



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur
et de la Recherche Scientifique
Université de Tissemsilt



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière

Mémoire de fin d'études pour l'obtention du diplôme de

Master académique en

Filière : **Physique**

Spécialité : **Nano-physique**

Présentée par : **-Gharbi Nassima**

-Nefah Aicha

Thème

**Etude des nano-objets dans un milieu
thermique**

Devant le jury composé de :

Présidente	: Besahraoui Fatiha	MCA	Université De Tissemsilt
Examineur	: Dahmane Fethallah	Professeur	Université De Tissemsilt
Encadrant	: Lakhdar Boumia	MCA	Université De Tissemsilt

Année Universitaire : 2021/2022

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

A mes très chers parents.

A mes sœurs et mes frères.

A toute ma famille.

A toutes mes amies (Amis).

A tous mes enseignants. (Es)

Nefah Aicha

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

A l'Ame de mon défunt père Djillali qui m'a quitté au milieu du voyage, et à ma chère mère Bakie fatma, que Dieu la protège ; ils ont toujours été là pour moi et m'ont donné un magnifique modèle de labeur et de persévérance.

À tous les membres de ma famille, mes frères, Mokhtar, Abdeldjabar, Mohamed, Hocine, Oussama, Khaled et mes sœurs, kheira, Bakhta, Zohra, Samira, Nawel, Houria, leurs maris et tous leurs enfants : Mohamed, Nasreddine, Khawla, Ikram, Maria, Sirine, Mahdi, Razane et tous mes proches.

Gharbi Nassima

Remerciements

Nous remercions Dieu de nous avoir donné la volonté et le courage qui nous ont permis de réaliser ce travail. Nous tenons en premier lieu à remercier notre Directeur de mémoire de master Dr Boumia Lakhdar pour nous avoir encadrés, pour l'intéressante documentation qu'il a mise à notre disposition, pour ses conseils précieux et pour toutes les commodités et aises qu'il nous a apportées durant l'étude.

Merci aussi à la présidente du jury de soutenance Dr Besahraoui Fatiha et à l'examineur Pr Dahmane Fethallah, tous nos remerciements pour avoir accepté d'examiner et d'évaluer ce travail.

Nous remercions tous nos amis(es) qui m'ont aidé de loin ou de près dans la réalisation de ce travail.

Nous saisissons cette occasion pour remercier tous les enseignants et enseignantes du département de physique de l'université de Tissemsilt qui n'ont jamais failli à leur mission sacrée.

Ce sont toujours des remerciements et des louanges, très difficiles à formuler, peut-être parce qu'ils nous font toujours sentir leurs manquements et leur incapacité à réaliser les droits de ceux que nous donnons. Je ne comprenais pas comment vous dédier cet honneur et comment vous dédier à la fois remerciements, pardon et gratitude aux personnes les plus chères qui ont eu un impact sur ma vie universitaire, qui ont été comme un père pour moi.

Une dédicace du fond du cœur à vous, et je distingue les deux hommes généreux et bienveillants en mémoire messieurs Boumia Lakhdar et Bidaoui Mourad. Vous avez tous les deux mille remerciements et respect et un million de salutations. Que Dieu vous bénisse tous les deux et que Dieu rende vos journées heureuses et prolonge votre vie avec bonté, bonheur, santé, amour et vous protège tous les deux.

GHARBI NASSIMA

ملخص:

يتم حساب درجة حرارة الالتواء الحرجة لـ نتريد البورون أحادي الجدار بناءً على نظرية جديدة لسلسلة القص غير المحلية من الدرجة الأولى النموذج الحالي قادر على التقاط كل من تأثير عوامل التشوه الصغيرة والعرضية لنتريد البورون أحادي الجدار.

تم الأخذ في الاعتبار الافتراض ان التنقل أو الإزاحة داخل المستوي والقص المستعرض من مكونات الانحناء والقص تشير النتائج إلى أهمية التأثيرات المقياس الصغير في تحليل الالتواء الحراري للأنايبب النانوية لنتريد البورون.

الكلمات الدالة:

درجة حرارة الالتواء الحرجة، الأنايبب النانوية لنتريد البورون، مؤشر القياس، تأثير المقياس الصغير

Abstract

The critical buckling temperature of NT of single-walled boron nitride (SWBNNT) has calculated based on a new theory of non-local first-order shear strain.

The current model is able to capture both the small-scale effect and the transverse deformation effects of single-walled boron nitride SWBNNT. Consideration given to the assumption that in-plane displacements and transverse displacements consist of bending and shear components.

The results indicate the importance of small-scale effects in the thermal buckling analysis of the boron nitride nanotube.

Key words:

Critical buckling temperature, boron nitride nanotube, scaling parameter, small-scale effect.

Résumé

La température critique de flambement de NT de nitrure de bore simple paroi (SWBNNT) est calculée en se basant sur une nouvelle théorie de la déformation de cisaillement non locale de premier ordre.

Le modèle actuel est capable de capturer à la fois l'effet de la petite échelle et les effets de déformation transversale de nitrure de bore mono paroi SWBNNT. On a pris en considération l'hypothèse que les déplacements dans le plan et les déplacements transversaux **consistent en les** composantes de flexion et de cisaillement.

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

Mots-clés :

Température critique de flambement, nanotube de nitrure de bore, paramètre d'échelle, effet de la petite échelle.

Liste des figures

Chapitre I

Figure I.1 : Structure du diamant.....	3
Figure. I.2 : Fullerène C_{60}	4
Figure I.3 : Structure du graphite.....	5
Figure I.4 : Structure d'un plan de graphène en deux dimensions.....	6
Figure I.5 : Représentation d'un nanotube de carbone mono Feuillet (SWCNT).....	6
Figure I.6 : Représentation des trois types de nanotubes.....	7
Figure I.7 : Structure schématique d'un nanotube multifeuillets (MWCNT).....	8
Figure I.8 : Elasticité du SWNTC.....	9
Figure.I.9 : nanotubes de nitrure de bore monofeuillet.....	15

Liste des graphes

Chapitre. III

Figure. III. 1. Variation de T_{cr} de flambement non-dimensionnelle et L/d Pour $0 \leq e_0 a \leq 0.6$ et $n = 1$	28
Figure. III. 2. Figure III. 2. Relation entre T_{cr} de flambement et le nombre de mode n $20 \leq L/d \leq 50$ $e_0 a = 0.4$ nm.....	30
Figure. III. 3. Relation entre T_{cr} de flambement et le nombre de mode n Pour $0 \leq e_0 a \leq 0.6$	31
Figure. III. 4. Rapport de la température critique de flambement (TBT PFSDT) pour (EBT) non local vs Rapport de la longueur de diamètre pour différente nombre de mode $e_0 a = 0.6$ nm.....	32

Table des matières

Table des matières

ملخص.....	
Abstract.....	
Résumé.....	
Liste des figures.....	
Liste des graphes	
Introduction.....	

Chapitre.I :

Généralités sur les Allotropes de Carbone

I. Quelques formes allotropiques du Carbone

I.1Diamant.....	3
I.2 Les fullerènes et dérivés.....	3
I.3.Le Graphite.....	4
I.4. Les nanotubes de Carbone.....	5
I.4.1 Les Structures de nanotubes de carbone.....	5
I.4.1.1 Les nanotubes mono Feuillet.....	5
I.4.1.2 Les nanotubes multi feuillets (multi-Wall carbone nanotubes MWCNT).....	7
I.5. Les propriétés des nanotubes de carbone.....	8
I.5.1 Propriétés électriques.....	8

I.5.2 Propriétés Mécaniques.....	9
I.5.3 Propriétés Thermiques.....	10
I.5.4 Propriétés optiques.....	10
I.5.5 Propriétés d'adsorption.....	10
I.6. Définition.....	11
I.7. Les Risques des nanomatériaux.....	11
I.7.1 Pour la santé.....	11
I.7.1.1 Appareil respiratoire.....	11
I.7.1.2 Appareil digestif.....	12
I.7.1.3 La Peau.....	12
I.7.1.4 Pour l'environnement.....	12
I.8 Les Applications des nanomatériaux.....	12
I.8.1 Le stockage d'énergie.....	13
I.8.2 Les capteurs.....	13
I.8.3 L'électronique.....	13
I.8.4 Transistors et Ordinateurs.....	14
I.8.5 Détecteurs.....	14
I.8.6 Piles.....	14
I.9 Les nanotubes de nitrure de bore.....	14
I.10. Le nitrure de bore.....	15

Chapitre. II

Chapitre II : Formulations et calculs.....	20
II.1. Les différentes théories.....	20
II.1.2 Le théorème de Timoshenko.....	22
Principe de la théorie.....	22
II .2. Analyse.....	22
II .3.Équations gouvernantes.....	23
II.4 .Solutions analytiques.....	25

Chapitre. III

Chapitre III Résultats et discussion.....	28
III.1. Résultats numériques et discussion.....	28
Conclusion.....	32

Introduction

Introduction

Depuis des dizaines d'années, la formidable intuition de Richard Feynman a commencé à voir les premières lueurs du jour par des études et des recherches dans le domaine nanométrique mobilisant toute la communauté scientifique. Ainsi, les industriels ont produit des nanomatériaux présentant des propriétés mécaniques et physiques qui étaient impensables il y a quelques années. Actuellement, les nanomatériaux suscitent un fort engouement qui s'explique par plusieurs facteurs notamment les progrès technologiques.

Les nanomatériaux sont probablement les objets scientifiques les plus étudiés et les plus développés de nos jours car ils permettent d'accéder à des propriétés exceptionnelles [1]. Les nanomatériaux interviennent dans certains processus ; physique, chimique, mécanique et d'autres. Ce n'est que depuis quelques décennies que la science des nanomatériaux a réellement pris son essor, jalonnée par la découverte des nano cristaux, des nanotubes de carbone, le graphène, les fullerènes...

Il y a eu un intérêt croissant dans la recherche en nanotechnologie, qui se concentre sur les particules qualifiées de particules ultrafines appelées nanomatériaux. En effet, la réduction de la taille d'un matériau à une échelle nanométrique peut conduire à des changements considérables de ses propriétés physico-chimiques.

Les nanotubes de carbone étaient découverts par hasard par le professeur de chimie Sumio Iijima (1991) qui les a identifiés par microscopie électronique en 1991 dans un sous-produit de synthèse des fullerènes.

On peut définir un nanotube de carbone comme étant un objet tubulaire creux avec un diamètre interne nanométrique et une longueur de l'ordre de quelques micromètres. Il est constitué d'un feuillet de graphite enroulé sur lui-même de façon à former un cylindre fermé aux deux extrémités par deux demi-fullerènes. La résistance d'un nanotube de carbone est cent fois supérieure à l'acier, il supporte des températures extraordinairement élevées.

L'objectif principal de ce mémoire de master est d'examiner l'effet thermique dans les nanomatériaux. Nous sommes partis de la problématique suivante :

Quel est le comportement d'un nanotube à base de nitrite de bore dans un milieu thermique ?
Ce travail est divisé en trois chapitres.

Le premier chapitre est consacré à la synthèse bibliographique sur les nanotubes de carbone et de nitrure de bore, le deuxième chapitre décrit quelques formulations utilisées dans les calculs des propriétés étudiées et le dernier chapitre est consacré aux résultats et discussion. Enfin, on termine par une conclusion.

Chapitre I

Généralités sur les Allotropes de Carbone

Chapitre I : Généralités sur les Allotropes de Carbone

I.1 Quelques formes allotropiques du Carbone

I.1.1Diamant

Le diamant est la forme la plus compacte du carbone, il possède une structure sp^3 formant un réseau cubique à faces centrées (figure I.1). La structure de type diamant compte donc 8 atomes par maille (contre 4 pour une structure de type cubique faces centrées classiques).

Cette structure lui attribue la plus grande dureté et la conductivité thermique la plus élevée de tous les matériaux d'origine naturelle. D'environ $2200 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ [2].

En revanche, et contrairement au graphite, le diamant est un isolant électrique, car il possède une grande bande interdite d'environ 5,4 eV [3].

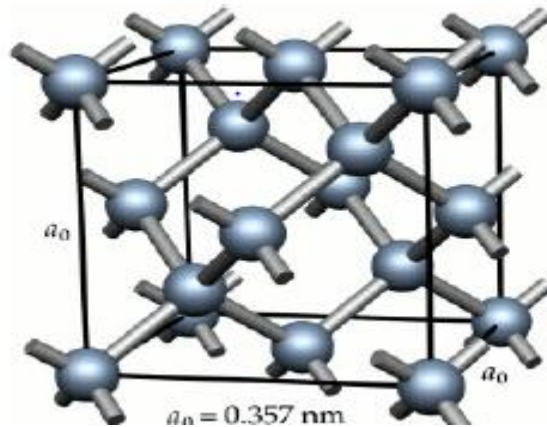


Figure I.1 : Structure du diamant.

I.1.2 Les fullerènes et dérivés :

L'élément de base de graphite et qui sert à 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. L'ajout d'un pentagone 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 aura inséré un pentagone et un heptagone resterait globalement plan.

En 1985, Kurl, Kroto et Smally, ont réussi à isoler une forme majoritaire constituée de 60 atomes de carbone. Cette molécule renfermée 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. (Voir figure. I.2).

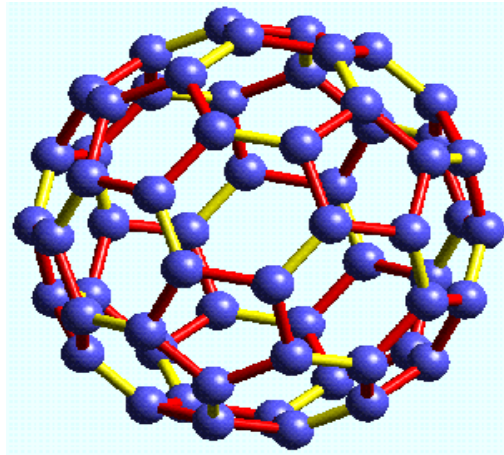


Figure. I.2.Fullerène C₆₀.

Cette nouvelle molécule a été appelée buckminsterfellerène, par analogie avec les dômes géodésiques de l'architecte Buckminster Fuller. Depuis le nom à évoluer .Le fullerène C₆₀ est le représentant le plus connu de la famille des fullerènes. 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 les C₆₀ et C₇₀,

I.1.3.Le Graphite

Le graphite qui est la forme allotropique du carbone pour 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, constitués d'un réseau hexagonal d'atomes de carbone (nid d'abeille), appelé graphène

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 Wm^{-1} dans la direction perpendiculaire [4]. 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 $7 \times 10^4 \text{ Sm}^{-1}$ (figure I.3) [5].

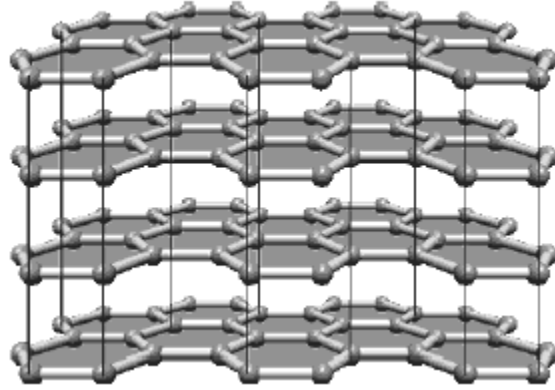


Figure I.3 : Structure du graphite [32].

I.1.4. Les nanotubes de Carbone :

I.1.4.1 Les Structures de nanotubes de carbone :

I.1.4.1.a Les nanotubes mono Feuillet :

La structure du nanotube de carbone se forme d'un plan de graphène. Elle se définit par un angle chiral et deux vecteurs unitaires, T qui représente la longueur de la maille unitaire dans la direction axiale du nanotube et \vec{C}_h est le vecteur chiral, reliant deux atomes dans ce même plan, qui définit la circonférence du nanotube (figure I .4), ce dernier peut être décomposé en deux vecteurs unitaires \vec{a}_1 et \vec{a}_2 de la maille du graphène, en donnant naissance aux deux indices entiers de chiralités n et m tels que [6] :

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (\text{I.1})$$

Avec $n \geq m$ et $\vec{a}_1 = \vec{a}_2 = 0,246 \text{ nm}$.

On montre alors que le diamètre du nanotube peut être calculé par :

$$d = 0.246 \frac{\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{\pi} \quad (\text{I.2})$$

L'angle d'enroulement, appelé aussi angle de chiralité θ est défini comme étant l'angle qui existe entre le vecteur unitaire de la maille de graphène \vec{a}_1 et le vecteur chiral \vec{c}_h et angle est donné par :

$$\theta = \sin^{-1} \left(\frac{\sqrt{3m}}{2\sqrt{n^2 + mn + m^2}} \right) \quad (\text{I.3})$$

À cause de la symétrie du plan de graphène, toutes les structures des nanotubes possibles peuvent être représentées par un enroulement de celui-ci avec un angle de chiralité compris entre 0° et 30° [7,8].

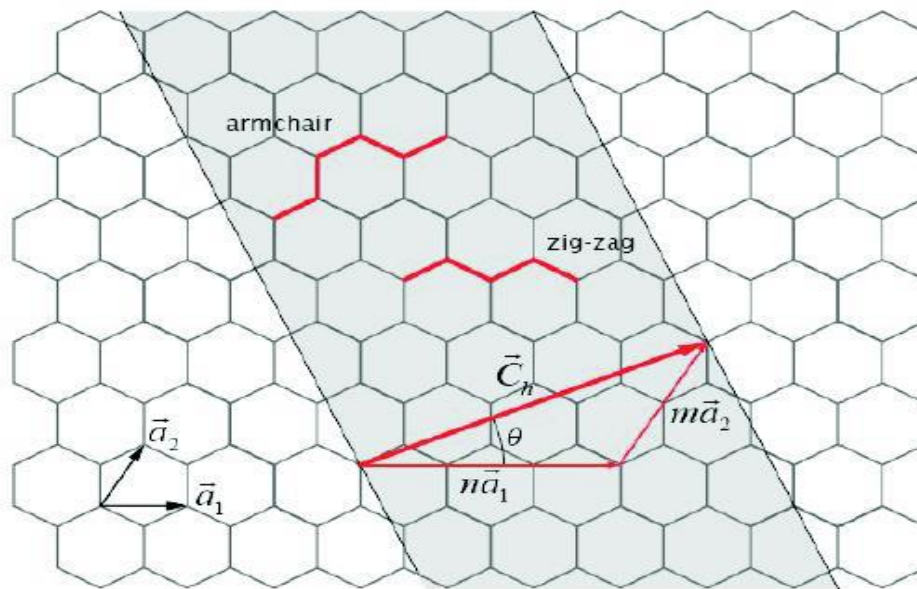


Figure I.4 : Structure d'un plan de graphène en deux dimensions .Le réseau hexagonal est décrit à partir des deux vecteurs de base \vec{a}_1 et \vec{a}_2 [9].

Les nanotubes mono Feuillet (SWCNT) se présentent sous la forme d'une feuille de graphène unique enroulée sur elle-même (Voir Figure I.5). Le nanotube idéal présente deux extrémités qui peuvent être fermées par deux dômes constitués par exemple de demi fullerènes, Mais pouvant aussi comporter des défauts dans le cas d'un nanotube réel. L'enroulement de la feuille de graphène va définir les propriétés du nanotube formé.

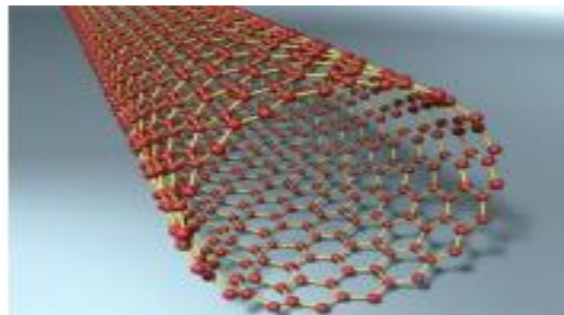


Figure I.5 : Représentation d'un nanotube de carbone mono Feuillet (SWCNT).

D'un point de vue technique, l'enroulement consiste à superposer deux hexagones du feuillet de graphène. Le choix des deux hexagones détermine le diamètre du nanotube et son hélicité θ , l'angle de 0° à 30° . On peut classer les nanotubes de carbone en trois familles différentes selon leur hélicité, ces familles se répartissant soit dans la classe des nanotubes chiraux, soit dans la classe des nanotubes non-chiraux :

- $\theta = 0^\circ$ ($m=0$), le nanotube est de type zigzag.
- $\theta = 30^\circ$ ($n=m$), le nanotube est de type chaise.
- $0 < \theta < 30^\circ$ ($n \neq m$), le nanotube est chiral.

Les deux types de nanotubes non-chiraux tirent leur nom de la forme suggérée par le dessin d'une couronne d'atomes du nanotube, comme le montre (Figure I.6).

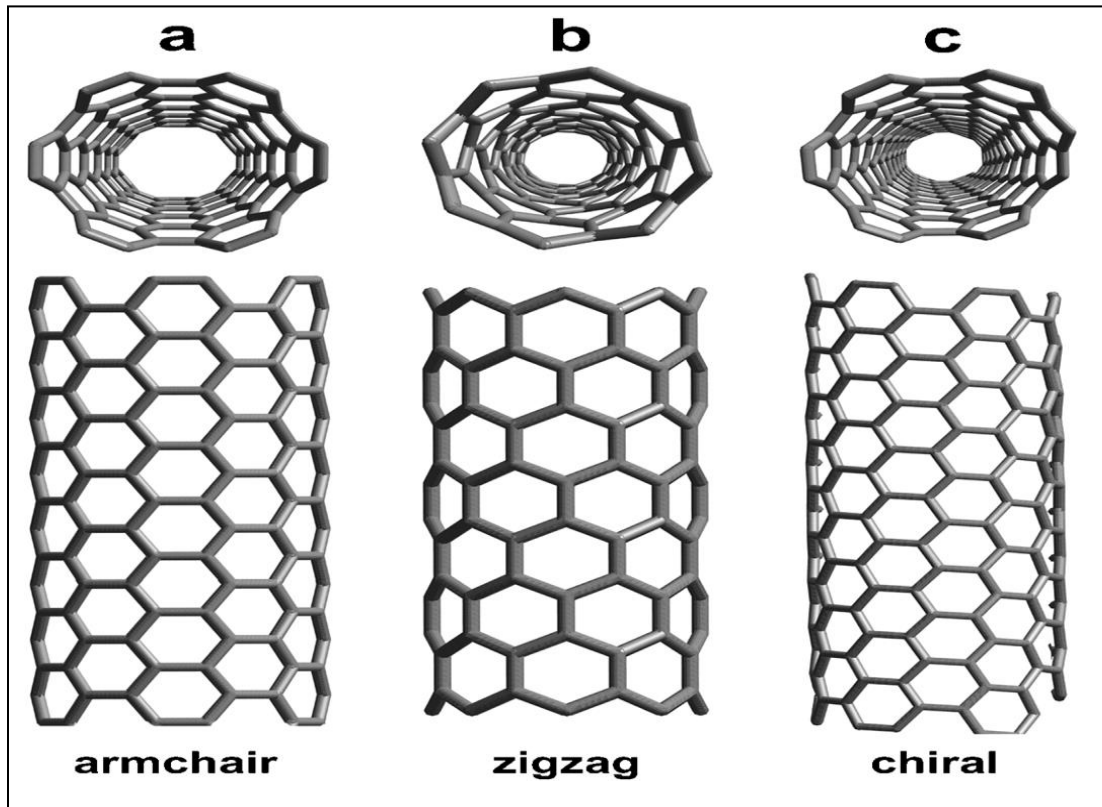


Figure I.6 : Représentation des trois types de nanotubes [10].

- Lorsque les motifs hexagonaux de carbone décrivent un cercle perpendiculaire à l'axe du nanotube, le NTC a une structure de type « zigzag ».
- Pour des motifs hexagonaux de carbone alignés parallèlement à l'axe du tube ; on dira que le NTC a une structure de type « armchair » ou « chaise ».
- Lorsque les cycles forment une hélicité intermédiaire entre zigzag et armchair. Le nanotube est alors qualifié de « chiral » ou « hélicoïdal ».

I.1.4.1.b Les nanotubes multi feuillets (multi-Wall carbone nanotubes MWCNT) :

Les nanotubes sont constitués par les nanotubes multi feuillets (MWCNT) qui sont formés de plusieurs nanotubes mono parois concentriques séparés par une distance d'environ 0.34 nanomètres (Figure I.7). Cette distance résulte de l'équilibre entre la force d'attraction et la force de répulsion des feuillets entre eux [11].

Le diamètre du plus petit nanotube interne détermine la taille du canal central du nanotube. Le diamètre interne d'un nanotube multi-feuillets est de l'ordre de deux nanomètres, tandis que le diamètre externe est de l'ordre d'une vingtaine de nanomètres et peut aller jusqu'à la centaine de nanomètres. Du fait des différentes structures que nous venons de voir, ces nanotubes de carbone présentent des propriétés physiques différentes.

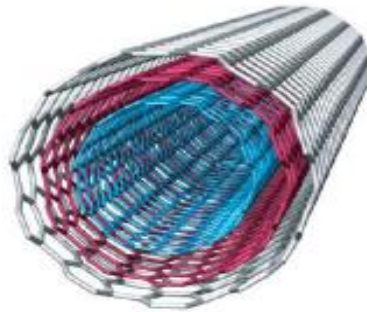


Figure I.7 : Structure schématique d'un nanotube multifeuillets (MWCNT), où l'on voit bien l'arrangement concentrique des feuilles de graphène [10].

I.1.5. Les propriétés des nanotubes de carbone :

On peut citer quelques propriétés dans les lignes suivantes :

I.1.5.1 Propriétés électriques :

La modélisation des bandes d'énergies a montré que la conductivité électrique d'un nanotube de carbone dépend de son hélicité, donc de ses indices de chiralité, et que tous les NTC possèdent une bande interdite, donc un comportement semi-conducteur [7]. On montre aussi que la bande interdite des NTC de type semi-conducteur est de l'ordre de 0,7 eV pour un diamètre $d = 1$ nm, et que celle-ci décroît en $1/d$ pour les diamètres supérieurs [12].

Les dimensions nanométriques des NTC leur confèrent une conduction d'électricité de type particulière, dite balistique [13,14].

En effet, dans un nanotube isolé sans défauts structurels, la mobilité des électrons à l'intérieur du nanotube est très importante car le libre parcours moyen qui caractérise la distance moyenne entre deux collisions élastiques d'électrons est supérieur à la longueur de nanotube. Cette absence de collisions se traduit par une résistance intrinsèque quasi nulle.

Cependant, la résistance totale d'un nanotube dépend aussi d'autres types de résistances à savoir :

- La résistance quantique qui est due aux effets quantiques liés aux dimensions nanométriques, d'environ 6,5 kW [15].

➤ La résistance de contact à l'interface métal/nanotube, qui représente la difficulté qu'éprouvent les électrons pour passer du métal au nanotube. Cette résistance peut être réduite ou éliminée en utilisant des contacts en palladium ou en titane [16,17].

Ce transport balistique du courant, les NTC peuvent supporter une forte densité de courant. Yao et al. ont rapporté une densité de courant qui dépasse les 10^9Acm^{-2} pour des SWCNT métalliques d'environ 1nm de diamètre. Cette valeur importante du courant qui peut être supportée par ces NTC est attribuée à leur environnement de mesure qui permet une bonne évacuation de la chaleur car d'autres essais sur des NTC suspendus ont donné des valeurs beaucoup plus faibles [18].

I.1.5.2 Propriétés Mécaniques :

La liaison covalente C-C du graphène assure aux nanotubes de carbone des propriétés mécaniques très intéressantes et notamment une forte rigidité. Les calculs montrent qu'un SWCNT possède un module d'Young très élevé de l'ordre du TP_a [19], ce qui le rend cinq fois plus rigide que l'acier. Toutefois, cette propriété est très dépendante de la qualité structurale du NTC.

En effet plus le nanotube de carbone présente des défauts structuraux, plus son module de Young sera faible. R. Gao. et al [20] ont mesuré des modules d'Young de l'ordre de 26 GPa seulement pour des MWCNT présentant des défauts structuraux.

En plus de leur rigidité, les NTC possèdent une grande flexibilité [21,22] qui se caractérise par leur tolérance à des taux de déformation en traction élevés et des torsions importantes sans rupture. Ce comportement de déformations élastiques non-linéaires semble être principalement dû au réarrangement réversible des atomes sous contrainte.



Figure I.8 : Elasticité du SWNTC.

I.1.5.3 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. La conductivité thermique des NTCs (de 3000 à 6600 $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) est supérieure à celle du graphite ou du diamant, ce dernier étant connu pour être un excellent conducteur thermique (de 1000 à 2600 $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) [23,24].

I.1.5.4 Propriétés optiques :

Les propriétés optiques des nanotubes de carbone sont moins mises en avant que leurs propriétés électroniques, ou mécaniques, mais se révèlent tout aussi intéressantes.

Les propriétés électroniques originales des tubes induisent des propriétés optiques également originales. La densité d'états des nanotubes mono parois est caractérisée par l'existence de singularités de Van Hove [25]. Les transitions électroniques possibles entre singularités du même ordre déterminent le spectre d'absorption. Ces transitions dépendent évidemment du type de nanotube, métallique ou semi-conducteur, mais également du diamètre d_t du nanotube considéré, avec une dépendance en $1/d_t$ en première approximation.

Il est possible de représenter sur une même figure l'énergie de toutes les transitions entre singularités de Van Hove en fonction du diamètre pour tous les types de nanotubes [28]. Ce type de figure est appelé diagramme de Kataura, le groupe de Kataura étant le premier à avoir introduit ce type de représentation [26]. Il existe différents diagrammes de Kataura dans la littérature, en fonction de la valeur de l'énergie de recouvrement choisie dans le calcul par le modèle liaisons fortes de la structure électronique des nanotubes [27, 28, 29].

I.1.5.5 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'insérer des atomes ou molécules (dopage) entre les nanotubes monoparoi d'un faisceau (intercalation inter tubulaire) ainsi qu'entre les différentes parois d'un nanotube multiparoi (intercalation inter planaire), et aussi de remplir par capillarité le canal central des nanotubes de carbone mono et multiparoi 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 (SWNTC)s 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 [30,31].

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 nanotubes de carbone 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 des porosités qui détermine ses propriétés d'adsorption.

I.1.6. Définition :

Un nanomatériau est un matériau naturel, formé accidentellement ou manufacture contenant des particules libres, sous d'agrégat ou sous forme d'agglomérat, dont au moins 50% des particules, dans la répartition numérique par taille, présentent une ou plusieurs dimensions externes se situant entre 1 et 100 nm.

I.1.7. Les Risques des nanomatériaux :

Le danger est la propriété intrinsèque d'une substance dangereuse ou d'une situation physique de pouvoir provoquer des dommages pour la santé humaine et/ou l'environnement.

I.1.7.1 Pour la santé :

En l'état actuel des connaissances, seul un inventaire des voies d'exposition est possible, sans fournir d'éléments quantitatifs d'exposition humaine et de risque sanitaire corrélé. La peau, les appareils digestif et respiratoire sont les voies potentielles d'entrée des nanoparticules manufacturées dans l'organisme humain. Les études concernent essentiellement la voie respiratoire et en particulier l'évaluation du risque d'exposition des travailleurs dans l'industrie [33].

I.1.7.2 Appareil respiratoire :

Les nanoparticules se déposent dans les voies pulmonaires, notamment dans le poumon profond en proportion nettement supérieure à celle de particules de taille micrométrique. Selon l'activité physique, le volume d'air inspiré pouvant être plus conséquent, la fraction de nanoparticules inhalée sera d'autant plus importante. Certaines nanoparticules ont tendance à former des agglomérats de taille micrométrique, modifiant alors leur comportement aérologique.

Il existe aussi un phénomène de passage de nanoparticules à travers la barrière de l'épithélium pulmonaire pour atteindre la circulation sanguine et les ganglions lymphatiques, et se répartir ensuite dans l'organisme. Le transfert semble d'autant plus important que le diamètre des nanoparticules est faible (inférieur à 2 nm). Les principaux organes de stockage répertoriés sont les reins, les testicules, le thymus, les poumons et le cerveau [34].

I.1.7.3 Appareil digestif :

L'exposition par ingestion peut avoir lieu en mangeant des aliments contaminés, en avalant des particules inhalées ou en portant à la bouche une main contaminée.

La quantification de l'exposition par la voie alimentaire est très incertaine en l'absence de données précises sur les nanoparticules dans l'alimentation. Cependant, il est bien connu que des particules peuvent franchir la barrière intestinale et se retrouver ainsi dans l'organisme [34].

I.1.7.4 La Peau :

L'industrie cosmétique utilise des nanoparticules dans de nombreux produits dont des crèmes solaires qui contiennent des nanoparticules de dioxyde de titane et d'oxyde de zinc. L'exposition par la peau a été étudiée dans ce cadre.

Le risque de franchissement de la barrière cutanée serait limité aux peaux lésées. Cependant, le passage par les follicules pileux reste possible et a été montré dans certaines conditions expérimentales. Il serait dépendant de la taille des nanoparticules et demande à être étudié [34].

I.1.7.5 Pour l'environnement :

La dispersion des nanoparticules dans l'environnement peut conduire à une contamination de l'air, des sols, des eaux de surface et souterraines et entraîner ainsi une exposition des organismes vivants.

Le manque d'études spécifiques a conduit à la mise en place de programmes de recherche sur le comportement des nanomatériaux dans l'environnement : mécanismes de biodégradation et de bioaccumulation, capacité d'adsorption de polluants, etc. [34].

I.1.8 Les Applications des nanomatériaux :

D'une façon générale, les nanomatériaux sont susceptibles d'être utilisés dans tous les domaines d'applications industrielles. Ils véhiculent de grands espoirs en matière d'amélioration des techniques médicales, d'économies d'énergie, d'armement, mais également, au quotidien, dans les textiles, les cosmétiques ou l'automobile [35].

- Nouveaux types de batteries.
- Cellules photovoltaïques nouvelle generation.

- Matériaux isolants plus efficaces.
- Isolation thermique.
- Détecteurs de glace sur les ailes d'avion.
- Destruction de tumeurs par chauffages.
- Crèmes solaires transparentes. [36].

I.1.8.1 Le stockage d'énergie :

L'utilisation des nanotubes de carbone dans le stockage des gaz (hydrogène), les NTC pourraient stocker jusqu'à 8% de leur masse en hydrogène [37, 38], sachant que la limite fixée 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.

I.1.8.2 Les capteurs :

Les nanotubes de carbone offrent un grand potentiel de développement de nouvelles méthodes d'imagerie, de mesure et de détection. En exploitant leur grande rigidité mécanique et leur dimension nanométrique, des pointes de microscope à force atomique ont été réalisées à base de nanotubes pour remplacer les pointes pyramidales à base de silicium.

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. [39], 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.

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 SWCNT a été rapporté par Kuzmych et al. [40].

I.1.8.3 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.

La fabrication de circuits logiques et des oscillateurs à base de transistors à effet de champ fabriqués par des NTC a été aussi rapportée par plusieurs auteurs [41, 42].

À cause de leur structure nanométrique, leur forte conductivité électrique, leur stabilité chimique, les nanotubes de carbone 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..

I.1.8.4 Transistors et Ordinateurs :

D'après les travaux de Zhou et al. [43], les SWCNT semi-conducteurs pourraient être utilisés comme canaux de transistors de type MOSFET (Metal Oxide Silicon Field Effect Transistors). On appelle ces derniers des "CNT FET" pour Carbone Nanotube FET. Grâce aux propriétés de transport balistique d'électrons dans les CNT, ce type de transistor permet théoriquement d'atteindre une fréquence de travail de l'ordre du THz [44].

I.1.8.5 Détecteurs :

L'intérêt d'utiliser des NTC comme capteur est de tirer parti de leur grande surface développée et de leur grande conductivité électrique qui permettraient une grande sensibilité de détection [45].

I.1.8.6 Piles :

Une batterie Redox est un dispositif convertissant de l'énergie chimique à partir d'un réactif soluble en énergie électrique de tension continue. L'énergie est stockée ou rendue par réaction électrochimique réversible entre deux couples Red-Ox de potentiels électrochimiques différents en solution.

La densité de puissance d'une cellule est déterminée par le taux de transfert d'électrons à chaque électrode et par la surface totale de ces électrodes. Généralement on utilise des acides forts en solution, les supports d'électrode ont donc besoin d'être très résistants, et de disposer d'une surface d'interaction très grande, d'être de très bons conducteurs et d'être peu coûteux.

Ainsi dans l'article de Rui et al. [46], les auteurs ont été capables de préparer des électrodes à base de NTC présentant une excellente activité électro-catalytique, ceci ayant été favorisé par une fonctionnalisation préalable des NTC avec de l'oxygène, améliorant les propriétés électrochimiques de surface des NTC. Aussi, on a amélioré les performances d'électrodes en nanotubes de carbone multi-parois en les plongeant dans une succession de solutions de KMnO_4 et d'acide citrique [47].

I.1.9 Les nanotubes de nitrure de bore :

Le carbone n'est pas le seul élément avec lequel il est possible de former des nanotubes. D'autres types de matériaux lamellaires tels le nitrure de bore hexagonal (hBN) (voir figure. I.9), le sulfure de tungstène WS_2 et le sulfure de molybdène MoS_2 peuvent également conduire à la formation de

nanotubes. Avant leur première synthèse en 1995, la stabilité des nanotubes de nitrure de bore avait été prédite théoriquement [30]. Par leurs calculs de structure électronique en 1994. L'intérêt grandissant qui est porté aux nanotubes de nitrure de bore est notamment dû au fait que, contrairement aux nanotubes de carbone, les nanotubes de nitrure de bore sont des semi-conducteurs à grand gap (de l'ordre de 5,5 à 6 eV) [26, 30] et que leurs propriétés électroniques sont indépendantes du diamètre et de l'hélicité.

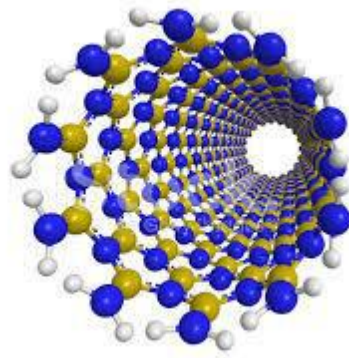


Figure. I.9 : nanotubes de nitrure de bore mono-feuillet

I.1.10. Le nitrure de bore :

Le nitrure de bore (BN) est un composé non naturel qui a été synthétisé pour la première fois en 1842 [32, 33]. Le bore et l'azote étant situés de part et d'autre du carbone dans le tableau périodique, le nitrure de bore et le carbone sont iso électroniques et leurs polymorphes sont similaires. Ainsi, le nitrure de bore existe sous quatre formes polymorphiques : le nitrure de bore hexagonal (équivalent du graphite), le nitrure de bore cubique (équivalent du diamant), le nitrure de bore wurtzitique (équivalent du diamant hexagonal) et le nitrure de bore rhomboédrique, les Mailles élémentaires des différentes phases allotropiques du nitrure de bore.

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

sur la figure 1.9. Le nitrure de bore hexagonal est composé de feuillets d'hexagones de B₃N₃ et sa géométrie est gouvernée par une hybridation sp² [35]. A la périphérie des réseaux hexagonaux, on trouve des groupements NH et B(OH).

Au sein du réseau hexagonal, les liaisons entre les atomes de bore et d'azote consécutifs sont covalentes, et de longueur 1,45 Å. En revanche, les liaisons existant entre les différents feuillets sont nettement plus longues (3,44 Å) car de type Van der Waals.

Le nitrure de bore hexagonal est non toxique et transparent aux micro-ondes. Il est également moins sensible à l'oxydation que le graphite, puisque la température maximale d'utilisation de ce dernier en atmosphère oxydante est de 600°C [31] alors qu'elle est de 850 à 900°C pour le nitrure de bore hexagonal. A température ambiante, le nitrure de bore hexagonal est insoluble dans l'eau [34].

Enfin, contrairement au graphite qui est noir qu'il soit monocristallin ou non, le nitrure de bore hexagonal est transparent quand il est monocristallin et ne présente pas de défauts [36]. La couleur blanche et l'opacité généralement observées sont dues à l'existence de défauts structuraux ou d'impuretés.

Références du chapitre I :

- [1] Iijima S. « Microtubules of graphitic carbon » *Nature* 1991 354, 56.
- [2] Shelimov K.B., Moskovits M. « Composite Nanostructures Based on Template-Grown Boron Nitride Nanotubes » *Chem. Mater.* 2000 12, 250.
- [3] Lourie O.R., Jones C.R., Bartlett B.M., Gibbons P.C., Ruoff R.S., Buhro W.E. « CVD growth of boron nitride nanotubes » *Chem. Mater.* 2000 12, 1808.
- [4] Lee R.S., Gavillet J., Lamy de la Chapelle M., Loiseau A., Cochon J.L., Pigache D., Thibault J., Willaime F. « Catalyst-free synthesis of boron nitride single-wall nanotubes with a preferred zig-zag configuration » *Phys. Rev. B* 2001 64, R121405.
- [5] Ma R., Bando Y., Sato T., Kurashima K. « Thin boron nitride nanotubes with unusual large inner diameters » *Chem. Phys. Lett.* 2001 350, 434.
- [6] Tang C., Bando Y., Golberg D. « Multi-walled BN nanotubes synthesized by carbon-free method » *J. Sol. Stat. Chem.* 2004 177, 2670.
- [7] Tang C., Bando Y., Sato T., Kurashima K. « A novel precursor for synthesis of pure boron nitride nanotubes » *Chem. Commun.* 2002 12, 1290.
- [8] Ma R., Bando Y., Sato T., Kurashima K. « Growth, morphology, and structure of boron nitride nanotubes » *Chem. Mater.* 2001 13, 2965.
- [9] Ma R., Bando Y., Sato T. « CVD synthesis of boron nitride nanotubes without metal catalysts » *Chem. Phys. Lett.* 2001 337, 61.
- [10] Wang X.Z., Wu Q., Hu Z., Chen Y. « Template-directed synthesis of boron nitride nanotube arrays by microwave plasma chemical reaction » *Electrochim. Act.* 2007 52, 2841.
- [11] Terauchi M., Tanaka M., Matsuda H., Takeda M., Kimura K. « Helical nanotubes of hexagonal boron nitride » *J. Electr. Microsc.* 1997 1, 75.
- [12] Terauchi M., Tanaka M., Suzuki K., Ogino A., Kimura K. « Production of zigzag-type BN nanotubes and BN cones by thermal annealing » *Chem. Phys. Lett.* 2000 324, 359.
- [13] Tang C.C., Lamy de la Chapelle M., Li P., Liu Y.M., Dang H.Y., Fan S.S. « Catalytic growth of nanotube and nanobamboo structures of boron nitride » *Chem. Phys. Lett.* 2001 342, 492.
- [14] Tang C.C., Fan S.S., Li P., Liu Y.M., Dang Y. « Synthesis of boron nitride in tubular form » *Mater. Lett.* 2001 51, 315.
- [15] Tang C.C., Ding X.X., Huang X.T., Gan Z.W., Qi S.R., Liu W., Fan S.S. « Effective growth of boron nitride nanotubes » *Chem. Phys. Lett.* 2002 356, 254.
- [16] Cai P., Chen L., Shi L., Yang Z., Zhao A., Gu Y., Huang T., Qian Y. « One convenient synthesis route to boron nitride nanotube » *Sol. Stat. Comm.* 2005 133, 621.
- [17] Bechelany M. « Nouveau procédé de croissance de nanofils base de SiC et de nanotubes de BN. Etude des propriétés physiques d'un nanofil individuel base de SiC. » 2006 Thèse de doctorat
- [18] Chen Y. « Mechanical Alloying and Milling » *Adv. Mater.* 2005 17, 2893.
- [19] Chen Y., Fitz Gerald J., Williams J.S., Bulcock S. « Synthesis of boron nitride nanotubes at low temperatures using reactive ball milling » *Chem. Phys. Lett.* 1999 299, 260.
- [20] Chen Y., Chadderton L.T., Fitz Gerald J., Williams J.S. « A solid-state process for formation of boron nitride nanotubes » *Appl. Phys. Lett.* 1999 74, 2960.
- [21] Chen Y., Chadderton L.T., Williams J.S., Fitz Gerald J. « Solid-state formation of carbon and boron nitride nanotubes » *J. Metast. Nanocryst. Mater.* 1999 8, 63.
- [22] Tang C., Bando Y., Sato T. « Catalytic growth of boron nitride nanotubes » *Chem. Phys. Lett.* 2002 362, 185.
- [23] Bae S.Y., Seo H.W., Park J., Choi Y.S., Park J.C., Lee S.Y. « Boron nitride nanotubes synthesized in the temperature range 1000-1200°C » *Chem. Phys. Lett.* 2003 374, 534.

- [24] FitzGerald J.D., Chen Y., Conway M.J. « Nanotube growth during annealing of mechanically milled boron » *Appl. Phys. A* 2003 76, 107.
- [25] Huo K.F., Hu Z., Chen F., Fu J.J., Chen Y., Liu B.H., Ding J., Dong Z.L., White T. « Synthesis of boron nitride nanowires » *Appl. Phys. Lett.* 2002 80, 3611.
- [26] Chen, Y., FitzGerald J., Williams J.S., Willis P. « Mechanochemical synthesis of boron nitride nanotubes » *J. Metast. Nanocryst. Mater.* 1999 2-6, 173.
- [27] Chen Y., Conway M., Williams J.S. « Large-quantity production of high-yield boron nitride nanotubes » *J. Mater. Res.* 2002 17(8) 1896.
- [28] « One-dimensional nanomaterials synthesized using high-energy ball milling and annealing process » *Sci. Technol. Adv. Mater.* 2006 7, 839.
- [29] Lim S.H., Luo J., Ji W., Lin J. « Synthesis of boron nitride nanotubes and its hydrogen uptake » *Cat. Tod.* 2007 120, 346.
- [30] Han W., Bando Y., Kurashima K., Sato T. « Synthesis of boron nitride nanotubes from carbon nanotubes by a substitution reaction » *Appl. Phys. Lett.* 1998 73, 3085.
- [31] Fuentes G.G., Borowiak-Palen E., Pichler T., Liu X., Graff A., Behr G., Kalenczuk R.J., Knupfer M., Fink J. « Electronic structure of multiwall boron nitride nanotubes » *Phys. Rev. B* 2003 67, 35429.
- [32] Borowiak-Palen E., Rummeli M., Gemming T., Knupfer M., Kalenczuk R.J., Pichler T. « Formation of novel nanostructures using carbon nanotubes as a frame » *Synth. Met.* 2005 153, 345.
- [33] Yu D.P., Sun X.S., Lee C.S., Bello I., Lee S.T., Gu H.D., Leung K.M., Zhou G.W., Dong Z.F., Zhang Z. « Synthesis of boron nitride nanotubes by means of excimer laser ablation at high temperature » *Appl. Phys. Lett.* 1998 72, 1966.
- [34] Wen Z.G., Ze Z., Gang B.Z., Peng Y.D. « Catalyst effects on formation of boron nitride nanotubes synthesized by laser ablation » *Sol. Stat. Comm.* 1999 109, 555.
- [35] Golberg D., Rode A., Bando Y., Mitome M., Gamaly E., Luther-Davies B. « Boron nitride nanostructures formed by ultra-high-repetition rate laser ablation » *Diamond Rel. Mater.* 2003 12, 1269.
- [36] Iijima S. « Microtubules of graphitic carbon » *Nature* 1991 354, 56.
- [37] N.G. Chopra and A. Zettl. Measurement of the elastic modulus of a multi-wall BN-NT. *Solid State Comm.*, 105 :297, 1998.
- [38] A.P. Suryavanshi, M.-F. Yu, J. Wen, C.C. Tang, and Y. Bando. Elastic modulus and resonance behaviour of BN-NTs. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :2527, 2004.
- [39] S.M. Nakhmanson, A. Calzolari, V. Meunier, J. Bernholc, and M. Buongiorno Nardelli. Spontaneous polarization and piezoelectricity in BN-NTs. *Phys. Rev. B*, 67 :235406, 2003.
- [40] D. Sanchez-Portal and E. Hernandez. Vibrational properties of single-wall nanotubes and monolayers of hexagonal BN. *Phys. Rev. B*, 66 :235415, 2002.
- [41] M. Hubacek, M. Ueki, T. Sato, and V. Broiek. High-temperature behaviour of hexagonal boron nitride. *Thermochim. Acta*, 282/283 :359, 1996.
- [42] Y. Chen, J. Zou, S.J. Campbell, and G. Le Caer. BN-NTs : pronounced resistance to oxidation. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :2430, 2004.
- [43] Y.-C. Zhu, Y. Bando, and R.-Z. Ma. Aluminium borate-BN nanocables. *Adv. Mater.*, 15 :1377, 2003.

- [44] R. Arenal, J.L. Cochon, O. Stephan, and A. Loiseau. MWBNNTs fillings by CaB₆.
- [45] S.-H. Jhi and Y.-K. Kwon. Hydrogen adsorption on BN-NTs : a path to room-temperature hydrogen storage. Phys. Rev. B, 69 :245407, 2004.
- [46] Y.-H. Kim, K.J. Chang, and S.G. Louie. Electronic structure of radially deformed BN and BC₃ NTs. Phys. Rev. B, 63 :205408, 2001
- [47] H.F. Bettinger, T. Dumitrica, G.E. Scuseria, and B.I. Yakobson. Mechanically induced defects and strength of BNNTs. Phys. Rev. B, 65 :041406.

Chapitre II

Formulations et calculs

II.1. Les différentes théories :

II.1.1 Le théorème de Bernoulli

Au cours de la déformation, les sections droites restent perpendiculaires à la courbe moyenne, les sections droites restent planes selon Navier-Bernoulli (pas de gauchissement)

L'hypothèse de Bernoulli permet de négliger le cisaillement dans le cas de la flexion : le risque de rupture est alors dû à l'extension des fibres situées à l'extérieur de la flexion, et la flèche est due au moment fléchissant. Cette hypothèse n'est pas valable pour les poutres courtes car ces dernières sont hors des limites de validité du modèle de poutre, à savoir que la dimension des sections doit être petite devant la longueur de la courbe moyenne [1].

Le cisaillement est pris en compte dans le modèle de Timoshenko

L'équation de la courbe de flexion est la suivante :

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

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

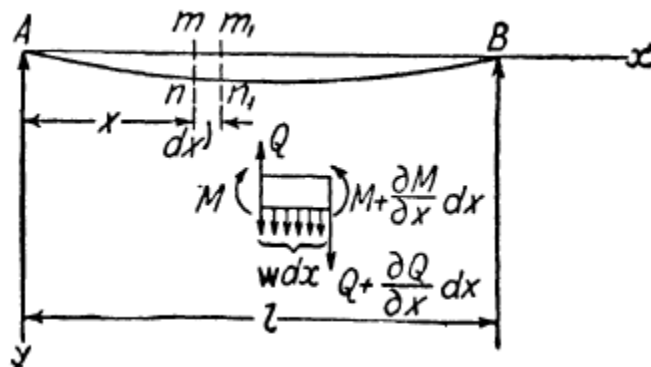


Fig. II.2 -Notation et géométrie d'un élément de la poutre Euler-Bernoulli

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

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

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 la barre vibrante est chargée par des forces d'inertie, dont l'intensité change sur la longueur de la barre et est indiquée par :

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

Où ρ est la masse volumique du matériel, et A est la section.

Substituant l'équation (II.3) à $p(x)$ dans l'équation. (II.2) l'équation générale pour la vibration latérale de la barre 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'une 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)

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

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

II.1.2 Le théorème de Timoshenko

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 poutre pendant qu'elle vibre. Le modèle implique deux équations d'ondes couplées.

La théorie de Timoshenko (ou la théorie épaisse de poutre) explique tous les deux l'effet de la déformation rotatoire d'inertie et de cisaillement, qui est négligée une fois appliqué à la théorie de poutre d'Euler-Bernoulli appelée aussi la théorie mince de poutre [1].

Dans le paragraphe précédent les dimensions 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 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 une barre vibrante est subdivisée par les coupes nodales en parties comparativement courtes.

II .2. Analyse

Les nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT ont un module de Young équivalent, un module de cisaillement, une longueur, un rayon moyen et une épaisseur.

La théorie de déformation au cisaillement des poutres de premier ordre est utilisée pour analyser la réponse de flambement thermique pour les nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT soumis à une élévation de température uniforme. Le champ de déplacement du présent modèle est donné comme suit [2] :

$$u(x, z) = -z \frac{\partial w_b}{\partial x} \quad (\text{II.6})$$

$$w(x, z) = w_b(x) + w_s(x) \quad (\text{II.7})$$

$$\varepsilon_x = -z \frac{\partial^2 w_b}{\partial x^2} \text{ et } \gamma_{xz} = -z \frac{\partial w_s}{\partial x} \quad (\text{II.8})$$

$$\sigma_x - \mu \frac{d^2 \sigma_x}{dx^2} = E \varepsilon_x \quad (\text{II.9.a})$$

$$\tau_{xz} - \mu \frac{d^2 \tau_{xz}}{dx^2} = G \gamma_{xz} \quad (\text{II.9.b})$$

II .3.Équations gouvernantes

Le principe des travaux virtuels du nanotube (nano-poutre) considéré est exprimé par [3-4-5-6-7-8] :

$$\delta U + \delta V = 0 \quad (\text{II.11})$$

δU = l'énergie de déformation virtuelle

δV = le travail virtuel externe en raison de la charge externe appliquée au nanotube.

La variation de l'énergie de déformation du faisceau est la suivante [9-3] ;

$$\delta U = \int_0^L (-M_b \frac{d^2 w_b}{dx^2} + Q \frac{d \delta w_s}{dx}) dx \quad (\text{II.12})$$

Où M_b et Q sont les facteurs de contraintes définis comme suit :

$$M_b = \int_A z \sigma_x dA \quad \text{et} \quad Q = \int_A \tau_{xz} dA \quad (\text{II.13})$$

La variation de l'énergie potentielle pour les charges appliquées peut être écrite comme [4] :

$$\delta V = - \int_0^L N_0 \frac{d(w_b + w_s)}{dx} \frac{d \delta(w_b + w_s)}{dx} dx \quad (\text{II.14})$$

Où N_0 est la charge axiale.

En remplaçant les expressions de δV et δU pour les équations II.12 et II.14 dans l'équation II.11 avec intégration par partie, δw_b et δw_s , on aura les équations suivantes :

$$\delta w_b : \frac{d^2 M_b}{dx^2} - N_0 \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} = 0 \quad (\text{II.15.a})$$

$$\delta w_s : \frac{dQ}{dx} - N_0 \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} = 0 \quad (\text{II.15.b})$$

Lorsque l'effet de déformation du cisaillement est négligé ($w_s=0$), les équations d'équilibre de l'équation (II.15) récupère les dérivés de la théorie des poutres d'Euler-Bernoulli.

En remplaçant l'équation (II.8) dans l'équation (II.9) et les résultats suivants dans l'équation (II.13), les contraintes résultantes sont obtenues comme suit :

$$M_b - \mu \frac{d^2 M_b}{dx^2} = -D \frac{dw_b}{dx^2} \quad (\text{II.16.a})$$

$$Q - \mu \frac{d^2 Q}{dx^2} = -A_s \frac{dw_s}{dx} \quad (\text{II.16.b})$$

$$D = \int_A z^2 E dA \quad (\text{II.17})$$

$$A_s = K_s \int_A G dA$$

Où $s K$ est le facteur de correction de cisaillement utilisé pour compenser l'erreur due à l'hypothèse de la contrainte de cisaillement constante. En remplaçant l'équation (II.16) dans l'équation (II.15), les équations gouvernantes non locales peuvent être exprimées en termes de déplacements (w_s, w_b) comme suit :

$$(D - \mu N_0) \frac{d^4 w_b}{dx^4} + N_0 \left(\frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} - \mu \frac{d^4 w_z}{dx^4} \right) = 0 \quad (\text{II.18.a})$$

$$(N_0 - A_s) \frac{d^2 w_s}{dx^2} + N_0 \left[\frac{d^2 w_b}{dx^2} - \mu \frac{d^4 (w_b + w_z)}{dx^4} \right] = 0 \quad (\text{II.18.b})$$

Les équations gouvernantes de la théorie locale des poutres peuvent être obtenues à partir de l'équation (II.18) en réglant le paramètre d'échelle μ égal à zéro. Pour le présent modèle, l'équation gouvernante non locale pour le flambement de SWBNNT, en considérant les effets thermiques peuvent être réécrits de la manière suivante :

$$(D - \mu N_0) \frac{d^4 w_b}{dx^4} + N_{th} \left(\frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} - \mu \frac{d^4 w_z}{dx^4} \right) = 0 \quad (\text{II.19.a})$$

$$(N_0 - A_s) \frac{d^2 w_s}{dx^2} + N_{th} \left[\frac{d^2 w_b}{dx^2} - \mu \frac{d^4 (w_b + w_z)}{dx^4} \right] = 0 \quad (\text{II.19.b})$$

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

$$N_{th} = \frac{EA}{1-2\nu} \alpha_x T \quad (\text{II.20})$$

Où α_x est le coefficient de dilatation thermique dans la direction de l'axe x, et ν est le rapport de Poisson, T présente le changement de température. Dans le présent travail, on suppose que seule la force axiale due au changement de température existe sur le SWBNNT.

II.4 .Solutions analytiques

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

$$\begin{Bmatrix} w_b \\ w_s \end{Bmatrix} = \sum_{n=1}^{\infty} \begin{Bmatrix} w_{bn} \sin(\beta n) \\ w_{sn} \sin(\beta n) \end{Bmatrix} \quad (\text{II.21})$$

Où w_{bn} , et w_{sn} sont des paramètres arbitraires à déterminer, ω est la fréquence propre associée au mode propre n , et $\beta = \frac{n\pi}{L}$. En remplaçant les expressions de w_b et w_s de l'équation (II.21) dans l'équation (II.19), les solutions de forme fermée peuvent être obtenues à partir des équations suivantes :

$$\left[\begin{Bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{Bmatrix} - \lambda N_{th} \alpha^2 \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \right] \begin{Bmatrix} w_{bn} \\ w_{sn} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (\text{II.22})$$

Ou ;

$$S_{11} = D\beta^4 , \quad S_{12} = 0 , \quad S_{22} = A_s\beta^2 , \quad \lambda = 1 + \mu\beta^2 \quad (\text{II.23})$$

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

$$N_{th} = \frac{S_{11}S_{22}}{\lambda\beta^2(S_{11} + S_{22})} \quad (\text{II.24})$$

La température critique avec la théorie du milieu continu non local peut être écrite de la manière suivante :

$$T_{cr} = \frac{\beta^2 K_s GI(1-2\nu)}{\alpha_x (1 + \mu\beta^2)(\beta^2 EI + K_s GA)} \quad (\text{II.25})$$

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

$$P_{cr} = \alpha_x \frac{AL^2}{I} T_{cr} \quad (\text{II.26})$$

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

Références du chapitre II

Références du chapitre II :

- [1] M. Benouis, Thèse de magistère, « Etude et analyse de l'instabilité des nanotubes en carbone », 2009.
- [2] Bouremana, M., Houari, M.S.A., Tounsi, A., Kaci, A., Adda Bedia, E.A. (2013), "A new first shear deformation beam theory based on neutral surface position for functionally graded beams", *Steel and Composite Structures*, **15(5)**, 467-479.
- [3] Bourada, M., Kaci, A., Houari, M.S.A., Tounsi, A. (2015), "A new simple shear and normal deformations theory for functionally graded beams", *Steel and Composite Structures*, **18(2)**, 409 – 423.
- [4] Bourada, F., Amara, K., Tounsi, A. (2016), "Buckling analysis of isotropic and orthotropic plates using a novel four variable refined plate theory", *Steel and Composite Structures*, **21(6)**, 1287 – 1306.
- [5] Ait Amar Meziane, M., Abdelaziz, H.H., Tounsi, A. (2014), "An efficient and simple refined theory for buckling and free vibration of exponentially graded sandwich plates under various boundary conditions", *Journal of Sandwich Structures and Materials*, **16(3)**, 293 – 318.
- [6] Belabed, Z., Houari, M.S.A., Tounsi, A., Mahmoud, S.R. and Anwar Bég, O. (2014), "An efficient and simple higher order shear and normal deformation theory for functionally graded material (FGM) plates", *Compos. Part B*, **60**, 274-283.
- [7] Ait Yahia, S., Ait Atmane, H., Houari, M.S.A. and Tounsi, A. (2015), "Wave propagation in functionally graded plates with porosities using various higher-order shear deformation plate theories", *Struct. Eng. Mech., Int. J.*, **53(6)**, 1143-1165.
- [8] Bennoun, M., Houari, M.S.A., Tounsi, A. (2016), "A novel five variable refined plate theory for vibration analysis of functionally graded sandwich plates", *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, **23(4)**, 423 – 431.
- [9] Hebali, H., Tounsi, A., Houari, M.S.A., Bessaim, A., Adda Bedia, E.A. (2014), "New quasi-3D hyperbolic shear deformation theory for the static and free vibration analysis of functionally graded plates", *Journal of Engineering Mechanics (ASCE)*, **140**, 374 – 383.
- [10] A .Hadj El Mrabet, Thèse de doctorat, « Analyse des propriétés physique des nanomatériaux à base de nitrure de bore et de carbone », 2016-2017

Chapitre III

Résultats et discussions

Chapitre III Résultats et discussion :**III.1. Résultats numériques et discussion**

Les dimensions et les caractéristiques utilisées dans les résultats numériques des nanotubes de nitrure de bore mono paroi (SWBNNT) à structure zigzag sont les suivantes :

$h = 0.075$ nm (épaisseur de la paroi)

$r = 0.313$ nm (rayon moyen)

$\nu = 0.34$ (Le coefficient de Poisson)

$E = 1.8$ TPa (le module de Young)

$\alpha_x = 1.2 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$

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

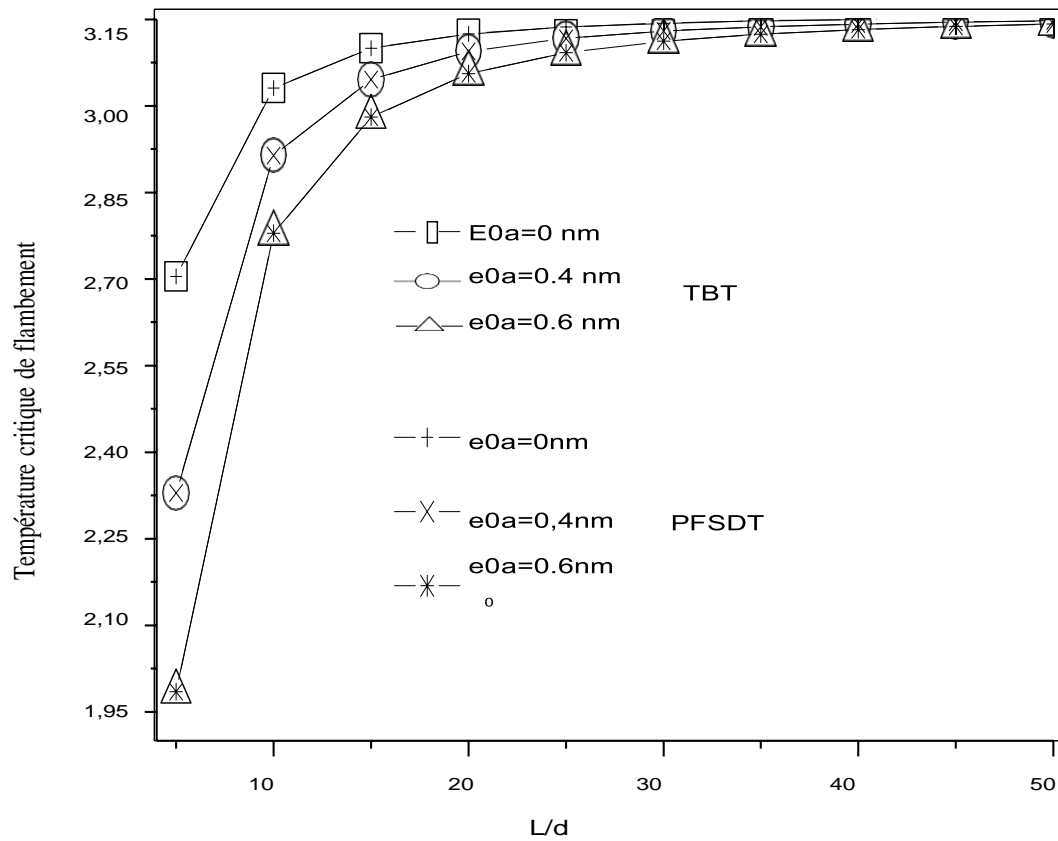


Figure. III. 1. Variation de T_{cr} de flambement non-dimensionnelle et L/d

Pour $0 \leq e_0 a \leq 0.6$ et $n = 1$

- La dépendance de la température de critique de flambement non-dimensionnelle sur le rapport d'élanement des nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT en forme zigzag est également représentée sur la Figure.III.1. Il est constaté que la théorie classique de Timoshenko TBT conventionnel non local et la théorie du premier ordre non local PFSDT annoncent des résultats similaires. On peut conclure des résultats de cette figure qu'une augmentation du paramètre d'échelle non locale produit un décrétement de la température critique de flambement. En outre, on peut voir que lorsque le rapport d'élanement est faible, les effets d'échelle non locale sont significatifs. Cependant, les effets d'échelle non locale sur la température critique de flambement non dimensionnelle diminueront avec l'augmentation du rapport d'élanement. Cela implique que les effets non locaux sur les caractéristiques de flambement thermique ne sont pas évidents pour le nanotube de nitrure de bore mono paroi SWBNNT élané mais devraient être pris en compte pour le nanotube de nitrure de bore mono paroi court.

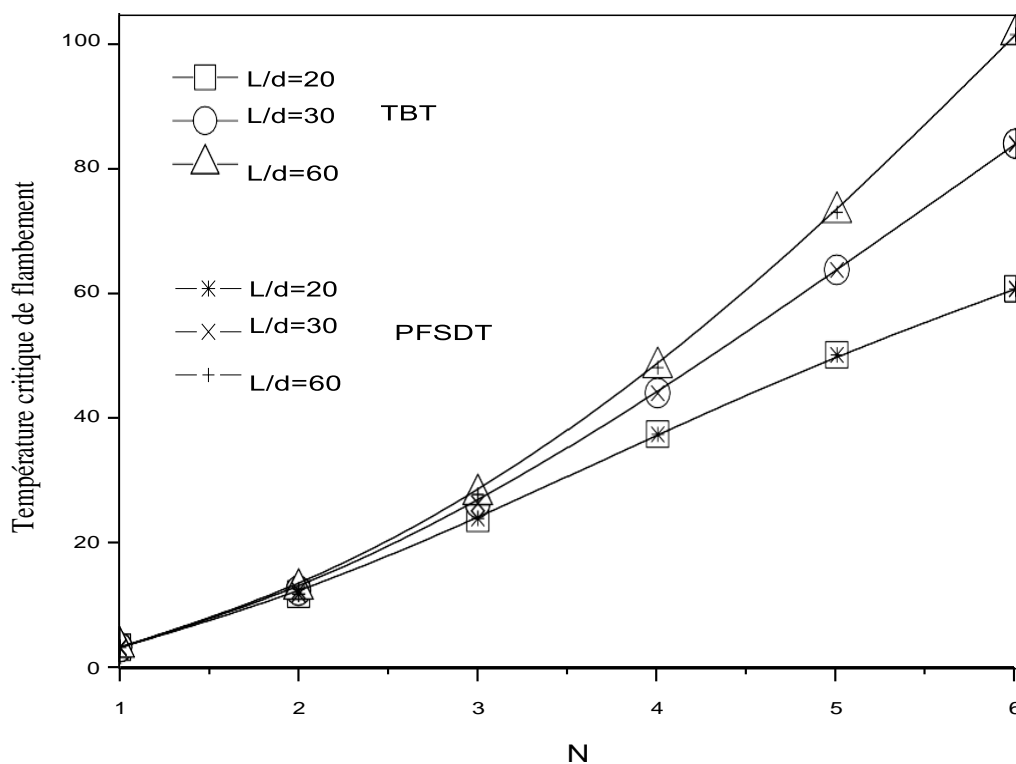


Figure III. 2. Relation entre T_{cr} de flambement et le nombre de mode n

$$20 \leq L/d \leq 50 \quad e_0 a = 0.4 \text{ nm}$$

- La comparaison de la température critique de flambement des nanotubes de nitrure de bore mono paroi (SWBNNT) en forme zigzag avec différents rapports d'élanement pour les six premiers modes basés sur la théorie classique de Timoshenko conventionnelle non locale

et la théorie du premier ordre non local PFSDT est présentée dans la figure.III.2. les deux théories fournissent des résultats identiques. On peut voir que l'effet du rapport d'élanement sur le flambement de la température critique est important aux modes supérieurs et que la diminution du rapport d'élanement réduit la température critique des nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT en zigzag.

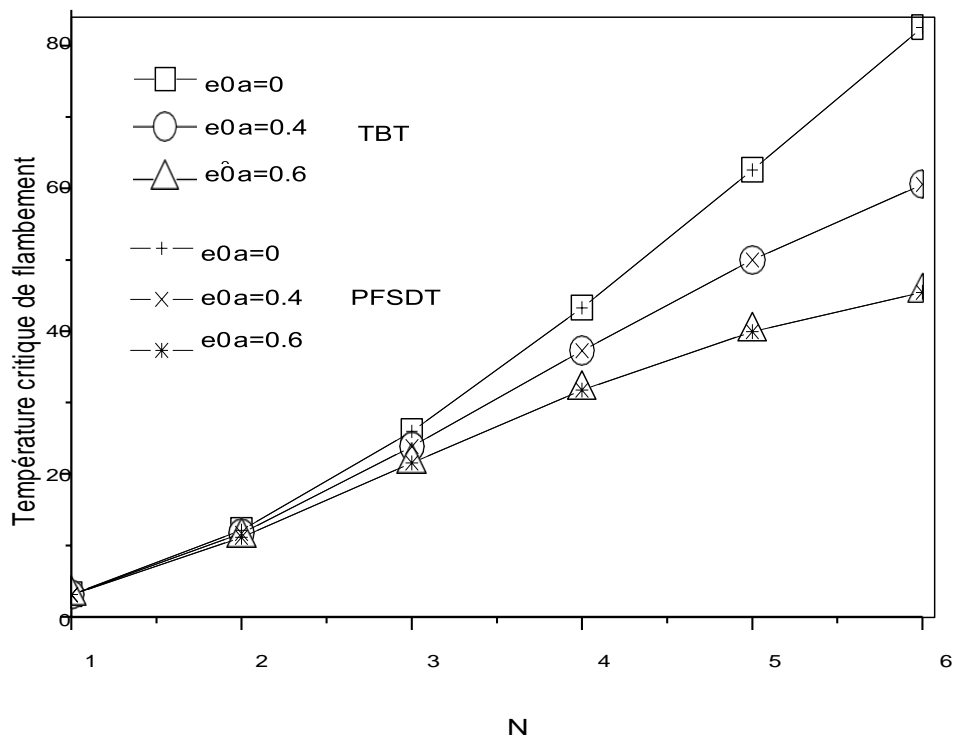


Figure III.3. Relation entre T_{cr} de flambement et le nombre de mode n
 Pour $0 \leq e_0 a \leq 0.6$

- La variation de la température critique en fonction du nombre de mode axial est représentée dans la figure III.3. Les résultats obtenus par la théorie du premier ordre non local (PFSDT) coïncident avec ceux prédits en utilisant la théorie classique de Timoshenko (TBT). On peut voir que les résultats basés sur les théories locales et non locales sont pratiquement les mêmes pour les petits nombres de modes. Cependant, en augmentant le numéro de mode, la différence devient évidente. De plus, on peut observer que l'augmentation du paramètre non local entraîne la diminution de la température critique.

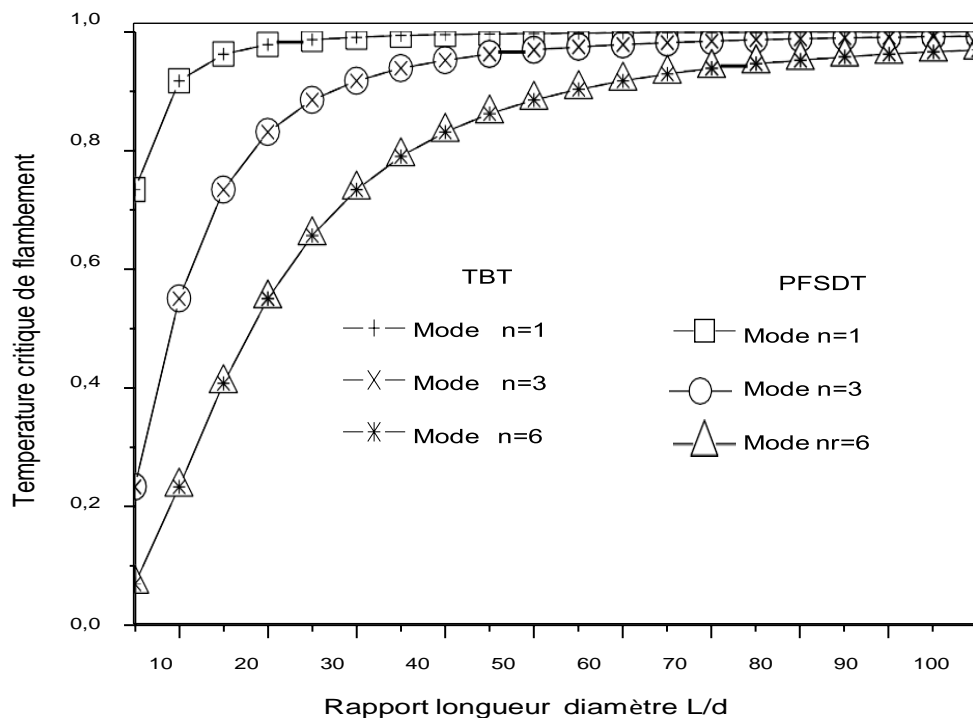


Figure III. 4 : Rapport de la température critique de flambement (TBT PFSDT) pour (EBT) nonlocal en fonction de L/d, pour différente nombre de mode

$$e_0a = 0.6 \text{ nm}$$

- Afin de démontrer les effets de la déformation transversale du cisaillement, la température critique de flambement des nanotubes de nitrure de bore mono paroi SWBNNT (zigzag) par la théorie du premier ordre non local PFSDT et la théorie classique de Timoshenko TBT non local au modèle de poutre Euler-Bernoulli non local avec différents rapports L/d est présentée à la Figure.III.4. On considère les nombre de mode et le paramètre d'échelle 0,6 nm, on peut observer que, pour les différents nombre de mode, tous les rapports sont inférieurs à 1,0. Cela signifie qu'en raison des effets de la déformation transversale du cisaillement, la température critique de flambement de la théorie du premier ordre non local PFSDT, la théorie du premier ordre non local est inférieure à celle du modèle de poutre non local Euler- Bernoulli. Ce phénomène est plus évident pour les nombre de mode plus élevé et pour les nombres de mode plus élevé et pour les rapports L/d plus petits. Cela signifie que les effets de la déformation transversale de cisaillement doivent être considérés et que la théorie du premier ordre non local PFSDT est plus précise pour les nanotubes de nitrure de bore courts.

Conclusion

Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié l'effet thermique des nano-objets, plus précisément, les nanotubes à base de nitrure de bore à l'échelle nanométrique, qui possède des propriétés physiques et mécaniques utilisées dans plusieurs domaines médicaux et industriels.

En se basant sur les principes de la théorie de l'élasticité thermique non locale, on obtient les équations dynamiques des nanotubes de carbone qu'on peut les appliquer sur notre nanotube de nitrure de bore, les effets de la petite échelle, et le changement du nombre de modes de vibrations entre nanotubes de nitrure de bore à simple paroi. Il est clair que la variation de la température critique est significative mais dans la plage de l'échelle nanométrique, donc de un jusqu'à cent nanomètres.

Enfin, nous nous sommes concentrés principalement sur le changement de température et sur l'effet d'échelle

