REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Djillali Liabes, Sidi Bel-Abbes

Faculté de Technologie

Département de Génie Civil et Travaux Publics

Laboratoire des Structures et Matériaux Avancés dans le Génie Civil et Travaux Publics





THÉSE

Pour l'obtention du titre de Docteur en Travaux Publics
Spécialité : Voies et Ouvrages d'Art

Thème :

Modélisation par élément finis à l'échelle atomique des matériaux

Présentée et soutenue publiquement par :

REGUIEG YSSAAD Abdellah

Devant le jury composé de :

BENATTA Mohamed Atif	**M.C.A**	**Président**	**U.D.L de Sidi Bel Abbes**
KROUR Baghdad	**M.C.A**	**Encadreur**	**U.D.L de Sidi Bel Abbes**
BACHIR BOUIADJRA Mohamed	**Professeur**	**Co-encadreur**	**U.D.L de Sidi Bel Abbes**
YEGHNEM Redha	**Professeur**	**Examinateur**	**U. de SAIDA**
HOUARI Mohamed Sid Ahmed	**Professeur**	**Examinateur**	**U. de MASCARA**
BELDJELILI Youcef	**M.C.A**	**Examinateur**	**U.D.L de Sidi Bel Abbes**
ZIANE Noureddine	**Professeur**	**Invité**	**U.D.L de Sidi Bel Abbes**

Année Universitaire 2022-2023

Remerciement

Je suis heureux d'adresser mes plus grands remerciements à mes parents qui ont travaillé dur et veillé sur mon éducation dès mon plus jeune âge, et sans eux, je ne serais pas qui je suis maintenant.

Mes remerciements s'adressent en premier lieu à Monsieur **Baghdad Krour** qui m'a soutenu dans la réussite de ce travail. Je le remercie de m'avoir donné l'envie de développer dans ce monde passionnant qu'est la recherche. Je le remercie également pour les nombreuses discussions, scientifiques ou non, que nous avions partagées tout au long de ma formation doctorale.

Je remercie aussi notre directeur de laboratoire Monsieur **Mohamed Bachir Bouiadjra**. Je le remercie surtout de m'avoir accueilli dans son Laboratoire des Structures et Matériaux Avancés en Génie Civil et Travaux Publics (LSMAGCTP) de l'université Djillali Liabes de Sidi-Bel-Abbes, et qui m'a intégré dans son équipe de recherche je tiens à lui exprimer toute ma gratitude et mon profond respect.

Sans oublier les membres du jury qui ont accepté d'examiner ce travail en Particuliers messieurs **Redha Yeghnem**, **Mohamed Sid Ahmed Houari**, et **Youcef Beldjelili**.

Je remercie l'ensemble des encadreurs et thésard du laboratoire pour les bons moments passés ensembles.

SOMMAIRE

Remerciement 1
SOMMAIRE 2
LISTE DES FIGURES 5
LISTE DES TABLEAUX 8
Résumé 9
Abstract 10
ملخص 11
Introduction générale 12
Chapitre I: Généralité sur les nanostructures de carbone 15
I.1. Graphène : 16
I.2. Nanotubes de carbone: 16
I.3. Nanocônes de carbone: 17
I.4. Les défauts dans les nanostructures de carbone : 18
I.5. Conclusion 20
Chapitre II: Etat de l'art sur les méthodes utilisées pour l'étude des nanostructures de carbone 21
II.1. Introduction 21
II.2. Les fonctions de l'énergie potentielle interatomique (Champ de forces ou Potentiel interatomique) 21
II.2.1. Le potentiel d'élongation des liaisons 22
II.2.2. Le potentiel de la flexion des angles de valence 23
II.2.3. Le potentiel de la torsion des angles dièdres propres et impropres 23
II.2.4. Le potentiel des interactions de van der Waals 24
II.2.5. Le potentiel des interactions électrostatiques 24
II.2.6. Le potentiel multi-corps de l'ordre de liaison 25
II.2.7. Le potentiel multi-corps de Stillinger-Weber 26
II.2.8. Discussion des potentiels rapportés 27
II.3. Revue de littérature sur les différentes méthodes utilisées pour étudier les propriétés mécaniques des nanostructures de carbone 27
II.3.1. Introduction 27
II.3.2. Méthodes expérimentales 28
II.3.3. Méthodes de simulation 28
II.3.3.1. Méthode de la dynamique moléculaire (DM) 29

II.3.3.1.1. Principe de la méthode DM 29
II.3.3.1.2. Les conditions aux limites périodiques 31
II.3.3.1.3. Contrôle du système 32
II.3.3.1.4. Applications et limites de la méthode DM à l'étude des nanostructures de carbone 32
II.3.3.2. La méthode des éléments finis classique (MEF) basée sur la mécanique des milieux continus (MMC) 33
II.3.3.2.1. Le principe de la mécanique des milieux continus (MMC) 33
II.3.3.2.2. Les applications de la MEF classique au domaine des nanostructures de carbone 35
II.3.3.2.3. Les limites de la méthode 35
II.3.3.3. La méthode des éléments finis (MEF) basée sur l'équivalence entre la mécanique moléculaire (MM) et la mécanique des structures (MS) 35
II.3.3.3.1. La MEF basée sur un élément de type « poutre en 3D » 36
A) Principe de la méthode MEF- Poutre 3D 36
B) Applications et limites de la méthode MEF- Poutre 3D 38
II.3.3.3.2. La MEF basée sur des éléments de ressort (SPFEM) 38
A) Principe de la méthode SPFEM 38
B) Applications et limites de la méthode SPFEM 39
II.3.3.4. La méthode des éléments finis atomiques (AFEM) 40
II.3.3.4.1. Principe de la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) 40
II.3.3.4.2. Applications et limites de la méthode AFEM 41
II.3.3.5. Autres méthodes de simulation 42
II.4. Conclusion 42
Chapitre III: Formulation de la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) 44
III.1. Introduction 44
III.2. Formulation AFEM en une dimension (1D) 44
III.2.1 Modélisation des interactions locales 44
III.2.2. Modélisation des interactions non locales 47
III.3. Formulation AFEM en deux dimension (2D) 49
III.3.1. Les interactions locales décrites par le potentiel à deux corps 49
III.4. Vérification de l'exactitude de la méthode AFEM 51
III.4.1. Problème en une dimension (1D) 51
III.4.2. Problème en deux dimensions (2D) 52
III.4.3. Le temps de calcul de la méthode AFEM 53
III.5. Conclusion 54

Chapitre IV: Développement d'un modèle AFEM non linéaire approprié pour étudier les propriétés mécaniques du graphène vierge et en présence de certaines formes de nanopores 56

IV.1. Introduction 56

IV.2. Le potentiel interatomique proposé 56

A) Potentiel de Stillinger Weber 56

B) Les critères mécaniques du potentiel proposé 57

IV.3. Développement d'un modèle AFEM basé sur le potentiel proposé 58

IV.4. Formulation du problème non linéaire 62

IV.5. Vérification de l'exactitude du modèle développé 63

IV.6. L'effet des formes de nanopores sur les propriétés mécaniques du graphène 67

IV.7. Conclusions 71

Chapitre V: Développement d'un nouveau modèle AFEM non linéaire approprié à l'étude des propriétés élastiques des nanocônes de carbone vierges et imparfaits 73

V.1 Introduction 73

V.2. Le potentiel interatomique proposé 74

V.3. Développement d'un nouvel élément AFEM basé sur le potentiel proposé 75

V.4. Validation du modèle proposé 78

V.5. Investigation de l'effet des imperfections sur les propriétés élastiques des CNCs 80

V.6. Conclusion 82

Conclusions générales 84

Références bibliographique 85

LISTE DES FIGURES

Chapitre I

Figure (I.1) : Classification des nanostructures de carbone en fonction de leurs dimensions. 15

Figure (I.2) : Illustration de la structure armchaire, chiral et en zigzag des CNTs (à gauche) et le schéma de la formation de nanotubes par l'enroulement d'une feuille de graphène (à droite) [20]. 17

Figure (I.3): Illustration de la structure de CNC, où R_S, R_L, L et α sont le petit rayon, le grand rayon, la longueur et l'angle au sommet de la CNC. 18

Figure (I.4): Les défauts les plus courants dans les nanostructures de carbone..... 19

Chapitre II

Figure (II.1): Illustration de la majorité des interactions induites dans les nanostructures. ... 22

Figure (II.2): Schéma d'une structure constituée des liaisons covalentes, tel que la résistance de la liaison interatomique (ij) est affectée par les autres liaisons liées avec elle à travers les angles de valence θ_{ijs_1}, θ_{ijs_2}, θ_{jif_1} et θ_{jif_2} 26

Figure (II.3): Représentation des étapes impliquées dans la dynamique moléculaire. 30

Figure (II.4): Illustration des conditions aux limites périodiques en deux dimensions. 31

Figure (II.5): Les modes de déformations de l'élément poutre tel que : (a) déformation axiale, (b) rotation de la flexion (c) rotation de la torsion. Extrait de la référence [98]. 37

Figure (II.6): Illustration des modèles utilisés à la méthode SPFEM, (a) la liaison C-C, (b) élément ressort élastique non linéaire axial et (c) élément ressort de torsion élastique linéaire. Extrait de la référence [103]. 39

Chapitre III

Figure (III.1): Illustration de la structure unidimensionnelle composée de cinq atomes. 44

Figure (III.2): AFEM à trois atomes pour modéliser l'effet local des atomes voisins. 45

Figure (III.3): Elément AFEM à cinq atomes pour modéliser l'effet local et non local avec les atomes voisins. 48

Figure (III.4): Structure bidimensionnelle constituée d'un réseau triangulaire d'atomes. Cette figure est de la référence [118]. 49

Figure (III.5): Représentation en 2D d'un élément AFEM à sept atomes. Extrait de la référence [118]. 50

Figure (III.6): Illustration d'une structure unidimensionnelle composée de sept atomes. La figure a été extraite de l'article [118]. 51
Figure (III.7): a) Le comportement Force-déformation, b) Nombre des itérations dans AFEM, c) l'erreur relative entre DM et AFEM. Cette figure est extraite de la référence [118]. 52
Figure (III.8): Structure bidimensionnelle sous forme d'un réseau des triangles en 2D exposée à un test de traction. Cette figure extrait de l'article [118]. 53

Chapitre IV

Figure (IV.1): Représentation du terme de l'énergie de l'élongation des liaisons interatomiques décrit par le potentiel de Stillinger-Weber (ligne noire pointé) et sa première dérivée (ligne rouge continue) en fonction de la longueur de la liaison interatomique. 57
Figure (IV.2): a)Illustration de la structure du graphène, b) l'élément AFEM de base dans la modélisation du graphène par la méthode présente. 58
Figure (IV.3): Représentations des rotations des angles de valence possibles dans l'interaction de l'atome i avec ses atomes voisins. 60
Figure (IV.4): Les éléments AFEM modifiés selon la particularité des atomes de bords du graphène. (i) est l'atome central de l'élément AFEM. 62
Figure (IV.5): Illustration de la feuille de graphène étudiée sous l'effet (a) un essai de traction dans la direction Armchair (AR), (b) un essai de traction dans la direction zigzag, (c) un essai de cisaillement. 64
Figure (IV.6): Courbes de contraintes-déformations obtenues en utilisant les deux méthodes AFEM et MD pour le graphène vierge étudié dans les deux essais (a) Traction dans la direction AR et (b) Traction dans la direction ZZ. 65
Figure (IV.7): Illustration de différentes formes de nanopores modélisées dans cette étude telles que (a), (c) et (e) sont les nanopores rectangulaires, en diamant et hexagonaux placés le long de la direction AR, tandis que (b), (d) et (f) sont les mêmes nanopores placés le long de la direction ZZ. 68
Figure (IV.8): Les propriétés élastiques du graphène nanoporeux en fonction du taux de vide (VR), où (a) et (b) le module d'Young dans les directions (EAR) et (EZZ), (c) le coefficient de Poisson (υ) et (d) le module de cisaillement (G). 70
Figure (IV.9): La résistance du graphène avec différentes formes de nanopores par rapport au taux de vide (VR) sous (a) la charge de traction AR, (b) la charge de traction ZZ et (c) la charge de cisaillement. 71

Figure (IV.10): Déformation de rupture du graphène en présence de différentes formes de nanopores sous (a) la charge de traction dans la direction AR, (b) la charge de traction dans la direction ZZ et (c) la charge de cisaillement. 72

Chapitre V

Figure (V.1): Illustration schématique de la structure du CNC construite dans cette étude, où R_S, R_L, L et α sont le petit rayon, le grand rayon, la longueur et l'angle au sommet de la CNC. 73

Figure (V.2): Les interactions les plus dominantes entre les atomes de la structure du CNC. 75

Figure (V.3): Illustration d'un atome de carbone interagit avec dix-huit atomes voisins à travers le terme de torsion des angles dièdre dans la structure du CNC, cette structure est un élément AFEM de base pour le modèle présent. 76

Figure (V.4): Illustration de la présente structure du CNC soumise au test de traction. Les atomes en colorés en jaune sont fixés, et les atomes colorés en rouge sont chargé. 78

Figure (V.5): Variation du module d'Young par rapport à la longueur de CNC, avec $\alpha=19.2^{o}$ et $\alpha=38.9^{o}$ en utilisant la présente AFEM et la méthode MM-FEM de la référence [130]. 79

Figure (V.6): Variation du module d'Young par rapport au rayon petit du CNC en utilisant le modèle AFEM présent et la méthode DM de la référence [129]. 80

Figure (V.7): Représentation du module d'Young moyen en fonction du pourcentage d'imperfections pour les trois types de CNC modélisés dans cette étude. 81

LISTE DES TABLEAUX

Chapitre IV

Tableau (IV.1): Comparaison des propriétés mécaniques prédites par AFEM présente et celles rapportées dans la littérature. 66

Chapitre V

Tableau (V.1): Comparaison entre le module d'Young du CNC prédit par le présent AFEM et celui rapporté dans la littérature. 79

Résumé

L'émergence de la nanotechnologie a permis l'avancement de plusieurs domaines de la science et de l'ingénierie, notamment le génie civil, grâce à ses approches et techniques basées sur l'information à l'échelle atomique.

Par ailleurs, en génie civil, les nanomatériaux sont devenus très répondus pour le renforcement, la réparation et le développement des nouveaux matériaux de construction. Dans cet égard, les nanomatériaux de carbone, notamment le graphène, les nanotubes et les nanocones de carbone ont pris la plus grande part des études en raison de leurs propriétés attrayantes. Cependant, les propriétés mécaniques de ces nanostructures peuvent être affectées en présence de défauts inévitables dans leur fabrication, ce qui nécessiterait de les étudier afin de les traiter ou de les utiliser correctement. Par conséquent, plusieurs études ont été menées dans cet axe dont la plupart ont eu recours à des méthodes de simulation à cause de la complexité et du cout élevé de la réalisation des expériences à l'échelle nanométrique.

Dans ce travail, les propriétés mécaniques du graphène et des nanocones de carbone vierges et en présence de certains défauts spécifiques sont étudiées en utilisant la simulation numérique à travers la méthode des éléments finis atomiques (AFEM). Pour cela, des nouveaux modèles atomiques sont développés en se basant sur l'approche de la mécanique moléculaire (MM) et la procédure de la méthode des éléments finis classique (MEF) dans le but d'améliorer la précision et la stabilité de la simulation par la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) ce qui démontrent notre principale contribution. Ensuite, ces modèles sont utilisés pour étudier les propriétés mécaniques du graphène sous l'effet de différentes formes de nanopores, puis étudier le pourcentage des imperfections dans les nanocones de carbone imparfaits.

En effet, les résultats de ce travail montrent l'efficacité et la rapidité de la méthode AFEM présente dans l'étude des propriétés mécaniques des nanostructures de carbone et peut ainsi constituer une nouvelle technique de simulation dans l'étude de nanomatériaux complexes tels que le silicate, en plus de l'investigation des défauts pouvant survenir dans ces nanomatériaux.

Mots clés : Méthode des éléments finis atomiques, propriétés mécaniques, graphène, nanocone de carbone, potentiel interatomique, défauts.

Abstract

In the recent years, the emergence of the nanotechnology has led to the advancement of several fields of science and engineering, especially civil engineering, thanks to its approaches and techniques based on information at the atomic scale. In civil engineering, nanomaterials have become very attractive for the reinforcement, repair and development of new construction materials. In this regard, carbon nanomaterials including graphene, carbon nanotubes (CNTs), and carbon nanocones (CNCs) have taken the largest share of studies due to their attractive properties. However, the mechanical properties of these nanostructures can be affected in the presence of inevitable defects during their fabrication, which would require studying them in order to process them or use them correctly. Consequently, several studies have been carried out in this area, most of which have used simulation methods because of the complexity and high cost of carrying out experiments at the nanometric scale.

In this work, the mechanical properties of the pristine graphene and carbon nanocones and in the presence of special defects are studied using the numerical simulation through the atomic finite element method (AFEM). For this, new atomic models are developed based on the molecular mechanics approach (MM) and the procedure of the classical finite element method (MEF) in order to improve the accuracy and stability of the simulation using the atomic finite element method (AFEM) which demonstrates our main contribution in this thesis. Then, these models are used to study the mechanical properties of graphene under the effect of different nanopore shapes, and then study the imperfections percentages in the imperfect carbon nanocones.

Indeed, the present results demonstrate the efficiency and the speed of the present AFEM to study of the mechanical properties of carbon nanostructures and can thus constitute a new simulation technique in the study of complex nanomaterials such as silicate, in addition to the investigation of defects that may occur in these nanomaterials.

Keywords: Atomic finite element method, mechanical properties, graphene, carbon nanocone, interatomic potential, defects.

ملخص

أدى ظهور تقنية النانو إلى تقدم العديد من مجالات العلوم والهندسة، وخاصة الهندسة المدنية، بفضل مناهجها وتقنياتها القائمة على المعلومات المتوفرة على المستوى الذري.

في مجال الهندسة المدنية، أصبحت المواد النانوية محط الكثير من أنظار الباحثين والمهندسين من أجل تعزيز وإصلاح مواد البناء التقليدية وتطوير مواد بناء الجديدة. في هذا الصدد، استحوذت المواد النانوية الكربونية بما في ذلك الجرافين، الأنابيب النانوية الكربونية والمخروطات النانوية الكربونية على القسط الأكبر من الدراسات نظرًا لخصائصها الجذابة.

رغم كل هذه المميزات، يمكن أن تتأثر الخواص الميكانيكية لهذه الهياكل النانوية في ظل وجود عيوب لا مفر منها أثناء عملية التصنيع، الأمر الذي يتطلب دراستها لمعالجتها أو استخدامها بالشكل الصحيح.

نتيجة لذلك، تم إجراء العديد من الدراسات في هذا الصدد، حيث استخدم معظمها طرق المحاكاة بسبب التعقيد والتكلفة العالية لإجراء التجارب على أرض الواقع.

في هذا العمل تمت دراسة الخواص الميكانيكية للجرافين والمخروطات النانوية الكربونية البكر وفي وجود بعض العيوب الخاصة باستخدام المحاكاة العددية من خلال طريقة العناصر المحدودة الذرية (AFEM). لهذا الغرض، تم تطوير نماذج ذرية جديدة بناءً على نهج الميكانيكا الجزيئية (MM) وخطوات طريقة العناصر المحدودة الكلاسيكية (MEF) من أجل تحسين دقة واستقرار المحاكاة بواسطة طريقة العناصر المحدودة الذرية (AFEM) مما يوضح مساهمتنا الرئيسية في هذا المحور من البحث.

بعد ذلك، يتم استخدام هذه النماذج المطورة لدراسة الخصائص الميكانيكية للجرافين تحت تأثير الأشكال المختلفة من المسام النانوية، ثم دراسة النسب المئوية للعيوب في مكوّنات الكربون النانوية غير الكاملة.

في الواقع، تظهر نتائج هذا العمل كفاءة وسرعة طريقة AFEM الموجودة في دراسة الخواص الميكانيكية للبنى النانوية الكربونية وبالتالي يمكن أن تشكل تقنية محاكاة جديدة في دراسة المواد النانوية المعقدة مثل السيليكات، بالإضافة إلى التحقيق في العيوب التي قد تحدث في هذه المواد النانوية.

الكلمات المفتاحية: طريقة العناصر المحدودة الذرية، الخواص الميكانيكية، الجرافين، المخروط النانوي الكربوني، الطاقة الكامنة بين الذرات، العيوب.

Introduction générale

À l'échelle de l'observateur, les matériaux présentent des structures et comportements complexes et continus qui peuvent être révélés en utilisant des outils expérimentaux simples et disponibles ou par des méthodes numériques basées sur les hypothèses de la mécanique des milieux continus (MMC). Néanmoins, les informations extraites à cette échelle peuvent souffrir de manque de précision à cause de la simplification de leurs hypothèses. Un tel obstacle a entravé l'avancement des matériaux au cours des dernières décennies jusqu'à ce que le concept de nano-ingénierie apparaisse. À une échelle très fine (de l'Angströms où 1 Å=10^{-10} m), tous les matériaux malgré leurs comportements différents sont constitués de l'unité fondamentale qui est l'atome. Ainsi, la connaissance du comportement des atomes dans le matériau peut donner des informations essentielles sur ses propriétés macroscopiques et cela peut aider à prévoir et traiter les problèmes de déformations, de défauts et de rupture à leur origine. De plus, le développement des nouveaux matériaux ou d'améliorer les matériaux existants est devenu lié au développement de la nanotechnologie qui est basée sur des concepts et des outils expérimentaux et de simulation à l'échelle nanométrique (1nm =10^{-9} m).

En nanoscience, l'étude peut aller loin jusqu'à une longueur égale à la distance atomique de quelques Angströms, dans ce cas on est à l'échelle atomique, à partir de 1nm jusqu'à 100 nm on est à l'échelle nanométrique. Toutefois, les deux échelles sont chevauchées dans la plupart des études en négligeant la structure interne de l'atome (son noyau et ses électron) qui peut être traitée par l'approche de la mécanique quantique (Quantum Mechanics (QM)).

Au cours des dernières années, les techniques de simulation à l'échelle atomique ont été développées de manière significative dans le domaine de génie civil en réponse à la demande croissante de matériaux de construction améliorants avec des performances satisfaisantes et des dégradations retardées, en plus de la difficulté de réaliser les expériences à cette échelle. Parmi les méthodes de simulation les plus utilisées dans l'étude des matériaux à l'échelle atomique on peut citer la méthode de la dynamique moléculaire (DM) en raison de sa précision à la description du comportement des atomes au cours du temps. Néanmoins, l'approche par dynamique moléculaire a une limite à la fois en échelle de temps et en échelle de longueur et ne peut atteindre que quelques micromètres à l'aide de supercalculateurs, et n'est donc pas adaptée à l'étude des matériaux de construction car ils sont toujours à grande échelle et leurs performances à long terme sont toujours la clé de la conception durable [1]. En revanche, la méthode des éléments finis donne une solution acceptable à l'échelle macroscopique, mais elle reste souffrir de manque de précision pour décrire les mécanismes de déformations et parfois incapable de détecter et de décrire les phénomènes de fissuration et de défauts qui nécessitent des informations du monde discret existant entre les atomes. Pour résoudre le problème du manque de précision et d'informations réelles à l'échelle macroscopique et la limitation du temps et de longueur à l'échelle atomique, un couplage entre l'approche de la mécanique continue (MMC) et l'approche de la mécanique moléculaire (MM) a devenu nécessaire dans la plupart des études dans ces dernières années. Par exemple, le couplage entre la méthode de la dynamique moléculaire et la méthode des éléments finis (DM-MEF) a été utilisé dans certaines études des matériaux composites [2][3][4][5] en montrant des résultats plus importants. Bien que ces résultats, le couplage entre DM et MEF peut être parfois difficile en raison de la réflexion d'ondes transféré du modèle atomique vers le modèle macroscopique [6]. D'autre

part, une autre formulation puissante de la méthode des éléments finis à l'échelle atomique en utilisant l'approche de la mécanique moléculaire (MM) a été développée par Liu et al. [7]. Cette nouvelle méthode (AFEM) a facilité l'application de la MEF pour étudier des systèmes d'atomes dans un temps très rapide par rapport à la dynamique moléculaire, en plus de sa souplesse au couplage avec la MEF de l'échelle macroscopique. La méthode des éléments finis atomiques (AFEM) est encore récente dans son application, ayant été limitée à l'étude de certaines structures atomiques simples [8]. Une recherche bibliographique sur les avantages, les applications et les limites de cette méthode nous motivé à apporter des contributions pour l'enrichir et de faire notre marque dans cet axe de recherche.

D'autre part, parmi les réalisations remarquables dans le domaine des nanotechnologies figure la découverte et la synthèse de nanomatériaux qui ont montré de meilleures propriétés physiques, chimiques et mécaniques par rapport aux matériaux conventionnels. Ces nouveaux matériaux sont définis selon la commission européenne comme un matériau naturel, formé accidentellement ou manufacturé, contenant au moins 50% des particules dont leurs tailles comprissent entre 1 nm et 100 nm. D'ailleurs, les nanomatériaux de carbone ont suscité un grand intérêt dans tous les domaines, y compris le génie civil, grâce aux propriétés électriques, thermiques et mécaniques exceptionnelles. Par exemple, les nanotubes de carbone et le graphène ont largement utilisés dans le renforcement des matériaux de construction comme le béton, le ciment, l'acier et le bitume et comme des matériaux à faible entretien et respectueux de l'environnement [9]. La fabrication de ces nanomatériaux peut produire des défauts incontournables qui peut affecter leur performance et notamment leur comportement mécanique. À cet égard, plusieurs travaux ont été réalisé sur les différents types de défauts existants dans les nanostructures de carbone que nous aborderons dans cette thèse afin de nous situer dans cet axe de rechercher et d'apporter notre contribution.

Notre but de cette thèse est de passer en revue les méthodes les plus utilisées dans l'étude du comportement des matériaux à l'échelle macroscopique et atomique en mettant en évidence la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) qui sert comme la méthode de base dans notre travail. Ensuite, nous essayons de développer de nouveaux modèles atomiques afin d'améliorer l'efficacité de la méthode AFEM dans l'étude des nanostructures de carbone, en particulier le graphène et les nanocônes de carbone puis les nanomatériaux en générales, ce qui constitue l'objectif principal de cette thèse. De plus, nous enrichirons notre travail en étudiant l'effet de différentes formes, tailles et orientations de nanopores sur les propriétés mécaniques du graphène en utilisant la présente méthode AFEM. Le dernier objectif de cette thèse est d'étudier l'effet de pourcentage des imperfections sur les propriétés élastiques des nanocônes de carbone en se basant sur une analyse aléatoire conduite dans notre algorithme AFEM.

Cette thèse est structurée de la manière suivante :

Le premier chapitre a été dédié à une vue générale sur les différentes nanostructures de carbone en se concentrant sur les structures de graphène et de nanocônes de carbone, terminant le chapitre par une revue sur les défauts existants dans ces nanostructures. Le deuxième chapitre est une recherche bibliographique sur les méthodes expérimentales et numériques les plus couramment utilisées pour l'étude des nanostructures de carbone, de sorte que nous discuterons des avantages et des limites de telles méthodes afin de justifier notre choix de la méthode des éléments finis (AFEM). Le troisième chapitre est consacré à l'explication de la formulation de la méthode des éléments finis atomiques en une dimension (1D) puis en deux dimensions (2D)

terminant le chapitre par une conclusion dans laquelle nous montrerons le problème tridimensionnel (3D). Dans le quatrième chapitre, nous essaierons de développer un modèle AFEM composé de dix atomes dont la capacité est de décrire les interactions entre les atomes de carbone de type « élongation des liaisons covalentes » et « flexion des angles de valence », puis nous étudierons l'effet de la forme, de la taille et de l'orientation des nanopores sur les propriétés élastiques et de rupture du graphène. Dans le dernier chapitre, nous développerons un autre modèle AFEM constitué de dix-neuf atomes capable de détecter les interactions de type « torsion des angles dièdres » en plus des deux types d'interactions susmentionnées afin d'étudier les propriétés élastiques des nanocônes de carbone (CNC), ensuite nous finirons notre travail par une analyse aléatoire de l'effet de différents pourcentages d'imperfections sur les propriétés élastiques des CNC. Enfin, une conclusion générale est dressée dans laquelle nous résumons le jus de notre travail et quelques perspectives qui peuvent être un prolongement de ce travail.

Chapitre I

Généralité sur les nanostructures de carbone

Dans le domaine de la nanotechnologie, les nanostructures de carbone sont les plus appréciées par les scientifiques en raison de leurs diverses propriétés électroniques, optiques, magnétiques et mécaniques inhérentes [10–12]. Leur polyvalence chimique, leur facilité de synthèse et leur biocompatibilité les ont rendus applicables dans divers domaines tels que le Génie civil, l'électromécanique, la médecine, le génie biomédical [13,14], et autres domaines [15].

Les nanomatériaux de carbone présentent une grande diversité de structures, en raison de leur forte capacité de formation de liaisons covalentes avec d'autres atomes. Par conséquent, la structure en carbone existe sous plusieurs formes appelées allotropies de carbone. Les formes allotropiques les plus populaires de nanomatériaux de carbone sont le nanodiamant, le graphène, le carbone amorphe, le fullerène C_{60}, les nanotubes de carbone (CNT), les oignons de carbone, les nanocônes de carbone (CNC) et les points quantiques de carbone (voir la figure (I.1)). Il existe plusieurs façons de classer les nanomatériaux de carbone, dont la plus célèbre est son classement par dimension comme suit :

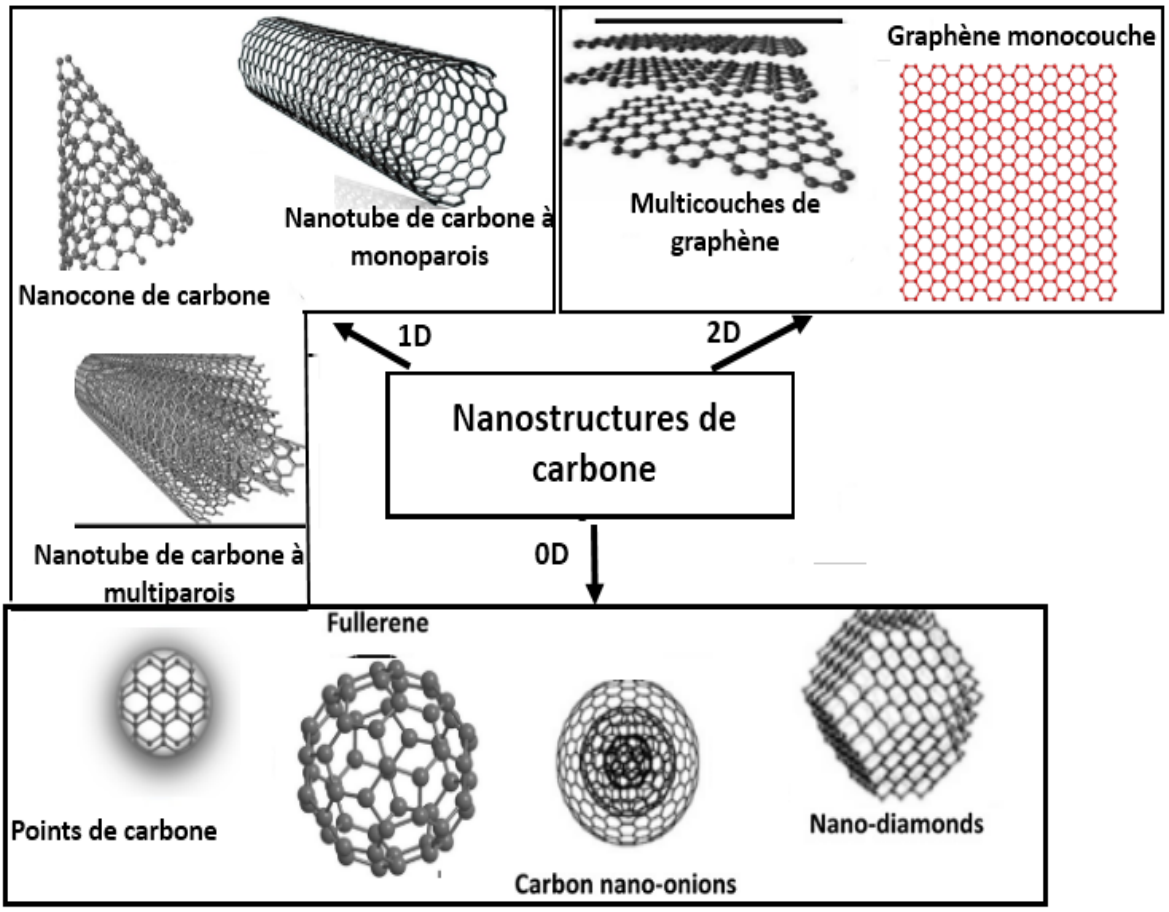


Figure (I.1) : Classification des nanostructures de carbone en fonction de leurs dimensions.

Zéro Dimension (0-D) : Fullerènes, oignon de carbone, points de carbone (CD), et nanodiamants.

Une dimension (1-D) : Nanotube de carbone (CNT), nanocône de carbone (CNC), nanofibres de carbone.

Deux dimensions (2-D) : Graphène, nanoribbans de graphène (GNR), graphènes à quelques couches.

Dans ce chapitre, nous nous intéresserons aux structures du graphène et du nanocône de carbone (CNC) qui serviront de points de base pour apporter nos contributions dans cet axe de recherche.

I.1. Graphène :

Le graphène est une feuille d'anneaux hexagonaux constitués d'atomes de carbone liés de manière covalente et répartis sous forme bidimensionnelle (voir la figure (I.1)). Ce nouveau matériau est obtenu en utilisant la technique d'exfoliation telle que rapportée par Novoselov et al. [16].

Plusieurs travaux ont révélé les excellentes propriétés du graphène, comme la résistivité électrique, la conductivité thermique et les propriétés mécaniques qui ont montré qu'il est 200 fois plus résistant et 5 fois plus dur que l'acier, en plus de sa légèreté, ces caractéristiques le rendaient plus demandé dans de nombreux domaines comme le génie civil [11,17], l'électromécanique [18] et d'autres domaines de recherche [19]. Dans le domaine du génie civil, certaines entreprises développent actuellement des matériaux de coulis de ciment thermoconducteurs contenant du graphène pour les puits géothermiques, ainsi que des ciments contenant des adjuvants de graphène plus résistants mécaniquement. De plus, le graphène peut être utilisé pour améliorer les propriétés de l'asphalte pour plus de résistance à la chaleur et des routes durables, avec une accumulation de récupération élastique et une fissuration réduite, ainsi qu'une résistance au feu. Concernant ces propriétés séduisantes, plusieurs études expérimentales et numériques ont été menées. Ces études seront abordées dans le chapitre suivant.

I.2. Nanotubes de carbone:

On peut modéliser le nanotube de carbone (CNT en anglais) par l'enroulement d'une feuille de graphène sur elle-même (voir la figure (I.2)). Cette feuille de graphène présente une structure de type nid d'abeille, dont on peut donner deux vecteurs directeurs, $\vec{a}_1$ et $\vec{a}_2$. On définit ensuite le vecteur de chiralité C_h comme:

$$C_h = n \cdot \vec{a}_1 + m \cdot \vec{a}_2 \qquad \text{(I.1)}$$

Où n et m sont les nombres de pas le long des liaisons en zigzag, qui permettent de nommer un nanotube tout en caractérisant sa chiralité selon lesquelles on peut définir trois types de nanotubes de carbone:

- (n,0) indique le CNT de type zigzag.
- (n,n) indique le CNT de type chaise (armchaire en anglais) ;
- (n, m) tel que n≠m indique le CNT de type chiral .

Selon le nombre de feuilles de CNT, on distingue deux types de CNT, les nanotubes à simple paroi (SWCNT) et les nanotubes à multi-parois (MWCNT).

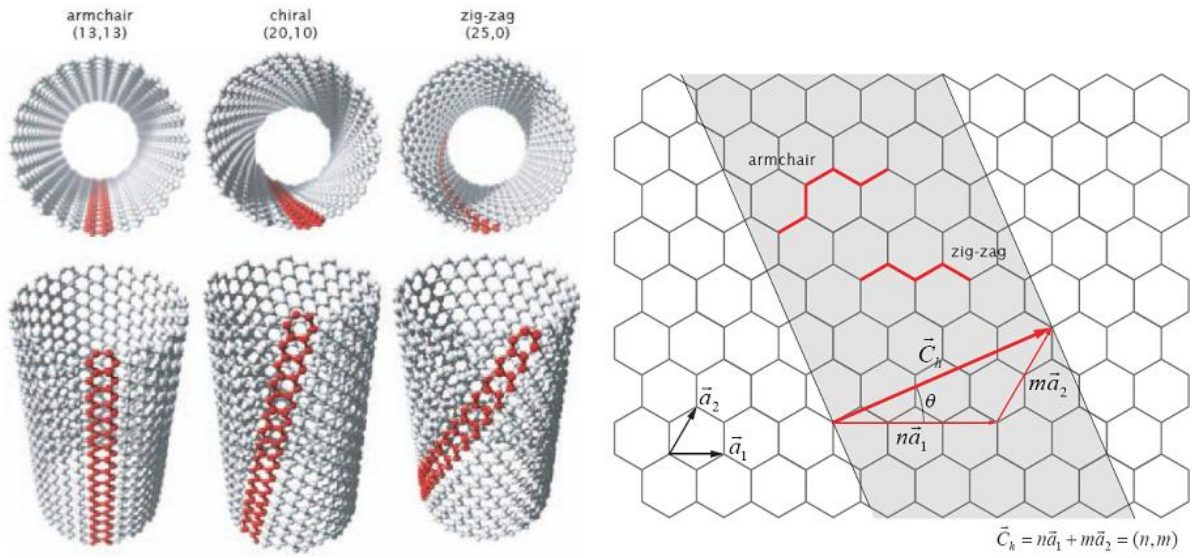


Figure (I.2) : Illustration de la structure armchaire, chiral et en zigzag des CNTs (à gauche) et le schéma de la formation de nanotubes par l'enroulement d'une feuille de graphène (à droite) [20].

Les nanotubes de carbone ont été découvert en 1991 par Ijima [21]. Ces nanostructures ont montré des propriétés électriques, thermiques et mécaniques très puissantes, ce qui les appliquées dans plusieurs domaines de la science et de l'ingénierie [22–25]. Les propriétés mécaniques des CNTs ont été étudiées en utilisant des mesures expérimentales et des simulations numériques [26,27].

I.3. Nanocônes de carbone:

Les nanocônes de carbone (carbon nanocônes, CNC) ou nanocornets (carbon nanohorns, CNH) sont considérés comme l'une des nanostructures de carbone attractives dans le domaine de la nanotechnologie. Ces types de nanostructures se caractérisent par leurs formes coniques définissent par l'angle au sommet (α), le rayon du petit socle (R_S) et le rayon du grand socle (R_L) comme illustré à la figure (I.3). Les nanocônes de carbone sont d'abord explorées par Harris et al., à partir des déchets de pousses formés lors de la production de fullerène via un processus de décharge à l'arc [27]. Les CNCs peuvent également se produire à la surface du graphite naturel ou se former lors de la décomposition pyrolytique d'hydrocarbures à l'aide d'une torche à plasma, comme indiqué par Arockiaraj et al. [28].

Plusieurs caractéristiques des CNCs ont été découvertes, comme leur surface spécifique, leur rendement élevé, leur grande stabilité chimique, leur grande pureté, leurs faibles toxicités, leurs propriétés catalytiques exceptionnelles, leur porosité supérieure et leur bonne conductivité [12]. Ces caractéristiques ont permis aux CNCs de compenser les nanotubes de carbone (CNT) dans de nombreux domaines tels que le génie biomédical, les applications de piles à combustible, les dispositifs de stockage de gaz et les capteurs électromécaniques [29–32]. De plus, les propriétés mécaniques extraordinaires des CNCs ont motivé les chercheurs à les utiliser pour renforcer les matériaux composites [33,34].

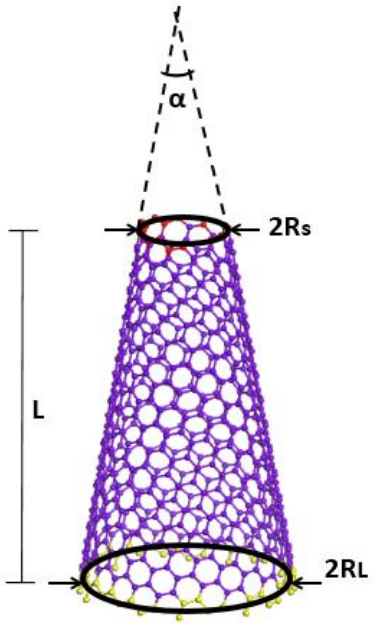


Figure (I.3): Illustration de la structure de CNC, où R_S, R_L, L et α sont le petit rayon, le grand rayon, la longueur et l'angle au sommet de la CNC.

En conséquence, certaines recherches expérimentales ont été menées. Parmi eux, il convient de mentionner l'expérience de Ge et Sattler [35] qui ont prédit des formes spéciales de CNC selon cinq angles au sommet possibles, son travail a été confirmé expérimentalement par Krishnan et al. [36] qui définissent ces angles au sommet comme 19.2º, 38.9º, 60º, 84.6º et 112,9°, respectivement. Naess et al. [37] ont caractérisé la structure de ces types de CNC en utilisant la microscopie électronique à transmission, les rayons X synchrotron et la diffraction électronique. Nous aborderons les différents travaux réalisés sur les propriétés mécaniques des CNC dans le chapitre suivant.

I.4. Les défauts dans les nanostructures de carbone :

Les propriétés des nanostructures de carbone, en particulier les propriétés mécaniques, peuvent diminuer en présence de certains défauts courants au cours du processus de fabrication, tels que les défauts de lacunes (vide d'atomes), les défauts de Stone-Wales, les dislocations [38] et les joints de grains [39]. Les défauts les fréquemment observés dans la fabrication des nanostructures de carbone sont :

- Le défaut de lacune est un défaut ponctuel où un atome manque à l'un des sites du réseau de la nanostructure (voir la figure (I.4a)).
- Le défaut de Stone-Wales est un défaut cristallographique se produit par la rotation de la liaison de carbone de 90º formant des anneaux pentagonaux et heptagonaux (voir la figure (I.4b)).
- Les fissures qui se forment en joignant les lacunes (vide d'atomes) générées dans les bandes de glissement disponibles aux échelles atomiques [40] (voir la figure (I.4c)).
- Les défauts de dislocation peuvent être formés par une translation de deux demi-réseaux l'un par rapport à l'autre par un vecteur de translation [41] comme illustré à la figure (voir la figure (I.4d)).
- Les nanopores sont des trous de taille et de formes régulières se produisent en éliminant un ensemble des atomes [42] (voir la figure (I.4e)).

En ce qui concerne les structures de graphène, plusieurs études ont été réalisées pour comprendre la relation entre les défauts et les propriétés mécaniques du graphène [43]. Khare et al. [44] ont étudié l'effet des grands défauts sur le comportement mécanique du graphène et des nanotubes de carbone en utilisant la combinaison entre la mécanique quantique (QM) et la mécanique moléculaire (MM). De plus, Liu et al. [42] ont étudié l'effet de la taille et la densité des pores sur les propriétés mécaniques du graphène, leur travail peut être utile pour concevoir des filtrations de graphène nanoporeux à haute performance. Xiao et al. [45] ont également travaillé sur le comportement à la rupture du graphène et des nanotubes de carbone sous des défauts de Stone-Wales. Ils ont utilisé la FEM à l'échelle atomique et ont démontré que la rigidité diminue linéairement avec l'augmentation de la densité de défauts, et que les propriétés mécaniques, le module d'élasticité et la résistance en particulier, sont plus affectées par la densité de défauts.

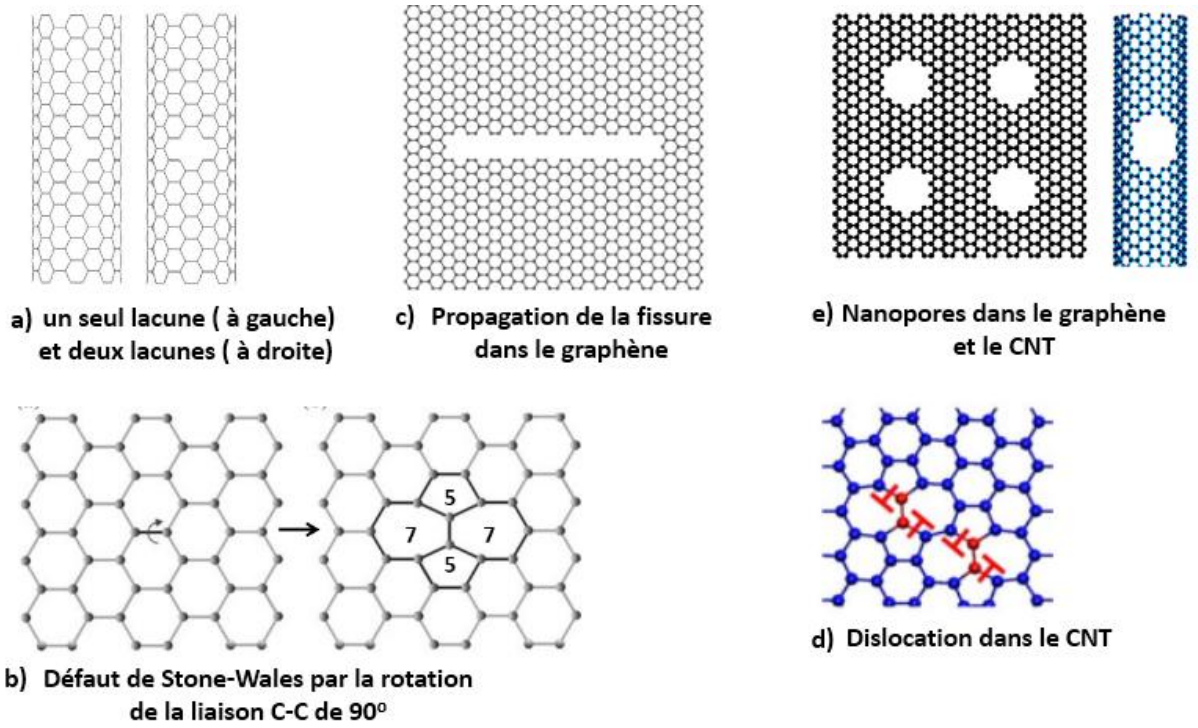


Figure (I.4): Les défauts les plus courants dans les nanostructures de carbone.

Néanmoins, il existe des études limitées sur l'effet des formes de nanopores sur la rupture de traction, dont la plupart ont utilisé des méthodes de calcul coûteuses comme les simulations de la dynamique moléculaire (DM). Par exemple, Zhu. Jian et al. [46] ont étudié le module d'Young et le comportement de fracture avec certaines formes de nanopores rectangulaires et circulaires en utilisant DM. SK Georgantzinos et al. [47] ont utilisé la méthode des éléments finis à ressort non linéaire (SPFEM) pour étudier les propriétés de traction et de cisaillement en présence de différentes tailles de pores dans la membrane de graphène, et ont montré que les petits pores n'ont pas d'effet significatif sur les constants élastiques par rapport aux moyennes et grandes pores; cependant, le contraire était vrai pour les propriétés de rupture. Ils ont également étudié le comportement au cisaillement en fonction de la taille des nanopores, mais ont négligé l'effet de bord du nanopore et sa forme sur ce comportement.

À la base de ces résultats de recherche, nous pouvons apporter notre contribution en étudiant l'effet du rapport des atomes manquants des nanopores, des formes et de l'orientation des nanopores sur les propriétés élastiques et de rupture à la traction et au cisaillement du graphène.

D'autre part, plusieurs chercheurs ont étudié les CNTs sous différents défauts [48]. Contrairement aux CNTs, les recherches sur les CNCs défectueuses sont rares et limitées. Par exemple, Guedes et al. [49] ont étudié la stabilité de différents défauts de lacune dans les CNCs en implémentant la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) dans le programme SIESTA. De plus, Liao dans ses articles [50,51] a étudié l'influence des défauts de lacune sur le flambement, ainsi que la rupture en traction des nanocônes de carbone à pointe ouverte en utilisant les simulations DM, il a démontré que les lacunes situées près de la petite base de CNC ont une plus grande dégradation de la contrainte de compression critique, de la charge de compression critique, de la contrainte d'allongement à la rupture et de la charge de traction à la rupture que les lacunes situées près de la grande base de CNC.

Cependant, il y a encore un manque d'informations sur l'effet des défauts sur les propriétés mécaniques des CNCs. De plus, les études précédentes sur les CNCs défectueuses sont déterministes, ce qui peut ne pas donner une bonne approximation de la réalité. Ces difficultés nous ont motivés à étudier l'effet des imperfections sur les propriétés mécaniques des CNCs en utilisant une analyse aléatoire.

I.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis en évidence les différents types de nanostructures de carbone et leurs propriétés, ainsi que leurs applications dans les domaines de la science et de l'ingénierie. Par ailleurs, les différents défauts pouvant survenir dans ces nanostructures ont également été discutés. Nous avons également discuté les études menées sur l'effet de ces défauts sur les propriétés mécaniques des nanostructures de carbone afin d'apporter nos contributions dans cet axe de recherche qui se résument comme suit :

- Nous étudierons les différentes formes de nanopores, en plus de leurs orientations et tailles sur les propriétés élastiques et de rupture du graphène.
- Nous enrichirons la recherche limitée de défauts dans les nanocônes de carbone par notre contribution à l'étude de l'effet du pourcentage d'imperfections sur les propriétés élastiques des CNCs en utilisant l'analyse aléatoire pour approcher à la réalité.

En plus des études évoquées dans ce chapitre, nous tenterons d'aborder les différentes méthodes numériques utilisées dans l'étude des nanostructures de carbone dans le chapitre suivant afin de montrer notre nouveau modèle développé à l'aide de la méthode des éléments finis atomiques qui sert de méthode de base dans notre travail.

Chapitre II

Etat de l'art sur les méthodes utilisées pour l'étude des nanostructures de carbone

II.1. Introduction

Dans ce qui précède, nous avons vu les propriétés exceptionnelles des nanostructures de carbone (en mettant l'accent sur le graphène, CNT et CNC) et leurs nombreuses applications dans les domaines scientifiques et de l'ingénierie. Ces nouveaux types de nanomatériaux nous ont motivés à effectuer une recherche bibliographique sur les différentes études réalisées tant aux laboratoires que simulées par des outils informatiques. D'abord, nous commençons ce chapitre par une recherche générale sur les différents potentiels (champs de forces) développés pour décrire les interactions interatomiques induites dans les nanostructures de carbone en mettant l'accent sur l'importance du choix du potentiel en fonction de la structure atomique et le but de l'étude. Notre choix du potentiel adéquat pour notre étude sera abordé dans la conclusion de la deuxième partie de ce chapitre. Par ailleurs, les méthodes expérimentales et de simulation menées dans l'étude des propriétés mécaniques des nanostructures de carbone seront évoquées dans la troisième partie de ce chapitre, en s'attardant notamment sur les méthodes de simulation afin de choisir une méthode performante et rapide pour étudier ces dernières nanostructures. Enfin, nous terminerons ce chapitre par une conclusion à laquelle nous montrerons notre choix de la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) qui servira d'outil de base dans notre étude des propriétés mécaniques des structures de graphène et des nanocônes de carbone (CNC) de sorte que nous apporterons notre contribution par des modèles faciles à mettre en œuvre et fiables à l'étude de ces structures.

II.2. Les fonctions de l'énergie potentielle interatomique (Champ de forces ou Potentiel interatomique)

L'état d'équilibre d'un matériau à l'échelle moléculaire peut être déterminé en utilisant l'approche de la mécanique moléculaire qui est basée sur le principe de la minimisation de l'énergie potentielle d'un ensemble des atomes. Afin de calculer cette énergie, plusieurs modèles mathématiques se sont développés sous le nom du champ de forces (ou le potentiel), parmi lesquels nous décrirons ceux utilisés à l'étude des propriétés mécaniques des nanostructures de carbone. En outre, le champ de forces d'un système des atomes est lié à la position des atomes et la nature des interactions entre eux (la nature des liaisons atomiques).

En fait, toutes les interactions induites dans le matériau peuvent être divisées en deux catégories comme le montre la figure (II.1) : la première catégorie s'appelle les interactions intramoléculaires et inclue le potentiel de l'élongation des liaisons, de la flexion des angles de valence, de la torsion des angles dièdres propres et impropres. La deuxième catégorie s'appelle les interactions intermoléculaires et inclue les interactions électrostatiques et les interactions de van der Waals. La simplification de ces interactions caractérise la fiabilité et la précision du champ de forces choisi et par conséquent la qualité de la simulation.

La représentation mathématique de l'énergie potentielle totale d'un système à N atomes peut s'écrire sous la forme suivante :

$$U_{tot} = U_{intra} + U_{inter} \quad \text{(II.1)}$$

Tel que les termes U_{intra} et U_{inter} représentent les potentiels des interactions intramoléculaires et intermoléculaires respectivement. Ces deux termes peuvent s'écrire sous les formules suivantes:

$$U_{intra} = U_b + U_\theta + U_d + U_\omega \quad \text{(II.2)}$$

$$U_{inter} = U_{ele} + U_{vdw} \quad \text{(II.3)}$$

Où U_b , U_Θ , U_d , U_ω , U_{ele} et U_{vdW} sont les potentiels de l'élongation des liaisons, de la flexion des angles de valence, de la torsion des angles dièdres propres, de la torsion des angles impropres, des interactions non liées de van der Waals et les interaction électrostatiques respectivement.

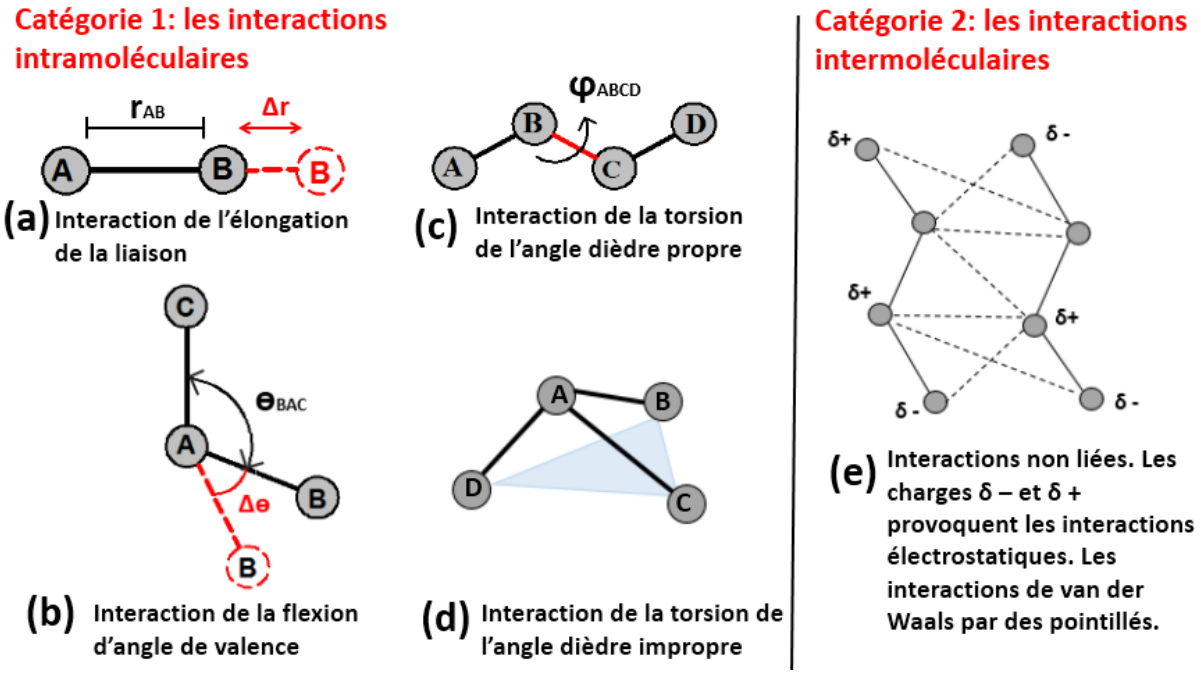


Figure (II.1): Illustration de la majorité des interactions induites dans les nanostructures.

II.2.1. Le potentiel d'élongation des liaisons

La déformation axiale des liaisons atomiques peut être modélisée par le modèle simple de Hooke (voir la figure (II.1a)), l'énergie stockée dans ces liaisons est décrit par la formule suivante :

$$U_b = \frac{1}{2} \cdot k_b \cdot (r - r_0)^2 \quad \text{(II.4)}$$

Où k_b représente la constante d'élongation de la liaison considérée (en $kcal^{-1}.mol^{-1}.nm^{-1}$ ou en $nN.nm^{-1}$) [52]. r et r_0 sont la longueur de la liaison interatomique à l'état considéré et la longueur de la liaison interatomique à l'équilibre respectivement (en nm). Le potentiel harmonique de l'équation (II.4) est valable pour des petites déformations et ne peut décrire les grandes déformations des liaisons et surtout auprès de la rupture. Par conséquent, il y a d'autres modèles

qui ont résolu ce problème, parmi lesquels le modèle de Morse [53] a montré son efficacité de décrire le phénomène de rupture des liaisons atomiques, sa formule est donnée par :

$$U_b = D_e\left[\left[1-e^{-\beta(r-r_0)}\right]^2-1\right] \quad \text{(II.5)}$$

Où D_e est la profondeur de l'énergie potentielle minimale et β est un coefficient empirique.

II.2.2. Le potentiel de la flexion des angles de valence

L'angle de valence est défini par deux liaisons interatomiques se rejoignent à un atome central comme illustré à la figure (II.1b), d'où sa déformation se produit en changeant l'orientation de ces liaisons. Par rapport à l'effet de l'élongation de liaison, la déformation de l'angle de valence nécessite moins d'énergie, alors qu'il joue un rôle essentiel à la stabilisation de la configuration des nanostructures en 3D comme le CNT. L'interaction de l'angle de valence peut prendre la forme harmonique suivante :

$$U_\theta = \frac{1}{2}\cdot k_\theta \cdot (\theta-\theta_0)^2 \quad \text{(II.6)}$$

Où k_Θ est la constante de la flexion d'angle de valence, Θ est l'angle de valence entre deux liaisons (A-B et A-C) liées à un atome central (l'atome A, voir la figure (II.1b)) et Θ_0 est l'angle de valence à l'équilibre.

Sous l'effet de grandes déformations, le modèle de Morse a été développé afin de représenter les déformations des angles de valence sous la formule qui suit :

$$U_\theta = \frac{1}{2}k_\theta(\theta-\theta_0)^2\left[1+k_{sextic}(\theta-\theta_0)^4\right] \quad \text{(II.7)}$$

II.2.3. Le potentiel de la torsion des angles dièdres propres et impropres

L'interaction de l'angle dièdre propre se produit entre quatre atomes liés par des liaisons covalentes en série comme le montre la figure (II.1c). Par contre, l'interaction de l'angle dièdre impropre se produit entre quatre atomes dont trois sont tous liés par des liaisons covalentes au quatrième atome qui s'appelle l'atome central (voir la figure (II.1d)). Comme indiqué par Gleadall et al. [54], La fonction du potentiel de la torsion d'angle dièdre propre peut s'écrire comme suit :

$$U_d = \frac{1}{2}k_d\left[1+\cos(n_\varphi\varphi-\varphi_0)\right]^2 \quad \text{(II.8)}$$

où k_d est la constante de la torsion d'angle dièdre propre, φ_0 est l'angle de phase, n_φ est la multiplicité qui dicte le nombre de pics de l'énergie potentielle pour une rotation complète de la liaison. La même fonction peut décrire l'interaction de la torsion des angles dièdres impropres.

Dans les nanostructures de carbone, l'effet de la torsion des angles dièdres propres et impropres peut être fusionné en un modèle simple et adéquat, la fonction de ce modèle a été mentionnée dans l'article de Georgantzinos et al. [55] sous la forme :

$$U_{\varphi} = \frac{1}{2} k_{\tau} (\varphi - \varphi_0)^2 \quad \text{(II.9)}$$

k_{τ} est la constante de la torsion d'angle dièdre.

II.2.4. Le potentiel des interactions de van der Waals

Les interactions de van der Waals sont des interactions électriques de faible intensité qui s'exercent entre les atomes non liés à courte distance (voir la figure (II.1e)). Le modèle le plus connu est le modèle de Lennard Jones dont son expression est :

$$U_{vdw} = 4\varepsilon_{ij}\left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \quad \text{(II.10)}$$

Où ε_{ij} est la profondeur du puits du potentiel où l'énergie atteint très faibles valeurs, r_{ij} est la distance entre les deux atomes non liés i et j, σ_{ij} est la distance d'équilibre entre les deux atomes i et j à laquelle l'énergie potentielle est nulle.

Ce potentiel contient deux termes importants, le terme de répulsion $\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12}$ qui décrit la résistance au chevauchement des nuages électroniques à court distances r_{ij} et le terme attractif qui augmente lorsque la distance r_{ij} augmente.

Les deux paramètres ε_{ij} et σ_{ij} peuvent être calculées en utilisant les règles de combinaison de Lorentz-Berthelot :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}\left(\sigma_{ii} + \sigma_{jj}\right) \quad \text{(II.11)}$$

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii} \cdot \varepsilon_{jj}} \quad \text{(II.12)}$$

ε_{ii} , σ_{ii} , ε_{jj} , σ_{jj} sont les paramètres du potentiel de Lennard Jones pour les atomes de même nature.

II.2.5. Le potentiel des interactions électrostatiques

Ce type d'interaction est dû aux charges électriques des atomes à longue distance et obéit la loi de Coulomb sous l'expression suivante :

$$U_{ele} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{q_i \cdot q_j}{r_{ij}}\right) \quad \text{(II.13)}$$

Où ε_0 est la constante diélectrique, q_i et q_j sont les charges électriques des atomes i et j respectivement.

L'estimation de l'énergie potentielle des interactions électrostatiques demande un calcul lourd, par conséquent, il est négligé dans la modélisation des structures contenant des atomes de

faibles charges électriques comme les nanostructures de carbones. Par contre, il affect l'énergie potentielle des structures ioniques comme le quartz et les silicates.

II.2.6. Le potentiel multi-corps de l'ordre de liaison

Ce potentiel décrit les interactions entre les atomes liés par des liaisons covalentes en tenant compte la contribution des liaisons voisines à la résistance de la liaison interatomique considérée à travers la flexion des angles de valence localisées par ces liaisons (voir la figure (II.2)). Le modèle le plus connu est le modèle de Tersoff-Brenner [56] qui est exprimé par la formule suivante :

$$U_{ij} = U_R(r_{ij}) - \overline{B}_{ij} \cdot U_A(r_{ij}) \tag{II.14}$$

Où U_{ij} est l'énergie potentielle stockée à la liaison interatomique i-j, U_R et U_A représentent le terme répulsif et attractif respectivement, leurs formules sont :

$$U_R = \frac{D^{(e)}}{S-1}\exp\left[-\sqrt{2S}\beta(r_{ij}-R)\right]\cdot f_c(r_{ij}) \tag{II.15}$$

$$U_A = \frac{D^{(e)}\cdot S}{S-1}\exp\left[-\sqrt{\frac{2}{S}}\beta(r_{ij}-R)\right]\cdot f_c(r_{ij}) \tag{II.16}$$

Tel que $D^{(e)}$, S et β sont des paramètres du potentiel et dépendent du nombre et du type de la liaison interatomique. f_c est une fonction de coupure qui restreint le potentiel afin de gagner le temps de calcul.

$\overline{B}_{ij}$ est le terme de l'ordre de liaison qui tient compte le nombre des liaisons liées avec la liaison i-j. D'après la figure (II.2), l'énergie de la liaison interatomique i-j est affectée par le mouvement des atomes f et s qui entourant les atomes i et j respectivement à travers la déformation de l'angle de valence. Donc, les atomes s1 et s2 ont un effet non local sur l'énergie de l'atome i, tandis que les atomes f1 et f2 ont un effet non local sur l'atome j. Alors, l'effet non local des atomes s1, s2, f1 et f2 sur les énergies potentielles des atomes i et j sont implicites dans le terme Bij.

Ce potentiel a été largement utilisé pour étudié les nanostructures de carbone et les hydrocarbures [8,40,53,57–59].

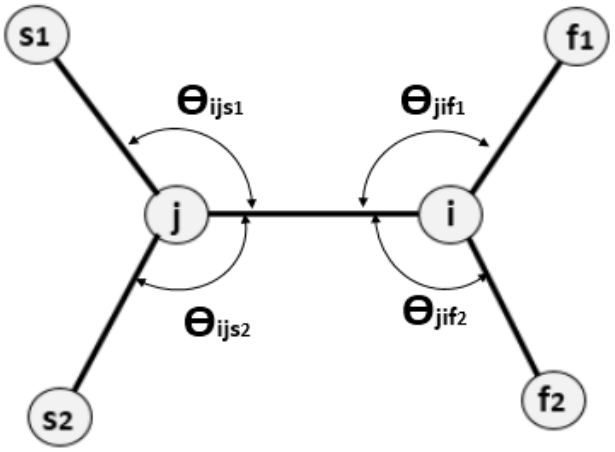


Figure (II.2): Schéma d'une structure constituée des liaisons covalentes, tel que la résistance de la liaison interatomique (ij) est affectée par les autres liaisons liées avec elle à travers les angles de valence θ_{ijs_1}, θ_{ijs_2}, θ_{jif_1} et θ_{jif_2}.

Il y a d'autres modèles basés sur l'ordre de liaison, parmi lesquels on a le potentiel REBO [60] et AIREBO [61] qui sont des versions améliorées du potentiel de Tersoff.

II.2.7. Le potentiel multi-corps de Stillinger-Weber

Le potentiel de Stillinger-Weber (SW) est l'un des potentiels les plus performants pour prédire les propriétés mécaniques et thermiques des matériaux covalents [62]. La fonction originale du potentiel a été développée par F. H. Stillinger and T. A. Weber [63] exprimée par la formule suivante :

$$U_{tot} = \sum U_b + \sum U_\theta \tag{II.17}$$

Où U_b et U_Θ sont l'énergie de l'élongation des liaisons et l'énergie de déformation des angles de valence respectivement, leurs formules sont données comme suit :

$$U_b = A \cdot \varepsilon \left(B \frac{\sigma^4}{r^4} - 1 \right) \exp\left(\frac{\sigma}{r - r_c} \right) \tag{II.18}$$

$$U_\theta = \lambda \cdot \varepsilon (\cos\theta - \cos\theta_0)^2 \exp\left(\frac{2\gamma\sigma}{r - r_c} \right) \tag{II.19}$$

Tel que ε , σ , λ et γ sont les paramètres du potentiel. r_c est la distance de coupure qui définit la limite des interactions décrites par ce potentiel.

Les paramètres du potentiel SW sont améliorées par Hossain et al. [62] pour l'étude des structures de graphène et CNT. Il a donné des meilleurs résultats pour les propriétés élastiques et de rupture en un temps standard par rapport aux potentiels Tersoff-Brenner, REBO et AIREBO.

II.2.8. Discussion des potentiels rapportés

Le choix du potentiel dépend de la géométrie de la structure, de la nature des interactions les entre les atomes de cette structure et du but de la simulation.

Alors, l'étude bibliographique des champs de forces nous a permis de déduire les points suivants :

- Les fonctions harmoniques des potentiels de l'élongation des liaisons et de la flexion des angles de valence sont capables de prédire les propriétés élastiques des matériaux avec une précision acceptable dans un temps de calcul économique, mais elles sont inutiles pour le calcul des grandes déformations et à la rupture. Dans ce cas, le potentiel de Morse montre son efficacité pour prédire les propriétés élastiques avec une grande précision par rapport aux termes harmoniques, ainsi qu'il peut décrire effectivement le phénomène de la rupture des liaisons interatomiques.
- Les potentiels de l'ordre de liaison comme le potentiel de Tersoff-Brenner, REBO et AIREBO sont des potentiels largement utilisés à l'étude du comportement mécanique des nanostructures de carbone, mais ils souffrent d'un manque de précision dans le calcul des propriétés élastiques de ce type des structures et surtout les structures de graphène [64].

Les études antérieures des structures du graphène et CNT ont montré que :

- Sous l'effet des petites déformations, les interactions d'élongation des liaisons et de la flexion des angles de valence a une grande contribution à l'énergie potentielle totale du système et par conséquent à la prédiction des propriétés élastiques du matériau, tandis que le terme de torsion a une faible contribution, son rôle est de stabiliser le système et empêcher l'effondrement par distorsion de la structure 3D comme le CNT et CNC. A ce niveau, et selon les données disponibles pour les nanostructures de carbone, le meilleur choix est d'utiliser le potentiel de Morse pour décrire les interactions de l'élongation des liaisons et de la flexion des angles de valence, tandis qu'un potentiel harmonique est suffisant pour décrire les interactions de la torsion des angles dièdres.
- Sous l'effet des grandes déformations, on choisit le potentiel de Morse parmi les autres potentiels grâce à son simplicité à l'implémentation et son fiabilité à la simulation du comportement à la rupture des liaisons interatomiques.
- Le potentiel de Stillinger-Weber a montré des meilleurs résultats par rapport aux potentiels de Tersoff-Brenner, REBO et AIREBO à l'étude du graphène et CNT.

II.3. Revue de littérature sur les différentes méthodes utilisées pour étudier les propriétés mécaniques des nanostructures de carbone

II.3.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous tentons de discuter des méthodes les plus utilisées pour étudier les propriétés mécaniques des nanostructures de carbone et des nanomatériaux en général. Cette recherche nous permet d'apporter notre contribution en améliorant des modèles numériques basés sur la méthode des éléments finis atomiques qui seront détaillés dans les chapitres suivants.

II.3.2. Méthodes expérimentales

Les nanotubes de carbones (CNTs en anglais) ont présenté des propriétés mécaniques exceptionnelles [65]. Certains travaux ont été réalisés afin de révéler ces propriétés, commençant par l'expérience du Krishnan et al. [66] menées sur des échantillons de CNT de diamètre varié de 1 à 1.5 nm en utilisant le microscope électronique à transmission (MET). Le module d'Young moyen a été estimé à 1.25 TPa. Yu et al. [67] ont utilisé le microscope à force atomique (AFM en anglais) pour étudier la réponse mécanique d'une gamme de 15 nanotubes de carbone à paroi unique (SWCNT en anglais) sous l'effet de la charge de traction. Le module d'Young obtenu est compris entre 0.32 et 1.47 TPa. Dans leurs autres travaux [68] ont mesuré la résistance à la traction d'une gamme de 19 structures des nanotubes de carbone à parois multiples (MWCNT en aglais) et ont trouvé qu'elle est comprise entre 11 et 63 GPa à la paroi externe du MWCNT. Afin d'éviter les difficultés associées à l'essai de traction direct, Li et al. [69] a mené l'essai de traction sur des cordes de 20 mm de longueur constituées des nanotubes de carbone à paroi unique (SWNT) parfaitement alignées. Ils ont estimé la résistance moyenne à la traction du SWCNT à 22.2 ± 2.2 GPa. Comme les nanotubes de carbone (CNTs), les nanocônes de carbone (CNCs) exposent des propriétés mécaniques extraordinaires. Cependant, peu d'expériences ont été faites sur ce type de nanostructures, dont la plupart se limitent uniquement sur l'étude de leurs caractéristiques géométriques comme la longueur, le petit rayon et l'angle au sommet. Par exemple, Ge et Sattler [35] ont prédit des formes spéciales de CNC selon cinq angles au sommet possibles, ses travaux ont été confirmés expérimentalement par Krishnan et al. [70] qui définissent ces angles au sommet comme 19,2, 38,9, 60, 84,6 et 112,9°, respectivement. Naess et al. [71] ont caractérisé la structure de ces types de CNC en utilisant la microscopie électronique à transmission, les rayons X synchrotron et la diffraction électronique.

Plusieurs études expérimentales ont été réalisées pour révéler les propriétés mécaniques du graphène, parmi lesquelles on cite l'expérience de Lee et al. [72] concernant la mesure du module d'Young et la résistance intrinsèque des membranes du graphène monocouche autoportantes par la technique de la nano-indentation dans le microscope AFM. Ces deux propriétés ont été estimé à 1 TPa et 130 GPa respectivement. Dans une autre expérience, Frank et al. [73] ont mesuré les constantes de ressort effectives d'empilements de feuilles de graphène suspendues au-dessus de tranchées définies par photolithographie dans du dioxyde de silicium à l'aide de l'outil AFM, et ont extrait une valeur de module élastique de 0.5 TPa. Zhang et al. [74] a réalisé un essai de traction à la rupture in situ en utilisant un dispositif nanomécanique dans un microscope électronique à balayage (SEM), conduisant à la première mesure expérimentale directe de la ténacité du graphène polycristallin.

Toutefois, en raison du cout élevé de la réalisation des essais expérimentaux, et parfois il est impossible de les réaliser pour détecter les mécanismes de déformation des matériaux à l'échelle atomique, ce qui a conduit à recourir aux méthodes numériques de simulation.

II.3.3. Méthodes de simulation

Ces dernières années, Les méthodes de simulation ont été développées de manière significative en réponse à la demande croissante d'une compréhension plus approfondie du comportement des matériaux à l'échelle nanométrique et atomique, notamment en présence des défauts, afin de concevoir des nouveaux matériaux ou d'améliorer les matériaux traditionnels. Dans cette section, nous aborderons les méthodes de simulation les plus connues dans le domaine de la nanotechnologie, en particulier celles utilisées dans l'étude des nanomatériaux à base de

carbone, comme la méthode de la dynamique moléculaire (DM) (Molecular Dynamics (MD) en anglais), la méthode des éléments finis (MEF) basée sur l'approche de la mécanique des milieux continus (MMC), la méthode des éléments finis basée sur l'approche de la mécanique moléculaire (MEF-MM) et on va terminer par la méthode des éléments finis atomique (Atomic Finite Element Method (AFEM) en anglais).

II.3.3.1. Méthode de la dynamique moléculaire (DM)

C'est une méthode de simulation numérique par ordinateur de la trajectoire d'un ensemble des atomes au cours du temps en se basant sur la loi fondamentale de la dynamique (la deuxième loi de Newton). L'émergence de cette technique remonte à la fin des années cinquante du siècle dernier, ses premières applications ont été fait par Alder et Wainwright [75] à l'étude d'un système de sphères dures composé de plusieurs centaines de particules entrent en collision les unes avec les autres. L'optimisation des outils informatiques conduit à l'avancement de la technique DM qui a servi d'outil de simulation efficace pour vérifier les hypothèses théoriques, ainsi que pour réaliser de nombreuses expériences difficiles à réaliser in situ afin de caractériser les propriétés des matériaux et prédire les réponses mécaniques. En outre, elle a montré l'efficacité à résoudre plusieurs problèmes dans divers domaines de recherche, notamment la physique, la chimie, la biologie, la médecine [75,76]. Dans ces dernières années, la DM a connu une large application dans le domaine de la science des matériaux et le génie civil [1].

II.3.3.1.1. Principe de la méthode DM

Un système de N atomes évolue dans le temps sous l'effet des conditions bien contrôlées (température et pression), peut être décrit par la loi de Newton de la mécanique classique qui s'annonce :

$$\mathbf{F}_i = m_i \cdot a_i \tag{II.20}$$

Où $\mathbf{F}_i$ est la somme des forces exercées sur l'atome i, m_i et a_i sont la masse et l'accélération de l'atome i.

L'équation (II.20) s'appelle « Equation du mouvement », à partir de laquelle l'accélération est obtenue en divisant la force par la masse. Ensuite, l'intégration de l'accélération par le temps une et deux fois donne respectivement la vitesse et la position de l'atome i. Alors, la connaissance des forces agissant sur les atomes est une clé pour formuler l'équation du système. Les forces exercées aux atomes du système s'obtiennent en dérivant le potentiel « champ de force » que nous avons mentionné dans la partie (II.2) sous l'écriture suivante :

$$\mathbf{F}_i = -\frac{dE}{dr_i} \tag{II.21}$$

Où E est l'énergie potentielle totale stockée à l'atome i, r_i est le vecteur position de l'atome i.

En posant des conditions initiales sur les positions et les vitesses des atomes, on peut prédire les nouvelles positions et vitesses des atomes en résolvant l'équation (II.20), et par conséquent les nouvelles accélérations et les forces agissant sur ces atomes. Le nombre lourd des atomes du système nécessite les intégrations numériques des équations du mouvement. À cet égard, de nombreux algorithmes ont été utilisés y compris l'algorithme de Verlet, Verlet Leapfrog et Prédicteur-Correcteur [76].

Par exemple, dans l'algorithme de Verlet, la position et la vitesse de l'atome i à l'instant (t+Δt) sont prédit en connaissant les forces Fi(t) exercées sur l'atome i à l'instant t, la position de l'atome i aux instants (t-Δt) et t. les formules de ri(t+Δt) et vi(t) sont obtenu par le développement en série de Taylor, et se reformulées comme le suit:

$$r_i(t+\Delta t) - r_i(t-\Delta t) = 2\Delta t \cdot r'(t) + O(\Delta t^3) \quad \text{(II.22)}$$

$$V_i(t) = r_i'(t) = \frac{r_i(t+\Delta t) - r_i(t-\Delta t)}{2\Delta t} \quad \text{(II.23)}$$

Dans cet algorithme, l'importance est accordée à la position plutôt qu'à la vitesse, ainsi qu'une augmentation légère du pas de temps pris Δt peut diminuer la précision du calcul. D'autre part, l'algorithme de Verlet-Leapfrog donne des résultats précis par rapport à l'algorithme de Verlet. L'idée de base de l'algorithme Verlet-Leapfrog est d'utiliser un demi pas de temps (Δt/2) pour calculer la vitesse à l'instant t et (t+Δt) en utilisant les formules suivantes :

$$V_i(t+\Delta t/2) = V_i(t-\Delta t/2) + F_i \frac{\Delta t}{m_i} \quad \text{(II.24)}$$

$$V_i(t) = \frac{V_i(t-\Delta t/2) - V_i(t+\Delta t/2)}{2} \quad \text{(II.25)}$$

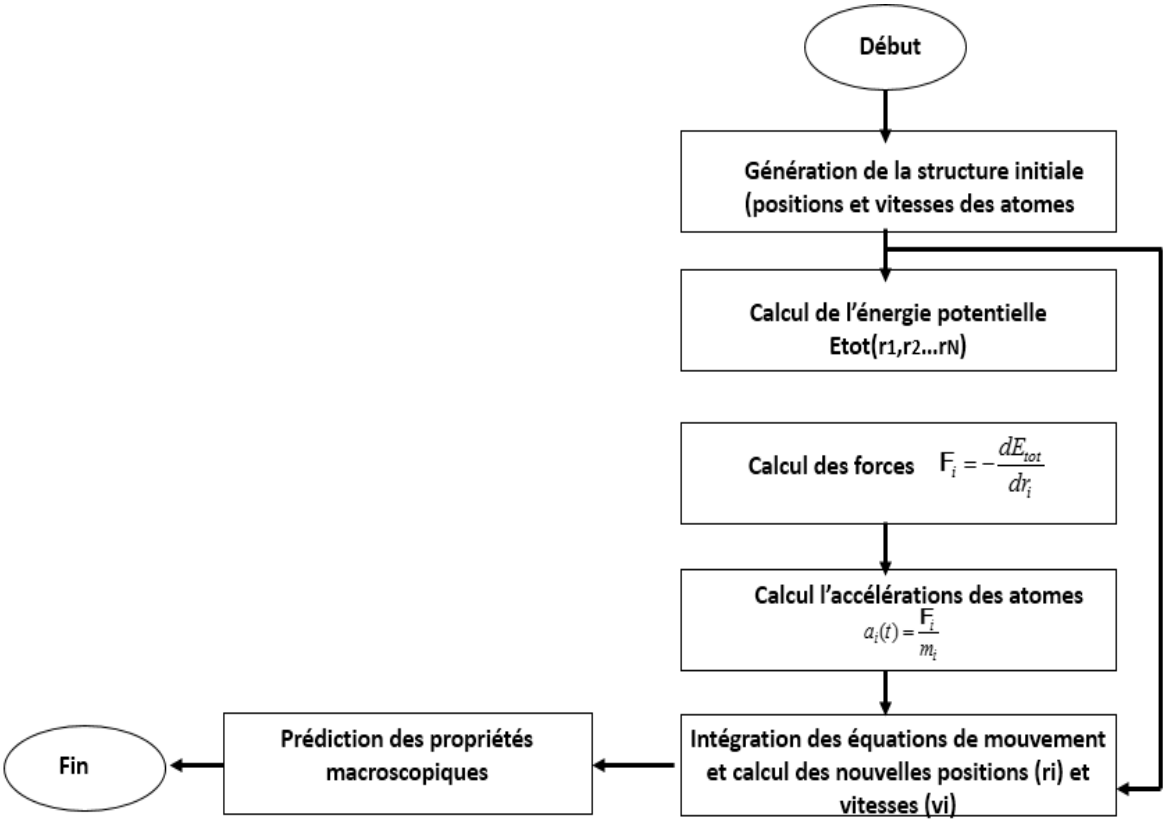


Figure (II.3): Représentation des étapes impliquées dans la dynamique moléculaire.

L'avantage de cet algorithme et de donner une bonne prédiction de la vitesse avec une bonne convergence, ainsi qu'il prend moins de mémoire de l'outil informatique.

Dans tous les algorithmes rapportés ici, le choix du pas de temps joue un rôle primordial tel que son augmentation peut accélérer le processus de simulation alors que peut affecter sur la précision du calcul, par contre, sa diminution peut améliorer la précision des résultats mais ça nécessite un calcul lourd.

Les étapes impliquées dans la méthode de la dynamique moléculaire sont résumées dans l'organigramme de la figure (II.3).

II.3.3.1.2. Les conditions aux limites périodiques

Dans la simulation de la dynamique moléculaire, le nombre des atomes est lié à l'espace de la mémoire de l'ordinateur, ce qui limite la taille du système simulé à certains nombres d'atomes. Par contre, à la réalité le système est composé d'un nombre impressionnant d'atomes qui rend la simulation très difficile. Pour surmonter cet obstacle, le système de N atomes est représenté par une boite cubique de côté L, puis cette boite se duplique dans toutes les directions afin d'éviter l'effet des faces de la boite qui peut affecter les propriétés physiques du système et par conséquent de s'éloigner à la représentation du système réel (voir la figure (II.3)). Ces conditions permettent donc de simuler un système réel d'un nombre infini d'atomes à partir d'un système fini et sont appelées conditions aux limites périodiques. En se basant sur la figure (II.4), Un atome sortant de la boite par un coté y entre en fait par l'autre côté. D'autre part, il faut assurer qu'un atome ne soit pas en interaction avec son image dans la boite qui lui est virtuellement accolée, ce qui représenterai mal la réalité. Pour cela, les interactions de chaque atome avec son environnement sont calculées dans une cellule imaginaire centrée à cet atome tronquées à une distance qui est au plus égale à la moitié de la taille de la cellule. Cette procédure s'appelle la convention d'image minimum.

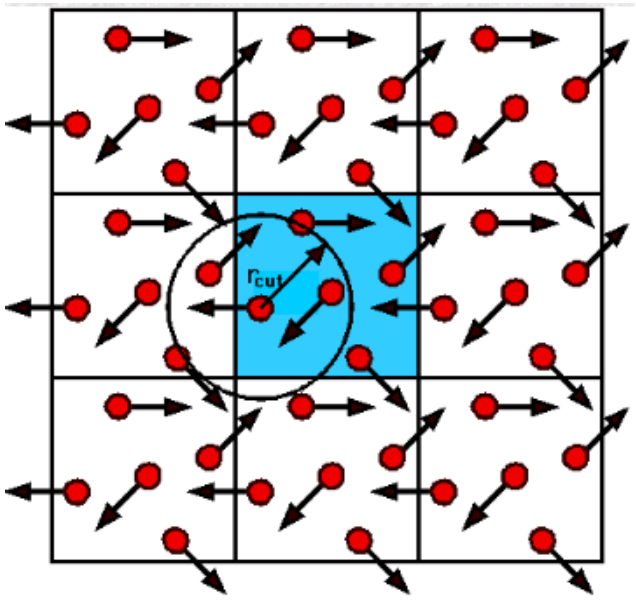


Figure (II.4): Illustration des conditions aux limites périodiques en deux dimensions.

Ainsi, toutes les interactions d'un atome avec les autres atomes situés à une distance supérieure à la moitié de la taille de la boîte sont éliminées. Cette distance s'appelle la distance de troncature « r_c ».

II.3.3.1.3. Contrôle du système

Afin d'assurer le chemin correct de la simulation, Nous devons définir les conditions avec sagesse. A cet effet, les vitesses initiales des atomes sont introduites d'une manière aléatoire en utilisant la distribution de Maxwell- Boltzmann qui les lie avec la température imposée. Leur relation peut être établie en considérant l'énergie cinétique stockée dans le système de manière macroscopique et microscopique, et donnée par l'équation suivante :

$$\frac{3}{2}k_B T = \frac{1}{N}\sum_i \frac{1}{2}m_i v^2{}_i \qquad \text{(II.26)}$$

k_B est la constante de Boltzmann, m_i et v_i sont la masse et la vitesse de l'atome i, N est le nombre total des atomes du système. Le côté gauche de l'équation (II.26) décrit l'énergie cinétique du système au niveau macroscopique via la grandeur de la température, tandis que le côté droit de l'équation décrit l'énergie cinétique du système au niveau microscopique via la grandeur de la vitesse des atomes. Par conséquent, les quantités microscopiques (vi et ri) du système sont liées avec les quantités macroscopiques (T, P) en utilisant des formules statistiques comme l'équation (II.26) qui s'introduisent à la notion d'ensemble statistique. Il existe trois ensembles couramment utilisés en DM :

1- L'ensemble microcanonique (NVE), où le nombre d'atomes (N), le volume (V) et l'énergie (E) du système sont maintenus constants.
2- L'ensemble canonique (NVT) où, le nombre d'atomes (N), le volume (V) et la température (T) du système sont constants.
3- L'ensemble de Gibbs (NPT), où le nombre d'atomes (N), la pression (P) et la température (T) du système sont maintenus constants.

Ces ensembles ont l'intérêt de contrôler le système conformément à l'expérience souhaitée. Par conséquent, il existe des algorithmes destinés au contrôle de la température et appelés « Thermostat » tel les thermostats de Nosé-Hoover et Berendsen, et d'autres destinés au contrôle de la pression et appelé « Barostat ».

II.3.3.1.4. Applications et limites de la méthode DM à l'étude des nanostructures de carbone

La méthode de la dynamique moléculaire (DM) a été appliquée avec succès dans divers domaines, en particulier le domaine des nanomatériaux de carbone, montrant dans de nombreux travaux, tel le travail de Liew et al. [77] impliquant l'étude des propriétés élastiques et plastiques des SWCNTs et MWCNTs sous l'effet de l'essai de traction en se basant sur le champ de force REBO couplé avec le potentiel de Lennard Jones. Autres travaux ont été menés par Liew et al. [78,79] sur l'étude du flambement des SWCNTs et des CNTs à parois multiples (MWCNT) sous compression ainsi que la tension et la compression des faisceaux de CNT pour comprendre les effets des forces inter-tubes de van der Waals sur l'ensemble du système. À l'aide du potentiel révisé de Tersoff – Brenner de deuxième génération, des simulations DM ont été réalisées par Qin [80] pour étudier les propriétés mécaniques de nanotubes de carbone à paroi unique à quatre parois avec des jonctions IMJ sous tension uni axiale. En ce qui concerne les nanocônes de carbone CNCs, Wei et al. [81] ont étudié les propriétés mécaniques des CNCs en utilisant la méthode de la dynamique moléculaire et ont rapporté que le module d'Young varie entre 0,29 et 0,73 TPa. Jordan et Crespi [82] ont investigué l'inversion chirale mécanique des CNCs sous compression d'indenteur sphérique en utilisant des simulations DM. Tsai et Fang

[83] ont étudié le mécanisme de nucléation des CNCs à l'aide de simulations DM démontrant l'effet de l'angle au sommet des CNCs sur leur stabilité thermique et leurs propriétés mécaniques. Liew et al. [84] ont étudié le comportement de flambement des CNCs à l'aide de simulations DM. Liao et al. [85] ont appliqué la méthode DM pour analyser le comportement en traction et en compression des CNCs à pointe ouverte. D'autre part, les structures de graphène ont également été étudiées par la DM, tel que Jiang et al. [86] ont investigué le module élastique (E) en observant les vibrations thermiques. Ils ont rapporté que dans la plage de température de 100 à 500 K, le module élastique augmente de 0,95 à 1,1 TPa à mesure que T augmente. En outre, nombreuses études sur les propriétés mécaniques du graphène sont rapportées dans les articles [40,46,59,62,87,88].

Bien que l'efficacité de la technique de la dynamique moléculaire dans l'étude des nanomatériaux, cette méthode souffre encore le problème du calcul lourd pour les grands systèmes, ainsi que la limitation à l'échelle de longueur et du temps.

Donc, les simulations DM ne conviennent pas pour étudier directement les matériaux car ils sont toujours à grande échelle de longueur, et leur performance à long terme est toujours la clé d'une conception durable. Ces limitations de la DM se sont résolues avec le progrès des outils informatiques très puissants qui ont augmenté l'échelle de temps, ainsi que la modélisation Multi-échelles est proposée qui peut lier les résultats DM aux observations microscopiques afin d'interpréter les comportements des matériaux [1].

D'autre part, il y a plusieurs méthodes numériques qui ont montrées leurs rapidités par rapport à la méthode de la dynamique moléculaire, tel la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) que nous tenterons d'enrichir dans le chapitre suivant.

II.3.3.2. La méthode des éléments finis classique (MEF) basée sur la mécanique des milieux continus (MMC)

La méthode des éléments finis (MEF) est une méthode numérique impliquant la discrétisation d'un domaine physique complexe en sous domaines appelant « éléments finis », et le comportement physique de ces éléments finis est approximé par des fonctions simples. Ensuite, ces éléments sont assemblés afin de reconstituer le domaine physique. Alors, on peut dire que la MEF est basée sur les branches suivantes :

- Les branches de la physique (la mécanique des milieux continus « MMC », la mécanique moléculaire « MM », la thermodynamique, l'élasticité…etc.).
- Analyse mathématiques (les polynômes, les matrices, les équations différentielles…etc.)
- Outils informatiques (ordinateur simple, station de calcul…etc.).

Dans la MEF, il y a confrontation entre la taille du calcul effectué par la machine qui dépend du nombre des éléments de discrétisation et la précision des résultats recherchés qui dépend des fonctions d'approximation.

II.3.3.2.1. Le principe de la mécanique des milieux continus (MMC)

Afin que nous puissions appliquer la méthode des éléments finis efficacement, nous devons bien connaitre les relations physiques (lois physiques) qui décrivent le système physique que nous voulons étudier. Dès lors, la mécanique des milieux continus (MMC) est l'une des

branches de la physique qui traite le comportement mécanique des matériaux qui peuvent être approximés comme des milieux continus pour certaines échelles de longueur et de temps.

L'idée de base de la MMC est de supposer que la substance de l'objet est continuellement distribuée et remplit tout l'espace qu'elle occupe, et ignore le fait que la matière est constituée d'atomes. Donc, elle fournit des modèles mathématiques utilisant les équations différentielles qui décrivent le comportement de tels objets à l'aide des lois physiques, telles que la conservation de la masse, la conservation de la quantité de mouvement et la conservation de l'énergie, ainsi que certaines informations sur le matériau sont fournies par des relations constitutives. Cela revient à considérer un volume élémentaire ($d\Omega$) représentant la matière de l'objet et satisfaisant les conditions suivantes :

- Capable de représenter effectivement les constituants de l'objet dans un espace infinitésimal.
- Le comportement mécanique de ce volume est régi par les lois de comportement extraites de l'expérience et reformulées dans un modèle appelé « Equations constitutives ».

Dans la mécanique des structures, la méthode des éléments finis basée sur l'approche de la mécanique des milieux continus est une méthode classique qui utilise des éléments de discrétisation de types barre, poutre, plaque, coque, membrane, solide d'une part, et utilise des fonctions d'approximations continues et dérivables tout le long de l'élément fini et satisfaisant les valeurs nodales appelant « Fonctions de forme ». Par conséquent, la résolution de l'équation globale du domaine physique peut s'appuyé sur quelques approches telle :

- L'approche cinématique : où le champ de déplacement est imposé en utilisant des fonctions d'approximations, et les paramètres inconnus de ce champ sont déterminés par la minimisation de l'énergie potentielle du domaine physique, la connaissance du champ de déplacement nous permet de calculer les déformations et les contraintes.
- L'approche d'équilibre statique : dans cette approche un champ de contraintes est imposé dont ses paramètres sont déterminés en utilisant le principe de la minimisation de l'énergie potentielle complémentaire.
- L'approche hybride : cette approche est fondée sur les deux approches précédentes, et utilise la fonctionnelle de Reisner (J_R).

Dans la MEF, l'efficacité de la simulation et la précision des résultats sont liés par deux facteurs importants :

- Le type et le nombre des éléments de discrétisation
- Le degré de la fonction d'approximation.

Par exemple, pour une structure définit en mécanique des structures, les étapes de l'analyse par MEF sont résumées comme le suit :

- Discrétiser la structure en plusieurs éléments structuraux (barre, poutre…etc.) adaptés aux conditions géométriques de la structure.
- Formuler l'équation de comportement pour chaque élément.
- Assembler les éléments finis au niveau de leurs nœuds en constituant les inconnues du système.
- Résoudre l'équation globale du problème en déterminant les inconnues nodales.

- Calculer les grandeurs physiques (contraintes, déformations, forces, température…etc.).

Pour les problèmes non linéaires [89–91], la formulation de la MEF se fait par incrément correspondant une configuration à laquelle le problème est considéré linéaire, la solution incrémentale obtenue doit être vérifiée les conditions de convergence pour passer l'incrément suivant. Il existe des problèmes non linéaires tel la non linéarité géométriques (problème de grandes déformations), non linéarité matérielle (les relations entre les contraintes et les déformations sont non linéaires), non linéarité dynamique (l'évolution des variables du système dans le temps).

II.3.3.2.2. Les applications de la MEF classique au domaine des nanostructures de carbone

Cette technique est largement utilisée dans les domaines de l'ingénierie, la biologie, la médecine, et la science des matériaux. En ce qui concerne les nanostructures de carbone, nous citons des études rapportées aux références [11,92,93] pour prédire les propriétés mécaniques du graphène. Autres travaux sur le comportement mécanique des nanotubes du carbone (CNTs) ont été élaborés et rapportés dans les articles suivants [94,95] Le comportement mécanique des nanocônes de carbone (CNCs) sont aussi étudiés [96,97].

Néanmoins, les travaux menés sur les nanostructures de carbone sont très limités, ainsi qu'ils ont donné des résultats moins précis par rapport à ceux de la DM et des expériences.

II.3.3.2.3. Les limites de la méthode

Au niveau de l'échelle macroscopique, la MEF a montré des meilleurs résultats, ainsi qu'elle a résolu des grands problèmes de l'ingénierie. Toutefois, elle souffre de décrire les discontinuités (la propagation des fissures par exemple). Par ailleurs, l'avènement de la nanotechnologie a révélé la faiblesse de cette méthode dans l'étude du comportement réel des matériaux en raison de son recours à l'approche de la mécanique des milieux continus qui néglige des informations primordiales définies à l'échelle atomique (comme les interactions entre les atomes, le vide entre les atomes…etc.). Pour surmonter ces difficultés, des modèles multi-échelles ont été développés comme mentionné dans la partie précédente. En outre, il y a des améliorations de la MEF en utilisant des approches plus précises comme l'approche de la mécanique moléculaire (MM), ou autre reformulation comme la formulation atomique que nous allons décrire aux parties suivantes.

II.3.3.3. La méthode des éléments finis (MEF) basée sur l'équivalence entre la mécanique moléculaire (MM) et la mécanique des structures (MS)

On a vu que l'origine des problèmes de déformations et des ruptures se trouve à l'échelle atomique, ce qui est difficile à détecter par la méthode des éléments finis conventionnelle (MEF). Des améliorations ont été apportées à la MEF afin de tient compte l'effet des interactions interatomiques sur les déformations induites dans le matériau. Une technique fondée sur l'approche de la mécanique des structures (MS) pour modéliser les liaisons interatomiques en utilisant des éléments structuraux comme l'élément poutre, barre, ressort. On rapporte deux types de modèles basés sur la mécanique des structures pour modéliser la liaison interatomique, le premier modèle considère la liaison (C-C) comme un élément poutre 3D tandis que le deuxième modèle utilise des éléments de ressorts, puis que le comportement de ces éléments est décrit par le potentiel interatomique défini dans l'approche de la mécanique moléculaire (MM).

II.3.3.3.1. La MEF basée sur un élément de type « poutre en 3D »

Dans cette partie, on va décrire l'une de ces méthodes qui se base sur l'idée de considérer la liaison interatomique comme un élément poutre 3D tel est défini à la mécanique des structures, puis les paramètres géométriques et élastiques de cet élément extraites du principe de l'équivalence entre l'énergie de déformation de l'élément poutre et le potentiel interatomique. Par conséquent, on peut se référer à la méthode dans l'abréviation suivante MEF- Poutre 3D.

A) Principe de la méthode MEF- Poutre 3D

Dans les nanostructures de carbone, les atomes de carbone sont liés entre eux par des liaisons covalentes formant un réseau hexagonal. Alors, en se basant sur la mécanique des structures, ce réseau est modélisé comme un système des portiques ou un système en poutres treillis en 3D, tel que les liaisons liant les atomes (C-C) sont modélisées comme des éléments poutres en 3D subissant trois types de déformations : déformations axiales, rotations dues à l'effet de la flexion et les rotations dues à l'effet de torsion. Donc, chaque élément poutre possède six degrés de libertés (6 DDL) par nœud, qui sont trois déplacements (ux, uy et uz), et trois rotations (Θx, Θy et Θz). Il reste à déterminer les caractéristiques géométriques et élastiques de l'élément poutre choisi. Selon la mécanique moléculaire, le potentiel de l'équation (II.1) peut représenter les modes de déformations régissent par les différentes interactions préalablement mentionnées, on peut réécrire ce potentiel comme le suit :

$$U_{tot} = U_b + U_\theta + U_d + U_\omega + U_{ele} + U_{vdw} \tag{II.27}$$

Il est évident que ce potentiel nécessite un modèle complexe pour décrire toutes les interactions possibles. Dans les structures comme le CNT, graphène et CNC, certains termes augmentent la charge du calcul sans affecter la précision des résultats, ce qui les a conduits à être négligés dans certaines études des propriétés mécaniques. Afin de simplifier le potentiel, Li et Chou [98] ont utilisé des termes harmoniques pour décrire les énergies de l'élongation des liaisons, de la flexion des angles de valence et de la torsion des angles dièdres. Pour le terme de la torsion, ils ont fusionné les deux termes U_d et U_ω en une forme harmonique convenable. Ces termes sont écrits sous les mêmes formules (II.4), (II.6) et (II.9), on peut les réécrire comme suit :

$$U_b = \frac{1}{2} k_b (\Delta r)^2 \tag{II.28}$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 \tag{II.29}$$

$$U_\varphi = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \varphi)^2 \tag{II.30}$$

Tel que Δr, $\Delta\Theta$ et $\Delta\varphi$ représentent la variation de la longueur de la liaison C-C, la variation de l'angle de valence et la variation de l'angle de torsion respectivement. D'autre part, ces trois modes sont représentés dans un élément poutre en utilisant l'énergie de déformation définit dans la mécanique des structures comme illustré sur la figure (II.5) et donnés par les expressions suivantes :

$$U_A = \frac{1}{2}\int_0^L \frac{N^2}{EA}dL = \frac{1}{2}\frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2}\frac{EA}{L}(\Delta L)^2 \tag{II.31}$$

$$U_M = \frac{1}{2}\int_0^L \frac{M^2}{EI}dL = \frac{2EI}{L(\Delta\theta)^2} = \frac{1}{2}\frac{EI}{(2\alpha)^2} \tag{II.32}$$

$$U_T = \frac{1}{2}\int_0^L \frac{T^2}{GJ}dL = \frac{1}{2}\frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2}\frac{GJ}{L}(\Delta\varphi)^2 \tag{II.33}$$

Où U_A, U_M et U_T sont l'énergie de déformation axiale, l'énergie de déformation de la flexion et l'énergie de déformation de la torsion respectivement. L, A sont la longueur et section de la poutre respectivement. N, M et T sont l'effort normal, le moment fléchissant et le moment de torsion respectivement. E, I et J sont le module élastique longitudinale (module d'Young), le moment d'inertie, et le moment d'inertie polaire respectivement. Par l'identification entre les équations (II.28)-(II.30) et les équations (II.31)-(II.33), on peut trouver les paramètres de l'élément poutre comme le suit :

$$\frac{EA}{L} = k_r \qquad \frac{EI}{L} = k_\theta \qquad \frac{GJ}{L} = k_\tau \tag{II.34}$$

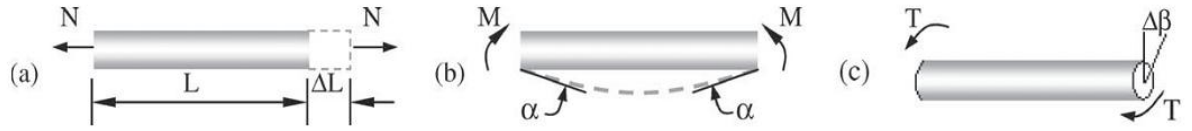


Figure (II.5): Les modes de déformations de l'élément poutre tel que : (a) déformation axiale, (b) rotation de la flexion (c) rotation de la torsion. Extrait de la référence [98].

Par conséquent, la matrice de rigidité élémentaire $\mathbf{K^{(e)}}$ de l'élément poutre 3D s'écrit comme suit :

$$[\mathbf{K}^e] = \begin{bmatrix}
\frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 & -\frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} \\
0 & 0 & \frac{12EI_y}{L^3} & 0 & -\frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{12EI_y}{L^3} & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \frac{GJ}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{GJ}{L} & 0 & 0 \\
0 & 0 & -\frac{6EI_y}{L^2} & 0 & -\frac{4EI_y}{L} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & -\frac{2EI_y}{L} & 0 \\
0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{4EI_z}{L} & 0 & -\frac{2EI_z}{L} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} \\
-\frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & -\frac{6EI_z}{L^2} & 0 & -\frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & -\frac{6EI_z}{L^2} \\
0 & 0 & -\frac{12EI_y}{L^3} & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{12EI_y}{L^3} & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & -\frac{GJ}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{GJ}{L} & 0 & & \\
0 & 0 & -\frac{6EI_y}{L^2} & 0 & \frac{2EI_y}{L} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & \frac{4EI_y}{L} & 0 \\
0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{2EI_z}{L} & 0 & -\frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{4EI_z}{L}
\end{bmatrix} \tag{II.35}$$

Ensuite, le vecteur des déplacements nodaux et le vecteur des forces nodales de l'élément poutre sont donnés par les formules suivantes :

$$\boldsymbol{u} = [u_{xi}, u_{yi}, u_{zi}, \theta_{xi}, \theta_{yi}, \theta_{zi}, u_{xj}, u_{yj}, u_{zj}, \theta_{xj}, \theta_{yj}, \theta_{zj}]^T \quad \text{(II.36)}$$

$$\boldsymbol{f} = [f_{xi}, f_{yi}, f_{zi}, m_{xi}, m_{yi}, m_{zi}, f_{xj}, f_{yj}, f_{zj}, m_{xj}, m_{yj}, m_{zj}]^T \quad \text{(II.37)}$$

En utilisant la procédure d'assemblage des éléments au niveau de leurs nœuds, on peut formuler l'équation du problème d'équilibre statique de la structure par l'équation suivante :

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{F} \quad \text{(II.38)}$$

B) Applications et limites de la méthode MEF- Poutre 3D

Cette technique est appliquée dans certaines études du comportement mécanique des nanostructures de carbone, dont la plus célèbres sont les travaux de Li et Chou [98]. En outre, des travaux ont été réalisés sur l'étude des propriétés mécaniques du graphène et CNT montrant [99–101].

L'utilisation de cette méthode est limitée au calcul de certaines propriétés mécaniques, notamment les propriétés élastiques. En outre, l'hypothèse de la déformation de la liaison atomiques (C-C) comme une poutre est loin de la réalité. En plus de ça, la simplification des termes du potentiel peut affecter la précision des résultats pour des grandes déformations et des cas complexes [102].

II.3.3.3.2. La MEF basée sur des éléments de ressort (SPFEM)

Dans cette méthode, les interactions entre les atomes sont décrites en utilisant des éléments structuraux de type « ressort 3D ». Deux types de ressorts sont proposés, le premier type est un ressort non linéaire destiné à modéliser l'interaction de l'élongation de la liaison C-C, tandis que la liaison C-C est supposée infiniment rigide transversalement (la flexion de la liaison C-C est négligeable) Ce qui est plus proche de la réalité. Le deuxième type est un ressort de torsion linéaire destiné à modéliser l'interaction de la flexion de l'angle de valence entre deux liaisons interatomiques. Meo et Rossi [103] ont développé cette technique pour étudier les structures de carbone nanotubes sous le nom de la méthode SPFEM.

A) Principe de la méthode SPFEM

En se basant sur la figure (II.6), l'interaction de l'élongation de la liaison entre l'atome i et j est modélisée par un élément ressort axial élastique non linéaire a deux nœuds i et j. cet élément a six degrés de libertés (6 DDL) par nœud, trois déplacements (Ux, Uy et Uz) et trois rotations (Θx, Θy, Θz). Les rotations de cet élément sont destinées à lier les ressorts axiaux aux ressorts de torsion, tandis que la liaison interatomique est maintenue toujours droite (infiniment rigide transversalement). Le comportement du ressort axial (voir la forme (a) de la figure (II.6)) est décrit par la relation Force-variation de la longueur de la liaison exprimée par la formule suivante en dérivant la formule (II.5) du potentiel de Morse :

$$F(\Delta r) = 2\beta D_e (1 - e^{-\beta \Delta r}) e^{-\beta \Delta r} \quad \text{(II.39)}$$

Où F est la force de l'élongation de la liaison interatomique, Δr est la variation de la longueur de la liaison interatomique i-j.

L'effet de la flexion de l'angle de valence entre deux liaisons interatomiques i-j et i-l comme illustré à la figure (II.6) est représenté par un élément ressort de torsion linéaire au niveau de l'atome central i. Cet élément est créé par une représentation spéciale de l'atome i en créant un nœud fictif k (voir la forme (c) de la figure (II.6)) ou trois nœuds fictifs comme mentionné par Georgantzinos et al. [55]. En outre, cet élément a également six degrés de liberté dans son repère local. Le comportement de l'élément de torsion linéaire peut être exprimé par la dérivée de la formule (II.7) donnant la relation moment-rotation comme suit :

$$M(\Delta\theta) = k_\theta \Delta\theta[1 + k_{sextic}(\Delta\theta)^4] \tag{II.40}$$

M est le moment fléchissant de l'angle de valence, $\Delta\Theta$ est la variation de l'angle de valence.

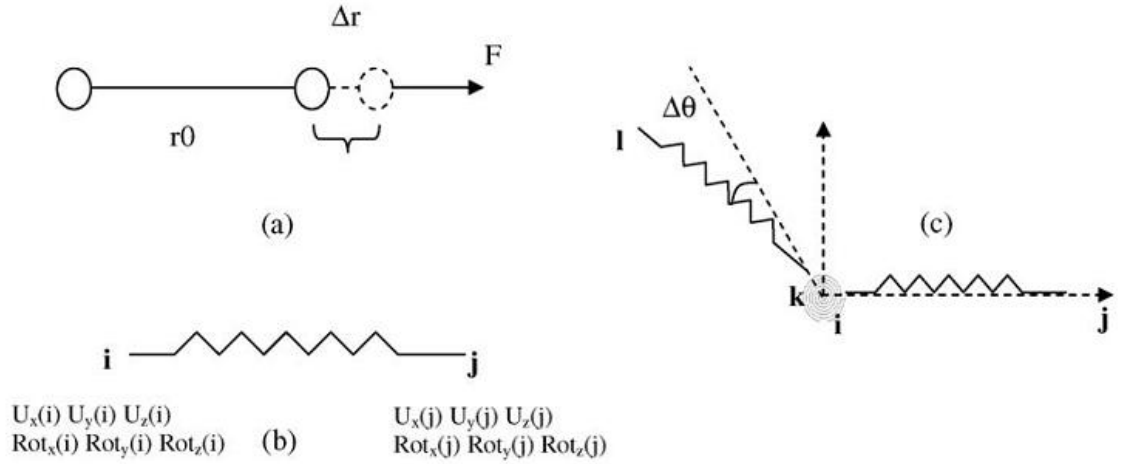


Figure (II.6): Illustration des modèles utilisés à la méthode SPFEM, (a) la liaison C-C, (b) élément ressort élastique non linéaire axial et (c) élément ressort de torsion élastique linéaire. Extrait de la référence [103].

Ensuite, les matrices de rigidité élémentaires des éléments ressorts élastiques non linéaires et les éléments ressorts de torsion élastiques linéaires se construites selon la procédure mentionnée par Georgantzinos et al. [55]. Due aux termes non linéaires du potentiel utilisé, l'équation globale du problème statique (II.38), formulée dans ce cas est une équation non linéaire qu'on doit la résoudre par un calcul itératif en utilisant des algorithmes non linéaires comme ce de Newton-Raphson.

B) Applications et limites de la méthode SPFEM

La méthode susmentionnée a connu certaines applications dans le domaine des nanostructures de carbone, ce qui est évident dans les travaux de Meo et Rossi [103,104] qui ont étudié le comportement mécanique élastique et à la rupture des structures de carbone nanotube et du graphène. Des améliorations à la méthode ont été apportées par Georgantzinos et al. [55] en utilisant un élément ressort de torsion pour modéliser l'interaction de torsion de l'angle dièdre, ainsi que d'utiliser un élément ressort de torsion non linéaire afin de modéliser la flexion de l'angle de valence. Giannopoulos et al. [105] ont étudié les propriétés élastiques des nanotubes de carbone à paroi unique (SWCNTs) en utilisant la méthode SPFEM.

La méthode SPFEM a donné des résultats plus précis par rapport à la méthode MEF- Poutre 3D, car les éléments ressorts modélisent mieux les interactions de l'allongement des liaisons C-C que les éléments poutres. Cependant, cette méthode est moins précise par rapport à la méthode

de dynamique moléculaire, notamment dans l'étude de comportements mécaniques complexes tels que le flambage, la rupture et l'effet hors plan du graphène. En revanche, la mise en œuvre de cette technique reste difficile pour modéliser une structure composée de plusieurs atomes de natures différentes (par exemple : Si-O-H).

II.3.3.4. La méthode des éléments finis atomiques (AFEM)

Cette méthode est une reformulation de la méthode des éléments finis classique (FEM) prenant en compte la nature du milieu discret du matériau à l'échelle atomique. L'idée de la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) a été fondée par Liu et al.[7].

II.3.3.4.1. Principe de la méthode des éléments finis atomiques (AFEM)

L'idée de base de la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) est de discrétiser la structure des atomes en éléments appelés AFEM, de sorte que chaque élément AFEM est défini par un atome central interagissant avec ses atomes voisins à travers un potentiel interatomique. Par conséquent, la procédure de cette méthode est la même que celle de la méthode des éléments finis classique (MEF). Contrairement à la MEF, la formulation des vecteurs de forces élémentaires et des matrices de rigidité élémentaires se fait directement par le calcul des dérivées de la première et deuxième dérivée de l'énergie potentielle pour chaque élément AFEM.

En effet, la répartition des atomes dans la structure et la nature des interactions interatomiques caractérisent le type de l'élément AFEM. De plus, les positions atomiques du système d'équilibre sont estimées en minimisant l'énergie totale de ce système, cet état est atteint en utilisant la formule suivante:

$$\frac{\partial E_{tot}}{\partial \mathbf{x}} = 0 \tag{II.41}$$

Dans laquelle, E_{tot} est l'énergie potentielle totale du système qui s'exprime comme suit :

$$E_{tot}(\mathbf{x}) = U_{tot}(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^{N} \overline{F_i} \cdot x_i \tag{II.42}$$

Où U_{tot} est l'énergie potentielle interatomique totale stockée dans les liaisons atomiques, qui peut être calculée par le potentiel interatomique de l'équation (II.1), $\overline{F_i}$ est la force externe appliquée sur l'atome i dont la position est x_i, et $\mathbf{X}$ est le vecteur position des atomes de la structure. N est le nombre total des atomes du système.

Le développement de l'énergie totale E_{tot} autour des positions d'équilibre des atomes x_0 peut être formulé à l'aide de la série de Taylor comme suit :

$$E_{tot}(\mathbf{x}) = E_{tot}(\mathbf{x}^{(0)}) + \left.\frac{dE_{tot}}{d\mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}} (\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(0)}) + \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(0)})^T \left.\frac{d^2E_{tot}}{d\mathbf{x}d\mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}} (\mathbf{x}-\mathbf{x}^{(0)}) \tag{II.43}$$

En définissant le déplacement $\mathbf{u} = \mathbf{X} - \mathbf{X}_0$ et en remplaçant l'équation (II.43) dans l'équation (II.41), l'équation du problème est obtenue de manière similaire à la méthode FEM comme :

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{P} \tag{II.44}$$

Où **K**, **u** et **P** sont la matrice de rigidité non linéaire, le vecteur de déplacement incrémental et le vecteur de forces résiduelles (ou le vecteur de forces hors équilibre) du système. Ces quantités peuvent être déterminées à l'aide des formules suivantes telles que rapportées dans l'article de Liu et al. [7]:

$$\mathbf{K} = \left.\frac{\partial^2 E_{tot}}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}} = \left.\frac{\partial^2 U_{tot}}{\partial \mathbf{x}\ \partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}} \tag{II.45}$$

$$\mathbf{P} = -\left.\frac{\partial E_{tot}}{\partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}} = \overline{\mathbf{F}} - \left.\frac{\partial U_{tot}}{\partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}} \tag{II.46}$$

Avec $\overline{\mathbf{F}}$ est le vecteur des forces externes appliquées aux atomes prescrits.

Donc, la détermination des positions des atomes nécessite la résolution de l'équation (II.44). Pour un système linéaire où les interactions sont décrites par des potentiels harmoniques comme ceux exprimés par les équations (II.4), (II.6) et (II.9), une seule itération est suffisante pour déterminer l'énergie minimale du système. L'approche à la réalité nécessite un potentiel non linéaire, dans ce cas l'équation du système devient non linéaire dont la solution est atteinte par un calcul itératif. Le temps de calcul du système décrit par l'équation (II.44) à l'aide d'un outil informatique est d'ordre O (MxN) comme indiqué par Liu et al. [7], où M est le nombre d'itérations nécessaires pour que P converge vers zéro et N est le nombre d'atomes du système. Liu et al. [7] ont trouvé que le nombre d'itérations M est indépendant du nombre des atomes N.

L'implémentation de l'AFEM sera détaillée dans le chapitre suivant, où elle servira de base pour notre étude des propriétés mécaniques des nanostructures de carbone.

II.3.3.4.2. Applications et limites de la méthode AFEM

La méthode AFEM a prouvé son efficacité et rapidité pour étudier les nanostructures de carbone. Nous le voyons dans les travaux de base de Liu et al. [7,106] qui ont montré la capabilité de cette méthode à être utilisée comme un outil puissant et rapide dans l'étude des CNTs. Après cela, nombreuses études ont été menées pour étudier le comportement mécanique des nanostructures de carbone. Nous mentionnons l'étude de Leung et al. [107] sur l'analyse du flambement des CNTs en utilisant la technique AFEM. Zhang et al. [108] ont appliqué la AFEM pour investiguer l'effet de la fonctionnalisation sur les propriétés mécaniques des SWCNTs. Gajbhiye et Singh [109] ont mené l'outil AFEM pour étudier la réponse en fréquence non linéaire d'une feuille de graphène monocouche (SLGS) sous l'impulsion et l'excitation harmonique. Malakouti et Montazeri [40] ont étudié le comportement mécanique des feuilles de graphène parfaites et en présence de certains types de défauts en utilisant la AFEM basée sur le potentiel de Tersoff-Brenner. Damasceno et al. [59] ont amélioré l'efficacité de l'AFEM en utilisant le potentiel REBO de deuxième génération afin d'étudier les propriétés mécaniques des nanorubans de graphène (GNRs), leurs travaux ont été étendus pour étudier les propriétés mécaniques du graphène sous différents défauts topologiques [88].

La méthode AFEM présente plusieurs avantages par rapport à la méthode MEF classique :

- Le calcul des matrices de rigidité et des vecteurs de force élémentaires des éléments AFEM est très précis en raison de l'utilisation directe des potentiels interatomiques, contrairement à la

méthode FEM qui utilise des fonctions d'approximation pour prédire le comportement des éléments.

- La méthode AFEM permet de détecter l'effet non local des atomes de la structure sur l'élément considéré du fait des termes multi-corps du potentiel utilisé, alors que cet effet est négligeable dans la méthode MEF.

- L'implémentation des éléments AFEM est très facile et ne nécessite pas de connaitre les repères locaux de ces éléments comme cela se fait dans la MEF.

Donc, la méthode AFEM a montré des avantages, en plus de sa simplicité à l'implémentation et sa rapidité à l'analyse des nanostructures par rapport aux autres méthodes rapportées dans cette thèse. En outre, des articles ont montré la finesse de la AFEM dans le couplage avec la MEF pour une modélisation multi-échelle sans rencontrer les problèmes de la réflexion des ondes mécaniques comme cela apparaitre au couplage entre la méthode DM et MEF.

II.3.3.5. Autres méthodes de simulation

Des modifications sont apportées à la méthode des éléments finis conventionnelles (MEF-MMC). L'une de ces améliorations on peut mentionner l'approche de la règle de Cauchy-Born qu'elle s'agit essentiellement d'une relation cinématique fondamentale reliant la déformation des vecteurs de réseau du cristal à celle d'un champ de déformation continu. Sous l'effet de cette approche, les informations sur les mouvements des atomes sont décrites par un champ de déformation uniforme [110]. Cette technique a connu des améliorations pour des déformations non linéaires et appliquées dans l'étude du comportement mécanique des CNTs comme rapporté dans les articles [111–113]. Par rapport à MEF-3D Beam et SPFEM, cette méthode présente des difficultés de mise en œuvre, ainsi que des résultats moins précis dans l'étude du comportement mécanique des nanostructures de carbone en présence de défauts.

Une autre approche a été introduite dans la méthode MEF par Eringen [114] qui suppose que la contrainte en un point est fonction des déformations en tous points du milieu continu. Sous cette hypothèse, l'approche de la mécanique des milieux continus (MMC) a été étendue pour prendre en compte l'effet des interactions moléculaires. Par conséquent, nous citons quelques applications de cette méthode à l'étude du comportement mécanique des nanostructures de carbone comme les travaux référencés par [115–117]. Néanmoins, les équations constitutives de cette approche sont très compliquées ce qui demande un calcul expansif et limité aux système de moins complexité.

II.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé les champs de forces (potentiels) développés pour décrire les différents types d'interactions entre les atomes, notamment les interactions les plus dominantes dans les nanostructures de carbone. Ensuite, nous avons justifié notre choix du potentiel selon la structure de carbone étudiée et la méthode utilisée. Par conséquent, pour les structures de graphène, nous avons choisi le potentiel de Stillinger-Weber en raison de sa capabilité de modéliser ce type de structures avec une grande précision en moins de temps de calcul par rapport à d'autres potentiels telles que Tersoff-Brenner, REBO et AIREBO comme rapporté dans l'article de Hossain et al. [62].

D’autre part, nous avons choisi le potentiel de Morse pour modéliser les nanocônes de carbone en raison de sa simplicité et rapidité par rapport aux autres potentiels utilisés. En outre, il a donnée des bons résultats dans l’étude des propriétés élastiques des nanotubes de carbone [53].

Par ailleurs, un état de l’art sur les différentes méthodes expérimentales et de simulations ont été abordées en montrant leurs capacités et leurs limites afin d’apporter notre contribution à cette recherche. Parmi les méthodes de simulation évoquées dans ce chapitre, la méthode des éléments finis atomiques a montré de nombreux avantages par rapport aux autres méthodes. Elle a prouvé sa capabilité en tant que technique de simulation rapide et fiable pour étudier les propriétés mécaniques des nanostructures de carbone et pour investiguer les différents types de défauts présents dans ces nanostructures avec une grande précision.

Dans cette thèse, nous utiliserons la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) en développant des modèles stables, facile à l’implémentation, et capables de décrire la majorité des interactions interatomiques induites dans les nanostructures de carbone. Cette méthode sera bien détaillée dans le chapitre suivant, puis notre contribution sera apportée à cette méthode par le développement des nouveaux modèles éléments finis atomiques qui servent à décrire les interactions non locales exprimées par les potentiels de Stillinger-Weber et de Morse, ainsi que celles exprimées par le potentiel de torsion. Le premier modèle est basé sur un élément AFEM à dix atomes afin de modéliser les interactions interatomiques décrites par le potentiel de Stillinger-Weber pour étudier les structures de graphène sans défauts, puis en présence de certaines formes de défauts. Le deuxième modèle est basé sur un élément AFEM à dix-neuf atomes afin de modéliser les interactions de l’élongation des liaisons interatomiques, de la flexion des angles de valence décrites par le potentiel de Morse et les interactions de la torsion des angles dièdres décrites par le potentiel harmonique, et ça pour l’étude des nanocônes de carbone (CNC) vierges, puis en présence de certains pourcentages des imperfections.

Chapitre III

Formulation de la méthode des éléments finis atomiques (AFEM)

III.1. Introduction

Dans le chapitre précédent, on a mentionné que le principe de la méthode des éléments finis atomiques (AFEM) ressemble à celui de la méthode des éléments finis conventionnelle (MEF) en se basant sur l'approche de la minimisation de l'énergie potentielle totale du système pour trouver les positions des atomes à l'état d'équilibre. Cette procédure permet de résoudre l'équation du système (II.45) qui sera détaillée dans les parties suivantes. Alors, dans ce chapitre nous essayons de faire la mise en œuvre de la méthode AFEM en une dimension (1D). Ensuite, nous l'agrandissons en deux dimensions (2D) puis en trois dimensions (3D). Le comportement des éléments AFEM sera décrit par le potentiel de Lennard Jones qui est fréquemment utilisé dans le test de la méthode DM et la méthode AFEM. La vérification de la fiabilité et de la précision de la méthode AFEM développée en 1D et 2D sera abordée dans les dernières parties de ce chapitre, en se basant sur l'étude de Damasceno et al. [118].

III.2. Formulation AFEM en une dimension (1D)

Pour expliquer la procédure de la méthode AFEM, nous utilisons la structure unidimensionnelle de la figure (III.1). Cette structure est constituée de cinq atomes. Dans cet exemple, nous expliquons les interactions locales et non locales qui sont prise en compte dans la plupart des potentiels interatomiques. Pour cela, deux éléments AFEM sont proposés. Le premier est un élément AFEM à trois atomes permet de modéliser les interactions locales, tandis que le deuxième est un élément AFEM à cinq atomes permet de détecter l'effet non local en plus de l'effet local des interactions interatomiques induites dans cette structure.



Figure (III.1): Illustration de la structure unidimensionnelle composée de cinq atomes.

III.2.1 Modélisation des interactions locales

Dans AFEM, les interactions locales sont les interactions qui se produisent entre l'atome i et ses premiers atomes voisins (liés directement par des liaisons covalentes). Ce type d'interaction peut être décrit par le potentiel de l'élongation des liaisons interatomiques. Le potentiel de Lennard Jones peut également décrire ces interactions en éliminant l'effet non local des autres atomes à travers une distance de coupure r_{cut} en vérifiant la condition $r_{cut} < 2 \cdot r_{ij}$, où r_{ij} est la longueur de la liaison covalente C-C lie l'atome i et j. De ce fait, un élément à trois atomes (AFEM 3) permet de modéliser les interactions locales induites dans la structure unidimensionnelle de la figure (III.1), cet élément est illustré dans la figure (III.2).

L'énergie interatomique totale stockée dans l'atome i de cet élément est exprimée par la formule suivante en utilisant un potentiel à deux corps comme le potentiel de Lennard Jones:

$$U_{tot}^{i} = U(r_{i,i-1}) + U(r_{i,i+1}) \qquad \text{(III.1)}$$

Cette formule indique que l'énergie interatomique totale de l'atome i est affectée par le mouvement des atomes i-1 et i+1 qui sont liés directement avec lui par des liaisons covalentes. Le terme $U_{i,i-1}$ est en fonction de la distance interatomique $r_{i,i-1}$ qui dépend des coordonnées des atomes i et i-1, alors que l'énergie $U_{i,i+1}$ est en fonction de la distance interatomique $r_{i,i+1}$ qui dépend des coordonnées des atomes i et i+1.

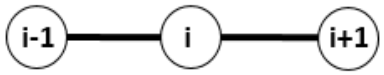


Figure (III.2): AFEM à trois atomes pour modéliser l'effet local des atomes voisins.

La première étape de la méthode AFEM consiste à construire la matrice de rigidité élémentaire et le vecteur force élémentaire de chaque élément AFEM 3 associé à chaque atome de la structure, à l'exception des atomes 1 et 5 qui nécessite de modifier l'élément AFEM 3 en fonctions des atomes de connectivités manquants.

La matrice de rigidité élémentaire et le vecteur des forces élémentaire de l'élément AFEM 3 peuvent être calculés en remplaçant l'équation (III.1) dans les équations (II.46) et (II.47) respectivement, nous obtenons :

$$K_i^{AFEM3} = \begin{matrix} \#\text{i} \\ \\ \#\text{i}-1 \\ \\ \#\text{i}+1 \end{matrix} \begin{matrix} \#\text{i} & \#\text{i}-1 & \#\text{i}1 \\ \left[\begin{matrix} \dfrac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_i} & \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i-1}} & \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i+1}} \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_{i-1} \partial x_i} & 0 & 0 \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_{i+1} \partial x_i} & 0 & 0 \end{matrix}\right. \end{matrix} \qquad \text{(III.2)}$$

$$P_i^{AFEM3} = \begin{matrix} \#\text{i} \\ \\ \#\text{i}-1 \\ \\ \#\text{i}+1 \end{matrix} \begin{matrix} \left[\begin{matrix} \dfrac{\partial U_{tot}^i}{\partial x_i} \\ 0 \\ 0 \end{matrix}\right. \end{matrix} \qquad \text{(III.3)}$$

Puisque l'élément AFEM à 3 atomes est centré à l'atome i, les rigidités nodales des atomes voisins i-1 et i+1 n'ont aucun effet dans cet élément c a d $\dfrac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial \mathbf{X_j} \partial \mathbf{X_j}} = 0$. La transmission de la rigidité de l'atome i vers l'atome voisin j est multipliée par ½ du fait de la réciprocité du calcul de ces rigidités dans l'élément AFEM 3 centré à l'atome j et qui sera doublé dans la matrice de rigidité globale de la structure due au chevauchement des éléments AFEM. Par conséquent, le chevauchement des éléments AFEM aux atomes i permet de prédire précisément l'effet non local décrit par le potentiel multi corps comme nous allons voir dans les parties suivantes.

Par exemple : l'énergie totale U_{tot}^{2}, la matrice de rigidité élémentaire K_2^{AFEM3} et le vecteur force élémentaire P_2^{AFEM3} de l'élément AFEM 3 centré à l'atome 2 sont donnés comme suit :

$$U_{tot}^{2} = U(r_{12}) + U(r_{23}) \tag{III.4}$$

$$K_2^{AFEM3} = \begin{array}{c} \begin{matrix} \#2 & \#1 & \#3 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 U_{tot}^{2}}{\partial x_2 \partial x_2} & \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^{2}}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^{2}}{\partial x_2 \partial x_3} \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^{2}}{\partial x_1 \partial x_2} & 0 & 0 \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^{2}}{\partial x_3 \partial x_2} & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{matrix} \\ \#2 \\ \#1 \\ \#3 \end{matrix} \tag{III.5}$$

$$P_2^{AFEM3} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial U_{tot}^{2}}{\partial x_2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \#2 \\ \#1 \\ \#3 \end{matrix} \tag{III.6}$$

De la même manière, on calcule K_3^{AFEM3} , P_3^{AFEM3} , K_4^{AFEM3} et P_4^{AFEM3} des éléments AFEM 3 définis par les atomes 3 et 4 respectivement. En revanche, les matrices de rigidité élémentaires et les vecteurs forces élémentaires des éléments AFEM centrés aux atomes 1 et 5 sont calculés par la modification des éléments AFEM 3 en fonction de leurs atomes voisins manquants. Par exemple, nous modifions l'élément AFEM au niveau de l'atome 1 pour ne considérer que l'interaction entre l'atome 1 et l'atome 2 exprimée par la formule suivante :

$$U_{tot}^{1} = U(r_{12}) \tag{III.7}$$

D'où, la matrice de rigidité élémentaire et le vecteur force de l'élément AFEM défini à l'atome 1 peuvent s'écrire comme suit :

$$K_1^{AFEM2} = \begin{array}{c} \begin{matrix} \#1 & \#2 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 U_{tot}^{1}}{\partial x_1 \partial x_1} & \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^{1}}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \cdot & \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial^2 U_{tot}^{1}}{\partial x_1 \partial x_2} & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{matrix} \#1 \\ \\ \#2 \end{matrix} \tag{III.8}$$

$$P_1^{AFEM2} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial U_{tot}^1}{\partial x_1} \\ \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \#1 \\ \\ \#2 \end{matrix} \tag{III.9}$$

Les formules de K_5^{AFEM2} et P_5^{AFEM2} de l'atome 5 sont établis par la même façon, où l'atome 5 interagit avec l'atome 4.

Après la préparation des matrices de rigidités élémentaires et des vecteurs force élémentaires, nous assemblons ces éléments au niveau des dégrées de liberté de leurs atomes pour construire la matrice de rigidité globale **K** et le vecteur force global **P** de la structure unidimensionnelle telle qu'implémenté dans la méthode MEF classique. D'où la matrice de rigidité globale et le vecteur forces globale de la structure unidimensionnelle de cinq atomes deviennent comme suit :

$$\mathbf{K} = \begin{matrix} \#1 & \#2 & \#3 & \#4 & \#5 & \\ \end{matrix} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 U_{tot}^1}{\partial x_1 \partial x_1} & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2 U_{tot}^1}{\partial x_1 \partial x_2} + \dfrac{\partial^2 U_{tot}^2}{\partial x_1 \partial x_2}\right) & 0 & 0 & 0 & \#1 \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2 U_{tot}^1}{\partial x_2 \partial x_1} + \dfrac{\partial^2 U_{tot}^2}{\partial x_2 \partial x_1}\right) & \dfrac{\partial^2 U_{tot}^2}{\partial x_2 \partial x_2} & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2 U_{tot}^2}{\partial x_2 \partial x_3} + \dfrac{\partial^2 U_{tot}^3}{\partial x_2 \partial x_3}\right) & 0 & 0 & \#2 \\ 0 & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2 U_{tot}^2}{\partial x_3 \partial x_2} + \dfrac{\partial^2 U_{tot}^3}{\partial x_3 \partial x_2}\right) & \dfrac{\partial^2 U_{tot}^3}{\partial x_3 \partial x_3} & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2 U_{tot}^3}{\partial x_3 \partial x_4} + \dfrac{\partial^2 U_{tot}^4}{\partial x_3 \partial x_4}\right) & 0 & \#3 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2 U_{tot}^3}{\partial x_4 \partial x_3} + \dfrac{\partial^2 U_{tot}^4}{\partial x_4 \partial x_3}\right) & \dfrac{\partial^2 U_{tot}^4}{\partial x_4 \partial x_4} & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2 U_{tot}^4}{\partial x_4 \partial x_5} + \dfrac{\partial^2 U_{tot}^5}{\partial x_4 \partial x_5}\right) & \#4 \\ 0 & 0 & 0 & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial^2 U_{tot}^4}{\partial x_5 \partial x_4} + \dfrac{\partial^2 U_{tot}^5}{\partial x_5 \partial x_4}\right) & \dfrac{\partial^2 U_{tot}^5}{\partial x_5 \partial x_5} & \#5 \end{bmatrix} \tag{III.10}$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial U_{tot}^1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial U_{tot}^2}{\partial x_2} & \dfrac{\partial U_{tot}^3}{\partial x_3} & \dfrac{\partial U_{tot}^4}{\partial x_4} & \dfrac{\partial U_{tot}^5}{\partial x_5} \end{bmatrix}^T \tag{III.11}$$

Avec $[\ ]^T$ est le vecteur transposé.

III.2.2. Modélisation des interactions non locales

Ces interactions se produisent entre l'atome étudié et les atomes voisins qui se trouvent à une distance supérieure à $2 \cdot r_{ij}$, telle que r_{ij} est la longueur de la liaison chimique entre l'atome i et son premier atome voisin j. Ce type des interactions peut être décrit par le potentiel de Lennard Jones ou un potentiel multi-corps comme les potentiels de Tersoff-Brenner, REBO, AIREBO et de Stillinger-Weber. Dans l'exemple de la figure (III.1), un élément AFEM à 5 atomes permet de modéliser les interactions non locales. L'élément AFEM à 5 atomes défini par son atome central i et 4 atomes voisins est illustré dans la figure (III.3), tel que les premiers atomes voisins sont les atomes i-1 et i+1 qui sont liés directement à l'atome i par des liaisons chimiques (covalentes), alors que les deuxièmes atomes voisins sont les atomes i-2 et i+2 qui ne sont pas liés à l'atome i par des liaisons chimiques.

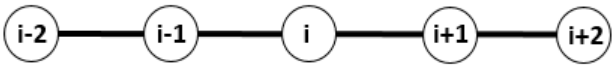


Figure (III.3): Elément AFEM à cinq atomes pour modéliser l'effet local et non local avec les atomes voisins.

L'énergie interatomique totale de l'élément AFEM à 5 atomes qui est stockée à l'atome central i peut être calculée en utilisant le potentiel de Lennard Jones ajusté par une distance de coupure vérifiant la condition $r_{eq} < 3 \cdot r_{ij}$. Elle s'écrit par la formule suivante :

$$U_{tot}^{i} = U(r_{i,i-1}) + U(r_{i,i-2}) + U(r_{i,i+1}) + U(r_{i,i+2}) \tag{III.12}$$

En remplaçant l'expression (III.12) dans les équations (II.46) et (II.47), la matrice de rigidité élémentaire et le vecteur force élémentaire de l'élément AFEM 5 peuvent s'écrit comme suit :

$$K_i^{AFEM\ 5} = \begin{array}{c} \begin{matrix} \#i & \#i-1 & \#i-2 & \#i+1 & \#i+2 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_i} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i-1}}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i-2}}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i+1}}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i+2}}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i-1}}\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i-2}}\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i+1}}\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i+2}}\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{matrix} \#i \\ \#i-1 \\ \#i-2 \\ \#i+1 \\ \#i+2 \end{matrix} \tag{III.13}$$

$$P_i^{AFEM\ 5} = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_{tot}^i}{\partial x_i} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \#i \\ \#i-1 \\ \#i-2 \\ \#i+1 \\ \#i+2 \end{matrix} \tag{III.14}$$

Dans l'exemple de la structure de la figure (III.1), seul l'atome 3 peut être modélisé par l'élément AFEM 5 complet. La forme de K^{AFEM} et P^{AFEM} des éléments AFEM des autres atomes doivent être modifiés. Par exemple, l'atome 2 interagit avec l'atome 1 et 3 par un effet local et avec l'atome 4 par un effet non local, d'où cet atome nécessite un élément AFEM à 4 atomes.

Les procédures de préparation de K^{AFEM} et P^{AFEM} , ainsi que la construction de K et P sont les mêmes que celles utilisées dans le cas de l'élément AFEM à 3 atomes.

En effet, on peut agrandir l'élément AFEM en introduisant d'autres atomes interagissant avec l'atome i en augmentant la distance de coupure pour prédire les interactions non locales avec une grande précision, mais ça dépend de la forme de la structure des atomes, le potentiel utilisé et le but de la simulation.

Néanmoins, les éléments AFEM proposés dans les structures unidimensionnelles sont capables de modéliser les interactions décrites par des potentiels à deux corps (considère un pair d'atomes seulement) sans prendre en considération les rotations des liaisons interatomiques qui peuvent affecter la stabilité et la forme de la structure en deux dimensions et trois dimensions.

III.3. Formulation AFEM en deux dimension (2D)

III.3.1. Les interactions locales décrites par le potentiel à deux corps

Dans les structures bidimensionnelles, les positions des atomes peuvent être exprimées en deux coordonnées (x,y). La distance interatomique entre l'atome i et j est calculée par la formule suivante :

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \qquad \text{(III.15)}$$

Le choix des éléments AFEM pour discrétiser la structure en 2D dépend du réseau de distribution des atomes de cette structure et du type de potentiel. Par exemple, pour la structure illustrée dans la figure (III.4) en supposant que les atomes interagissent entre eux à travers un potentiel à deux corps (potentiel de Lennard Jones par exemple), l'élément AFEM approprié pour modéliser cette structure est un élément à 7 atomes comme illustré dans la figure (III.5).

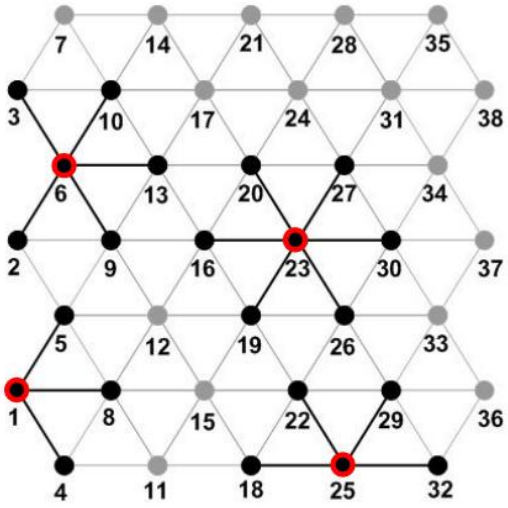


Figure (III.4): Structure bidimensionnelle constituée d'un réseau triangulaire d'atomes. Cette figure est de la référence [118].

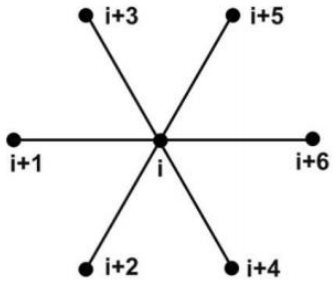


Figure (III.5): Représentation en 2D d'un élément AFEM à sept atomes.
Extrait de la référence [118].

L'élément AFEM 7 choisi dans cet exemple est capable de détecter les interactions locales seulement (entre l'atome central i et les premiers atomes voisins liés avec lui directement par des liaisons chimiques).

L'énergie totale de l'élément AFEM 7 est stocké à l'atome i et exprimée par la formule suivante :

$$U_{tot}^{i} = U(r_{i,i+1}) + U(r_{i,i+2}) + U(r_{i,i+3}) + U(r_{i,i+4}) + U(r_{i,i+5}) + U(r_{i,i+6}) \tag{III.16}$$

Cette formule indique que l'énergie de l'atome i est la somme des interactions entre l'atome i et ses voisins. En substituant la formule (III.16) dans les formules (II.46) et (II.47), la matrice de rigidité élémentaire K^{AFEM} et le vecteur force élémentaire P^{AFEM} de l'élément AFEM 7 prennent les formes suivantes :

$$K_i^{AFEM\ 7} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial y_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i+1}} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial y_{i+1}} & \cdots & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_{i+6}} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial y_{i+6}} \\ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_i \partial x_i} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_{i+1} \partial x_i} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_{i+1} \partial x_i} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_{i+6} \partial x_i} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_{i+6} \partial x_i} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{III.17}$$

$$P_i^{AFEM\ 7} = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_{tot}^i}{\partial x_i} \\ \frac{\partial U_{tot}^i}{\partial y_i} \\ (0 \quad)_{12\times 1} \end{bmatrix} \tag{III.18}$$

Donc, puisque chaque nœud (atome) de l'élément AFEM 7 possède deux degrés de liberté (2 DDL), la taille de K_i^{AFEM7} est de (14x14), ainsi que la taille de P_i^{AFEM7} est de (14x1).

Ensuite, les procédures de calcul des K^{AFEM} et P^{AFEM} des éléments AFEM et de la construction de $\mathbf{K}$ et $\mathbf{P}$ dans le problème bidimensionnel sont les même que celles utilisées dans le problème unidimensionnel. D'autre part, l'élément AFEM 7 doit être modifié pour modéliser certains atomes particuliers auxquels manquent certains atomes voisins. Par exemple, l'atome 1 à trois atomes voisins, d'où l'énergie interatomique totale de cet atome résulte de la participation des énergies interatomiques des liaisons formées par l'atome 1 et ses trois atomes voisins et qui peut s'écrire comme suit :

$$U_{tot}^{1} = U(r_{14}) + U(r_{15}) + U(r_{18}) \qquad \text{(III.19)}$$

De plus, l'élément AFEM 7 se réduit à un élément à quatre atomes dont la matrice de rigidité élémentaire est de (8x8) et le vecteur force élémentaire est de (8x1). De la même manière, les atomes 5 et 6 nécessitent des éléments AFEM incomplets de type AFEM 6, tandis que les atomes 11, 14, 18, 21, 25 et 28 nécessitent des éléments AFEM 5.

Néanmoins, les éléments AFEM choisis dans cet exemple ne peuvent pas modéliser la structure bidimensionnelle réelle comme la structure du graphène, par ce qu'ils sont incapables de modéliser les interactions non locales incorporées dans les termes de flexion des angles de valence et de torsion des angles dièdres.

III.4. Vérification de l'exactitude de la méthode AFEM

La formulation de la méthode AFEM en 1D et en 2D a été déjà validé dans les travaux de Damasceno et al. [118] en comparant les résultats obtenus par AFEM avec ceux calculés par la méthode de la dynamique moléculaire. D'où, nous aborderons dans cette partie leurs résultats.

III.4.1. Problème en une dimension (1D)

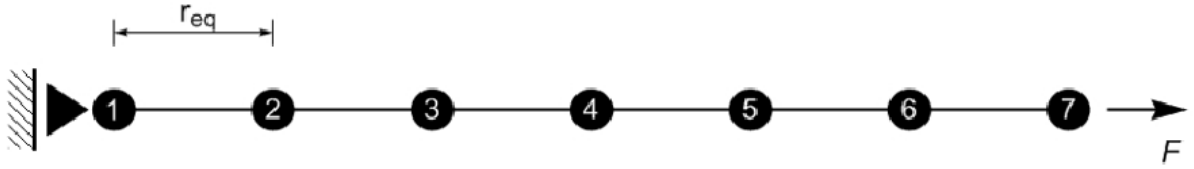


Figure (III.6): Illustration d'une structure unidimensionnelle composée de sept atomes. La figure a été extraite de l'article [118].

Pour vérifier la fiabilité et la précision de la méthode AFEM dans l'étude des structures unidimensionnelles, Damasceno et al. [118] Ont étudié une chaine composée de sept atomes (voir la figure (III.6)) par la méthode AFEM en choisissant un élément AFEM à cinq atomes. Les interactions entre les atomes de cette structure sont décrites par le potentiel de Lennard Jones dont les paramètres sont simplifiés à $\sigma = 1$ et $\varepsilon = 1$. La distance interatomique initiale pour tous les paires d'atomes a été supposé constante et égale à la distance d'équilibre r_{eq} définit par le potentiel de Lennard Jones.

De plus, des conditions aux limites ont été appliquées en fixant le déplacement de l'atome 1 et en appliquant une force de traction à l'atome 7, où cette force varie de 0 à 2.5 ev/A (1 ev/A=1.6022nN). Les résultats obtenus ont été comparés avec les résultats de la méthode DM réalisée dans le logiciel LAMMPS. Le comportement de la structure unidimensionnelle prédit par les deux méthodes, l'erreur relative entre les deux méthodes et le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence (nous avons trouvé $P = 10^{-11}$ dans cet exemple) pour chaque incrément de charge à l'aide d'AFEM sont présentés dans les figures (III.7. (a)-(c)). Les résultats de déformations prédites par la méthode AFEM coïncident bien avec ceux de la méthode DM avec une erreur apportée à 10^{-5}. Pour chaque incrément de charge, la méthode DM a pris 1000 itérations pour atteindre l'équilibre, tandis que la méthode AFEM a nécessité de 4 à 8 itérations.

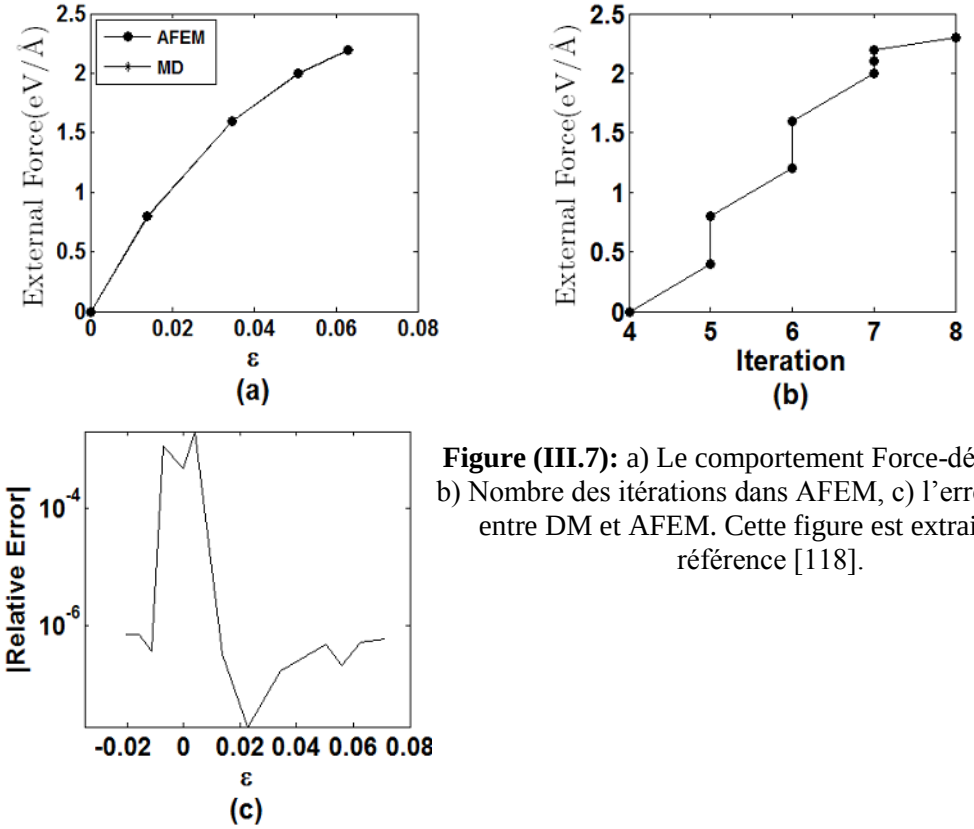


Figure (III.7): a) Le comportement Force-déformation, b) Nombre des itérations dans AFEM, c) l'erreur relative entre DM et AFEM. Cette figure est extraite de la référence [118].

La grande différence entre les deux méthodes en termes de nombre des itérations montre la rapidité de la méthode AFEM dans l'analyse statique des structures unidimensionnelles.

Par conséquent, les résultats obtenus par les deux méthodes démontrent la validité de la méthode AFEM pour étudier les structures unidimensionnelles.

III.4.2. Problème en deux dimensions (2D)

Afin de valider la méthode AFEM dans l'étude des structures bidimensionnelles, Damasceno et al. [118] ont étudié une structure de 655 atomes distribués comme un réseau triangulaire en utilisant à la fois les méthodes AFEM et DM basées sur le potentiel Lennard Jones avec les mêmes paramètres utilisées dans l'étude de la structure unidimensionnelle susmentionnée. Le modèle utilisé dans la méthode AFEM est un élément AFEM à sept atomes comme celui défini dans la figure (III.5). La structure bidimensionnelle est représentée dans la figure (III.8), où les

atomes de son bord gauche sont bloqués dans les deux directions (x et y), alors que les atomes de son bord droit sont tractés par des forces dans la direction x.

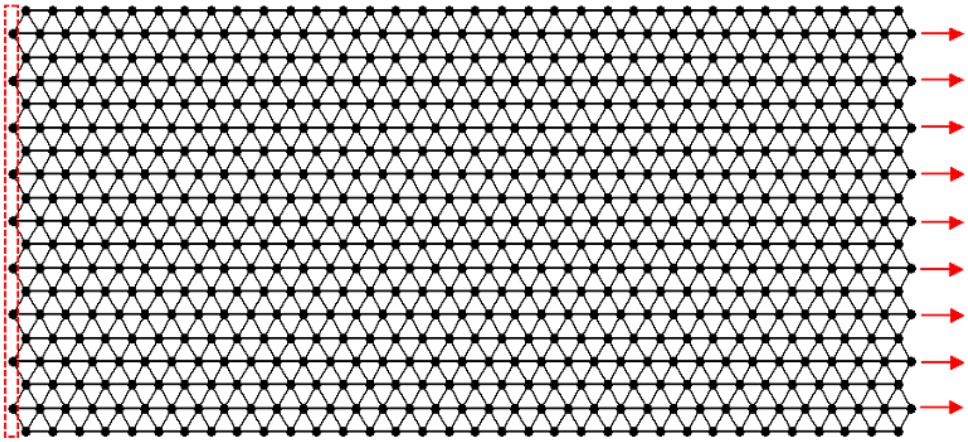


Figure (III.8): Structure bidimensionnelle sous forme d'un réseau des triangles en 2D exposée à un test de traction. Cette figure extrait de l'article [118].

Leur travail a montré un meilleur accord entre les résultats des deux méthodes. De plus, la méthode AFEM a pris 7 itérations au maximum pour trouver l'état d'équilibre du système, tandis que la méthode DM a pris 50000 itérations. Ces résultats confirment une fois de plus la précision et la rapidité de la méthode des élément finis atomique dans l'analyse du comportement mécanique des structures d'atomes en une dimension et en deux dimensions.

III.4.3. Le temps de calcul de la méthode AFEM

La procédure de la mise en œuvre de la méthode AFEM se divise en trois étapes :

- La première étape consiste à la formulation de la matrice de rigidité élémentaire $\mathbf{K}^{AFEM}$ et le vecteur force élémentaire $\mathbf{P}^{AFEM}$ de chaque élément AFEM.
- La deuxième étape est la construction de la matrice de rigidité globale $\mathbf{K}$ et du vecteur forces global $\mathbf{P}$ de la structure en assemblant les éléments AFEM au niveau des degrés de liberté de leurs nœuds.
- La troisième étape consiste à appliquer les conditions aux limites puis à résoudre le problème $\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}=\mathbf{P}$.

Comme il a montré par Liu et al.[7], le temps de calcul de la matrice $\mathbf{K}$ et du vecteur $\mathbf{P}$ est proportionnel au nombre des atomes de la structure. De plus, le temps de la résolution du système de N atomes est de l'ordre de O(N) en raison des rangées de zéros éléments dans $\mathbf{K}$ (the sparnesse of $\mathbf{K}$ en anglais).

En outre, le nombre d'itérations nécessaires pour résoudre l'équation du système $\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}=\mathbf{P}$ dépend de la forme de la fonction du potentiel interatomique. Pour un système décrit par un potentiel de forme linéaire comme le potentiel de l'équation (II.4), une seule itération est suffisante pour atteint l'équilibre.

Dans le cas d'un système non linéaire, la résolution de l'équation $\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}=\mathbf{P}$ prend M itérations, où le nombre des itérations M est indépendant du nombre des atomes. Le temps de la résolution

du système non linéaire est de l'ordre de O(MxN). La propriété O(MxN) démontre la rapidité de la méthode AFEM par rapport à la méthode DM qui est basée sur des méthodes de résolutions d'ordre $O(N^2)$ comme la méthode du gradient conjugué.

III.5. Conclusion

L'implémentation des éléments AFEM en 1D et en 2D a été bien détaillé dans ce chapitre afin de montré comment choisir les éléments AFEM en fonction de la géométrie de la structure étudiée et du type de potentiel utilisé. De plus, les procédures de la mise en œuvre de la méthode AFEM ont été également expliquées. En fin, la présente méthode a été validée par la comparaison des résultats avec ceux de la dynamique moléculaire (DM) en 1D et en 2D.

Néanmoins, le développement de la méthode des éléments finis atomiques en 1D et 2D, ainsi que sa validation en utilisant la méthode de la dynamique moléculaire dans ce chapitre est limité à l'utilisation du potentiel de Lennard Jones, où les rotations des liaisons interatomiques dans le plan et hors plan de la structure sont négligées. Dans la réalité, plusieurs interactions interatomiques se produisent dans les nanostructures de carbone et dans les nanomatériaux en général, parmi lesquelles, les interactions de l'élongation des liaisons covalentes, les interactions de flexion des angles de valence et les interactions de torsion des angles dièdres sont les plus dominantes dans les nanostructures de carbone comme rapporté dans le chapitre de la littérature. En outre, le mouvement des atomes sous l'effet de ces interactions se fait dans les trois directions de l'espace (x,y,z), ce qui conduit à des mouvements complexes (comme la distorsion de la structure 3D du nanotube de carbone). Par conséquent, la bonne description de ces interactions tout en respectant la géométrie de la structure dans la réalité conduit à un choix judicieux du modèle AFEM approprié. Dans le chapitre suivant, nous tenterons d'améliorer les modèles AFEM pour étudier le comportement mécanique des nanostructures de carbone avec une grande précision dans un temps de calcul très court. Ensuite, Nos modèles proposés seront prouver leurs efficacités dans l'investigation des défauts dans ces nanostructures.

Chapitre IV

Développement d'un modèle AFEM non linéaire approprié pour étudier les propriétés mécaniques du graphène vierge et en présence de certaines formes de nanopores

IV.1. Introduction

La méthode AFEM a été déjà utilisée dans l'étude des propriétés élastiques et à la rupture du graphène en se basant sur les potentiels de Tersoff-Brenner [40,59] et REBO [59,88]. Les potentiels utilisés dans ces études ont donné des résultats acceptables dans un temps de calcul standard. Néanmoins, des études ont montré que ces potentiels sont moins précis dans le calcul des propriétés élastiques [62]. Afin d'apporter notre contribution par le développement d'un modèle AFEM très précis et facile à mettre en œuvre, nous avons choisi le potentiel de Stillinger-Weber qui a prouvé de meilleurs résultats dans la prédiction des propriétés élastiques et de la rupture du graphène et des nanotubes de carbone [62] en comparaison avec les autres potentiels rapportés dans la littérature. Ensuite, la précision du modèle AFEM présent sera vérifiée en comparant nos résultats avec ceux de la littérature.

En revanche, la présence de certaines formes de nanopores a un effet significatif sur les propriétés mécaniques du graphène. L'investigation de ces nanopores nous permet de faire bon usage du graphène nanoporeux dans des applications de filtration telles que le dessalement de l'eau de mer, la séparation des gaz et les canaux ioniques [46,87]. Par conséquent, nous étudierons l'effet de différentes formes de nanopores sur les propriétés mécaniques du graphène en utilisant le modèle AFEM développé.

IV.2. Le potentiel interatomique proposé

A) Potentiel de Stillinger Weber

Le potentiel Stillinger-Weber (SW) est considéré comme l'un des plus performants pour prédire les propriétés mécaniques et thermiques de nombreux matériaux covalents. Le potentiel originel du système atomique a été développé par F. H. Stillinger et T. A. Weber [63] et il s'exprime par les termes de la formule (II.18) et (II.19). Ces termes sont à nouveau réécrits comme suit :

$$U_b = A\varepsilon(B\frac{\sigma^4}{r^4} - 1)\exp(\frac{\sigma}{r - r_c}) \tag{IV.1}$$

$$U_\theta = \lambda\varepsilon(\cos\theta - \cos\theta_0)^2 \exp(\frac{2\gamma\sigma}{r - r_c}) \tag{IV.2}$$

Où U_b et U_θ sont respectivement le terme de l'élongation des liaisons interatomiques et le terme de flexion des angles de valence. Les paramètres du potentiel SW ont été rapportées par Hossain et al. [62] comme suit :

A=38.39709, B=0.09399, σ=0.2025 nm, γ=0.55, ε=0.16022 nN.nm et λ=41.

La distance de coupure est prise égale à $r_c = \sqrt{3} \cdot r_0$, Cette distance de coupure est bien en accord avec les conditions rapportées par Hossain et al. [62].

En effet, Les résultats obtenus par Hossain et al. [62] ont prouvé que le potentiel de Stillinger-Weber est plus simple et prend moins de temps de calcul par rapport aux potentiels de Tersoff et AIREBO. Ces raisons nous ont motivés à choisir ce potentiel dans notre étude.

B) Les critères mécaniques du potentiel proposé

Les études sur le comportement à la rupture rapportées par T. Belytschko [53] ont révélé que le terme de flexion d'angle de liaison (angle de valence) U_θ a peu d'effet sur le comportement à la rupture, son rôle principal est d'assurer la configuration d'équilibre du graphène. En conséquence, l'énergie d'élongation de la liaison U_b exprimée par la formule (IV.1) est utilisée dans la présente étude pour définir les critères de rupture des liaisons interatomiques, son graphe est représenté sur la figure (IV.1). Cette figure montre trois points importants tels que mentionnés par T. C. Theodosiou et D. A. Saravanos [119] :

- Le point d'équilibre fondamental : ce point correspond à la distance interatomique d'équilibre r_0, à cet état l'énergie atteint son minimum global et les forces internes deviennent nulles (les interactions atomiques attractives et répulsives s'équilibrent).
- Le point d'inflexion : il correspond à la distance interatomique r_f et indique les valeurs maximales des efforts internes, au-delà de ce point, la rigidité de la liaison interatomique change de signe de positif à négatif et la structure ne peut pas retrouver son état initial non déformé.
- Le troisième point correspond à la limite d'interactions à laquelle l'énergie converge vers zéro.

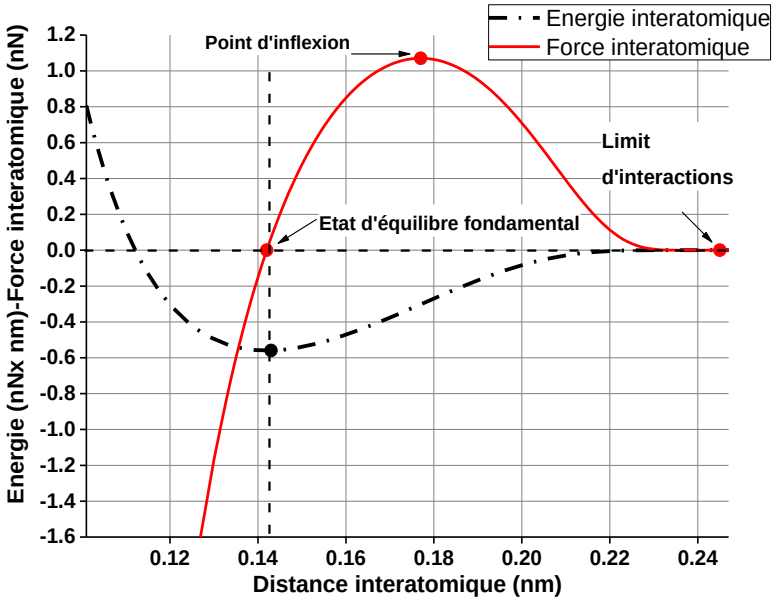


Figure (IV.1): Représentation du terme de l'énergie de l'élongation des liaisons interatomiques décrit par le potentiel de Stillinger-Weber (ligne noire pointé) et sa première dérivée (ligne rouge continue) en fonction de la longueur de la liaison interatomique.

D'après les critères de ruptures discutés aux travaux [103,120] et l'interprétation du potentiel présent, nous utilisons le critère du point d'inflexion où la liaison interatomique atteint sa résistance maximale à r_f=0.1776 nm (correspond à une déformation critique de 24.5 % de la liaison interatomique).

IV.3. Développement d'un modèle AFEM basé sur le potentiel proposé

La plupart des interactions qui se produisent entre les atomes du nanomatériau sont exprimées par le potentiel de la formule (II.2) comme mentionné dans le chapitre I. Cependant, dans les nanostructures bidimensionnelles de carbone comme le graphène, les interactions de l'élongation des liaisons interatomiques et celles-ci de flexion des angles de valence sont les plus dominantes par rapport aux autres interactions [55]. Par conséquent, la formule (II.2) se réduite à la formule suivante :

$$U_{tot} = U_b + U_\theta \tag{IV.3}$$

Où U_b et U_θ sont le terme de l'énergie de l'élongation des liaisons interatomiques et de l'énergie de flexion des angles de valence respectivement. La compréhension du comportement des atomes sous l'effet de ces deux types d'interactions nous permet de développer un élément AFEM fiable pour une simulation stable et précise dans l'étude du comportement mécanique du graphène.

Pour démontrer notre choix d'un élément AFEM adéquat, nous expliquerons les interactions de la formule (IV.3) qui se produisent entre un atome étudié et ceux qui l'entourent en se basant sur la figure (IV.2). Dans la structure de la figure (IV.2), chaque atome interagit avec ses atomes voisins à travers l'élongation et la rotation des liaisons covalentes (C-C).

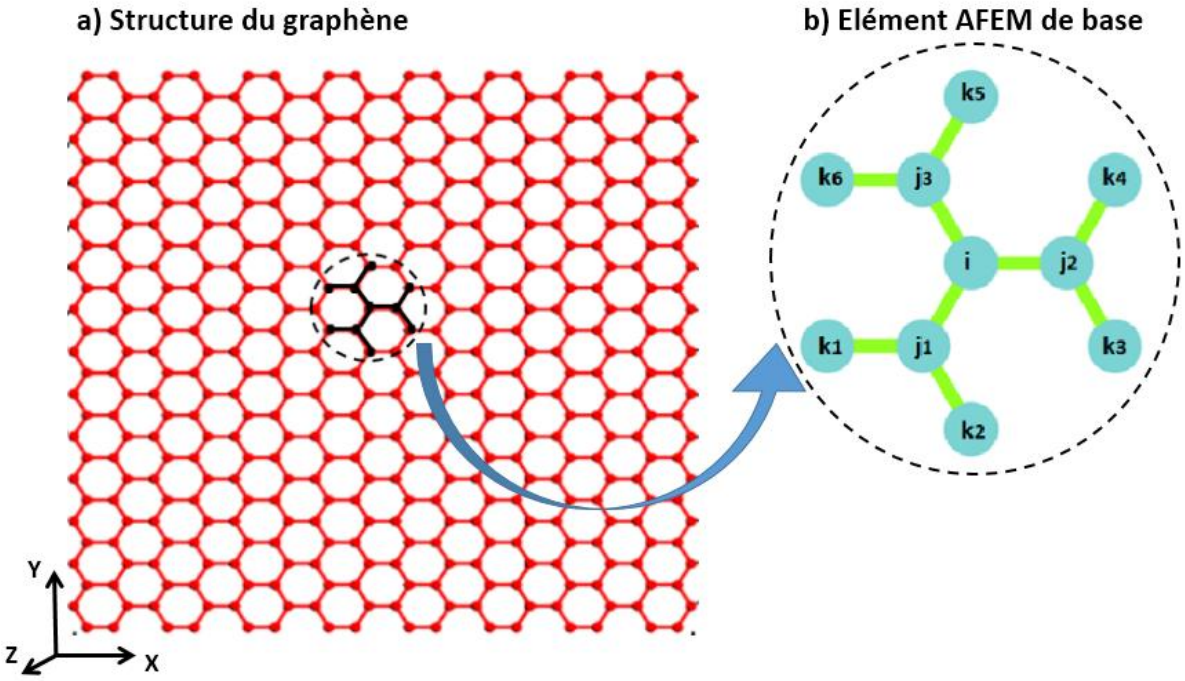


Figure (IV.2): a)Illustration de la structure du graphène, b) l'élément AFEM de base dans la modélisation du graphène par la méthode présente.

Par exemple, on prend un atome situé à l'intérieur de la structure du graphène (figure (IV.2a)), cet atome est lié directement à trois premiers atomes voisins par des liaisons covalentes, tandis qu'il n'est pas lié avec les deuxièmes atomes voisins par des liaisons covalentes.

Pour décrire le mécanisme d'interaction de l'atome étudié avec ses atomes voisins, nous choisissons la structure de dix atomes illustrée à la figure (IV.2b) qui peut représenter les interactions locales induites dans les liaisons covalentes liant l'atome i avec ses trois premiers atomes voisins, ainsi que les interactions non locales qui se produisent entre l'atome i et ses six deuxièmes atomes voisins.

L'énergie totale de l'atome i due à l'interaction de l'élongation des liaisons C-C liant cet atome avec ses trois premiers atomes voisins (j_1, j_2 et j_3) peut être calculée par la formule suivante :

$$U_b^{(i)} = U_b(r_{ij_1}) + U_b(r_{ij_2}) + U_b(r_{ij_3}) \tag{IV.4}$$

Où $U_b(r_{ij_1})$, $U_b(r_{ij_2})$ et $U_b(r_{ij_3})$ sont les termes du potentiel d'élongation des liaisons interatomiques de longueurs r_{ij_1}, r_{ij_2} et r_{ij_3} respectivement. Ces trois termes peuvent être calculées en utilisant la formule (IV.1) du potentiel de Stillinger Weber.

De plus les mouvements des premiers atomes voisins par rapport à l'atome i dans les trois directions du plan (u_x, u_y et u_z) peuvent conduire à des rotations relatives des liaisons interatomiques i-j_1, i-j_2 et i-j_3. Ce type d'interaction peut être décrit par le potentiel de flexion d'angle de valence de la formule (IV.2). Par conséquent l'énergie de flexion de l'angle de valence emmagasinée à l'atome i peut être exprimée comme suit :

$$U_\theta^{(i)} = U_\theta(\theta_{j_1ij_2}) + U_\theta(\theta_{j_2ij_3}) + U_\theta(\theta_{j_1ij_3}) \tag{IV.5}$$

Où $U_\theta(\theta_{j_1ij_2})$, $U_\theta(\theta_{j_2ij_3})$ et $U_\theta(\theta_{j_1ij_3})$ sont les termes du potentiel de flexion des angles de valence $\theta_{j_1ij_2}$, $\theta_{j_2ij_3}$ et $\theta_{j_1ij_3}$ respectivement. En se basant sur la figure (IV.3) ces trois angles de valence peuvent être calculées en utilisant les formules suivantes :

$$\theta_{j_1ij_2} = \frac{(r_{ij_1}{}^2 + r_{ij_2}{}^2 - r_{j_1j_2}{}^2)}{2\cdot(r_{ij_1}\cdot r_{ij_2})} \tag{IV.6}$$

$$\theta_{j_2ij_3} = \frac{(r_{ij_2}{}^2 + r_{ij_3}{}^2 - r_{j_2j_3}{}^2)}{2\cdot(r_{ij_2}\cdot r_{ij_3})} \tag{IV.7}$$

$$\theta_{j_1ij_3} = \frac{(r_{ij_1}{}^2 + r_{ij_3}{}^2 - r_{j_1j_3}{}^2)}{2\cdot(r_{ij_1}\cdot r_{ij_3})} \tag{IV.8}$$

Où la longueur de la liaison interatomique r_{ij} peut être calculée en utilisant la formule suivante ;

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \tag{IV.9}$$

Les autres longueurs de liaison interatomique sont calculées de la même manière que la liaison r_{ij}. On peut constater que les trois termes du potentiel de flexion des angles de valence déterminés par les premières liaisons covalentes ont un effet local sur l'énergie de l'atome i.

Cet effet n'est pas suffisant pour assurer la stabilité du modèle pendant la simulation. En outre, le mouvement de l'atome i peut affecter la déformation des angles de valence des triplets (ij_1 k_1), (ij_1 k_2), (ij_2 k_3), (ij_2 k_4), (ij_3 k_5) et (ij_3 k_6). Par exemple, l'angle de valence du triplet (ij_1 k_1) peut etre exprimé comme suit :

$$\theta_{ij_1k_1} = \frac{(r_{j_1i}{}^2 + r_{j_1k_1}{}^2 - r_{ik_1}{}^2)}{2\cdot(r_{j_1i}\cdot r_{j_1k_1})} \qquad \text{(IV.10)}$$

Où les distances interatomiques r_{ji}, r_{jk} et r_{ik} peuvent être calculées en utilisant la formule (IV.9).

De même, les autres cinq angles de valence peuvent être calculés.

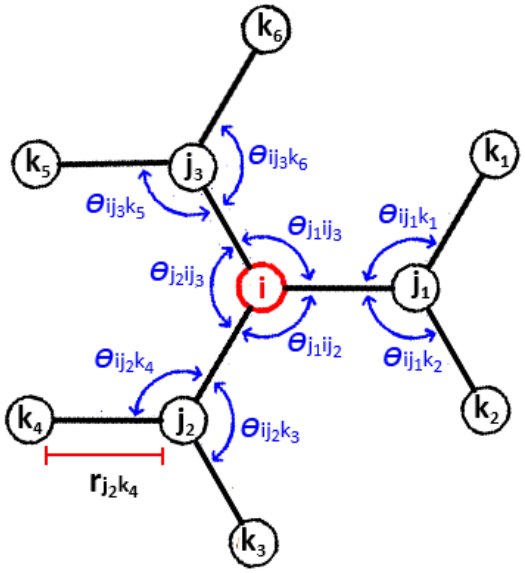


Figure (IV.3): Représentations des rotations des angles de valence possibles dans l'interaction de l'atome i avec ses atomes voisins.

Les formules des angles de valence de ces six triplets montrent que l'atome i participe par ses coordonnées au calcul de ces angles. Par conséquent, la déformation de ces angles affecte les coordonnées de l'atome i et donc son énergie totale. A travers ces termes d'angles, nous pouvons étendre la formule du terme de flexion des angles de valence (IV.5) pour tient compte l'effet non local implicite dans ces six angles. La formule du potentiel de flexion des angles de valence devient :

$$\begin{aligned} U_\theta^{(i)} = {} & U_\theta(\theta_{j_1ij_2}) + U_\theta(\theta_{j_2ij_3}) + U_\theta(\theta_{j_1ij_3}) + U_\theta(\theta_{ij_1k_1}) + U_\theta(\theta_{ij_1k_2}) \\ & + U_\theta(\theta_{ij_2k_3}) + U_\theta(\theta_{ij_2k_4}) + U_\theta(\theta_{ij_3k_5}) + U_\theta(\theta_{ij_3k_6}) \end{aligned} \qquad \text{(IV.11)}$$

Les trois premiers termes de la formule (IV.11) décrivent les interactions locales provoquées par les déformations angulaires des liaisons covalentes reliant l'atome i à ses trois premiers voisins (j_1, j_2 et j_3), alors que les six derniers termes de cette formule décrivent l'effet non local implicite dans les déformations angulaires des liaisons reliant les atomes j aux deuxièmes atomes voisins k. cela veut dire que le mouvement des deuxièmes atomes voisins affecte

l'énergie totale de l'atome i à travers un effet non local implicite dans les termes de flexion des angles de valence.

En remplaçant le potentiel de flexion des angles de valence de la formule (IV.11) dans la formule (IV.3) afin de calculer l'énergie totale emmagasinée dans l'atome i qui devient :

$$\begin{aligned} U_{tot}^{i} &= U_b(r_{ij_1}) + U_b(r_{ij_2}) + U_b(r_{ij_3}) + U_\theta(\theta_{j_1ij_2}) + U_\theta(\theta_{j_2ij_3}) + U_\theta(\theta_{j_1ij_3}) \\ &+ U_\theta(\theta_{ij_1k_1}) + U_\theta(\theta_{ij_1k_2}) + U_\theta(\theta_{ij_2k_3}) + U_\theta(\theta_{ij_2k_4}) + U_\theta(\theta_{ij_3k_5}) + U_\theta(\theta_{ij_3k_6}) \end{aligned} \quad \text{(IV.12)}$$

L'effet non local des interactions de flexion des angles de valence a été déjà développé par Liu et al. [7] en utilisant le potentiel de Tersoff-Brenner qui peut décrire les interactions non locales à travers du paramètre de l'ordre de liaison (Bond order), ce paramètre n'existe pas dans les potentiels de flexion de l'angle de valence comme le potentiel harmonique et de Morse. C'est pour cela, nous avons séparé les termes locales et non locales dans notre représentation afin de bien expliquer la contribution des atomes non liés par des liaisons covalentes à travers ces interactions non locales à l'énergie de l'atome considéré.

En se basant sur le développement précédent, l'élément AFEM à dix atomes dont la géométrie est représentée dans la figure (IV.2b) permet de modéliser les interactions susmentionnées. La matrice de rigidité élémentaire et le vecteur force élémentaire de cet élément prennent les formes suivantes en substituant la formule (IV.12) dans les formules (II.46) et (II.47) :

$$K_i^{AFEM10} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_i} & \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial y_i} & \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial z_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial x_n} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial y_n} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_i \partial z_n} \\ \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_i \partial x_i} & \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_i \partial y_i} & \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_i \partial z_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_i \partial x_n} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_i \partial y_n} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_i \partial z_n} \\ \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_i \partial x_i} & \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_i \partial y_i} & \frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_i \partial z_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_i \partial x_n} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_i \partial y_n} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_i \partial z_n} \\ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_n \partial x_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_n \partial y_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial x_n \partial z_i} & & & \\ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_n \partial x_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_n \partial y_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial y_n \partial z_i} & & [0]_{27\times 27} & \\ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_n \partial x_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_n \partial y_i} & \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^i}{\partial z_n \partial z_i} & & & \end{bmatrix} \quad \text{(IV.13)}$$

$$P_i^{AFEM10} = \begin{Bmatrix} Fx_i - \frac{\partial U_{tot}^i}{\partial x_i} \\ Fy_i - \frac{\partial U_{tot}^i}{\partial y_i} \\ Fz_i - \frac{\partial U_{tot}^i}{\partial z_i} \\ \\ (0)_{27\times 1} \end{Bmatrix} \quad \text{(IV.14)}$$

Avec n est le numéro des atomes voisins tel que n=j_1, j_2, j_3, k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 et k_6. Ainsi, Fx_i, Fy_i et Fz_i sont les composantes des forces externes appliquées à l'atome i dans les directions x, y et

z respectivement. Puisque l'élément AFEM présent contient dix atomes et chaque atomes a trois degrés de liberté, la taille de la matrice de rigidité élémentaire devient 30×30 et la taille du vecteur force devient 30×1.

Néanmoins, certains atomes ne peuvent pas être modélisés par l'AFEM à dix atomes complet en raison des atomes voisins manquants dû à la géométrie du graphène (effet des bords du graphène) [59]. En conséquence, des éléments AFEM modifiés ont été développés pour tenir compte de ce manque de connectivité comme illustré à la figure (IV.4). La taille de la matrice de rigidité élémentaire et du vecteur force élémentaire des éléments AFEM modifiés dépend du nombre des atomes voisins. Dans la figure (IV.4) on remarque six types des éléments AFEM modifiés. Par exemple l'élément AFEM 5 modélise les atomes possédant quatre atomes voisins (les atomes de connectivité).

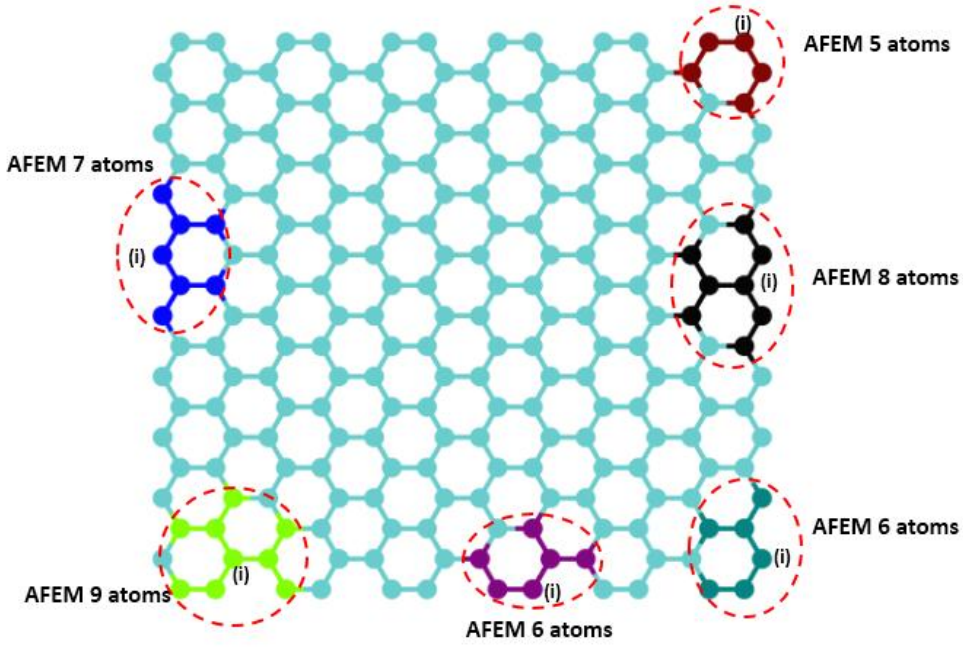


Figure (IV.4): Les éléments AFEM modifiés selon la particularité des atomes de bords du graphène. (i) est l'atome central de l'élément AFEM.

IV.4. Formulation du problème non linéaire

La modélisation de la structure du graphène peut être générée par le logiciel Nanotube modeler [121]. Ensuite, les coordonnées des atomes ainsi que leurs connectivités sont exportées dans un fichier (PDB) du fait de la simplicité de sa prise en main dans le logiciel Matlab que nous utilisons dans notre simulation. À partir des coordonnées des atomes et leurs connectivités on construit deux types de matrices dans Matlab, l'une contient les numéros des atomes ainsi que leurs coordonnées, l'autre contient les connectivités des atomes voisins de chaque atome. Ensuite, à chaque atome on définit un élément AFEM approprié pour ses atomes voisins afin de formuler sa matrice de rigidité élémentaire et son vecteur élémentaire, cette procédure prend N itérations, tel que N est le nombre total des atomes.

De plus, on fait l'assemblage des matrices de rigidité élémentaires et des vecteurs forces élémentaires susmentionnés pour construire la matrice de rigidité globale $\mathbf{K}$ et le vecteur force

global $\mathbf{P}$ de la structure afin de formuler l'équation du problème (II.44). Après cela, des conditions aux limites adéquates doivent être appliquées comme nous le verrons dans les parties des résultats. Enfin, on résout l'équation du problème (II.44) qui est annoncée à :

$$\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}=\mathbf{P} \tag{IV.15}$$

Dans notre étude, l'équation (IV.15) est non linéaire en raison de la non linéarité du potentiel interatomique utilisé. Par conséquent, la résolution de cette équation se fait par un calcul itératif en utilisant la méthode de Newton Raphson [122] tel que pour chaque incrément de charge, le vecteur déplacement des atomes **u** se calcule à chaque itération m comme suit :

$$\mathbf{u}_{(m)}=\mathbf{K}_{(m)}^{-1}\cdot\mathbf{P}_{(m)} \tag{IV.16}$$

Les déplacements calculés seront ajoutés aux coordonnées des atomes pour obtenir les nouvelles coordonnées à l'itération m+1 tel que :

$$\mathbf{X}_{(m+1)}=\mathbf{X}_{(m)}+\mathbf{u}_{(m)} \tag{IV.17}$$

Où $\mathbf{X}_{(m+1)}$et $\mathbf{X}_{(m)}$ sont les vecteurs de coordonnées des atomes à l'itération m+1 et m respectivement. Le calcul itératif permet de mettre à jour les coordonnées des atomes jusqu'à l'équilibre du système de sorte que $\mathbf{P}=0$.

IV.5. Vérification de l'exactitude du modèle développé

Dans le but de tester la précision et l'efficacité du présent AFEM, nous étudions les propriétés mécaniques d'une feuille de graphène vierge de dimensions 5,396 nm x 5,165 nm et composée de 1118 atomes. Trois essais sont effectués. Le premier est un essai de traction dans la direction « Armchair » où les atomes du bord droit de la feuille de graphène sont tractés par une force répartie, avec les atomes du bord gauche de la feuille fixés dans les trois directions du repère (*x,y,z*) comme illustré à la Fig. (IV.5a) afin de déterminer le module d'Young (E_{AR}) le coefficient de Poisson ($\upsilon_{AR,ZZ}$), le comportement contraintes-déformations dans la directions (AR), la résistance à la traction (σ_u) et la déformation à la rupture (ε_u). Le deuxième est un essai de traction dans la direction « Zigzag » où les atomes du bord supérieur de la feuille de graphène sont tractés par une force répartie, tandis que les atomes du bord inférieur sont bloqués dans les trois directions du repère (*x,y,z*) (voir la figure (IV.5b)) afin de déterminer les grandeurs E_{ZZ}, $\upsilon_{ZZ,AR}$, σ_u et ε_u . Le dernier essai est un essai de cisaillement de sorte que les atomes du bord droit de la feuille de graphène sont exposés à une force répartie dans la direction Zigzag, tandis que les atomes du bord gauche sont fixés dans les trois directions. De plus, les atomes du bord supérieur et inférieur de la feuille sont fixés dans la direction Armchair (les déplacements u_{AR}=0) [47], cet essai est représenté dans la figure (IV.5c). Dans ce qui suit les directions armchair et zigzag seront notées par AR et ZZ respectivement.

Par conséquent, les propriétés mécaniques sous l'essai de traction peuvent être déterminées en utilisant les formules suivantes :

$$\varepsilon_{AR}=\frac{\Delta l_{AR}}{L_{AR}} \qquad \varepsilon_{ZZ}=\frac{\Delta l_{ZZ}}{L_{ZZ}} \tag{IV.18}$$

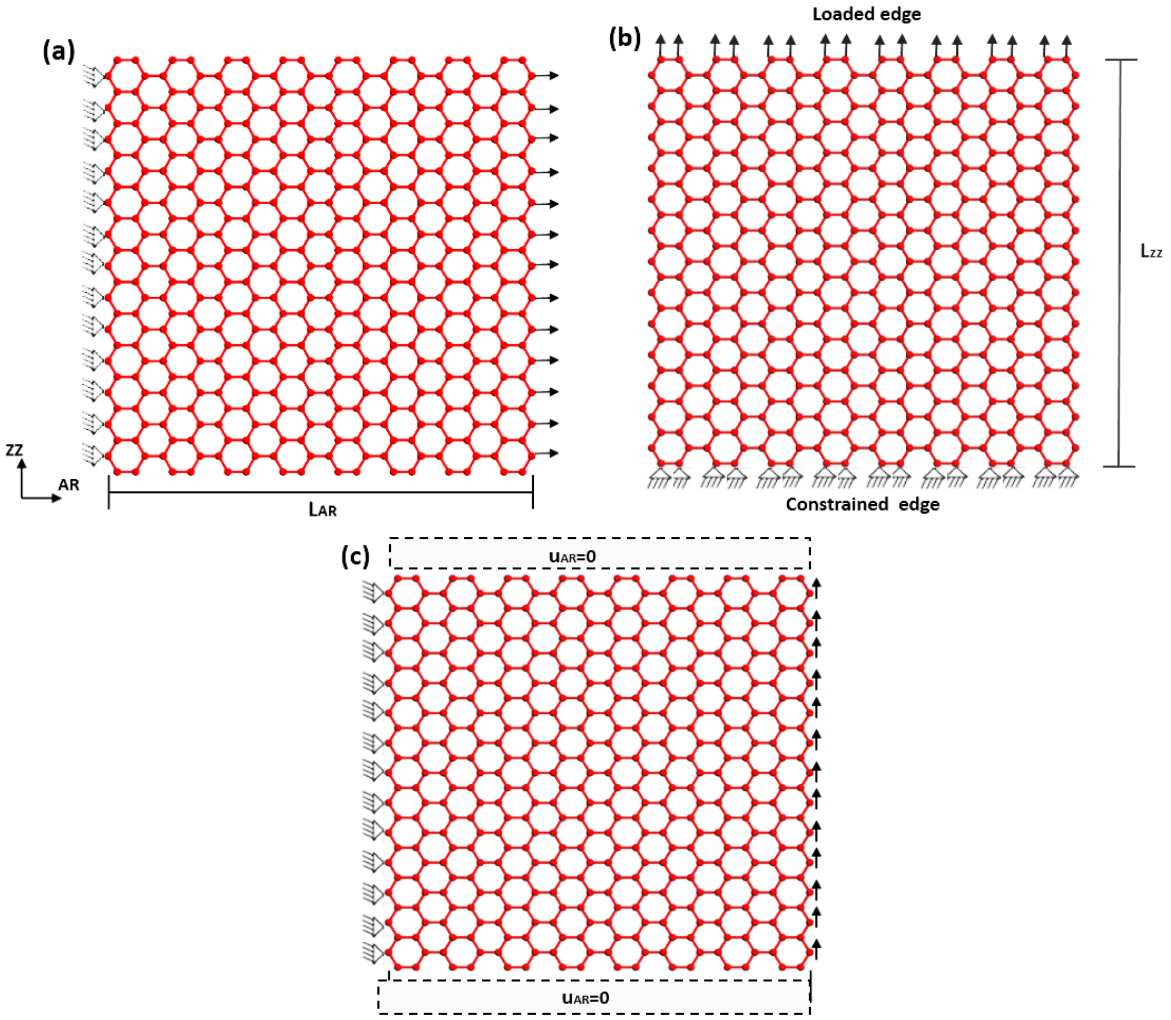


Figure (IV.5): Illustration de la feuille de graphène étudiée sous l'effet (a) un essai de traction dans la direction Armchair (AR), (b) un essai de traction dans la direction zigzag, (c) un essai de cisaillement.

$$\sigma_{AR} = \frac{R_{AR}}{L_{ZZ} \cdot t} \qquad \sigma_{ZZ} = \frac{R_{ZZ}}{L_{AR} \cdot t} \tag{IV.19}$$

$$E_{AR} = \frac{\sigma_{AR}}{\varepsilon_{AR}} \qquad E_{ZZ} = \frac{\sigma_{ZZ}}{\varepsilon_{ZZ}} \tag{IV.20}$$

$$\upsilon_{AR,ZZ} = \frac{\varepsilon_{ZZ}}{\varepsilon_{AR}} \tag{IV.21}$$

Où:

Δl_{AR} et Δl_{ZZ} sont les déplacements totaux des atomes de bord chargés dans les directions AR et ZZ respectivement.

L_{AR} et L_{ZZ} sont les longueurs initiales de la feuille de graphène le long des directions AR et ZZ.

R_{AR} et R_{ZZ} sont les forces de réaction totales des atomes de bord fixés dans les directions AR et ZZ respectivement.

E_{AR} et E_{ZZ} sont les modules élastiques longitudinaux dans les directions AR et ZZ respectivement.

σ_{AR} et σ_{ZZ} sont les contraintes de traction dans les directions AR et ZZ respectivement.

ε_{AR} et ε_{ZZ} sont les déformations d'allongement dans les directions AR et ZZ respectivement.

$\upsilon_{AR,ZZ}$ et $\upsilon_{AR,ZZ}$ sont les coefficients de Poissons dans l'essai de traction dans les directions AR et ZZ respectivement.

L'épaisseur de la feuille de graphène t (selon l'axe Z) est supposé égale à 0.34 nm dans la présente étude, cette valeur a été validée dans plusieurs travaux antérieurs [59,123].

De plus, les propriétés mécaniques de la feuille de graphène sous l'effet du test de cisaillement peuvent être déterminées par les formules suivantes :

$$\gamma_{AR,ZZ} = \tan^{-1}\left(\frac{\Delta l_{ZZ}}{L_{AR}}\right) \qquad \tau_{AR,ZZ} = \frac{T_{ZZ}}{L_{ZZ} \cdot t} \qquad G_{AR,ZZ} = \frac{\tau_{AR,ZZ}}{\gamma_{AR,ZZ}} \tag{IV.21}$$

Où Δl_{ZZ} est le déplacement transversal des atomes du bord chargé par la force répartie de cisaillement (déplacement des atomes du bord dans la direction ZZ) , T_{ZZ} est la force totale de réaction (effort tranchant) des atomes du bord fixé, $\gamma_{AR,ZZ}$, $\tau_{AR,ZZ}$ et $G_{AR,ZZ}$ sont la déformation de distorsion, la contrainte tangentielle de cisaillement et le module élastique de cisaillement (module de Coulomb).

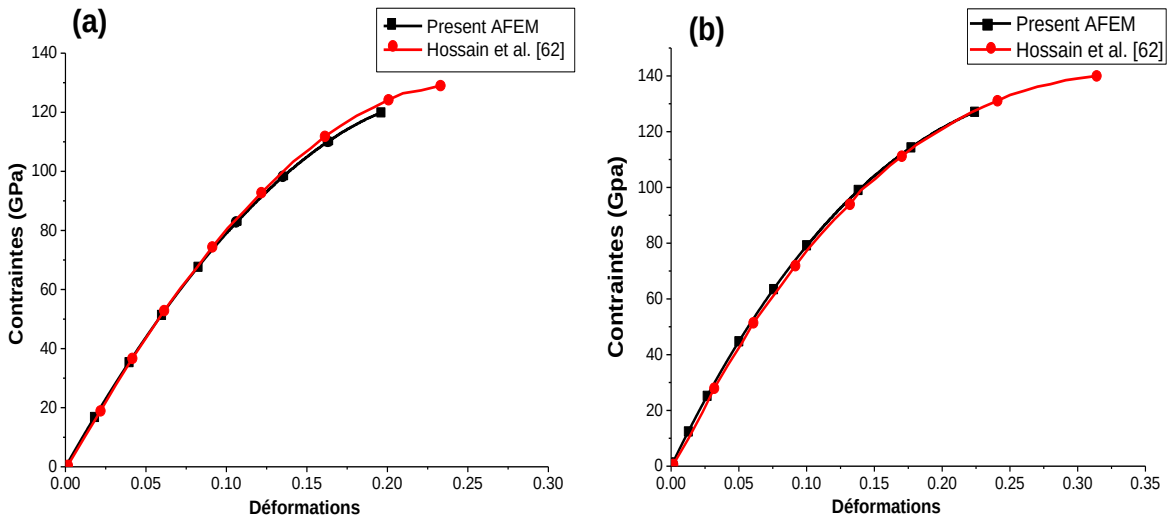


Figure (IV.6): Courbes de contraintes-déformations obtenues en utilisant les deux méthodes AFEM et MD pour le graphène vierge étudié dans les deux essais (a) Traction dans la direction AR et (b) Traction dans la direction ZZ.

Les deux essais de tractions susmentionnées nous permettent de simuler le comportement mécanique à la traction de la feuille de graphène vierge sous forme d'une courbe contraintes-déformations comme représenté dans la figure (IV.6), où nos résultats sont comparés avec ceux de Hossain et al. [62] en utilisant la méthode DM.

La figure (IV.6a) montre qu'il y a un bon accord entre la méthode AFEM présente et la méthode DM de la littérature [62] avec une erreur inférieure à 1.2% lorsque les déformations ne dépassent pas la valeur de 0.11 dans la direction AR, alors que cette erreur atteint jusqu'à 8% aux grandes déformations. De cette façon, la résistance à la traction et la déformation à la rupture prédite par DM sont de 130 GPa et 0,233, alors que ces quantités sont de 120,18 GPa et 0,197 en utilisant le présent AFEM. Dans la direction ZZ, les deux méthodes s'accordent bien dans la plage de déformation de 0 à 0,2, puis les résultats de DM ont tendance à s'écarter légèrement de ceux de AFEM jusqu'à ε = 0,2257. Cependant, la méthode DM continue de simuler le comportement de rupture jusqu'à ce que toutes les liaisons atomiques atteignent des valeurs limites et se rompent en prédisant 140 GPa et 0,314 pour la résistance à la traction et la déformation à la rupture, tandis que l'AFEM prédit 127,4 GPa et 0,2257 pour ces deux propriétés. En outre, La méthode DM a montré qu'il est capable de reproduire la rupture de liaisons interatomiques et de mieux estimer le comportement à la rupture du graphène que la méthode AFEM, cette différence légère entre les deux méthodes aux grandes déformations est dû la différence entre les paramètres du potentiel (r_c, r_f), les dimensions de la feuille de graphène et les conditions aux limites utilisées dans ce travail et ceux utilisés par Hossain et al. [62]. De plus, la AFEM présente ne peut pas capturer l'effet de la température sur le comportement mécanique du graphène dans la mesure où celle-ci est quasi_statique en comparaison avec la méthode DM, alors que l'efficacité de cet effet sur le comportement à la rupture a été investigué par T. C. Theodosiou et D. A. Saravanos [119]. Néanmoins, le présent AFEM montre bien sa capacité à simuler le comportement mécanique du graphène et à bien décrire ses propriétés de rupture avec une bonne précision.

Tableau (IV.1): Comparaison des propriétés mécaniques prédites par AFEM présente et celles rapportées dans la littérature.

Méthode utilisée	Chiralité	Module d'Young E (TPa)	Coefficient de Poisson υ	Module de cisaillement G (TPa)	Résistance à la traction σ_u (GPa)	Déformation à la rupture ε_u
AFEM présente	Armchair	0.958	0.21	0.412	120.18	0.1970
	Zigzag	1.007	0.26	/	127.40	0.2257
DM [62]	Armchair	0.992	/	/	130	0.2330
	Zigzag	0.987	/	/	140	0.3140
CM [124]	Armchair	0.669	/	0.384	123	0.3300
	Zigzag	0.812	/	/	/	/
AFEM [59]	Armchair	0.670	/	/	101.30	0.1700
	Zigzag	0.710	/	/	116.40	0.2300
SPFEM [55]	Armchair	0.710	0.208	0.312	93.91	0.1980
	Zigzag	0.737	0.219	0.285	120.31	0.2690
DM [125]	Armchair	1.001+-0.003	0.21+-0.01	/	90	0.1300
	Zigzag	/	/	/	107	0.2000
DFT [126]	Armchair	1.050	0.186	/	110	0.1940
	Zigzag	1.050	0.186	/	121	/
Expérience [72]		1.020+-0.150	/	/	126+-12	0.2500

Par ailleurs, une autre comparaison entre notre modèle AFEM et certains résultats expérimentaux, théoriques et numériques est présentée dans le tableau (IV.1). Il apparait clairement que les propriétés mécaniques sont affectées par la chiralité du graphène où la feuille de graphène est plus résistante et ductile dans la direction « zigzag » que dans la direction « armchair ». Le coefficient de Poisson prédit par la méthode AFEM présente est relativement

en accord avec celui prédit par les méthodes SPFEM [55] et DM [125], tandis qu'il est légèrement supérieur à celui de la méthode DFT [126]. Concernant le module de cisaillement il y a une légère différence entre les résultats présentés dans le tableau (IV.1), mais cette différence est dans une fourchette acceptable.

D'ailleurs, le présent modèle AFEM prédit la résistance à la traction avec une bonne précision où ses résultats convergent bien avec ceux de l'expérience [72] et la méthode DM [62], de plus on remarque un intervalle de différence entre les autres méthodes numériques. D'autre part, le modèle présent donne des bon résultats en ce qui concerne les déformations à la rupture qui s'accordent bien avec ceux de l'expérience [72], la méthode AFEM [59], SPFEM [55] et DFT [126].

Après avoir passé en revue les études antérieures, la différence entre les méthodes numériques présentées dans le tableau (IV.1) peut être due à la différence entre les conditions de simulation, les paramètres du potentiels, les hypothèses de l'étude et les paramètres géométriques de l'échantillon comme il a rapporté dans les articles [55,59,62] mais la fourchette de cette différence a été acceptée dans les travaux antérieurs. L'avantage de notre modèle est qu'il a pu donner des résultats proches des résultats expérimentaux. En se basant sur les résultats présents, notre modèle AFEM démontre son efficacité de prédire les propriétés mécaniques du graphène avec une bonne précision, en plus de sa simplicité à l'implémentation et sa rapidité à l'analyse de ce type des nanostructures.

IV.6. L'effet des formes de nanopores sur les propriétés mécaniques du graphène

Nous avons mentionné que les propriétés mécaniques du graphène peuvent être dégradées en présence de certains types de défauts. À cet égard, des études ont été menées, la plupart desquelles sont limitées à l'étude des défauts de lacunes, Stone-Wales, et quelques nanopores de formes circulaires [45,46,87]. De plus ces études ont été conduites en utilisant des techniques de simulation couteuses en temps de calcul, comme la méthode DM, QM-MM. Nous avons rapporté aussi l'utilisation des méthodes numériques rapides comme AFEM, SPFEM à l'étude de quelques nanopores [40,47,88], mais dans ces études l'effet des formes de nanopores est négligé. Néanmoins, les propriétés de cisaillement du graphène sous l'effet de différentes formes de nanopores n'ont pas été étudiées dans les travaux antérieurs. De ce fait, nous détaillons dans cette partie une étude approfondie sur les propriétés élastiques et de rupture du graphène sous l'effet des essais de traction et de cisaillement en présence de certaines formes de défauts.

Afin d'étudier les propriétés mécaniques à la traction du graphène nanoporeux en présence des formes rectangulaires, hexagonales, diamantées, nous avons implémenté le test de traction dans deux directions (dans la direction AR puis dans la direction ZZ) comme celles représentées sur les figures (IV.5a) et (IV.5b) en utilisant la méthode AFEM présente. A chaque test, les nanopores sont placés de deux manières, dans la première, les nanopores sont positionnées dans la direction AR (le grand coté du nanopore est orienté dans la direction AR) comme illustré dans les figures (IV.7 (a), (c) et (e)), alors que dans la deuxième, les nanopores sont placées dans la direction ZZ (le grand coté du nanopore est orienté dans la direction ZZ) comme illustré dans les figures (IV.7 (b), (d) et (f)).

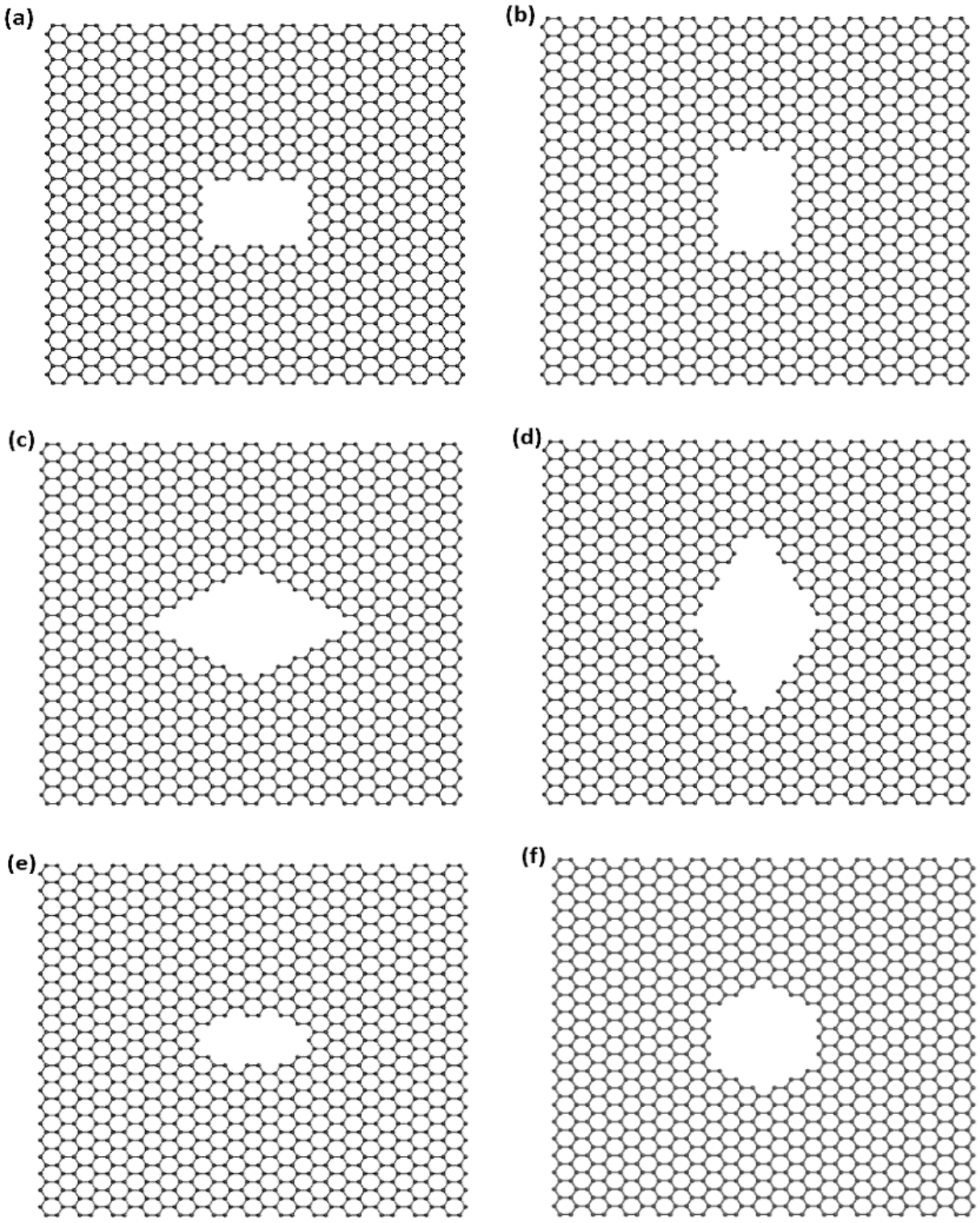


Figure (IV.7): Illustration de différentes formes de nanopores modélisées dans cette étude telles que (a), (c) et (e) sont les nanopores rectangulaires, en diamant et hexagonaux placés le long de la direction AR, tandis que (b), (d) et (f) sont les mêmes nanopores placés le long de la direction ZZ.

En conséquence, les propriétés élastiques prédites des essais de traction sont présentées dans les figures (IV.8 (a)-(c)), tandis que les propriétés de rupture sont représentées dans les figures (IV.9 (a)-(b)) et (IV.10 (a)-(b)).

Pour prédire les propriétés au cisaillement du graphène sous l'effet des nanopores présents, le même test de cisaillement décrit dans la partie précédente et illustré dans la figure (IV.5c) a réalisé en utilisant la méthode AFEM présente. Les résultats obtenus sont représentés dans les figures (IV.8d), (IV.9c) et (IV.10c). En outre, la taille du nanopore est représentée par un taux de vide (VR) qui est égale le nombre d'atomes éliminés dans le vide divisé par le nombre total d'atomes de graphène. Par conséquent, des éléments AFEM modifiés sont utilisés afin d'adapter le maillage de AFEM au niveau des bords du nanopore.

La variation du module d'Young en fonction du taux de vide (VR), dans la direction AR puis dans la direction ZZ est montrée dans les figures (IV.8a) et (IV.8b). Ces deux figures montrent clairement que la présence de nanopores diminue significativement le module d'Young, et cette diminution augmente lorsque le taux de vide augmente. Sous la charge de traction dans la direction AR (Traction AR), tous les nanopores placés parallèlement à la direction AR (formes AR) présentent des valeurs E_{AR} plus élevées que ceux placées parallèlement à la direction ZZ (formes ZZ), comme illustré à la figure (IV.8a). De plus, parmi les formes ZZ, le diamant ZZ a un effet de réduction plus élevé sur E_{AR}, tandis que l'hexagone ZZ a l'effet le plus faible, cette réduction de E_{AR} devient très importante lorsque le taux de vide augmente vers les grandes valeurs. En revanche, les formes ZZ ont un module d'Young plus élevé que les formes AR sous la charge de traction dans la direction ZZ (Traction ZZ) (voir la figure (IV.8b)). La valeur la plus basse de Ezz est atteinte en présence du diamant AR. ces résultats montrent que les nanopores à point pointu normaux à la direction de la charge ont le plus grand effet sur la dégradation du module d'Young. Il apparait clairement que la chiralité affecte également le module élastique E tel que le graphène est rigide dans la direction ZZ en comparaison avec la direction AR. La figure (IV.8c) montre que le coefficient de Poisson υ augmente lorsque le taux de vide (VR) augmente, cette augmentation est affectée par la forme et l'orientation du nanopore de sorte que les diamants (diamant ZZ puis AR) mènent a une augmentation rapide vers des grandes valeurs du υ , tandis que les formes rectangulaires (rectangle ZZ et AR) ont les valeurs les plus faibles. On observe également que la relation entre υ et VR est presque linéaire pour toutes les formes de nanopores.

Dans les figures (IV.9 (a) et (b)), la résistance à la traction réduit aux valeurs les plus basses en présence des nanopores en comparaison avec la feuille vierge. Cette réduction est encore affectée par les nanopores à pointe pointue perpendiculaire à la direction de la charge de traction, par exemple : la résistance à la traction AR est réduite de 120,18 à 24,75 GPa lorsque VR=0,0215 en présence du diamant ZZ, et la résistance à la traction ZZ est réduite de 127,4 à 27,5 GPa en présence du diamant AR. De plus, pour des valeurs plus petites de VR, le taux de diminution de la résistance à la traction est important, puis ce taux diminue lentement pour des grandes valeurs de VR. Ainsi, la résistance du graphène dans la direction ZZ s'affecte largement par les nanopores en comparaison avec la résistance AR.

En outre, la déformation à la rupture de la feuille de graphène chute brutalement à de petites valeurs sous l'effet des nanopores comme illustré dans les figures (IV.10 (a) et (b)).

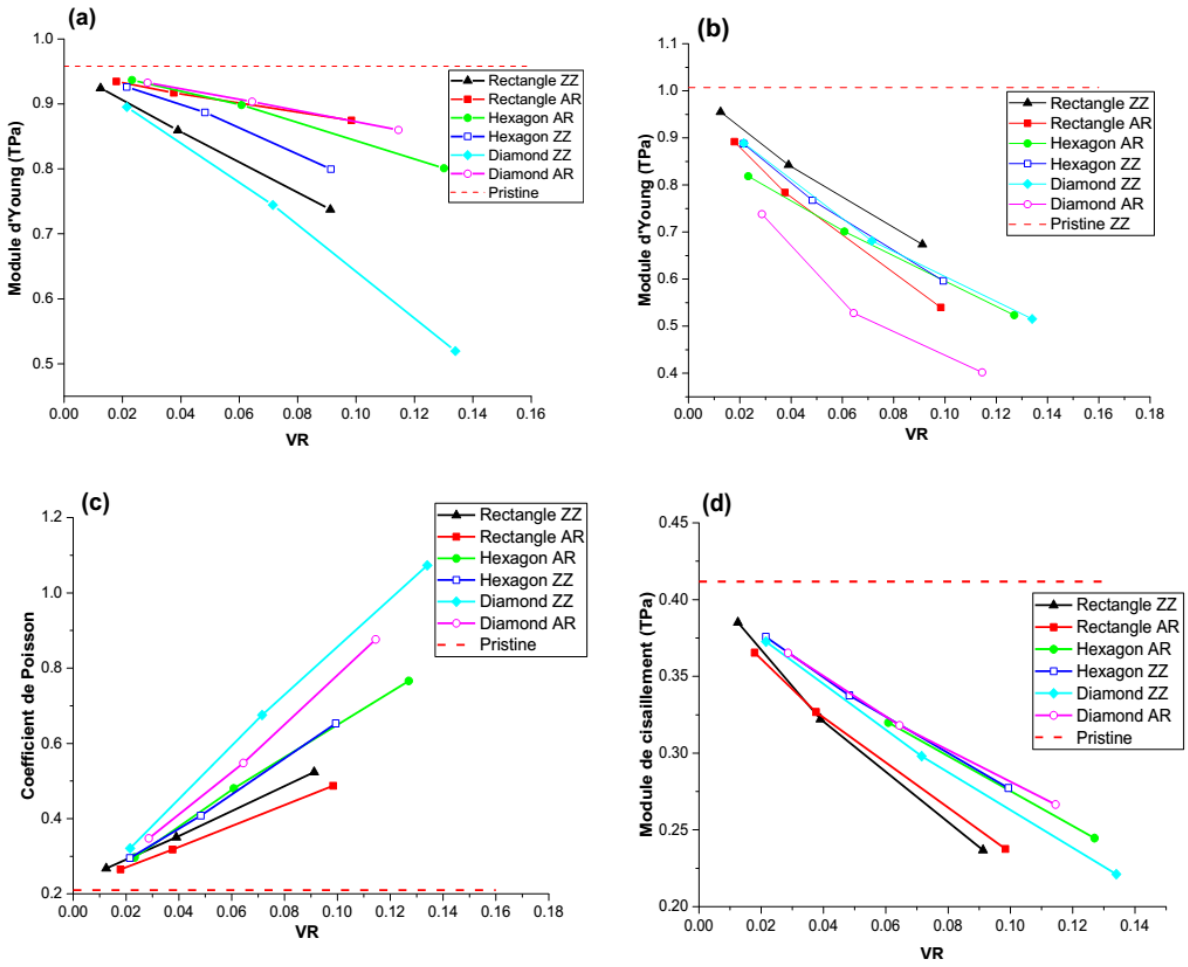


Figure (IV.8): Les propriétés élastiques du graphène nanoporeux en fonction du taux de vide (VR), où (a) et (b) le module d'Young dans les directions (EAR) et (EZZ), (c) le coefficient de Poisson (υ) et (d) le module de cisaillement (G).

Lors de l'augmentation du taux de vide, le taux de diminution de la déformation à la rupture diminue légèrement puis tend à se stabiliser vers certaines valeurs. Ces figures montrent également que le graphène a une grande ductilité dans la direction ZZ par rapport à la direction AR.

De plus, les formes ZZ dégradent largement la ductilité du graphène par rapport aux formes AR dans l'essai de traction AR. Au contraire, la dégradation de la ductilité du graphène est largement affectée par les nanopores AR en comparaison avec les nanopores ZZ dans l'essai de traction ZZ, cette différence est clairement observée dans le cas des nanopore diamantées. Sur la base de ces résultats, on en déduit que le nanopore qui a la pointe pointue normale à la direction de charge diminue de manière significative la ductilité du graphène. De plus, la taille du nanopore (VR) n'affecte pas significativement la variation de la déformation à la rupture.

La figure (IV.8d) montre une diminution rapide du module de cisaillement qui atteint moins de 0,25 TPa, en particulier à un taux de vide élevé. De plus, la forme rectangulaire diminue rapidement le module de cisaillement aux valeurs les plus basses par rapport aux autres formes dans la direction ZZ et AR. On constate également que les courbes du module de cisaillement pour les formes AR et ZZ ont quasiment la même tendance. Par ailleurs, les nanopores rectangulaires font chuter rapidement la résistance au cisaillement aux valeurs les plus basses

tandis que le diamant AR a moins d'effet sur le taux de réduction par rapport aux autres formes (IV.9c). Nous pouvons simplement classer la résistance des formes de nanopores sous le test de cisaillement par ordre croissant comme suit :

Rectangle ZZ < Rectangle AR < Diamond ZZ < Hexagon ZZ < Hexagon AR < Diamond AR.

On constate dans la figure (IV.10c) que la déformation de cisaillement ultime est moins sensible à la variation de l'indice des vides, mais elle est plus sensible à la présence de formes nanoporeuses, où la déformation est réduite de 0,431 à moins de 0,13 rad en présence de formes rectangulaires.

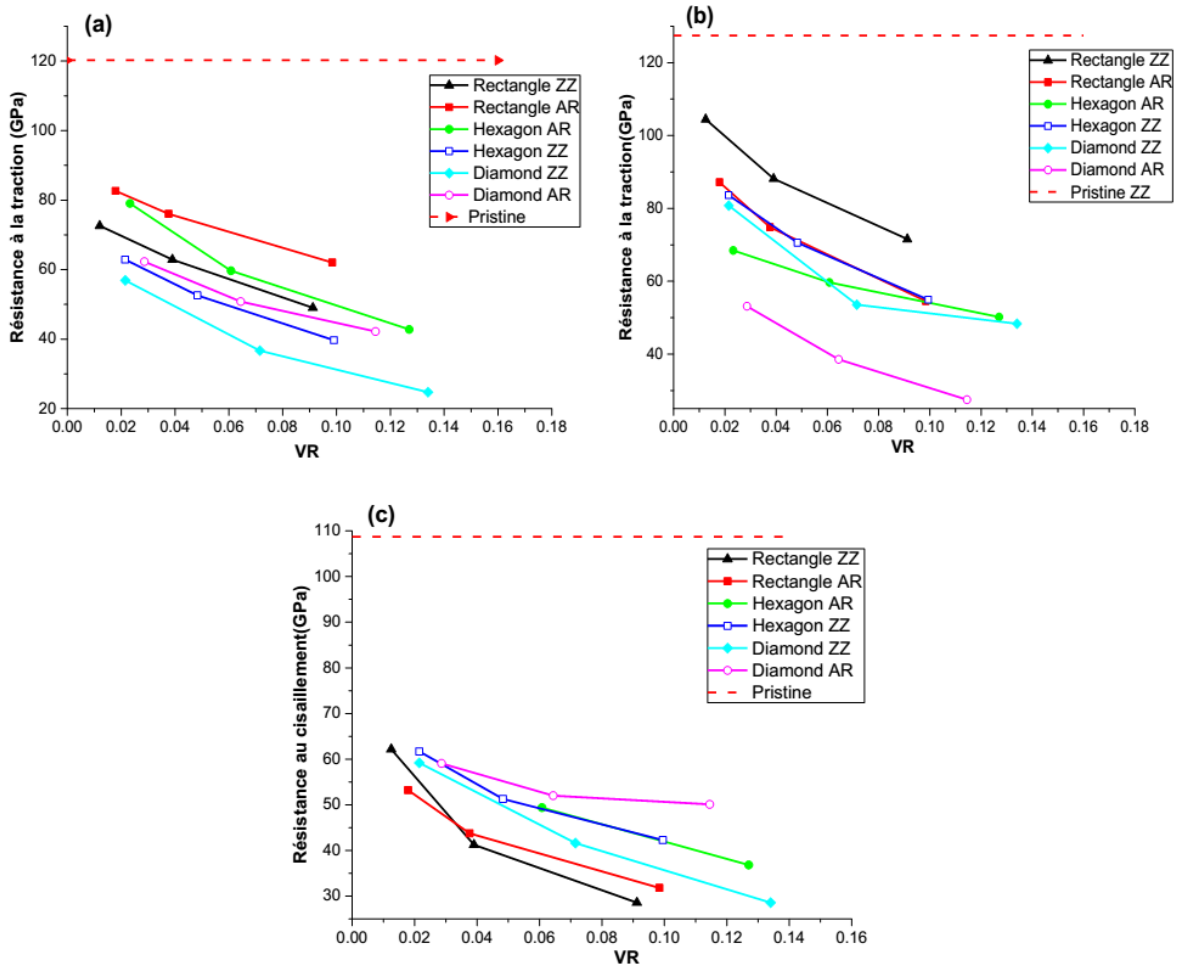


Figure (IV.9): La résistance du graphène avec différentes formes de nanopores par rapport au taux de vide (VR) sous (a) la charge de traction AR, (b) la charge de traction ZZ et (c) la charge de cisaillement.

IV.7. Conclusions

Afin de prédire les propriétés mécaniques de la feuille de graphène avec différentes formes de nanopores, nous avons utilisé la méthode des éléments finis à l'échelle atomique (AFEM) basée sur le potentiel de Stillinger Weber, ce potentiel a déjà prouvé sa précision et son efficacité par rapport aux potentiels Tersoff et REBO pour prédire ces propriétés et notamment les constants élastiques. En outre, les propriétés mécaniques du graphène telles que le module de cisaillement, la résistance au cisaillement et la déformation de cisaillement ultime sous

différentes formes de nanopores qui n'ont pas été estimées par les méthodes rapportées dans la littérature sont également estimées par la présente méthode.

L'effet des formes, de l'orientation et de la taille des nanopores est également étudié en incorporant des nanopores rectangulaires, hexagonaux et en diamant avec l'augmentation du nombre d'atomes manquants (VR). Les résultats obtenus ont montré que les nanopores placés perpendiculairement à la direction de la charge réduisent davantage les propriétés mécaniques que ceux placés parallèlement à la direction de la charge.

Parmi ces nanopores, ceux ayant une longue pointe pointue normale à la direction de la charge (comme le diamant ZZ normal à la charge appliquée dans la direction AR) ont un effet significatif sur la dégradation des propriétés mécaniques. Les courbes des constantes élastiques ont montré une relation linéaire entre ces constantes et la variation du taux de vides (VR), en particulier dans le cas du coefficient de Poisson et du module de cisaillement. En revanche, il s'avère que les déformations sont moins affectées par la variation de la forme du nanopore, mais elles chutent rapidement en présence de ces nanopores, notamment au cas du cisaillement. En effet, le modèle AFEM développé dans cette étude a prouvé sa facilité de mise en œuvre et son efficacité pour étudier les propriétés élastiques et de rupture de la feuille de graphène vierge et en présence de différentes formes de nanopores avec une grande précision en très peu de temps.

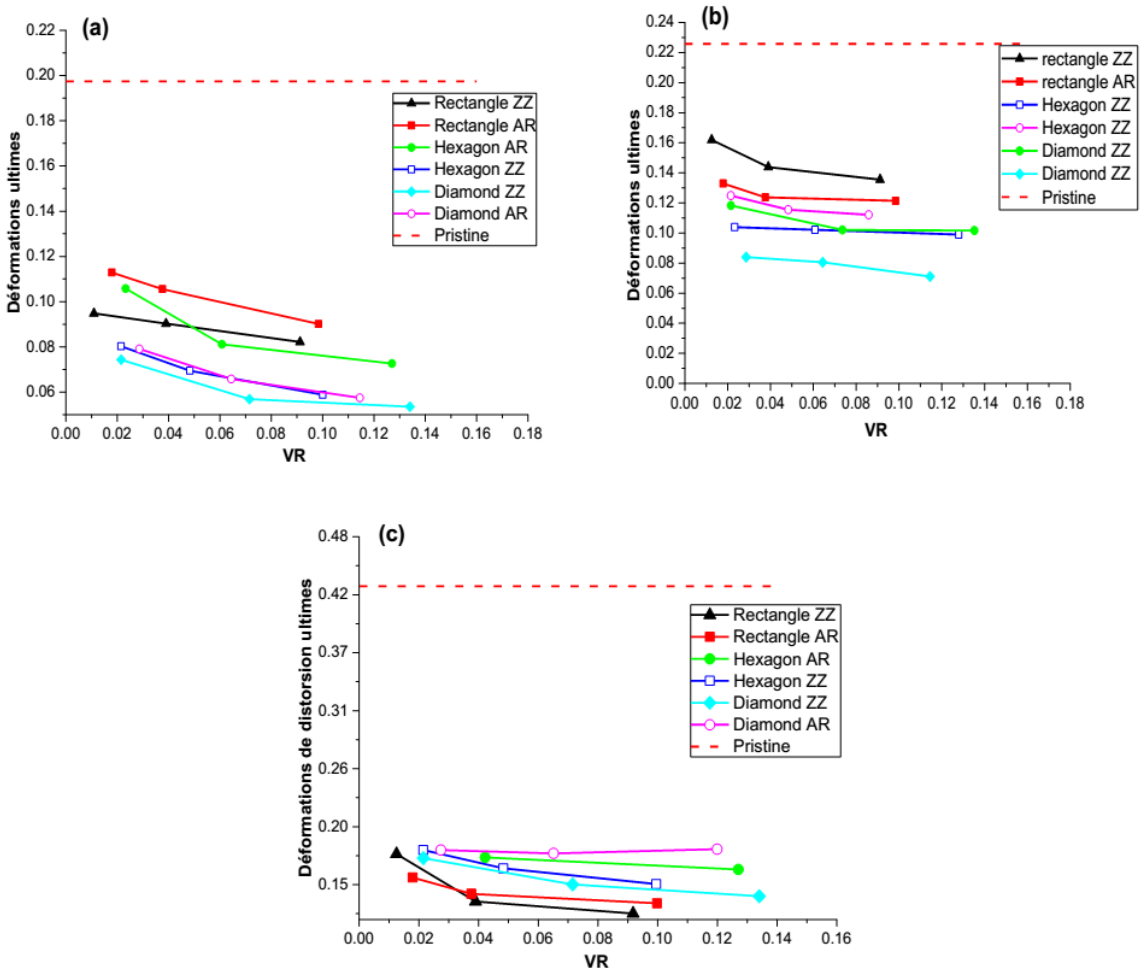


Figure (IV.10): Déformation de rupture du graphène en présence de différentes formes de nanopores sous (a) la charge de traction dans la direction AR, (b) la charge de traction dans la direction ZZ et (c) la charge de cisaillement.

Chapitre V

Développement d'un nouveau modèle AFEM non linéaire approprié à l'étude des propriétés élastiques des nanocônes de carbone vierges et imparfaits

V.1 Introduction

On a montré dans le chapitre précédent que dans le graphène, l'interaction de l'élongation des liaisons interatomiques se produit dans les liaisons covalentes liant l'atome étudié et ses trois premiers atomes voisins, tandis que l'interaction de flexion des angles de valence se produit entre l'atome étudié et ses trois premiers atomes voisins à travers un effet local, et ses six deuxièmes atomes voisins à travers un effet non local. De ce fait, ces interactions ont été décrites complètement par un élément AFEM à dix atomes. Néanmoins, dans les nanotubes et les nanocônes de carbone (CNTs et CNCs), l'effet de distorsion de la structure peut se produit pendant la simulation ce qui peut affecte la précision des résultats et peut nécessiter un temps de calcul supplémentaire pour atteint la stabilité du système. Des études ont montré que cet effet peut se produire à cause des interactions de torsion des angles dièdres entre les atomes de la structure tubulaire [127].

Le premier objectif de ce chapitre est de développer un modèle d'éléments finis atomiques non linéaires (AFEM) efficace et capable de capturer les interactions de torsion des angles dièdres en plus des interactions d'élongation de liaisons interatomiques et de flexion d'angles de valence, qui sont considérées comme les interactions atomistiques prédominantes dans les nanocônes de carbone (CNCs). Par conséquent, un nouvel élément AFEM de base contenant dix-neuf atomes est développé et examiné en étudiant l'effet des paramètres géométriques des CNCs sur leur module d'Young et en comparant les résultats obtenus avec la littérature disponible.

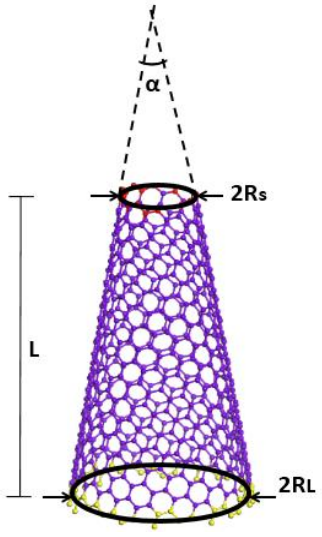


Figure (V.1): Illustration schématique de la structure du CNC construite dans cette étude, où R_S, R_L, L et α sont le petit rayon, le grand rayon, la longueur et l'angle au sommet de la CNC.

Le deuxième objectif de ce chapitre est d'implémenter le modèle AFEM développé dans un algorithme aléatoire afin d'investiguer l'influence de différents pourcentages d'imperfections sur le module d'Young des nanocônes de carbone (CNCs).

V.2. Le potentiel interatomique proposé

Les nanocônes de carbone (CNC) sont obtenus en enlevant un coin des couches de graphène et en joignant leurs bords en une forme conique. Sur la base de cette technique, la structure de CNC utilisée dans cette étude est construite et illustrée à la figure (V.1), où elle est caractérisée par son petit rayon (RS), son grand rayon (RL), sa longueur (L) et son angle au sommet (α).

Comme il a montré dans le chapitre II, la majorité des interactions induites dans les nanotubes et les nanocônes de carbone (CNTs et CNCs) peuvent être réduites aux interactions de l'élongation des liaisons interatomiques, de flexion des angles de valence et de torsion des angles dièdres comme illustré dans la figure (V.2). On peut exprimer ces interactions en utilisant la formule suivante :

$$U_{tot} = U_b + U_\theta + U_\varphi \tag{V.1}$$

L'énergie de l'élongation des liaisons interatomiques U_b et l'énergie de flexion des angles de valence U_θ sont bien décrites en utilisant le potentiel de Morse modifié [53] et qui sont données comme suit :

$$U_b = D_e\left[\left[1 - e^{-\beta(r-r_0)}\right]^2 - 1\right] \tag{V.2}$$

$$U_\theta = \frac{1}{2}k_\theta(\theta-\theta_0)^2\left[1 + k_{sextic}(\theta-\theta_0)^4\right] \tag{V.3}$$

Comme il a rapporté dans l'article [53], les paramètres du potentiel de Morse modifié prennent les valeurs suivantes :

D_e = 0.603105 nN.nm β = 26.25 nm^{-1}, k_θ = 0.9 nN.nm.rad^{-2}, k_{sextic} = 0.754 rad^{-4}

Dans cette étude, la longueur de la liaison et l'angle de valence à l'équilibre sont r_0 = 0.139 nm, θ_0 =2.094 rad.

Le potentiel de Morse modifié a choisi dans notre étude du fait que sa précision et sa simplicité à la description des interactions de l'élongation des liaisons et de flexion des angles de valence.

En se basant sur la figure (V.2c), l'angle de valence entre trois atomes peut être calculé comme suit :

$$\theta_{BAC} = \frac{(r_{AB}{}^2 + r_{AC}{}^2 - r_{BC}{}^2)}{2\cdot(r_{AB}\cdot r_{AC})} \tag{V.4}$$

Où A, B, C sont respectivement les numéros d'atomes, r_{AB}, r_{AC} et r_{BC} sont les longueurs des liaisons interatomiques A-B, A-C et B-C.

Les interactions de torsion des angles dièdres peuvent être exprimées par un terme harmonique comme celui de la formule (II.9), ce terme peut être réécrit comme suit :

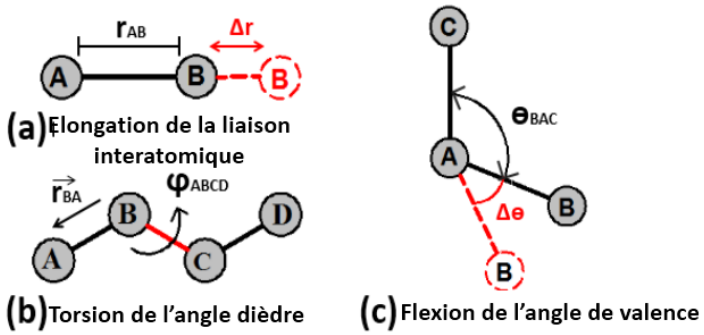


Figure (V.2): Les interactions les plus dominantes entre les atomes de la structure du CNC.

$$U_{\varphi} = \frac{1}{2} k_{\tau} (\Delta\varphi)^2 \tag{V.5}$$

La constante de force de torsion k_{τ} est prise à 0,278 nN.nm/rad^2 d'après la référence [55]. La grandeur $\Delta\varphi$ représente la variation de l'angle de torsion. l'angle de torsion utilisé au calcul du terme U_{φ} peut être calculé comme suit :

$$\varphi_{ABCD} = \vec{n}_{ABC} \cdot \vec{n}_{BCD} \tag{V.6}$$

φ_{ABCD} est l'angle de torsion formé par les plans (ABC) et (BCD) (voir la figure (V.2b)) , $\vec{n}_{ABC}$ and $\vec{n}_{BCD}$ sont des vecteurs unitaires normaux aux plans (ABC) et (BCD) respectivement, qui peuvent être calculés comme suit :

$$\vec{n}_{ABC} = \frac{\vec{r}_{CB} \times \vec{r}_{BA}}{r_{BC} \cdot r_{AB} \cdot \sin(\theta_{ABC})} \tag{V.7}$$

$$\vec{n}_{BCD} = \frac{\vec{r}_{DC} \times \vec{r}_{CB}}{r_{CD} \cdot r_{BC} \cdot \sin(\theta_{BCD})} \tag{V.8}$$

Tel que $\vec{r}_{BA}$ est le vecteur de l'atome B vers A, $\vec{r}_{CB}$ est le vecteur de l'atome C vers B, $\vec{r}_{DC}$ est le vecteur de l'atome D vers C, θ_{ABC} et θ_{BCD} sont les angles formés par les triplets A-B-C et B-C-D respectivement et peuvent être calculés en utilisant la formule (V.4).

V.3. Développement d'un nouvel élément AFEM basé sur le potentiel proposé

L'interaction de torsion d'angle dièdre peut se produire dans une liaison interatomique par la rotation des deux liaisons connectées à ses deux extrémités (voir la figure (V.2b)). De ce fait, pour un atome situé à l'intérieur de la structure du CNC, les interactions possibles de type torsion des angles dièdres peuvent être représentées par la structure de la figure (V.3). Par conséquent, l'énergie de l'atome 1 peut être influencée par le mouvement de trois premiers voisins, six deuxièmes voisins et neuf troisièmes voisins qui participent par leurs coordonnées aux termes de torsion des angles dièdres formés entre ces atomes, d'où l'énergie totale de l'interaction de torsion d'angle dièdre stockée dans l'atome 1 peut être exprimée par la formule suivante :

$$
\begin{aligned}
U_{\varphi}^{(1)} = & U_{\varphi}(\varphi_{2,1,3,7}) + U_{\varphi}(\varphi_{2,1,3,8}) + U_{\varphi}(\varphi_{2,1,4,9}) + U_{\varphi}(\varphi_{2,1,4,10}) \\
& + U_{\varphi}(\varphi_{3,1,2,5}) + U_{\varphi}(\varphi_{3,1,2,6}) + U_{\varphi}(\varphi_{3,1,4,9}) + U_{\varphi}(\varphi_{3,1,4,10}) \\
& + U_{\varphi}(\varphi_{4,1,2,5}) + U_{\varphi}(\varphi_{4,1,2,6}) + U_{\varphi}(\varphi_{4,1,3,7}) + U_{\varphi}(\varphi_{4,1,3,8}) \\
& + U_{\varphi}(\varphi_{1,2,5,11}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,2,5,12}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,2,6,13}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,2,6,14}) \\
& + U_{\varphi}(\varphi_{1,3,7,14}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,3,7,15}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,3,8,16}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,3,8,17}) \\
& + U_{\varphi}(\varphi_{1,4,9,17}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,4,9,18}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,4,10,11}) + U_{\varphi}(\varphi_{1,4,10,19})
\end{aligned}
\tag{V.9}
$$

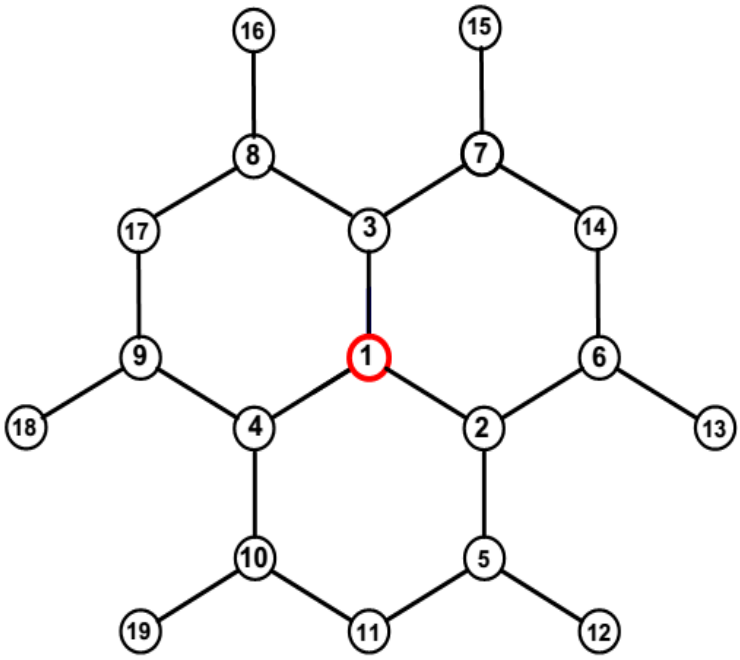


Figure (V.3): Illustration d'un atome de carbone interagit avec dix-huit atomes voisins à travers le terme de torsion des angles dièdre dans la structure du CNC, cette structure est un élément AFEM de base pour le modèle présent.

Par exemple, la rotation des liaisons interatomiques 1-2 et 3-7 par rapport à la liaison interatomique 1-3 peut provoquer la torsion de cette dernière, et par conséquent d'affecter l'énergie de l'atome 1 à travers l'interaction de torsion de l'angle dièdre $\varphi_{2,1,3,7}$. De même on obtient vint quatre termes de torsion possibles qui peuvent affecter l'énergie de l'atome 1 qui sont accumulés dans la formule (V.9).

En effet, l'énergie totale d'un atome situé à l'intérieur de la structure du CNC peut résulte de la superposition des termes de l'élongation des liaisons interatomique, flexion des angles de valence et torsion des angles dièdres exprimée dans la formule (V.1). De ce fait, un élément AFEM à dix-neuf atomes (en se basant sur la figure (V.3)) est capable de décrire ces trois termes d'interaction, d'où l'énergie totale de cet élément AFEM est stocké dans l'atome 1 et peut être exprimée comme suit:

$$U_{tot}^{(1)} = U_{b}^{(1)} + U_{\theta}^{(1)} + U_{\varphi}^{(1)} \tag{V.10}$$

Avec : le terme de l'élongation des liaisons interatomiques $U_{b}^{(1)}$ est décrit par la formule suivante :

$$U_b^{(1)} = U_b(r_{1,2}) + U_b(r_{1,3}) + U_b(r_{1,4}) \tag{V.11}$$

De plus, le terme de flexion des angles de valence $U_\theta^{(1)}$ peut être calculé par la formule suivante :

$$\begin{aligned} U_\theta^{(1)} &= U_\theta(\theta_{2,1,3}) + U_\theta(\theta_{2,1,4}) + U_\theta(\theta_{3,1,4}) + U_\theta(\theta_{1,2,5}) + U_\theta(\theta_{1,2,6}) \\ &+ U_\theta(\theta_{1,3,7}) + U_\theta(\theta_{1,3,8}) + U_\theta(\theta_{1,4,9}) + U_\theta(\theta_{1,4,10}) \end{aligned} \tag{V.12}$$

Alors que le terme de torsion des angles dièdres $U_\varphi^{(1)}$ peut être calculé par la formule (V.9). Il apparait que uniquement les termes $U_\theta^{(1)}$ et $U_\varphi^{(1)}$ peuvent décrire les interactions non locales entre l'atome 1 et ses deuxièmes et troisièmes atomes voisins.

Pour obtenir la matrice de rigidité élémentaire et le vecteur force élémentaire de l'élément AFEM à dix-neuf atome présent, nous substituons la formule (V.10) dans les formules (II.46) et (II.47) respectivement, ce qui donne :

$$K_1^{AFEM19} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2 U_{tot}^{AFEM19}}{\partial \mathbf{X}_1 \partial \mathbf{X}_1}\right)_{3\times 3} & \left(\frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^{AFEM19}}{\partial \mathbf{X}_1 \partial \mathbf{X}_n}\right)_{3\times 54} \\ \left(\frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_{tot}^{AFEM19}}{\partial \mathbf{X}_n \partial \mathbf{X}_1}\right)_{54\times 3} & (0)_{54\times 54} \end{bmatrix} \tag{V.13}$$

$$P_1^{AFEM19} = \begin{bmatrix} \left(\overline{\mathbf{F}}_1 - \frac{\partial U_{tot}^{AFEM19}}{\partial \mathbf{X}_1}\right)_{3\times 1} \\ (0)_{54\times 1} \end{bmatrix} \tag{V.14}$$

Où n indique le nombre d'atomes voisins qui va de 2 à 19, $\mathbf{X}_1$ est le vecteur des composantes de la position de l'atome 1 dans le repère global (xyz) de la structure du CNC, $\mathbf{X}_n$ est le vecteur des composantes de positions des atomes voisins dans le repère global (x,y,z), $\overline{\mathbf{F}}_1$ est le vecteur des forces externes appliquées à l'atome 1.

Cependant, du fait de la forme du nanocône de carbone, certains atomes ont moins de dix-neuf atomes voisins (comme les atomes de la petite base et la grande base du CNC). Cela nécessite de modifier l'élément AFEM19 en fonction de l'éventuelle connectivité atomique incomplète. De la même façon que pour le graphène, on adapte l'élément AFEM présent à la particularité de ces atomes.

Les procédures d'assemblage de la matrice de rigidité globale et du vecteur force global de la structure CNC et de la résolution du problème définit par l'équation (IV.15) sont les mêmes que celles utilisées pour le graphène et sont mentionnées dans la partie 4 du chapitre précédent.

V.4. Validation du modèle proposé

Afin de valider notre modèle AFEM, une structure de CNC avec une longueur L=3.4 nm, un rayon de la petite base R_s=0.33nm et un angle au sommet α=19.2° a soumis un test de traction afin que les atomes de sa grande base sont fixés dans les trois directions x, y et z, tandis que les atomes de sa petite base sont tractés par une charge uniforme comme montré à la figure (V.4).

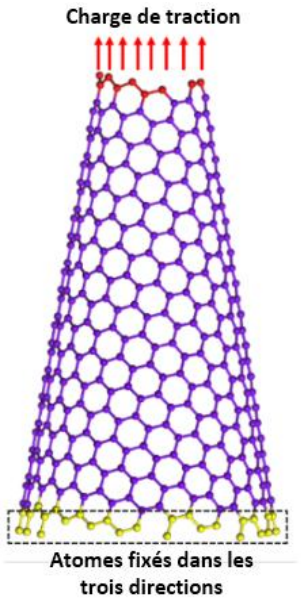


Figure (V.4): Illustration de la présente structure du CNC soumise au test de traction. Les atomes en colorés en jaune sont fixés, et les atomes colorés en rouge sont chargé.

Dans cet essai, le module élastique E (module d'Young) peut être calculé en utilisant la formule qui a déjà utilisée dans l'étude [128] et qui est exprimée comme suite :

$$E = \frac{F}{\delta h \pi \tan(\alpha)} \ln(\frac{R_s}{R_L}) \qquad (V.15)$$

Où F, δh, α, R_s et R_L, sont respectivement la charge appliquée, le déplacement relatif des atomes de la base chargée par rapport à la base fixée, l'angle au sommet, le petit rayon et le grand rayon de la CNC. Les résultats obtenus sont comparés avec ceux rapportés dans la littérature comme indiqué dans le tableau (V.1).

On constate que le module d'Young E prédit par le modèle AFEM présent est supérieur à celui prédit par la méthode DM rapporté par Wei et al. [129], alors qu'il converge bien vers celui-ci rapporté par Fakhrabadi et al. [130] et Ansari et Mahmoudinezhad [128]. En fait, la différence entre les méthodes numériques rapportées dans la littérature est due à la différence des conditions de simulation et des paramètres des potentiels utilisés [47]. Généralement, la plage de la différence dans les résultats numériques rapportés est acceptable dans la littérature.

En conséquence, le modèle AFEM présent démontre son efficacité de prédire le module d'Young de CNC avec une bonne précision en plus de sa rapidité à l'analyse.

Tableau (V.1): Comparaison entre le module d'Young du CNC prédit par le présent AFEM et celui rapporté dans la littérature.

Référence du travail	Méthode utilisée	R_S (nm)	L (nm)	E (TPa)
AFEM présent	AFEM	0.33	3.4	0.834
Wei et al. [129]	DM	0.4	1.0	0.725
Fakhrabadi et al. [130]	MM-FEM	0.4	1.0	0.867
Ansari et al. [128]	DM	0.34	2.0	0.814
	3D spring FEM model	0.34	2.0	0.820

En revanche, la méthode AFEM présente a été également testée dans l'étude de l'effet de la longueur du CNC sur son module d'Young. Dans cette étude, deux types de CNC avec α=19.2° et α=38.9° ont été soumisis à un essai de traction, pour chaque angle au sommet α on génère des structures CNC de longueurs variées. Les résultats obtenus sont comparés avec ceux de Fakhrabadi et al. [130] et représentés dans la figure (V.5). On peut constater que l'angle au sommet affecte évidemment le module d'Young, où ce dernier prend les plus petites valeurs pour les grands angles au sommet. De plus, l'augmentation de la longueur du CNC réduit légèrement le module d'Young jusqu'à ce qu'il converge vers certaines valeurs, après quoi ce module devient insensible à la variation de la longueur du CNC, surtout pour les angles au sommet les plus grands.

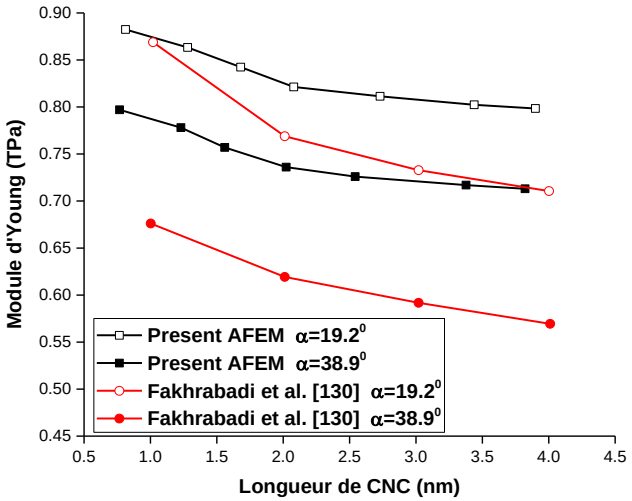


Figure (V.5): Variation du module d'Young par rapport à la longueur de CNC, avec α=19.2° et α=38.9° en utilisant la présente AFEM et la méthode MM-FEM de la référence [130].

Le taux de décroissance des courbes obtenues par la méthode MM-FEM est légèrement supérieur à celui obtenu par la méthode AFEM présente, en particulier à des valeurs inférieures de la longueur du CNC et de son angle au sommet, alors que celui-ci devient très petit pour des grandes valeurs de α. De plus, le modèle AFEM présent surestime le module d'Young par rapport à MM-FEM. Cette différence peut être attribuée à la différence des conditions de

simulation et des paramètres des potentiels utilisés dans les deux méthodes. Néanmoins, le modèle AFEM a montré des résultats acceptables.

Un autre test du modèle AFEM présent a été effectué en comparant nos résultats avec ceux prédits à l'aide de la simulation DM menée par Wei et al. [129] sur la relation entre le module d'Young et le petit rayon du nanocône de carbone comme représenté dans la figure (V.6). Les paramètres géométriques des CNC utilisés dans ce test sont L=4 nm, α=19.2°. La figure (V.6) montre que le module d'élasticité actuel est supérieur à celui prédit par la méthode DM rapportée, où la différence entre les deux courbes atteint 0,141 TPa.

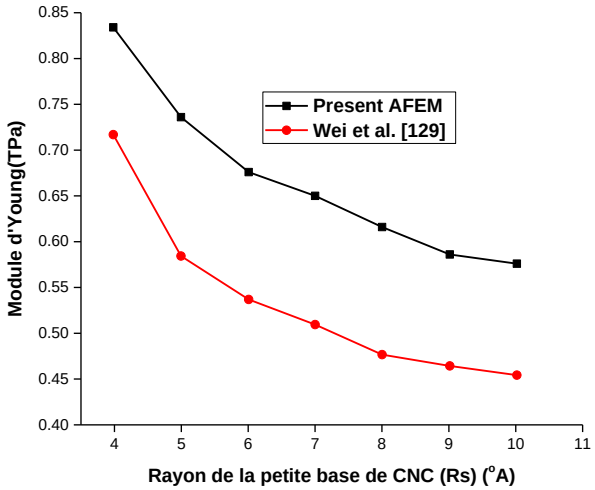


Figure (V.6): Variation du module d'Young par rapport au rayon petit du CNC en utilisant le modèle AFEM présent et la méthode DM de la référence [129].

Cependant, les résultats du présent travail ont presque le même comportement que ceux rapportés par Wei et al. [129]. De plus, à de petites valeurs de rayon R_s, le taux de réduction du module d'Young est le plus élevé, puis diminue progressivement jusqu'à disparaître à des valeurs constantes du module d'Young.

Ces résultats démontrent que la présente méthode AFEM est capable d'analyser l'influence des paramètres géométriques des CNCs sur leurs propriétés élastiques avec une bonne précision, sachant que le temps du calcul par la présente méthode est très court ne dépassant pas 1 min pour une structure de 1000 atomes.

V.5. Investigation de l'effet des imperfections sur les propriétés élastiques des CNCs

Dans cette partie, on utilise le modèle AFEM présent pour modéliser les imperfections dans les CNCs en étudiant leurs effets sur les propriétés élastiques des CNCs. À cette fin, trois structures de CNC avec des angles au sommet de 19,2°, 38,9° et 60°, une longueur et un petit rayon fixés à L = 3,4 nm et Rs = 0,33 nm respectivement sont testées sous différents pourcentages d'imperfection. Les imperfections sont représentées par l'élimination des liaisons interatomiques, ce qui nécessite de modifier à chaque fois les éléments AFEM selon la nouvelle géométrie de la structure imparfaite du CNC. Par conséquent, le paramètre qui doit être modifié au cours de l'étude est le pourcentage d'imperfections dus à la rupture des liaisons C-C dans le CNC. De ce fait, la première étape consiste à déterminer combien de liaisons correspondent à un pourcentage de défauts. Ensuite, un vecteur de nombres aléatoires avec une distribution

normale est généré en utilisant un code déjà préparé dans Matlab afin d'éliminer les liaisons interatomiques sélectionnées et de renuméroter les atomes et ses connectivités à nouveau dans la structure du CNC, d'où il est nécessaire de répéter ce processus avec différentes combinaisons de ruptures de liaison générées aléatoirement. Ensuite, un calcul statistique est mené pour trouver la valeur représentative du module d'Young (E_{moy}), tel que pour chaque pourcentage d'imperfection, un nombre de tests sont conduits jusqu'à atteindre des valeurs confidentes correspondant à un écart type inférieur à 1% comme rapporté par Rafiee et Pourazizi [131]. La procédure peut être résumée dans les étapes suivantes :

- Spécifier le type du CNC (α, L et Rs)
- Spécifier le pourcentage des imperfections
- Boucle sur le pourcentage des imperfections :
  - Boucle sur le nombre de tests nécessaires dans chaque pourcentage d'imperfections :
    - ➢ Générer la structure imparfaite du CNC correspond au pourcentage donné
    - ➢ Construire la matrice des éléments AFEM
    - ➢ Boucle sur l'incrément de charge:
      - Résolution du problème non linéaire $\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}=\mathbf{P}$ en déterminant les nouvelles positions des atomes.
      - Calculer le module d'Young, puis stocker sa valeur pour le calcul statistique.
    - ➢ Vérifier si l'écart type est inférieur à 1 %
  - Calculer la moyenne du module d'Young en utilisant l'algorithme statistique intégré dans Matlab.

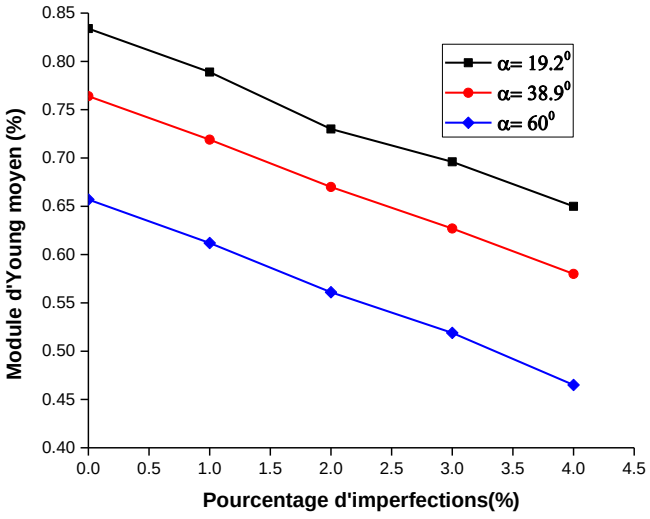


Figure (V.7): Représentation du module d'Young moyen en fonction du pourcentage d'imperfections pour les trois types de CNC modélisés dans cette étude.

En conséquence, la valeur moyenne du module d'Young calculée (E_{moy}) pour chaque pourcentage d'imperfections dans les trois types de CNC est représentée dans la figure (V.7).

Comme le montre cette figure, l'augmentation des pourcentages d'imperfection réduit considérablement le module d'Young, cette réduction est moins affectée par la variation de l'angle au sommet où on voit le même comportement des courbes pour les trois types de CNC. De plus, la relation entre le module d'Young moyen et le pourcentage d'imperfection est presque linéaire pour les trois types de CNC.

En conséquence, les résultats obtenus dans cette étude peuvent être utiles dans certaines applications de nanocône de carbone. En outre, la méthode AFEM développée dans cette étude montre qu'elle peut être utilisée comme un outil fiable et rapide pour investiguer les imperfections dans les structures de CNC et dans les nanostructures en général.

V.6. Conclusion

La méthode des éléments finis atomiques (AFEM) est réalisée en développant un nouvel élément AFEM de base contenant dix-neuf atomes, qui peut capturer avec précision les effets d'élongation des liaisons interatomiques, de flexion d'angles de valence et de torsion d'angles dièdres afin d'étudier les propriétés mécaniques des CNCs vierges et imparfaits. L'effet de l'angle au sommet, de la longueur et du petit rayon de CNC sur son module d'Young est également étudié afin de tester la précision et l'efficacité du modèle AFEM présent. Il s'avère que le module d'Young obtenu en utilisant le modèle AFEM présent se situe dans la fourchette acceptable des résultats de la littérature, tout en montrant des meilleures valeurs par rapport à certaines des méthodes mentionnées dans la littérature. De plus, le présent AFEM a pu simuler le comportement des résultats de la littérature avec une bonne précision dans l'étude de l'influence des paramètres géométriques du CNC sur son module d'Young. En revanche, l'influence de différents pourcentages d'imperfections sur le module d'Young des CNCs imparfaits est analysé de manière aléatoire à l'aide de la présente méthode AFEM. Il est révélé que l'augmentation des pourcentages d'imperfection réduit considérablement le module d'Young des CNCs, alors que le taux de réduction est insensible au changement d'angle au sommet. De plus, on a trouvé que la relation entre le module d'Young et le pourcentage d'imperfections est presque linéaire. Sur la base de cette étude, le présent AFEM peut être mis en œuvre facilement comme une technique efficace pour étudier avec précision le comportement mécanique de différentes structures de nanocônes de carbone en moins de temps de calcul par rapport aux autres techniques comme DM.

Conclusions générales

L'apparition des nanomatériaux dans le domaine du génie civil a ouvert de nouveaux horizons aux chercheurs et ingénieurs pour développer leurs techniques de l'étude. En raison des difficultés rencontrées lors de la réalisation des essais expérimentaux, la plupart des chercheurs ont eu tendance à utiliser des méthodes de simulation en raison de l'évolution de la puissance de calcul et de la possibilité de réaliser l'expérience sans fournir de moyens coûteux. Par ailleurs, les nanostructures de carbone ont montré des propriétés intéressantes qui les ont rendues utilisables dans de nombreux domaines dont le génie civil. Par conséquent, trois objectifs ont été visés lors de la préparation de ce travail :

Le premier est le principal et concerne le développement d'un modèle AFEM puissant et capable de détecter la majorité des interactions qui se produisent dans les nanostructures de carbone notamment les nanocônes de carbone. A cet égard, un nouveau modèle basé sur des éléments AFEM non linéaires constitués de dix-neuf atomes a été développé, ce modèle peut capturer les interactions locales et non locales des effets de l'élongation des liaisons C-C, de la flexion des angles de valences C-C-C et de la torsion des angles dièdres C-C-C-C qui peuvent affecter significativement les propriétés mécaniques de ces nanostructures.

Le deuxième objectif de cette thèse est d'étudier l'effet de différentes formes, tailles et orientations de nanopores sur les propriétés élastiques et de rupture du graphène en raison de leur présence inévitable dans la fabrication du graphène, en plus de certains de leurs avantages dans certaines applications du graphène telles que le dessalement de l'eau de mer, la séparation des gaz et les canaux ioniques.

Le troisième objectif de cette thèse est d'implémenter un algorithme aléatoire utilisant notre modèle AFEM à dix-neuf atomes afin d'étudier l'effet du pourcentage d'imperfections sur les propriétés élastiques des nanocônes de carbone.

Donc, dans cette thèse nous avons abordé les différentes méthodes expérimentales et numériques utilisées dans l'étude des nanostructures de carbone, cette revue nous a donné une vision approfondie sur les points forts et faibles de chaque méthode, ce qui nous a conduit à choisir la méthode des éléments finis atomiques (AFEM). Cependant, les différentes études réalisées sur les nanostructures de carbone à l'aide de la méthode AFEM sont très limitées, ce qui nous a poussé à rechercher de nouveaux modèles pour enrichir cette méthode en termes de temps et de précision de calcul. C'est pourquoi notre travail a été le suivant :

Dans l'étude des propriétés mécaniques du graphène, nous avons choisi le potentiel de Stillinger-Weber pour décrire les interactions de l'élongation des liaisons C-C et de la flexion des angles de valence en raison de sa simplicité et sa grande précision en comparaison avec les potentiels Tersoff-Brenner et REBO. De plus, nous avons conduit la méthode AFEM en utilisant des éléments AFEM à dix atomes qui ont prouvé leur efficacité de détecter les deux types d'interactions susmentionnées. En outre, les propriétés mécaniques du graphène telles que le module de cisaillement, la résistance au cisaillement et la déformation de cisaillement ultime sous différentes formes de nanopores qui n'ont pas été estimées par les méthodes rapportées dans la littérature sont également estimées par la méthode présente.

En revanche, l'effet des formes, de l'orientation et de la taille des nanopores sur les propriétés élastiques et de rupture du graphène ont été également étudié en modélisant des nanopores rectangulaires, hexagonaux et en diamant en augmentant à chaque fois leur taille exprimée par

le tau des atomes manquants (VR). Les résultats obtenus ont montré que les nanopores placés perpendiculairement à la direction de la charge réduisent davantage les propriétés mécaniques que ceux placés parallèlement à la direction de la charge.

Parmi ces nanopores, ceux ayant une longue pointe pointue normale à la direction de la charge (comme le diamant ZZ normal à la charge appliquée dans la direction AR) ont un effet significatif sur la dégradation des propriétés mécaniques. Les courbes de constantes élastiques ont montré une relation presque linéaire entre ces constantes et la variation du taux de vides (VR), en particulier dans le cas du coefficient de Poisson et du module de cisaillement. En revanche, il s'avère que les déformations sont moins affectées par la variation de la forme du nanopore, mais elles chutent rapidement en présence de ces nanopores, notamment au cas du cisaillement. En effet, le modèle AFEM développé dans cette étude a prouvé sa facilité de mise en œuvre et son efficacité pour étudier les propriétés élastiques et de rupture de la feuille de graphène vierge et en présence de différentes formes de nanopores avec une grande précision en très peu de temps.

Dans l'étude des nanocônes de carbone, nous avons développé un nouveau modèle AFEM de base contenant dix-neuf atomes, qui peut capturer avec précision les effets d'élongation de liaisons C-C, de flexion d'angles de valence et de torsion d'angles dièdres afin d'étudier les propriétés mécaniques des CNCs vierges et imparfaits. L'effet de l'angle au sommet, de la longueur et du petit rayon du CNC sur son module d'Young a été également étudié afin de tester la précision et l'efficacité du modèle AFEM présent. Il s'avère que le module d'Young obtenu en utilisant le modèle AFEM présent se situe dans la fourchette acceptable des résultats de la littérature, tout en montrant de meilleures valeurs par rapport à certaines des méthodes mentionnées dans la littérature. De plus, le présent AFEM a pu simuler le comportement des résultats de la littérature avec une bonne précision dans l'étude de l'influence des paramètres géométriques du CNC sur son module d'Young. En revanche, l'influence de différents pourcentages d'imperfections sur le module d'Young des CNCs imparfaits est analysée de manière aléatoire à l'aide de la présente méthode AFEM. Il est révélé que l'augmentation des pourcentages d'imperfections réduit considérablement le module d'Young des CNCs, alors que le taux de réduction est insensible au changement d'angle au sommet. De plus, on a trouvé que la relation entre le module d'Young et le pourcentage d'imperfections est presque linéaire. Sur la base de cette étude, le présent AFEM peut être mis en œuvre facilement comme une technique efficace pour étudier avec précision le comportement mécanique de différentes structures de nanocônes de carbone en moins de temps de calcul par rapport aux autres techniques comme la méthode de la dynamique moléculaire (DM).

D'après les résultats de cette thèse, le présent modèle est bien adapté pour constituer la base de futurs modèles pouvant simuler le comportement mécanique de certaines nanostructures complexes telles que le silicate, qui est considéré comme le principal constituant des granulats et du béton.

Le couplage entre AFEM et FEM classique fournit une méthode de calcul multi-échelles transparente et puissante adaptée aux problèmes statiques à plus grande échelle. Ce type de modélisation peut être utilisé dans l'étude des problèmes de décollement dans les techniques de renforcements des structures par des matériaux composites avec une grande précision.

Références bibliographique

[1] D. Lau, W. Jian, Z. Yu, and D. Hui, "Nano-engineering of construction materials using molecular dynamics simulations: Prospects and challenges," *Compos. Part B Eng.*, vol. 143, pp. 282–291, Jun. 2018, doi: 10.1016/J.COMPOSITESB.2018.01.014.

[2] S. Doagou-Rad, J. S. Jensen, A. Islam, and L. Mishnaevsky, "Multiscale molecular dynamics-FE modeling of polymeric nanocomposites reinforced with carbon nanotubes and graphene," *Compos. Struct.*, vol. 217, pp. 27–36, Jun. 2019, doi: 10.1016/J.COMPSTRUCT.2019.03.017.

[3] S. Liu *et al.*, "Uniaxial deformation of polystyrene–silica nanocomposites studied by hybrid molecular dynamics–finite element simulations," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 129, pp. 1–12, Mar. 2017, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2016.11.031.

[4] Y. Li and G. D. Seidel, "Multiscale modeling of the interface effects in CNT-epoxy nanocomposites," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 153, pp. 363–381, Oct. 2018, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2018.07.015.

[5] D. Lau, O. Büyüköztürk, and M. J. Buehler, "Characterization of the intrinsic strength between epoxy and silica using a multiscale approach," *J. Mater. Res.*, vol. 27, no. 14, pp. 1787–1796, Jul. 2012, doi: 10.1557/JMR.2012.96.

[6] G. Anciaux, "Simulation multi-échelles des solides par une approche couplée dynamique moléculaire/éléments finis. De la modélisation à la simulation haute performance. - TEL - Thèses en ligne," Sciences et Technologies Boordeaux I.

[7] B. Liu, Y. Huang, H. Jiang, S. Qu, and K. C. Hwang, "The atomic-scale finite element method," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 193, no. 17–20, pp. 1849–1864, May 2004, doi: 10.1016/J.CMA.2003.12.037.

[8] K. Kim, M. S. Gutierrez, R. C. Batra, and J. E. Dove, "The Atomic-scale Finite Element Method for Analyzing Mechanical Behavior of Carbon Nanotube and Quartz," Aug. 2006, Accessed: Nov. 03, 2022. [Online]. Available: https://vtechworks.lib.vt.edu/handle/10919/34851.

[9] R. Vejtai, *Springer Handbook of Nanomaterials | Robert Vajtai | Springer*, 2013e édit. Springer Dordrecht Heidelberg London New York, 2013.

[10] A. A. Balandin *et al.*, "Superior thermal conductivity of single-layer graphene," *Nano Lett.*, vol. 8, no. 3, pp. 902–907, Mar. 2008, doi: 10.1021/NL0731872/ASSET/IMAGES/MEDIUM/NL-2007-031872_0005.GIF.

[11] T. Doan, H. Le-Quang, and Q. D. To, "Coupled molecular dynamics and micromechanics study of planar elastic properties of graphene with void defects," *Mech. Mater.*, vol. 147, p. 103450, Aug. 2020, doi: 10.1016/J.MECHMAT.2020.103450.

[12] P. Karfa, S. De, K. C. Majhi, R. Madhuri, and P. K. Sharma, "Functionalization of Carbon Nanostructures," *undefined*, vol. 1–5, pp. 123–144, Jan. 2019, doi: 10.1016/B978-0-12-803581-8.11225-1.

[13] S. Zhu and G. Xu, "Single-walled carbon nanohorns and their applications," *Nanoscale*, vol. 2, no. 12, pp. 2538–2549, Dec. 2010, doi: 10.1039/C0NR00387E.

[14] X. Fan, J. Tan, G. Zhang, and F. Zhang, "Isolation of carbon nanohorn assemblies and their potential for intracellular delivery," *Nanotechnology*, vol. 18, no. 19, p. 195103,

Apr. 2007, doi: 10.1088/0957-4484/18/19/195103.

[15] M. J. Allen, V. C. Tung, and R. B. Kaner, "Honeycomb carbon: A review of graphene," *Chem. Rev.*, vol. 110, no. 1, pp. 132–145, Jan. 2010, doi: 10.1021/CR900070D/ASSET/CR900070D.FP.PNG_V03.

[16] K. S. Novoselov *et al.*, "Electric field in atomically thin carbon films," *Science (80-.).*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, Oct. 2004, doi: 10.1126/SCIENCE.1102896/SUPPL_FILE/NOVOSELOV.SOM.PDF.

[17] A. A. Balandin *et al.*, "Superior thermal conductivity of single-layer graphene," *Nano Lett.*, vol. 8, no. 3, pp. 902–907, Mar. 2008, doi: 10.1021/NL0731872/ASSET/IMAGES/MEDIUM/NL-2007-031872_0005.GIF.

[18] J. L. Le, H. Du, and S. D. Pang, "Use of 2D Graphene Nanoplatelets (GNP) in cement composites for structural health evaluation," *Compos. Part B Eng.*, vol. 67, pp. 555–563, Dec. 2014, doi: 10.1016/J.COMPOSITESB.2014.08.005.

[19] F. Cakir, H. Uysal, and V. Acar, "Experimental modal analysis of masonry arches strengthened with graphene nanoplatelets reinforced prepreg composites," *Measurement*, vol. 90, pp. 233–241, Aug. 2016, doi: 10.1016/J.MEASUREMENT.2016.04.061.

[20] A. Kis, "Mechanical properties of mesoscopic objects," EPFL, 2003.

[21] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon," *Nat. 1991 3546348*, vol. 354, no. 6348, pp. 56–58, 1991, doi: 10.1038/354056a0.

[22] L. Raki, J. Beaudoin, R. Alizadeh, J. Makar, and T. Sato, "Cement and Concrete Nanoscience and Nanotechnology," *Mater. 2010, Vol. 3, Pages 918-942*, vol. 3, no. 2, pp. 918–942, Feb. 2010, doi: 10.3390/MA3020918.

[23] L. Y. Chan and B. Andrawes, "Finite element analysis of carbon nanotube/cement composite with degraded bond strength," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 47, no. 4, pp. 994–1004, Feb. 2010, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2009.11.035.

[24] M. Eftekhari, S. Hatefi Ardakani, and S. Mohammadi, "An XFEM multiscale approach for fracture analysis of carbon nanotube reinforced concrete," *Theor. Appl. Fract. Mech.*, vol. 72, no. 1, pp. 64–75, Aug. 2014, doi: 10.1016/J.TAFMEC.2014.06.005.

[25] M. Eftekhari and S. Mohammadi, "Multiscale dynamic fracture behavior of the carbon nanotube reinforced concrete under impact loading," *Int. J. Impact Eng.*, vol. 87, pp. 55–64, Jan. 2016, doi: 10.1016/J.IJIMPENG.2015.06.023.

[26] M. F. Yu, O. Lourie, M. J. Dyer, K. Moloni, T. F. Kelly, and R. S. Ruoff, "Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load," *Science (80-.).*, vol. 287, no. 5453, pp. 637–640, Jan. 2000, doi: 10.1126/SCIENCE.287.5453.637/SUPPL_FILE/1046083C1.GIF.

[27] G. M. Odegard, T. S. Gates, L. M. Nicholson, and K. E. Wise, "Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials," *Compos. Sci. Technol.*, vol. 62, no. 14, pp. 1869–1880, Nov. 2002, doi: 10.1016/S0266-3538(02)00113-6.

[28] M. Arockiaraj, J. Clement, and K. Balasubramanian, "Topological Properties of Carbon Nanocones," *https://doi.org/10.1080/10406638.2018.1544156*, vol. 40, no. 5, pp. 1332–1346, Oct. 2018, doi: 10.1080/10406638.2018.1544156.

[29] S. Zhu and G. Xu, "Single-walled carbon nanohorns and their applications," *Nanoscale*, vol. 2, no. 12, pp. 2538–2549, Dec. 2010, doi: 10.1039/C0NR00387E.

[30] X. Fan, J. Tan, G. Zhang, and F. Zhang, "Isolation of carbon nanohorn assemblies and their potential for intracellular delivery," *Nanotechnology*, vol. 18, no. 19, p. 195103, Apr. 2007, doi: 10.1088/0957-4484/18/19/195103.

[31] K. Ajima, M. Yudasaka, T. Murakami, A. Maigné, K. Shiba, and S. Iijima, "Carbon nanohorns as anticancer drug carriers," *Mol. Pharm.*, vol. 2, no. 6, pp. 475–480, Nov. 2005, doi: 10.1021/MP0500566/ASSET/IMAGES/MEDIUM/MP0500566N00001.GIF.

[32] J. W. Yan, K. M. Liew, and L. H. He, "Ultra-sensitive analysis of a cantilevered single-walled carbon nanocone-based mass detector," *Nanotechnology*, vol. 24, no. 12, p. 125703, Mar. 2013, doi: 10.1088/0957-4484/24/12/125703.

[33] K. Momeni and R. S. Yassar, "Stress distribution on a single-walled carbon nanohorn embedded in an epoxy matrix nanocomposite under axial force," *J. Comput. Theor. Nanosci.*, vol. 7, no. 6, pp. 1035–1041, Jun. 2010, doi: 10.1166/JCTN.2010.1450.

[34] A. Fraczek-Szczypta and S. Blazewicz, "Manufacturing and physico-mechanical characterization of carbon nanohorns/polyacrylonitrile nanocomposites," *J. Mater. Sci.*, vol. 46, no. 17, pp. 5680–5689, Sep. 2011, doi: 10.1007/S10853-011-5519-3/TABLES/7.

[35] M. Ge and K. Sattler, "Observation of fullerene cones," *Chem. Phys. Lett.*, vol. 220, no. 3–5, pp. 192–196, Apr. 1994, doi: 10.1016/0009-2614(94)00167-7.

[36] A. Krishnan, E. Dujardin, M. M. J. Treacy, J. Hugdahl, S. Lynum, and T. W. Ebbesen, "Graphitic cones and the nucleation of curved carbon surfaces," *Nat. 1997 3886641*, vol. 388, no. 6641, pp. 451–454, 1997, doi: 10.1038/41284.

[37] S. N. Naess, A. Elgsaeter, G. Helgesen, and K. D. Knudsen, "Carbon nanocones: wall structure and morphology," *http://www.tandfonline.com/action/journalInformation?show=aimsScope&journalCode=tsta20#.VmBmuzZFCUk*, vol. 10, no. 6, p. 6, 2009, doi: 10.1088/1468-6996/10/6/065002.

[38] S. Chen, E. Ertekin, and D. C. Chrzan, "Plasticity in carbon nanotubes: Cooperative conservative dislocation motion," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 81, no. 15, p. 155417, Apr. 2010, doi: 10.1103/PHYSREVB.81.155417/FIGURES/10/MEDIUM.

[39] J. Zhang, J. Zhao, and J. Lu, "Intrinsic strength and failure behaviors of graphene grain boundaries," *ACS Nano*, vol. 6, no. 3, pp. 2704–2711, Mar. 2012, doi: 10.1021/NN3001356/ASSET/IMAGES/MEDIUM/NN-2012-001356_0005.GIF.

[40] M. Malakouti and A. Montazeri, "Nanomechanics analysis of perfect and defected graphene sheets via a novel atomic-scale finite element method," *Superlattices Microstruct.*, vol. 94, pp. 1–12, Jun. 2016, doi: 10.1016/J.SPMI.2016.03.049.

[41] J. Lahiri, Y. Lin, P. Bozkurt, I. I. Oleynik, and M. Batzill, "An extended defect in graphene as a metallic wire," *Nat. Nanotechnol. 2010 55*, vol. 5, no. 5, pp. 326–329, Mar. 2010, doi: 10.1038/nnano.2010.53.

[42] Y. Liu and X. Chen, "Mechanical properties of nanoporous graphene membrane," *J. Appl. Phys.*, vol. 115, no. 3, p. 034303, Jan. 2014, doi: 10.1063/1.4862312.

[43] G. Rajasekaran, P. Narayanan, and A. Parashar, "Effect of Point and Line Defects on Mechanical and Thermal Properties of Graphene: A Review," *https://doi.org/10.1080/10408436.2015.1068160*, vol. 41, no. 1, pp. 47–71, Jan. 2015, doi: 10.1080/10408436.2015.1068160.

[44] R. Khare *et al.*, "Coupled quantum mechanical/molecular mechanical modeling of the fracture of defective carbon nanotubes and graphene sheets," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 75, no. 7, p. 075412, Feb. 2007, doi: 10.1103/PHYSREVB.75.075412/FIGURES/14/MEDIUM.

[45] J. R. Xiao, J. Staniszewski, and J. W. Gillespie, "Fracture and progressive failure of defective graphene sheets and carbon nanotubes," *Compos. Struct.*, vol. 88, no. 4, pp. 602–609, May 2009, doi: 10.1016/J.COMPSTRUCT.2008.06.008.

[46] J. Zhu, M. He, and F. Qiu, "Effect of Vacancy Defects on the Young's Modulus and Fracture Strength of Graphene: A Molecular Dynamics Study," *Chinese J. Chem.*, vol. 30, no. 7, pp. 1399–1404, Jul. 2012, doi: 10.1002/CJOC.201200505.

[47] S. K. Georgantzinos, D. E. Katsareas, and N. K. Anifantis, "Limit load analysis of graphene with pinhole defects: A nonlinear structural mechanics approach," *Int. J. Mech. Sci.*, vol. 55, no. 1, pp. 85–94, Feb. 2012, doi: 10.1016/J.IJMECSCI.2011.12.006.

[48] A. M. Patel, N. Gosai, and A. Y. Joshi, "A Review on Defects in Carbon Nanotubes," *Appl. Mech. Mater.*, vol. 813–814, pp. 145–150, Nov. 2015, doi: 10.4028/WWW.SCIENTIFIC.NET/AMM.813-814.145.

[49] J. P. Guedes, S. Azevedo, and J. R. Kaschny, "Stability of vacancies in carbon nanocones," *Eur. Phys. J. B 2010 783*, vol. 78, no. 3, pp. 347–351, Nov. 2010, doi: 10.1140/EPJB/E2010-10529-6.

[50] M. L. Liao, "Influences of vacancy defects on buckling behaviors of open-tip carbon nanocones," *J. Mater. Res.*, vol. 30, no. 7, pp. 896–903, Apr. 2015, doi: 10.1557/JMR.2015.60.

[51] M.-L. Liao, "Influences of vacancy defects on tensile failure of open-tip carbon nanocones," *AIMS Mater. Sci.*, vol. 4, no. 1, pp. 178–193, 2017, doi: 10.3934/matersci.2017.1.178.

[52] A. Ayoub, "Études ab initio et dynamique moléculaire des propriétés structurales et thermodynamiques de la calcite et la witherite sous hautes pressions," Lille 1, 2010.

[53] T. Belytschko, S. P. Xiao, G. C. Schatz, and R. S. Ruoff, "Atomistic simulations of nanotube fracture," *Phys. Rev. B*, vol. 65, no. 23, p. 235430, Jun. 2002, doi: 10.1103/PhysRevB.65.235430.

[54] A. Gleadall, J. Pan, L. Ding, M. A. Kruft, and D. Curcó, "An atomic finite element model for biodegradable polymers. Part 1. Formulation of the finite elements," *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.*, vol. 51, pp. 409–420, Nov. 2015, doi: 10.1016/J.JMBBM.2015.07.008.

[55] S. K. Georgantzinos, D. E. Katsareas, and N. K. Anifantis, "Graphene characterization: A fully non-linear spring-based finite element prediction," *Phys. E Low-dimensional Syst. Nanostructures*, vol. 43, no. 10, pp. 1833–1839, Aug. 2011, doi: 10.1016/J.PHYSE.2011.06.037.

[56] D. W. Brenner, "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films," *Phys. Rev. B*, vol. 42, no. 15, p. 9458, Nov. 1990,

doi: 10.1103/PhysRevB.42.9458.

[57] C. F. Cornwell and L. T. Wille, “Elastic properties of single-walled carbon nanotubes in compression,” *Solid State Commun.*, vol. 101, no. 8, pp. 555–558, Feb. 1997, doi: 10.1016/S0038-1098(96)00742-9.

[58] J. W. Yan, K. M. Liew, and L. H. He, “Predicting mechanical properties of single-walled carbon nanocones using a higher-order gradient continuum computational framework,” *Compos. Struct.*, vol. 94, no. 11, pp. 3271–3277, Nov. 2012, doi: 10.1016/J.COMPSTRUCT.2012.04.017.

[59] D. A. Damasceno, E. Mesquita, R. K. N. D. Rajapakse, and R. Pavanello, “Atomic-scale finite element modelling of mechanical behaviour of graphene nanoribbons,” *Int. J. Mech. Mater. Des.*, vol. 15, no. 1, pp. 145–157, Mar. 2019, doi: 10.1007/S10999-018-9403-Z/FIGURES/11.

[60] D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison, S. J. Stuart, B. Ni, and S. B. Sinnott, “A second-generation reactive empirical bondorder (REBO) potential energy expression for hydrocarbons,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 14, no. 4, p. 783, Jan. 2002, doi: 10.1088/0953-8984/14/4/312.

[61] S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison, “A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions,” *J. Chem. Phys.*, vol. 112, no. 14, p. 6472, Mar. 2000, doi: 10.1063/1.481208.

[62] M. Z. Hossain, T. Hao, and B. Silverman, “Stillinger–Weber potential for elastic and fracture properties in graphene and carbon nanotubes,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 30, no. 5, p. 055901, Jan. 2018, doi: 10.1088/1361-648X/AAA3CC.

[63] F. H. Stillinger and T. A. Weber, “Computer simulation of local order in condensed phases of silicon,” *Phys. Rev. B*, vol. 31, no. 8, p. 5262, Apr. 1985, doi: 10.1103/PhysRevB.31.5262.

[64] A. Genoese, A. Genoese, and G. Salerno, “In-plane and out-of-plane tensile behaviour of single-layer graphene sheets: a new interatomic potential,” *Acta Mech. 2020 2317*, vol. 231, no. 7, pp. 2915–2930, May 2020, doi: 10.1007/S00707-020-02680-0.

[65] S. Iijima, “Helical microtubules of graphitic carbon,” *Nat. 1991 3546348*, vol. 354, no. 6348, pp. 56–58, 1991, doi: 10.1038/354056a0.

[66] A. Krishnan, E. Dujardin, T. W. Ebbesen, P. N. Yianilos, and M. M. J. Treacy, “Young’s modulus of single-walled nanotubes,” *Phys. Rev. B*, vol. 58, no. 20, p. 14013, Nov. 1998, doi: 10.1103/PhysRevB.58.14013.

[67] M. F. Yu, B. S. Files, S. Arepalli, and R. S. Ruoff, “Tensile Loading of Ropes of Single Wall Carbon Nanotubes and their Mechanical Properties,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 84, no. 24, p. 5552, Jun. 2000, doi: 10.1103/PhysRevLett.84.5552.

[68] M. F. Yu, O. Lourie, M. J. Dyer, K. Moloni, T. F. Kelly, and R. S. Ruoff, “Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load,” *Science (80-.).*, vol. 287, no. 5453, pp. 637–640, Jan. 2000, doi: 10.1126/SCIENCE.287.5453.637/SUPPL_FILE/1046083C1.GIF.

[69] F. Li, H. M. Cheng, S. Bai, G. Su, and M. S. Dresselhaus, “Tensile strength of single-walled carbon nanotubes directly measured from their macroscopic ropes,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 77, no. 20, p. 3161, Nov. 2000, doi: 10.1063/1.1324984.

[70] A. Krishnan, E. Dujardin, M. M. J. Treacy, J. Hugdahl, S. Lynum, and T. W. Ebbesen, "Graphitic cones and the nucleation of curved carbon surfaces," *Nat. 1997 3886641*, vol. 388, no. 6641, pp. 451–454, 1997, doi: 10.1038/41284.

[71] S. N. Naess, A. Elgsaeter, G. Helgesen, and K. D. Knudsen, "Carbon nanocones: wall structure and morphology," *http://www.tandfonline.com/action/journalInformation?show=aimsScope&journalCode=tsta20#.VmBmuzZFCUk*, vol. 10, no. 6, 2009, doi: 10.1088/1468-6996/10/6/065002.

[72] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene," *Science (80-.).*, vol. 321, no. 5887, pp. 385–388, Jul. 2008, doi: 10.1126/SCIENCE.1157996/SUPPL_FILE/LEE-SOM.PDF.

[73] I. W. Frank, D. M. Tanenbaum, A. M. van der Zande, and P. L. McEuen, "Mechanical properties of suspended graphene sheets," *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct. Process. Meas. Phenom.*, vol. 25, no. 6, p. 2558, Dec. 2007, doi: 10.1116/1.2789446.

[74] P. Zhang *et al.*, "Fracture toughness of graphene," *Nat. Commun. 2014 51*, vol. 5, no. 1, pp. 1–7, Apr. 2014, doi: 10.1038/ncomms4782.

[75] B. J. Alder and T. E. Wainwright, *Studies in Molecular Dynamics. I. General Method*, Illustrée,., vol. 31, no. 2. American Institute of PhysicsAIP, 2004.

[76] D. C. Rapaport, "The art of molecular dynamics simulation," p. 400, 1997, Accessed: Nov. 03, 2022. [Online]. Available: https://books.google.com/books/about/The_Art_of_Molecular_Dynamics_Simulation.html?hl=fr&id=hHxllwEACAAJ.

[77] K. M. Liew, X. Q. He, and C. H. Wong, "On the study of elastic and plastic properties of multi-walled carbon nanotubes under axial tension using molecular dynamics simulation," *Acta Mater.*, vol. 52, no. 9, pp. 2521–2527, May 2004, doi: 10.1016/J.ACTAMAT.2004.01.043.

[78] K. M. Liew, C. H. Wong, X. Q. He, M. J. Tan, and S. A. Meguid, "Nanomechanics of single and multiwalled carbon nanotubes," *Phys. Rev. B*, vol. 69, no. 11, p. 115429, Mar. 2004, doi: 10.1103/PhysRevB.69.115429.

[79] K. M. Liew, C. H. Wong, and M. J. Tan, "Tensile and compressive properties of carbon nanotube bundles," *Acta Mater.*, vol. 54, no. 1, pp. 225–231, Jan. 2006, doi: 10.1016/J.ACTAMAT.2005.09.002.

[80] Z. Qin, Q. H. Qin, and X. Q. Feng, "Mechanical property of carbon nanotubes with intramolecular junctions: Molecular dynamics simulations," *Phys. Lett. A*, vol. 372, no. 44, pp. 6661–6666, Oct. 2008, doi: 10.1016/J.PHYSLETA.2008.09.010.

[81] J. X. Wei, K. M. Liew, and X. Q. He, "Mechanical properties of carbon nanocones," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 91, no. 26, p. 261906, Dec. 2007, doi: 10.1063/1.2813017.

[82] S. P. Jordan and V. H. Crespi, "Theory of carbon nanocones: Mechanical chiral inversion of a micron-scale three-dimensional object," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, no. 25, p. 255504, Dec. 2004, doi: 10.1103/PHYSREVLETT.93.255504/FIGURES/8/MEDIUM.

[83] P. C. Tsai and T. H. Fang, "A molecular dynamics study of the nucleation, thermal stability and nanomechanics ofcarbon nanocones," *Nanotechnology*, vol. 18, no. 10, p. 105702, Jan. 2007, doi: 10.1088/0957-4484/18/10/105702.

[84] K. M. Liew, J. X. Wei, and X. Q. He, "Carbon nanocones under compression: Buckling and post-buckling behaviors," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 75, no. 19, p. 195435, May 2007, doi: 10.1103/PHYSREVB.75.195435/FIGURES/9/MEDIUM.

[85] M. L. Liao, C. H. Cheng, and Y. P. Lin, "Tensile and compressive behaviors of open-tip carbon nanocones under axial strains," *J. Mater. Res.*, vol. 26, no. 13, pp. 1577–1584, Jun. 2011, doi: 10.1557/JMR.2011.160.

[86] J. W. Jiang, J. S. Wang, and B. Li, "Young's modulus of graphene: A molecular dynamics study," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 80, no. 11, p. 113405, Sep. 2009, doi: 10.1103/PHYSREVB.80.113405/FIGURES/4/MEDIUM.

[87] Y. Liu and X. Chen, "Mechanical properties of nanoporous graphene membrane," *J. Appl. Phys.*, vol. 115, no. 3, p. 034303, Jan. 2014, doi: 10.1063/1.4862312.

[88] D. A. Damasceno, R. K. N. D. Rajapakse, E. Mesquita, and R. Pavanello, "Atomistic simulation of tensile strength properties of graphene with complex vacancy and topological defects," *Acta Mech. 2020 2318*, vol. 231, no. 8, pp. 3387–3404, Jun. 2020, doi: 10.1007/S00707-020-02715-6.

[89] K. S. Surana, "Geometrically non-linear formulation for the three dimensional solid-shell transition finite elements," *Comput. Struct.*, vol. 15, no. 5, pp. 549–566, Jan. 1982, doi: 10.1016/0045-7949(82)90007-4.

[90] H. A. Elkaranshawy and M. A. Dokainish, "Corotational finite element analysis of planar flexible multibody systems," *Comput. Struct.*, vol. 54, no. 5, pp. 881–890, Mar. 1995, doi: 10.1016/0045-7949(94)00346-5.

[91] A. Rodríguez-Ferran, A. Pérez-Foguet, and A. Huerta, "Arbitrary Lagrangian–Eulerian (ALE) formulation for hyperelastoplasticity," *Int. J. Numer. Methods Eng.*, vol. 53, no. 8, pp. 1831–1851, Mar. 2002, doi: 10.1002/NME.362.

[92] E. Marenić, A. Ibrahimbegovic, J. Sorić, and P. A. Guidault, "Homogenized Elastic Properties of Graphene for Small Deformations," *Mater. 2013, Vol. 6, Pages 3764-3782*, vol. 6, no. 9, pp. 3764–3782, Sep. 2013, doi: 10.3390/MA6093764.

[93] C. Baykasoglu and A. Mugan, "Coupled molecular/continuum mechanical modeling of graphene sheets," *Phys. E Low-dimensional Syst. Nanostructures*, vol. 45, pp. 151–161, Aug. 2012, doi: 10.1016/J.PHYSE.2012.07.021.

[94] B. I. Yakobson, C. J. Brabec, and J. Bernholc, "Nanomechanics of Carbon Tubes: Instabilities beyond Linear Response," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, no. 14, p. 2511, Apr. 1996, doi: 10.1103/PhysRevLett.76.2511.

[95] A. Pantano, D. M. Parks, and M. C. Boyce, "Mechanics of deformation of single- and multi-wall carbon nanotubes," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 52, no. 4, pp. 789–821, Apr. 2004, doi: 10.1016/J.JMPS.2003.08.004.

[96] R. D. Firouz-Abadi, M. M. Fotouhi, and H. Haddadpour, "Free vibration analysis of nanocones using a nonlocal continuum model," *Phys. Lett. A*, vol. 375, no. 41, pp. 3593–3598, Sep. 2011, doi: 10.1016/J.PHYSLETA.2011.08.035.

[97] J. W. Yan, K. M. Liew, and L. H. He, "Buckling and post-buckling of single-wall carbon nanocones upon bending," *Compos. Struct.*, vol. 106, pp. 793–798, Dec. 2013, doi: 10.1016/J.COMPSTRUCT.2013.07.007.

[98] C. Li and T. W. Chou, "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes," *Int. J. Solids Struct.*, vol. 40, no. 10, pp. 2487–2499, May 2003, doi: 10.1016/S0020-7683(03)00056-8.

[99] Y. Chandra, F. Scarpa, S. Adhikari, J. Zhang, E. I. Saavedra Flores, and H. X. Peng, "Pullout strength of graphene and carbon nanotube/epoxy composites," *Compos. Part B Eng.*, vol. 102, pp. 1–8, Oct. 2016, doi: 10.1016/J.COMPOSITESB.2016.06.070.

[100] Y. Chandra, E. I. Saavedra Flores, F. Scarpa, and S. Adhikari, "Buckling of hybrid nanocomposites with embedded graphene and carbon nanotubes," *Phys. E Low-dimensional Syst. Nanostructures*, vol. 83, pp. 434–441, Sep. 2016, doi: 10.1016/J.PHYSE.2016.01.021.

[101] Y. Chandra, R. Chowdhury, F. Scarpa, and S. Adhikaricor, "Vibrational characteristics of bilayer graphene sheets," *Thin Solid Films*, vol. 519, no. 18, pp. 6026–6032, Jul. 2011, doi: 10.1016/J.TSF.2011.04.012.

[102] B. Liu, Z. Zhang, and Y. Chen, "Atomistic statics approaches - Molecular mechanics, finite element method and continuum analysis," *J. Comput. Theor. Nanosci.*, vol. 5, no. 9, pp. 1891–1913, Sep. 2008, doi: 10.1166/JCTN.2008.904.

[103] M. Meo and M. Rossi, "Tensile failure prediction of single wall carbon nanotube," *Eng. Fract. Mech.*, vol. 73, no. 17, pp. 2589–2599, Nov. 2006, doi: 10.1016/J.ENGFRACMECH.2006.05.005.

[104] M. Rossi and M. Meo, "On the estimation of mechanical properties of single-walled carbon nanotubes by using a molecular-mechanics based FE approach," *Compos. Sci. Technol.*, vol. 69, no. 9, pp. 1394–1398, Jul. 2009, doi: 10.1016/J.COMPSCITECH.2008.09.010.

[105] G. I. Giannopoulos, P. A. Kakavas, and N. K. Anifantis, "Evaluation of the effective mechanical properties of single walled carbon nanotubes using a spring based finite element approach," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 41, no. 4, pp. 561–569, Feb. 2008, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2007.05.016.

[106] B. Liu, H. Jiang, Y. Huang, S. Qu, M. F. Yu, and K. C. Hwang, "Atomic-scale finite element method in multiscale computation with applications to carbon nanotubes," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 72, no. 3, p. 035435, Jul. 2005, doi: 10.1103/PHYSREVB.72.035435/FIGURES/10/MEDIUM.

[107] A. Y. T. Leung, X. Quo, X. Q. He, H. Jiang, and Y. Huang, "Postbuckling of carbon nanotubes by atomic-scale finite element," *J. Appl. Phys.*, vol. 99, no. 12, p. 124308, Jun. 2006, doi: 10.1063/1.2206607.

[108] Z. Q. Zhang, B. Liu, Y. L. Chen, H. Jiang, K. C. Hwang, and Y. Huang, "Mechanical properties of functionalized carbon nanotubes," *Nanotechnology*, vol. 19, no. 39, p. 395702, Aug. 2008, doi: 10.1088/0957-4484/19/39/395702.

[109] S. O. Gajbhiye and S. P. Singh, "Multiscale nonlinear frequency response analysis of single-layered graphene sheet under impulse and harmonic excitation using the atomistic finite element method," *J. Phys. D. Appl. Phys.*, vol. 48, no. 14, p. 145305, Mar. 2015, doi: 10.1088/0022-3727/48/14/145305.

[110] M. Born, K. Huang, M. Lax, M. Born, K. Huang, and M. Lax, "Dynamical Theory of Crystal Lattices," *AmJPh*, vol. 23, no. 7, pp. 474–474, Oct. 1955, doi:

10.1119/1.1934059.

[111] M. Arroyo and T. Belytschko, "An atomistic-based finite deformation membrane for single layer crystalline films," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 50, no. 9, pp. 1941–1977, Sep. 2002, doi: 10.1016/S0022-5096(02)00002-9.

[112] H. W. Zhang, J. B. Wang, and X. Guo, "Predicting the elastic properties of single-walled carbon nanotubes," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 53, no. 9, pp. 1929–1950, Sep. 2005, doi: 10.1016/J.JMPS.2005.05.001.

[113] X. Guo, J. B. Wang, and H. W. Zhang, "Mechanical properties of single-walled carbon nanotubes based on higher order Cauchy–Born rule," *Int. J. Solids Struct.*, vol. 43, no. 5, pp. 1276–1290, Mar. 2006, doi: 10.1016/J.IJSOLSTR.2005.05.049.

[114] , AC Eringen and , JL Wegner, "Nonlocal Continuum Field Theories," *Appl. Mech. Rev.*, vol. 56, no. 2, pp. B20–B22, Mar. 2003, doi: 10.1115/1.1553434.

[115] G. I. Giannopoulos, S. K. Georgantzinos, and N. K. Anifantis, "A semi-continuum finite element approach to evaluate the Young's modulus of single-walled carbon nanotube reinforced composites," *Compos. Part B Eng.*, vol. 41, no. 8, pp. 594–601, Dec. 2010, doi: 10.1016/J.COMPOSITESB.2010.09.023.

[116] R. Ansari, R. Rajabiehfard, and B. Arash, "Nonlocal finite element model for vibrations of embedded multi-layered graphene sheets," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 49, no. 4, pp. 831–838, Oct. 2010, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2010.06.032.

[117] F. Khosravi, S. A. Hosseini, and A. Tounsi, "Forced Axial Vibration of a Single-Walled Carbon Nanotube Embedded in Elastic Medium under Various Moving Forces," *J. Nano Res.*, vol. 63, pp. 112–133, 2020, doi: 10.4028/WWW.SCIENTIFIC.NET/JNANOR.63.112.

[118] D. A. Damasceno, E. Mesquita, and R. N. K. D. Rajapakse, "Mechanical Behavior of Nano Structures Using Atomic-Scale Finite Element Method (AFEM)," *Lat. Am. J. Solids Struct.*, vol. 14, no. 11, pp. 2046–2066, 2017, doi: 10.1590/1679-78254050.

[119] T. C. Theodosiou and D. A. Saravanos, "Numerical simulation of graphene fracture using molecular mechanics based nonlinear finite elements," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 82, pp. 56–65, Feb. 2014, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2013.09.032.

[120] T. Dumitrică, T. Belytscko, and B. I. Yakobson, "Bond-breaking bifurcation states in carbon nanotube fracture," *J. Chem. Phys.*, vol. 118, no. 21, p. 9485, May 2003, doi: 10.1063/1.1577540.

[121] "Nanotube Modeler (Nanocones, Bucky-Ball, Fullerenes, Simulation Software)." http://www.jcrystal.com/products/wincnt/ (accessed Nov. 04, 2022).

[122] K. J. BEERS, *Numerical Methods for Chemical Engineering Applications in MATLAB*. Cambridge University Press, 2006.

[123] A. Tapia, R. Peón-Escalante, C. Villanueva, and F. Avilés, "Influence of vacancies on the elastic properties of a graphene sheet," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 55, pp. 255–262, Apr. 2012, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2011.12.013.

[124] C. D. Reddy, S. Rajendran, and K. M. Liew, "Equilibrium configuration and continuum elastic properties of finite sized graphene," *Nanotechnology*, vol. 17, no. 3, p. 864, Jan. 2006, doi: 10.1088/0957-4484/17/3/042.

[125] H. Zhao, K. Min, and N. R. Aluru, "Size and chirality dependent elastic properties of graphene nanoribbons under uniaxial tension," *Nano Lett.*, vol. 9, no. 8, pp. 3012–3015, Aug. 2009, doi: 10.1021/NL901448Z/ASSET/IMAGES/MEDIUM/NL-2009-01448Z_0006.GIF.

[126] F. Liu, P. Ming, and J. Li, "Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 76, no. 6, p. 064120, Aug. 2007, doi: 10.1103/PHYSREVB.76.064120/FIGURES/5/MEDIUM.

[127] G. I. Giannopoulos and S. K. Georgantzinos, "Tensile behavior of gallium nitride monolayer via nonlinear molecular mechanics," *Eur. J. Mech. - A/Solids*, vol. 65, pp. 223–232, Sep. 2017, doi: 10.1016/J.EUROMECHSOL.2017.04.010.

[128] R. Ansari and E. Mahmoudinezhad, "Characterizing the mechanical properties of carbon nanocones using an accurate spring-mass model," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 101, pp. 260–266, Apr. 2015, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2015.02.001.

[129] J. X. Wei, K. M. Liew, and X. Q. He, "Mechanical properties of carbon nanocones," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 91, no. 26, p. 261906, Dec. 2007, doi: 10.1063/1.2813017.

[130] M. M. S. Fakhrabadi, N. Khani, R. Omidvar, and A. Rastgoo, "Investigation of elastic and buckling properties of carbon nanocones using molecular mechanics approach," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 61, pp. 248–256, Aug. 2012, doi: 10.1016/J.COMMATSCI.2012.04.029.

[131] R. Rafiee and R. Pourazizi, "Evaluating the influence of defects on the young's modulus of carbon nanotubes using stochastic modeling," *Mater. Res.*, vol. 17, no. 3, pp. 758–766, 2014, doi: 10.1590/S1516-14392014005000071.