carbon, 1995, **33**, (1).
- [35]: YU M.-F., et al., *Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load*, Science, 2000, **287**, (5453).
- [36]: LOURIE O., et al., *Buckling and Collapse of Embedded Carbon Nanotubes*, Physical Review Letters, 1998, **81**, (8), 1638-1641.
- [37]: WALTERS D. A., et al., *ELASTIC STRAIN OF FREELY SUSPENDED SINGLE-WALL CARBON NANOTUBE ROPES*, Applied Physics Letters, 1999, **74**, (25), 3.
- [38]: WAGNER H. D., et al., *Stress-induced fragmentation of multiwall carbon nanotubes in a polymer matrix*, Applied Physics Letters, 1998, **72**, (2), 188-190.
- [39]: YAKOBSON B., et al., *Mechanical Properties of Carbon Nanotubes*, Topics Applied Physics, 2001, **80**, 287-327.
- [40]: BELYTCHKO T., et al., *Atomistic simulations of nanotube fracture*, Physical Review B, 2002, **65**.
- [41]: A. Appenzeller, E. Joselevich, W. Honlein, .Carbon Nanotubes for Data Processing., in R. Wasered, .Nanoelectronics and Information Technology., Wiley-VCH (2003).
- [42]: VIVIEN L., et al., *Single-wall carbon nanotubes for optical limiting*, Chemical Physics Letters, 1999, **307**, (5.6), 317-319.
- [43]: SUN X., et al., *Broadband optical limiting with multiwalled carbon nanotubes*, Applied Physics Letters, 1998, **73**, (25), 3632-3634.
- [44]: Houdyp, Dupasc, Lahmani, « Les nanosciences - nanotechnologies et nanophysique » La collection Echelle, Editions Belin 2006.
- [45]: Decossas Sébastien, Nanotribologie par Microscopie de Force Atomique (AFM) sur des nanotubes de carbone, Thèse de Doctorat (2001), Université Grenoble I - Joseph Fourier.
- [46]: Wong Kang et al., Physica E **27** 332-340 (2005).
- [47]: Fennimore et al., Nature **424** 408-410 (2003).
- [48]: Changhong Ke et al., Applied Physics Letters **85**, 4 681-683 (2004).
- [49]: Lu et al., Nanotechnology **18** 065501 (2007).

## Chapitre II : Développements analytiques et formulation

### II.1 Introduction

Ce Chapitre, basé sur la théorie d'élasticité thermique nonlocal. Le modèle de D'Euler-Bernoulli est développé pour l'étude de la propagation des ondes dans les nanotubes de carbone (DWNTs). Les effets du milieu élastique et les forces élastiques de Van der Waals entre les tubes internes et externes sont pris en compte. Des expressions explicites sont dérivées pour des fréquences normales et des rapports d'amplitude, pour le cas de DWNTs simplement soutenu, et les influences du changement de température et de l'effet de la petite échelle sont aussi étudiés.

L'équation du mouvement de vibration transverse est donnée par le modèle d'Euler-Bernoulli.

### II.2 Les conditions de calcul

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

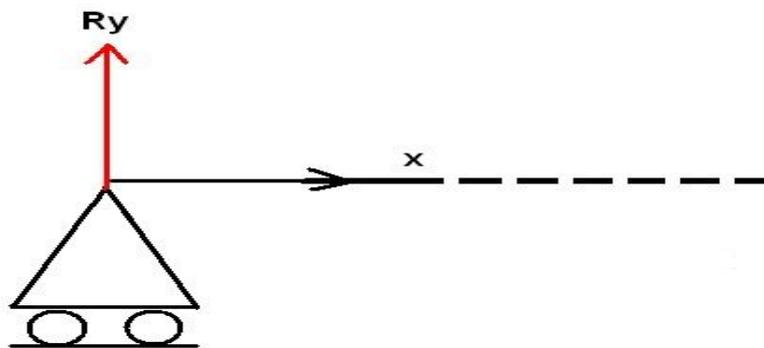


Figure II.1 -Vibration transversale d'un nanotube de carbone.

#### II.2.1 Modèle Euler- Bernoulli

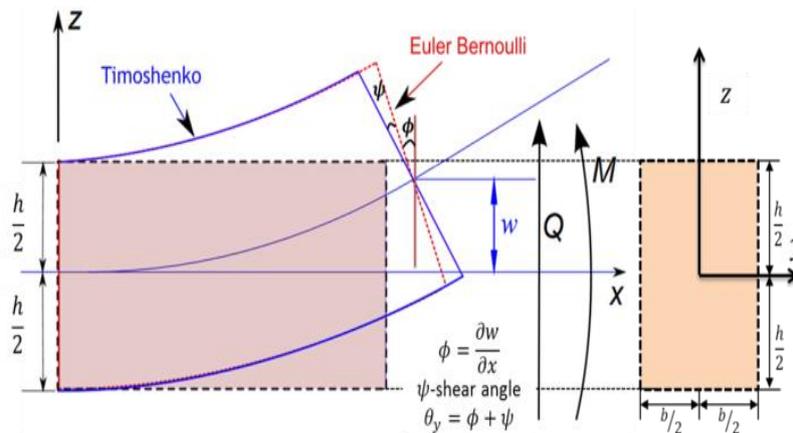
La vibration se produit dans un des principaux plans de la flexion du nanotube de carbone et dont les dimensions en coupe sont petites en comparaison de la longueur de la barre, l'équation bien connue de la courbe de déflexion est:

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

$$E.I. \frac{d^2 y}{dx^2} = -M \quad (\text{II.1})$$

$E.I$  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 des forces de cisaillement est illustrée dans la figure(II.2).



**Figure II.2** -Notation et géométrie d'un élément du modèle Euler-Bernoulli

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

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

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

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.

Il est seulement nécessaire d'appliquer le principe d'Alembert et d'imaginer que le nanotube vibrant est chargé par des forces d'inertie, dont l'intensité change sur la longueur du nanotube et est indiquée par :

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

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

Là où  $\rho$  est la masse volumique du nanotube, et  $A$  est la section du nanotube.

Substituant (II.3) à  $p(x)$  dans équation. (II.2) l'équation générale pour la vibration latérale du NTC devient:

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

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

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

Où

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

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

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 un nanotube pendant qu'il 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 d'Euler-Bernoulli appelée aussi la théorie mince de poutre.

Dans le paragraphe précédent les dimensions en coupe du nanotube 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 dimensions en coupe sur la fréquence. Ces corrections peuvent être d'importance considérable en étudiant les modes de la vibration des fréquences plus élevées quand un modèle vibrant est subdivisée par les coupes nodales en parties comparativement courtes.

**II.2.2.2 Inertie rotationnelle**

Il est facile de voir que pendant la vibration les éléments du nanotube (voir la figure. II.2) 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 correspondante 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:

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

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

Ce moment devrait être pris en considération en considérant la variation du moment de flexion le long de l'axe du nanotube. Puis, au lieu du premier des équations (II.2), nous aurons:

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

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

$$E.I \frac{d^4 y}{dx^4} = - \frac{d^2 M}{dx^2}$$

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

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

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 Modèle non locale de poutre double élastique avec l'effet thermique**

Les équations du mouvement pour la vibration transversale du modèle d'Euler sont :

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

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

Où  $p(x)$  est la force transversale distribuée le long de l'axe  $x$ ,  $w$  est le débattement transversal,  $\rho$  est la densité massique,  $A$  est la section de coupe du nanotube, et  $Q$  est la force résultante de cisaillement sur la coupe, qui satisfait la condition d'équilibre de moment :

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

$N_t$  dénote une force axiale additionnelle qui dépend de la température  $T$  et de coefficient de dilatation thermique de nanotube  $\alpha$ . Cette force peut être exprimée comme suivant :

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

Le moment de flexion résultant  $M$  dans Equation (II.9) est défini ci après :

$$M = \int_A y \sigma dA \quad (\text{II.11})$$

Où  $\sigma$  est la contrainte axiale nonlocale des milieux continus]. Une relation constitutive nonlocale unidimensionnelle pour la poutre peut être écrite en tant que [1, 2, 3, et 4] :

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

Pour le cas où l'effet thermique est pris en considération, Equation. (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 matériau qu'on appelle constante d'échelle. Avec l'hypothèse d'Euler-Bernoulli pour la petite flexion, la contrainte axiale est donnée par [5] :

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

Où  $y$  est la coordonnée transversale mesurée positivement dans la direction de la flexion.

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

Selon Equations. (II.13) et (II.14), la relation (II.11) peut être exprimée ainsi :

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

$I = \int_A y^2 dA$  Est le moment de l'inertie.

Par substitution des équations (II.8), (II.9) et (II.10) dans (II.11), le moment de flexion nonlocal  $M$  et la force de cisaillement  $Q$  peuvent être obtenus comme suivant :

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

Et

$$Q = -EI \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} + (e_0 a)^2 \left[ \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} - \frac{\partial p(x)}{\partial x} + EA \alpha T \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right] \quad (\text{II.17})$$

L'équation du mouvement (II.8) peut être exprimée ainsi pour la flexion transversale par l'équation ci-dessous :

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

C'est l'équation générale pour les vibrations transversales d'un modèle élastique sous la pression distribuée transversalement et l'effet thermique sur la base d'élasticité nonlocale. On note que quand le paramètre  $a$  à échelle réduite disparaît, l'équation ci-dessus se réduit à l'expression classique d'Euler Bernoulli (II.8).

On sait que les nanotubes de carbone à doubles parois sont distingués du modèle élastique traditionnel par leurs deux structures creuses et les forces associées de Van Der Waals d'inter tube. Puisque CNTs ont la conductivité thermique élevée, on peut considérer que la variation de température est uniformément distribuée dans CNT. L'équation (II.18) peut être employée à chacun des nanotubes intérieurs et extérieurs des nanotubes de carbone à doubles parois.

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

Supposant que les nanotubes intérieurs et extérieurs ont la même épaisseur constante, alors nous aurons :

$$p_{12} = E I_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} + \rho A_1 \frac{\partial^2 w_1}{\partial t^2} + E A_1 \alpha T \frac{\partial^2 w_1}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \left( \rho A_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^2 \partial t^2} + E A_1 \alpha T \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} - \frac{\partial^2 p_{12}}{\partial x^2} \right) \quad (\text{II.19a})$$

$$- p_{12} = E I_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \rho A_2 \frac{\partial^2 w_2}{\partial t^2} + E A_2 \alpha T \frac{\partial^2 w_2}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \left( \rho A_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^2 \partial t^2} + E A_2 \alpha T \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \frac{\partial^2 p_{12}}{\partial x^2} \right) \quad (\text{II.19b})$$

Où les indices 1 et 2 sont employés pour indiquer les quantités liées aux nanotubes intérieurs et extérieurs, respectivement,  $p_{12}$  indique 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 de Van Der Waals [6]. Le potentiel d'interaction de Van Der Waals, en fonction de l'espacement de l'inter couche entre deux nanotubes adjacents, peut être estimé par le modèle de Lennard Jones. Le potentiel d'interaction de l'inter couche entre deux nanotubes adjacents peut être simplement rapproché par le potentiel obtenu pour deux monocouches plates de graphite, notée  $g(\delta)$ , où  $\delta$  est l'espace intercalaire entre deux couches [7,8]. Pour la propagation de vibration dans des 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 une fonction linéaire du saut de flexion à ce point, ainsi nous avons :

$$p_V = \left[ \frac{dg(\delta)}{d\delta} \right]_{\delta=t} + c(\Delta w) \quad (\text{II.20a})$$

Où :

$$c = \left. \frac{d^2 g}{d\delta^2} \right|_{\delta=t} \quad (\text{II.20b})$$

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

Où  $t$  est l'espacement initial de couche avant la déformation, qui est égale ou très près de l'épaisseur représentative d'un CNT,  $(\Delta w)$  exprime le saut de flexion dû à la déformation, et  $c$  est le coefficient d'interaction de Van Der Waals. Dans Equation. (II.20) l'énergie potentielle d'interaction entre deux nanotubes adjacents d'un CNTs est décrite par le potentiel [9] de Lennard Jones des milieux continus, qui peut être exprimé approximativement en termes d'espacement de couche intercalaire  $\delta$  comme suit :

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

Où :  $\delta_0 = 0.34 \text{ nm}$  est l'espacement de couche intercalaire d'équilibre et le  $K$  est une constante. En substituant des données obtenues en référence [10] pour deux SWNTs concentrique dans Equation. (14), on aura :

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

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, [7, 8] le premier terme d'Equation. (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 0.34 nm). Le coefficient d'interaction de Van Der Waals par unité de longueur entre deux tubes, qui peuvent être estimés par l'égalité suivante : [11]

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

Où  $R_1$  est le rayon du nanotube intérieur.

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

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

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

En introduisant l'Equation. (II.23) dans les Equations. (II.19a) et (II.19b) nous aurons :

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

$$-c(w_2 - w_1) = EI_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \rho A_2 \frac{\partial^2 w_2}{\partial t^2} + E A_2 \alpha T \frac{\partial^2 w_2}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \left( \rho A_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^2 \partial t^2} + E A_2 \alpha T \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + c \frac{\partial^2}{\partial x^2} (w_2 - w_1) \right) \quad (\text{II.25b})$$

Avec l'effet de la petite échelle de longueur incluse, ces deux équations décrivent les vibrations transversales libres de nanotubes de carbones doubles parois sous l'effet thermique, et elles sont couplées ensemble par l'interaction de Van der Waals.

### II.4. Résultats mathématiques du modèle vibratoire

Considérons un nanotube double parois de longueur L dans lequel les deux extrémités sont simplement soutenues, ainsi les modes vibratoires du DWCNT sont de la forme [12]

$$w_1 = a_1 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x, \text{ et } \lambda_n = \frac{n\pi}{L} \quad (\text{II.26})$$

$$w_2 = a_2 e^{i\omega t} \sin \lambda_n x$$

Où  $a_1$  et  $a_2$  sont les amplitudes des flexions des nanotubes intérieurs et extérieurs. Ainsi, les deux fréquences de résonance d'ordre n du DWCNT avec l'effet thermique peuvent être

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

obtenues par l'intermédiaire du modèle nonlocale par substitution de l'équation (II.21) dans Equations. (II.20a) et (II.20b), qui donne le suivant :

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

Avec

$$\alpha_n = \frac{c(A_1 + A_2)}{\rho A_1 A_2} - \frac{2E\alpha T \lambda_n^2}{\rho} + \frac{E \lambda_n^4 (A_1 I_2 + A_2 I_1)}{\rho A_1 A_2 (1 + (e_0 a)^2 \lambda_n^2)} \quad (\text{II.28})$$

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

Où  $\omega_{nI}$  est la plus inférieure fréquence normale, et  $\omega_{nII}$  est la plus élevée fréquence normale.

## Chapitre II .....Développements analytiques et formulation

### Références

- [1]J. Peddieson, R. Buchanan, et R.P. McNitt, J. Eng.Sci interne. **41**, 305 (2003).
- [2]A.C. Eringen, J. Appl. Phys. **54**, 4703 (1983).
- [3]Y. Q. Zhang, G. R. Liu, et X.Y. Xie, Phys. Tour. B. **7 1**, 195404 (2005).
- [4]H. Heireche, A.Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. AddaBedia, Physica. E **40**, 2791 (2008).
- [5]S.P. Timoshenko, Philos. Magnétique. **41**, 744 (1921).
- [6]B. Reulet *et al*, Phys. Rev. Lett. **85**, 2829 (2000).
- [7]L.A. Girifalco et R.A. Lad, J. Chem. Phys. **25**, 693 (1956).
- [8]L.A. Girifalco, J. Chem. Phys. **95**, 5370 (1991).
- [9]L. A. Girifalco, M. Hodak, et R. S. Lee, Phys. Rev. B **6 2**, 13104 (2000).
- [10]R. Satio, R. Matsuo, T. Kimura, G. Dresselhaus, et M. S. Dresselhaus, Chem. Phys. Lett. **34 8**, 187 (2001).
- [11]L.J. Sudak, J. Appl. Phys. **94**, 7281 (2003).
- [12]H. Heireche, A.Tounsi, A. Benzair, Nanotechnology. **1 9**, 185703 (2008).

## Chapitre ..... Interprétations et discussion

### Chapitre III. Interprétations et discussion

#### 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 [1] 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 locaux correspondants et les rapports des résultats avec le changement de température à ceux sans changement de température, respectivement, sont donnés ci-après :

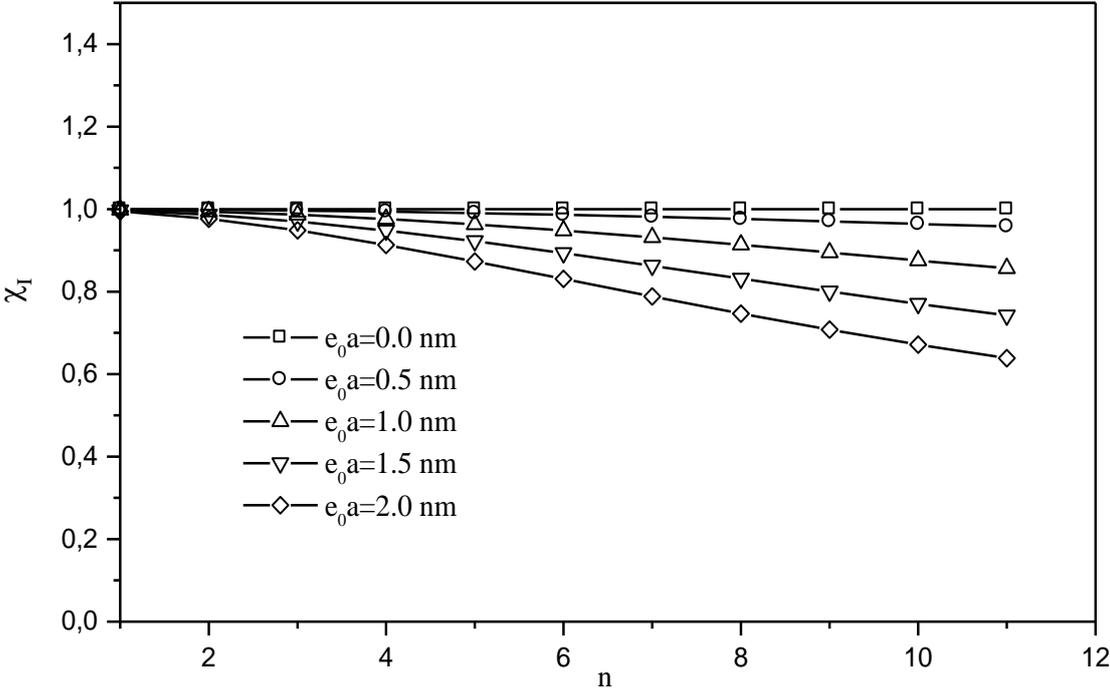
$$\chi_I = \frac{(\omega_{nI})_N}{(\omega_{nI})_L},$$

$$\chi_{II} = \frac{(\omega_{nII})_N}{(\omega_{nII})_L},$$

$$\zeta_I = \frac{(\omega_{nI})_N}{(\omega_{nI})_N^0},$$

$$\zeta_{II} = \frac{(\omega_{nII})_N}{(\omega_{nII})_N^0}$$

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



**Figure III.1** L'effet de la petite échelle sur la basse fréquence naturelle  $\omega_{n1}$  du nanotube de carbone double parois avec le rapport  $L/d_2=40$  dans le cas de la basse température ( $\theta=40$  K)

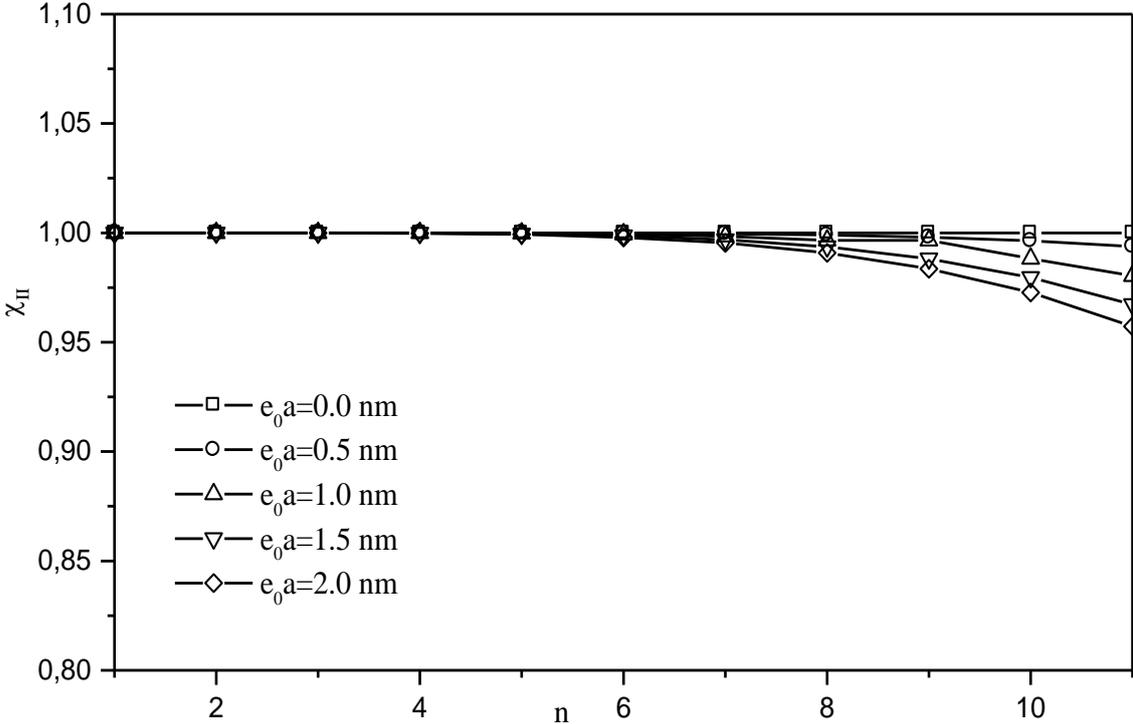
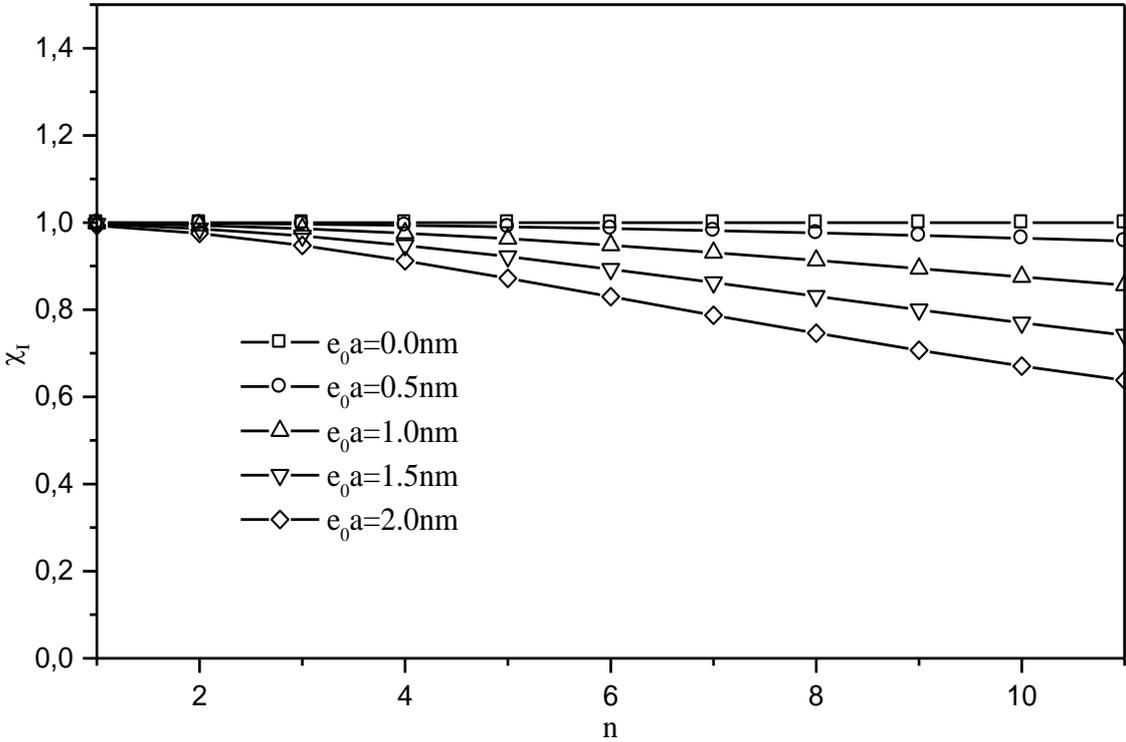
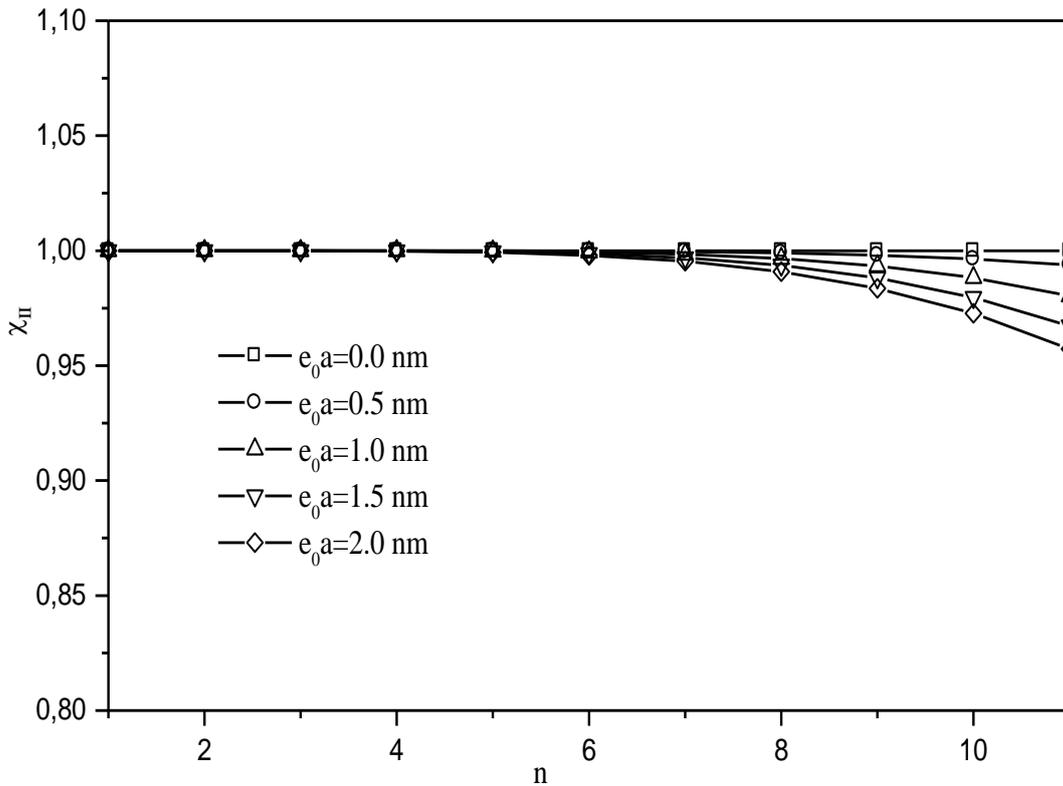


Figure III.2 L'effet de la petite échelle sur la haute fréquence naturelle  $\omega_{nII}$  du nanotube de carbone double parois avec le rapport  $L/d_2=40$  dans le cas de la basse température ( $\theta=40$  K).



**Figure III.3** L'effet de la petite échelle sur la basse fréquence naturelle  $\omega_n$  du nanotube de carbone double parois avec le rapport  $L/d_2=40$  dans le cas de la haute température ( $\theta=40$  K).



**Figure III.4** L'effet de la petite échelle sur la haute fréquence naturelle  $\omega_{nII}$  du nanotube de carbone double parois avec le rapport  $L/d_2=40$  dans le cas de la haute température ( $\theta=40$  K)

### III.2. Le paramètre nonlocal $e_0$

Pour le cas de la basse température, nous supposons  $\alpha = -1.6 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  [2,3]. Avec l'allongement  $L/d_2 = 40$  et le changement de température  $\theta = 40 \text{ K}$ , les rapports  $\chi_I$  et  $\chi_{II}$ , le paramètre d'échelle  $e_0 a$  et le nombre de mode vibratoire  $n$  sont indiqués dans les figures (III.1 et III.2). Avec  $n = 2$  et  $\theta = 40 \text{ K}$ , les rapports  $\chi_I$  et  $\chi_{II}$ , le paramètre nonlocal  $e_0 a$ . Les rapports  $\chi_I$  et  $\chi_{II}$  servent d'index pour évaluer quantitativement l'effet à échelle réduite sur la propagation de vibrations dans DWCNT. On le voit clairement dans les figures. (III.1 à III.2) que les rapports  $\chi_I$  et  $\chi_{II}$  sont moins que l'unité. Ceci signifie que l'application du modèle local 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

## Chapitre ..... Interprétations et discussion

différents atomes de carbone dans CNTs est négligé. Comme peut être vu, le léger effet de taille sur la fréquence normale inférieure  $\omega_{nI}$  est significatif tandis que la haute fréquence normale  $\omega_{nII}$  est peu sensible à l'effet d'échelle. À mesure que le paramètre de réseau  $e_0a$  augmente, les rapports  $\chi_I$  obtenus par la théorie nonlocale 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 [4] tandis que le modèle local de milieu continu considère le ressort constant pour prendre une valeur infinie. Dans l'ensemble, la théorie nonlocale devrait être employée si on a besoin des prévisions précises des caractéristiques vibratoires des nanotubes de carbone.

Pour le cas de la haute température, nous supposons  $\alpha = 1.1 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  [2, 3]. Avec le rapport  $L/d_2 = 40$  et le changement de température  $\theta = 40K$ , la variation des rapports  $\chi_I$  et  $\chi_{II}$  avec le paramètre de réseau  $e_0a$  pour les divers nombre de mode vibratoire  $n$  sont montrés dans les figures.(III.3 et III.4).

### Conclusion

Ce troisième chapitre montre 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.

## Chapitre ..... Interprétations et discussion

### REFERENCE

[1] H. Jiang, R. Liu, Y. Huang et K.C. Hwang, J. Eng. Mater. Technol. **126**, 265 (2004) .

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

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

[4] L.F. Wang, et H. Y. Hu, Phys. Rev. B **71**, 195412 (2005).



## CONCLUSION GENERALE

Des équations dynamiques du nanotube de carbone à double parois sont obtenues sur la base de la théorie élastique thermique nonlocale. Les effets de la petite taille, du changement de température et les forces de Van Der Waals entre les nanotubes intérieurs et extérieurs sont pris en considération. On montre que l'effet du changement de température sur les caractéristiques vibratoires d'un nanotube de carbone double-parois doit être considéré. L'analyse est basée sur le modèle de Lennard-Jones pour les forces de Van Der Waals entre les nanotubes intérieurs et extérieurs. Pour le cas de DWCNTs simplement soutenus, les fréquences normales sont déterminées et discutées dans les détails. On montre que la haute fréquence normale de DWCNTs est peu sensible au changement de la température et de l'effet d'échelle réduite tandis que les effets thermiques et les effets nonlocaux sur la fréquence normale inférieure sont significatifs. L'effet thermique sur la fréquence normale inférieure  $\omega_{nl}$  diminue avec l'augmentation du nombre vibratoire de mode  $n$  et augmente avec l'augmentation du rapport  $L / d^2$  et le changement de température  $\theta$ . On constate que l'effet nonlocal devient plus grand, particulièrement pour des valeurs plus élevées du nombre de mode vibratoire  $n$  et l'effet à échelle réduite ne peut pas être négligé ainsi. Beaucoup d'études se sont portées sur les vibrations dans les nanotubes de carbone double-parois mais sous d'autres conditions. Ce travail s'est donc principalement focalisé sur la vibration sous les deux effets en même temps, d'un côté l'effet de paramètre d'échelle et de l'autre côté l'effet du changement de la température.

Ce travail effectué, il serait intéressant de poursuivre les investigations sur les vibrations des NTC dans d'autres conditions et autres paramètres pour mieux comprendre ce nouveau produit révolutionnaire de la science nouvelle. Dans ce travail, plusieurs pistes de recherche sont donc à envisager. Ce mémoire s'est inscrit dans un travail de compréhension des mécanismes qui doivent être ajoutés aux nombreuses questions auxquelles il est nécessaire de répondre avant d'envisager l'intégration des NTC au sein des phénomènes comme la vibration dans différentes conditions avec plus de paramètres. Atteindre cet objectif nécessite un strict contrôle de procédés de production des nanotubes et, peut être, par de nouveaux moyens technologiques qui restent encore à inventer.