

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DJILLALI LIABES DE SIDI BEL ABBES



FACULTE DES SCIENCES EXACTES

DEPARTEMENT MATERIAUX ET DEVELOPPEMENT DURABLE

THESE DE DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité : Sciences Physiques

Option : Nanomatériaux

Sujet de thèse

*Etude de la vibration libre
D'un nanotube en carbone*

Présenté par : Mr RAKRAK Kaddour

Soutenu le 18 / 03 / 2018 devant le jury composé de :

Président	: BENZAIR Abdelnour	Professeur	UDL SIDI BEL ABBES
Examineurs	: TOUNSI Abdelouahed	Professeur	UDL SIDI BEL ABBES
	: ZIDOUR Mohamed	MCA	U.TIARET
	: BOUSAHLA Abdelmoumen Anis	MCA	C.U.RELIZANE
	: BESSEGHIR Abderrahmane	MCA	C.U.TISSEMSILET
Encadreur	: HEIRECHE Houari	Professeur	UDL SIDI BEL ABBES

Année universitaire 2017-2018

Remerciement

Je remercie au premier lieu le professeur H.HEIRECHE pour m'avoir accueilli au sein de laboratoire de modélisation et simulation multi-échelle, et pour m'avoir proposé ce travail de thèse.

Mes très sincères remerciements au professeur H. HEIRECHE qui a encadré mon travail de thèse, j'adresse aussi mes sincères remerciements au docteur M. ZIDOUR pour sa patience vis-à-vis de mes nombreuses questions, son enthousiasme et son optimisme ont été un encouragement permanent.

Je remercie monsieur le professeur BENZAIR Abdelnour de l'université Djillali Liabes de SIDI BELABBES et qui m'ont fait l'honneur d'être le président de cette thèse.

Je remercie monsieur le professeur TOUNSI Abdelouahed de l'université Djillali Liabes de SIDI BELABBES pour avoir accepté examiner cette thèse et de participer à ce jury.

Je remercie monsieur ZIDOUR Mohamed Maître de conférence de l'université Ibn Khaldoune de TIARET pour avoir accepté de participer à ce jury.

Je remercie monsieur BOUSAHLA Abdelmoumen Anis Maître de conférence au sein centre universitaire de RELIZANE pour avoir accepté de participer à ce jury.

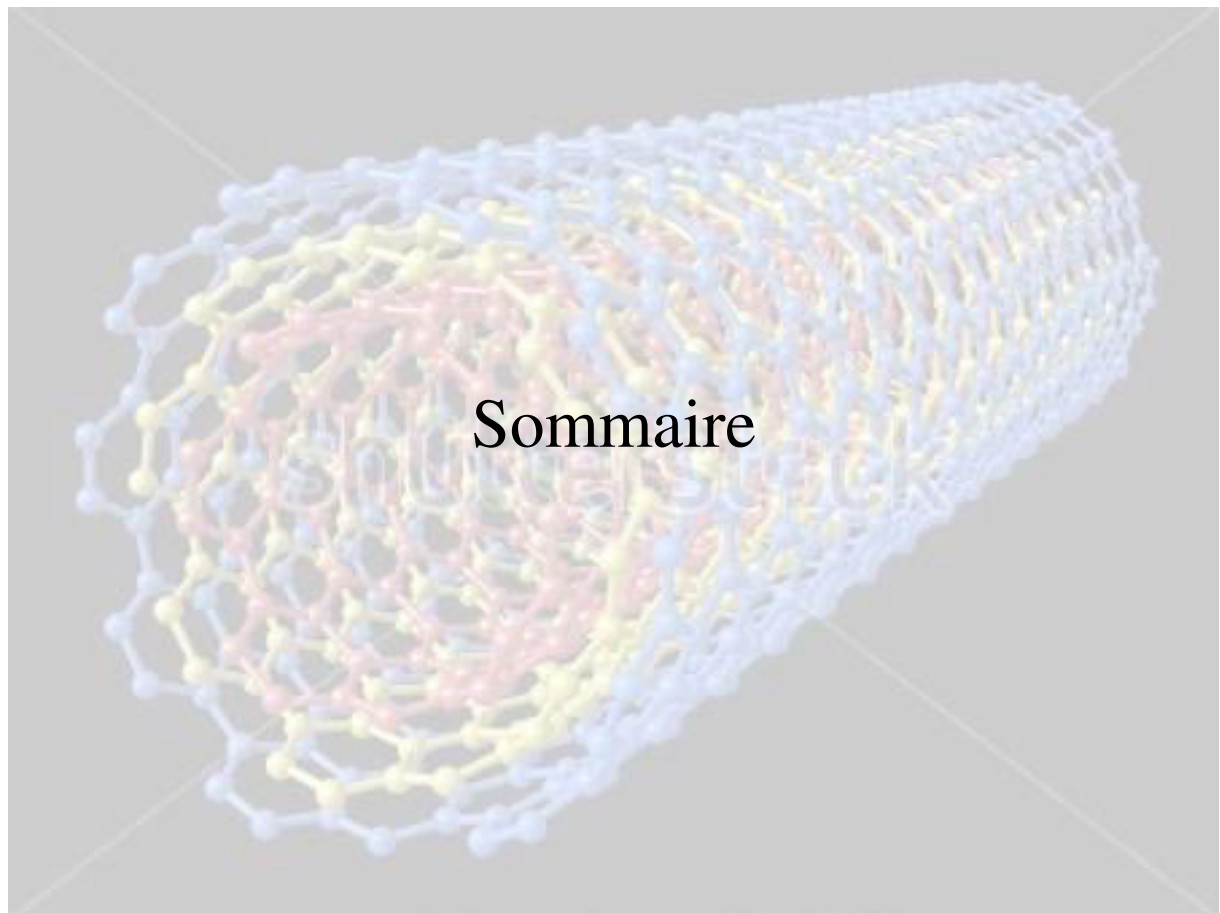
Je remercie monsieur BESSEGHIR Abderrahmane Maître de conférence au niveau de centre universitaire de TISSEMSILET pour avoir accepté de participer à ce jury.

Je tiens en particulier et avant tout à remercier mes parents, sans lesquels je n'aurais pu terminer ce travail et qui m'ont toujours apporté tout leur soutien et leur appui.

Je tiens aussi à remercier ma femme qui m'a aidé pour réaliser ce travail malgré sa lourde tâche que ce soit avec les enfants ou avec sa thèse de doctorat.

Je tiens aussi à remercier mes chers frères et sœurs, et mes chers amis et en particulier les enseignants et l'équipe administrative du département ST de l'université Hassiba benbouali de CHLEF.

Enfin à tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin pour réaliser ce travail, a tous encore Merci.



www.shutterstock.com · 104594399

Sommaire

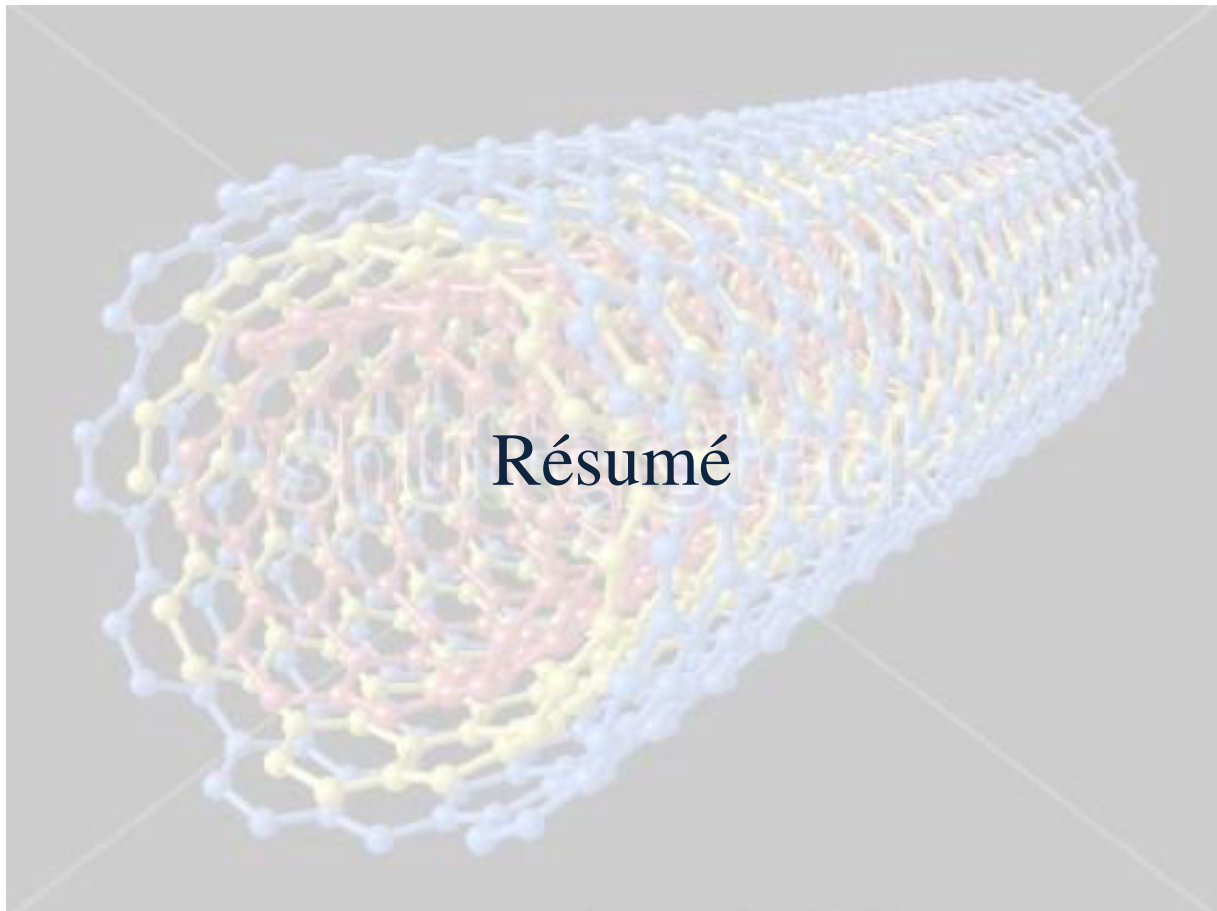
Résumé	<i>i</i>
Liste des figures	<i>iv</i>
Liste des tableaux	<i>vi</i>
Liste des abréviations	<i>vii</i>
Liste des notations.....	<i>viii</i>
Introduction générale	01
<i>Chapitre I : Généralités sur les nanotubes de carbone</i>	
1. Introduction	04
2. Le carbone	04
3. Les différentes formes de carbone	05
3.1- Le graphite	05
3.1.1- Paramètre de maille	06
3.1.2- Symétrie	06
3.2- Diamant	07
3.3- Carbone mal organise	09
4. Les nouvelles formes de carbone	10
4.1- le fullerène	10
4.2- Nanostructures unidimensionnelles	11
4.2.1- Structure des nanotubes de carbone	12
4.2.2- Nanotube de carbone monocouche et multicouche	14
4.2.3.1- Nanotube de carbone monocouche (SWNT)	14
4.2.3.2- Nanotube de carbonnes multicouches (DWNT)	15
5- Synthèse des nanotubes de carbone	16
5.1- Décharge par arc électrique	17
5.2- Ablation par laser	17
5.3- Elaboration par CVD (Chemical Vapor Deposition	18
6- Propriétés des nanotubes de carbone	19
6.1- Propriétés mécaniques	20
6.2- Propriétés électroniques	21
6.3- Propriétés thermiques	23
6.4- Propriétés optiques	23
7- Défauts des nanotubes de carbone	24
8- Purification des nanotubes de carbone	25
8.1- La voie sèche	25
8.1- La voie humide	26
9- Applications des nanotubes de carbone	28
9.1- Transistor a effet de champ (FET)	28
9.2- Source d'électrons	29
9.3-Toxicité des nanotubes de carbone	30
10- Conclusion	31
Référence	32
<i>Chapitre II : La théorie d'élasticité non-locale</i>	
1. Introduction	35
2. Limites de la théorie classique et intérêt de l'approche non-locale	36
2.1-Théories non-locales à gradient	36
2.2-Théories non-locales intégrales	37
3. Conclusion	39
Référence	41

Chapitre III : Etude théorique sur la vibration libre d'un nanotube de carbone

1. Introduction	43
2. La théorie d'Euler Bernoulli	45
3. La théorie de Timoshenko	46
4. Théorie d'ordre élevé	48
5. Vibration libre d'un nanotube de carbone double couche	49
6. Conclusion	54
Référence	55

Chapitre IV : Résultats et discussion sur la vibration libre d'un nanotube de carbone

1. Introduction	57
2. Discussion	57
3. Conclusion	65
Référence	67
Conclusion générale	68



www.shutterstock.com · 104594399

Résumé

Sur la base de la théorie d'élasticité non-local on a développé le modèle élastique nonlocal de la poutre Euler-Bernoulli pour analyser la vibration libre d'un nanotube de carbone double couche (*DWCNT*). Les nanotubes doubles couches pourraient être imaginés comme un groupe de co-axiales cylindrique emballé en commun par la force d'interaction de Van der Waals.

Les valeurs du module de Young utilisée dans cette étude de trois types de nanotubes de carbone double-couche (*DWCNTs*), armchair, zigzag , et chiral, sont calculées par la simulation de la dynamique moléculaire(MD) . Les résultats obtenus indiquent clairement la dépendance de la fréquence de la vibration avec la variation de nombre de mode, le coefficient de petite échelle, le rapport (L/d) et de la chiralité du nanotube.

Cette recherche est prometteuse pour divers applications et utilisation du nanotube de carbone double couches.

Mot clé: nanotube double couche; Vibration; Elasticité non-locale; chiralité.

Abstract

On the basis of the nonlocal elasticity theory, the nonlocal elastic model of the Euler-Bernoulli beam was developed to analyze the free vibration of a double-layered carbon nanotube (DWCNT). The double walled nanotubes could be considered as a cylindrical coaxial group packaged together by the van der Waals interaction force.

The values of the Young's modulus used in this study of double-walled carbon nanotubes (DWCNTs), armchair, zigzag, and chiral, are calculated by molecular dynamics simulation (MD).

The results obtained clearly indicate the dependence of the frequency of the vibration with the variation of mode number, the coefficient of small scale, aspect ratio and chirality.

This research is promising for various applications and use of the double layer carbon nanotube.

Keywords: nanotube double walled; Vibration; Elasticity nonlocal; chirality.

ملخص

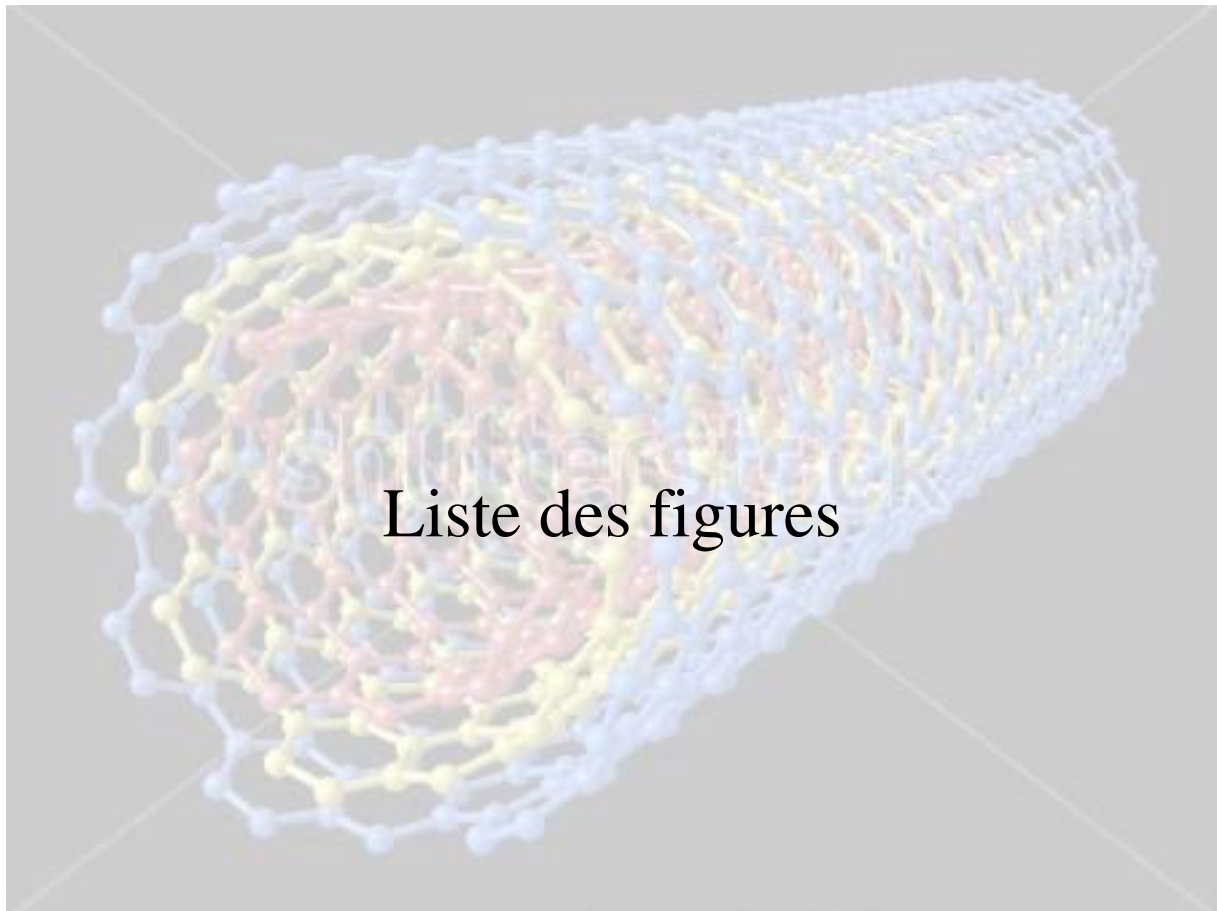
على أساس نظرية المرونة غير المحلية، تم تطوير النموذج المرن غير المحلي لعارضة أولر-برنولي لتحليل الاهتزاز الحر لأنابيب الكربون ذات الجدران المزدوجة (DWCNT). ويمكن أن اعتبار الأنابيب النانوية للكربون مزدوجة الطبقة كمجموعة اسطوانات محورية مرتبط بواسطة قوى فان دير فالز.

تم حساب معامل يونغ لنانوتيب الكربونية مزدوجة الطبقة لأنواع الثلاث في هذه الدراسة بواسطة محاكاة الديناميك الجزيئية.

وتشير النتائج التي تم الحصول عليها توضح الترابط بين تردد الاهتزاز مع الاختلاف في النبض، والمعامل الصغير للسلم ونسبة الارتفاع في اللاتناظرية.

هذه الدراسة مهمة نظرا لمختلف التطبيقات الكثيرة للأنابيب النانوية الكربون مزدوجة الطبقة. **الكلمات المفتاحية:**

أنابيب نانوية مزدوجة الطبقة. اهتزاز؛ مرونة غير المحلية؛ هيكل.



Liste des figures

www.shutterstock.com · 104594399

Liste des figures

Chapitre I : Généralités sur les nanotubes de carbone

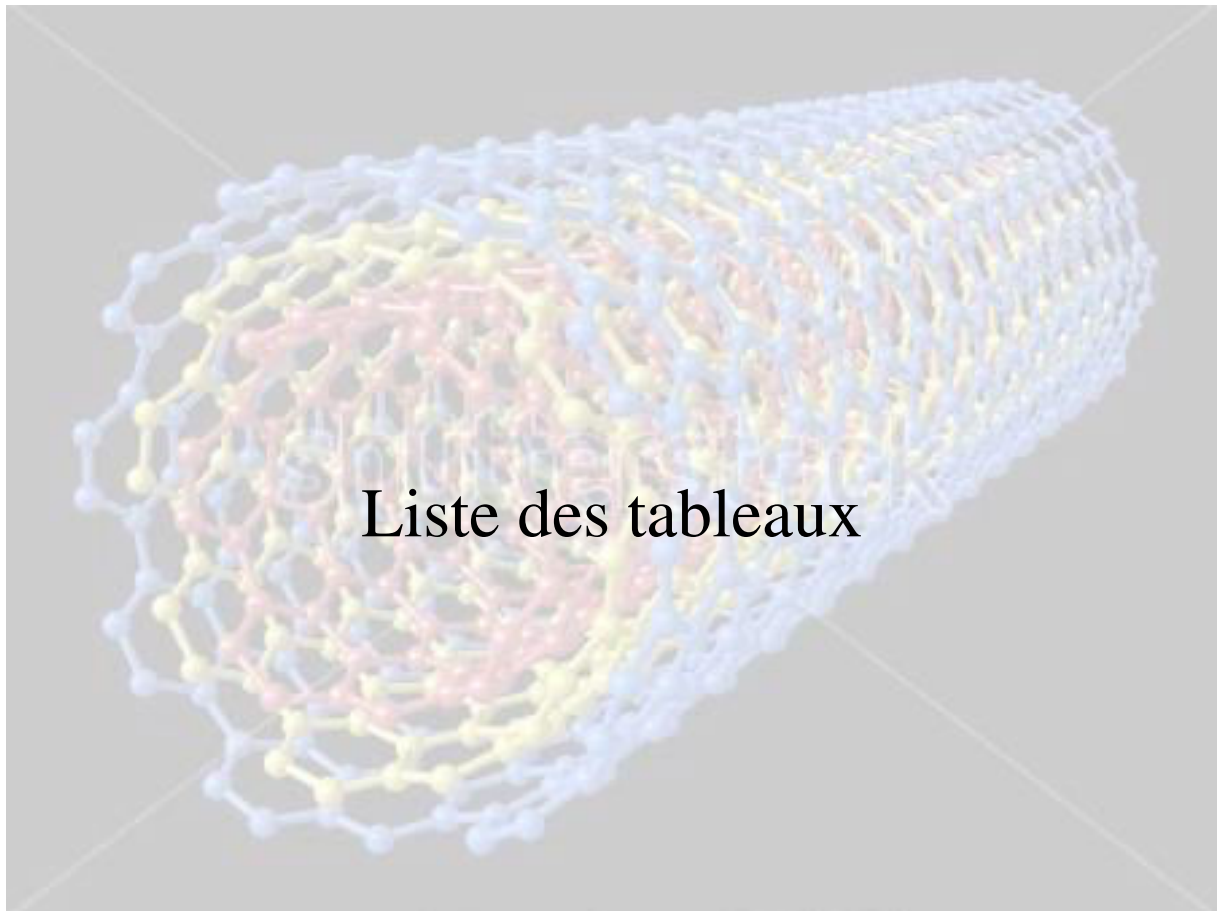
Figure 1.1 Forme cristallin de graphène.....	05
Figure 1.2 les vecteurs de base du réseau	06
Figure 1.3 réseau de graphène.....	06
Figure 1. 4 représentation du réseau du graphite	07
Figure 1. 5 structure diamant	08
Figure 1. 6 Représentation schématique des différentes formes allotropiques du carbone	10
Figure 1. 7 Structure cristalline d'un nanotube de carbone	11
Figure 1. 8 Représentation d'une nanofibre : un cylindre plein avec un grand aspect ratio	11
Figure 1. 9 Représentation d'un nanocable : 2 couches différentes superposées et entourées d'une nanofibre	12
Figure 1. 10 : Représentation de la structure d'une feuille de graphite ainsi que les différentes configurations d'enroulement d'un graphène	13
Figure 1. 11 : Représentation graphique d'un SWNT (gauche) et image de microscope électronique à transmission de plusieurs SWNT (droite)	15
Figure 1. 12 Schéma d'un cristal de 7 nanotubes	15
Figure 1. 13 : Représentation graphique d'un MWNT (en haut) et image de microscope électronique à transmission d'un MWNT (en bas)	16
Figure 1. 14 : Schéma d'un réacteur de synthèse de nanotubes de carbone par la méthode de l'arc électrique	17
Figure 1. 15: Schéma représentant un réacteur de type ablation laser permettant la production de nanotubes de carbone	18
Figure 1.16:Schéma d'un réacteur CVD pour la croissance des (NTC)	19
Figure 1. 17. Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monocouches en fonction de leurs indices de chiralité (n,m).....	21
Figure 1.1 8. Densités d'états de deux SWNTs zigzag : (a) le nanotube (9,0), qui a un comportement métallique et (b) le nanotube (10,0) qui est semiconducteur.	22
Figure 1. 19 Influence du type de cycle sur la courbure de la surface	24
Figure 1. 20 Introduction d'une paire pentagone-heptagone provoquant une variation de diamètre et de chiralité : a- de (11,0) à (12,0) ; b- de (9,0) à (12,0)	24
Figure 1.21 Défauts pentagonaux et heptagonaux se traduisant par des jonctions.....	25
Figure 1. 22 Transistor à effet de champ de nanotube de carbone	29

Chapitre III : Etude théorique sur la vibration libre d'un nanotube de carbone

Figure 3.1 Cinématique d'Euler Bernoulli	45
Figure 3.2 Cinématique de Timoshenko	47
Figure 3.3 Cinématique de la Théorie d'Ordre Elevé.....	48

Chapitre IV : Résultats et discussion de la vibration libre d'un nanotube de carbone

Figure 4.1 Relation entre le rapport de fréquence plus faible de DWCNT, la chiralité du nanotube de carbone de type armchair et le numéro de mode; Les valeurs de (L / d) sont 30 et ($e_0a = 2nm$).....	60
Figure 4. 2: Relation entre le rapport de fréquence plus faible de DWCNT, la chiralité du nanotube de carbone de type chiral et le numéro de mode; Les valeurs de (L / d) sont 30 et ($e_0a = 2nm$).....	60
Figure 4. 3: Relation entre le rapport de fréquence plus faible de DWCNT, la chiralité du nanotube de carbone de type zigzag et le nombre de mode; Les valeurs de (L / d) sont 30 et ($e_0a = 2nm$).....	61
Figure 4. 4: Relation entre le rapport de fréquence plus faible de DWCNT et le nombre de modes pour les différences de chiralité des nanotubes de carbone; Les valeurs de (L / d) sont 30 et ($e_0a = 2nm$).....	62
Figure 4.5: effet du rapport d'aspect et de la chiralité du nanotube de carbone double couches sur le rapport de fréquence plus faible de DWCNT avec ($e_0a = 2nm$, $N = 2$)...	63



Liste des tableaux

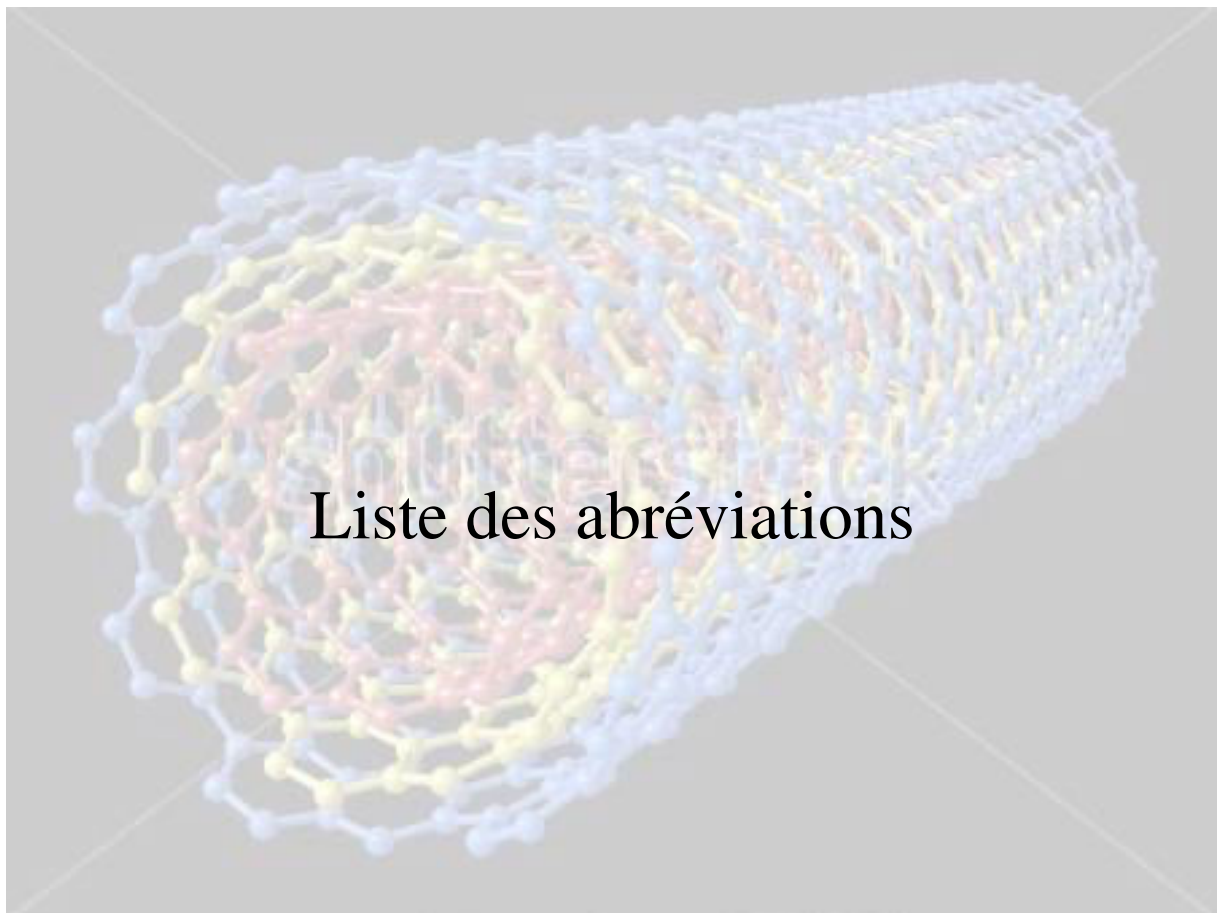
Liste des tableaux

Chapitre I : Généralités sur les nanotubes de carbone

Tableau 1.1 Propriétés et applications du diamant	09
---	----

Chapitre IV : Résultats et discussion de la vibration libre d'un nanotube de carbone

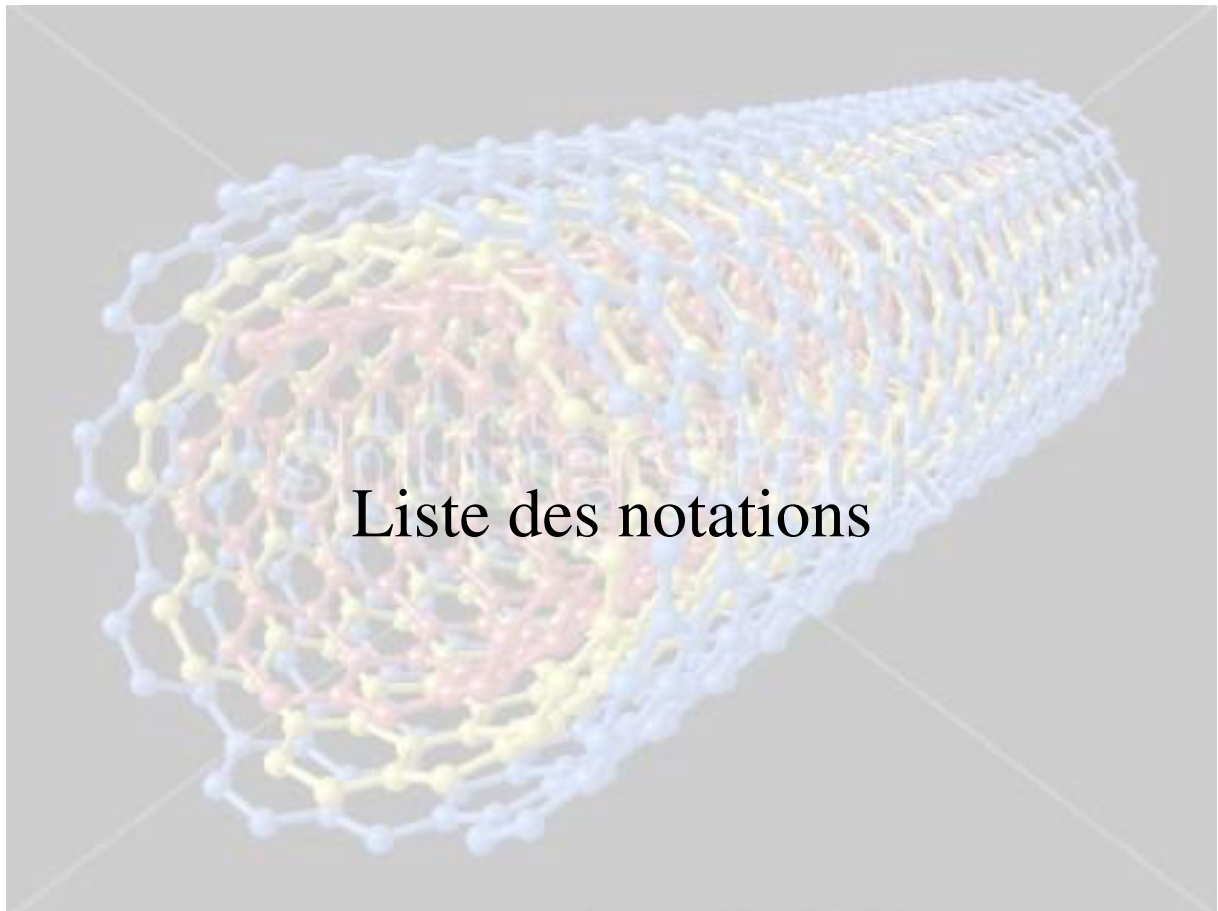
Tableau 4.1: liste des valeurs du module de Young des nanotubes de carbone mono et double couches pour différentes chiralités.....	58
Tableau 4.2: liste des valeurs du rapport de basse fréquence pour différents chiralité armchair, nombre de mode (N) et rapports d'aspect (L / d) de nanotube de carbone, lorsque la valeur des coefficients d'échelle (e_0a) est 2nm	64
Tableau 4.3: liste des valeurs du rapport de basse fréquence pour différents chiralité chiral, nombre de mode (N) et rapports d'aspect (L / d) de nanotube de carbone, lorsque la valeur des coefficients d'échelle (e_0a) est 2nm	64
Tableau 4.4: liste des valeurs du rapport de basse fréquence pour différents chiralité zigzag, nombre de mode (N) et rapports d'aspect (L / d) de nanotube de carbone, lorsque la valeur des coefficients d'échelle (e_0a) est 2nm	65



www.shutterstock.com · 104594399

Liste des abréviations

<i>AFM:</i>	<i>Microscopie à force atomique.</i>
<i>C-C:</i>	<i>La liaison carbone-carbone.</i>
<i>CVD:</i>	<i>Chemical Vapor Deposition.</i>
<i>C60:</i>	<i>Fullerène C60.</i>
<i>C70:</i>	<i>Fullerène C70.</i>
<i>C80:</i>	<i>Fullerène C80.</i>
<i>DQM</i>	<i>la méthode différentielle quadratique.</i>
<i>DWCNT</i>	<i>Double Walled Carbone Nano Tube.</i>
<i>HiPCo:</i>	<i>High Pressure dismutation of CO.</i>
<i>HFCVD:</i>	<i>Hot Filament Chemical Vapor Deposition.</i>
<i>HP:</i>	<i>Haute performance.</i>
<i>MD:</i>	<i>La dynamique moléculaire.</i>
<i>MWCNT:</i>	<i>Multi Wall Carbone NanoTube.</i>
<i>Nd-YAG:</i>	<i>Un laser employé dans la méthode de l'ablation laser.</i>
<i>NTC:</i>	<i>Carbone NanoTube.</i>
<i>OLEDs:</i>	<i>D'éclairage à diodes électroluminescentes organiques.</i>
<i>PMMA:</i>	<i>Le polyméthacrylate de méthyle.</i>
<i>STM:</i>	<i>Microscopie à effet tunnel.</i>
<i>SWCNT:</i>	<i>SingleWall Carbone NanoTube..</i>
<i>TEM</i>	<i>Microscopie électronique de transmission.</i>
<i>TP:</i>	<i>Thermoplastique</i>



Liste des notations

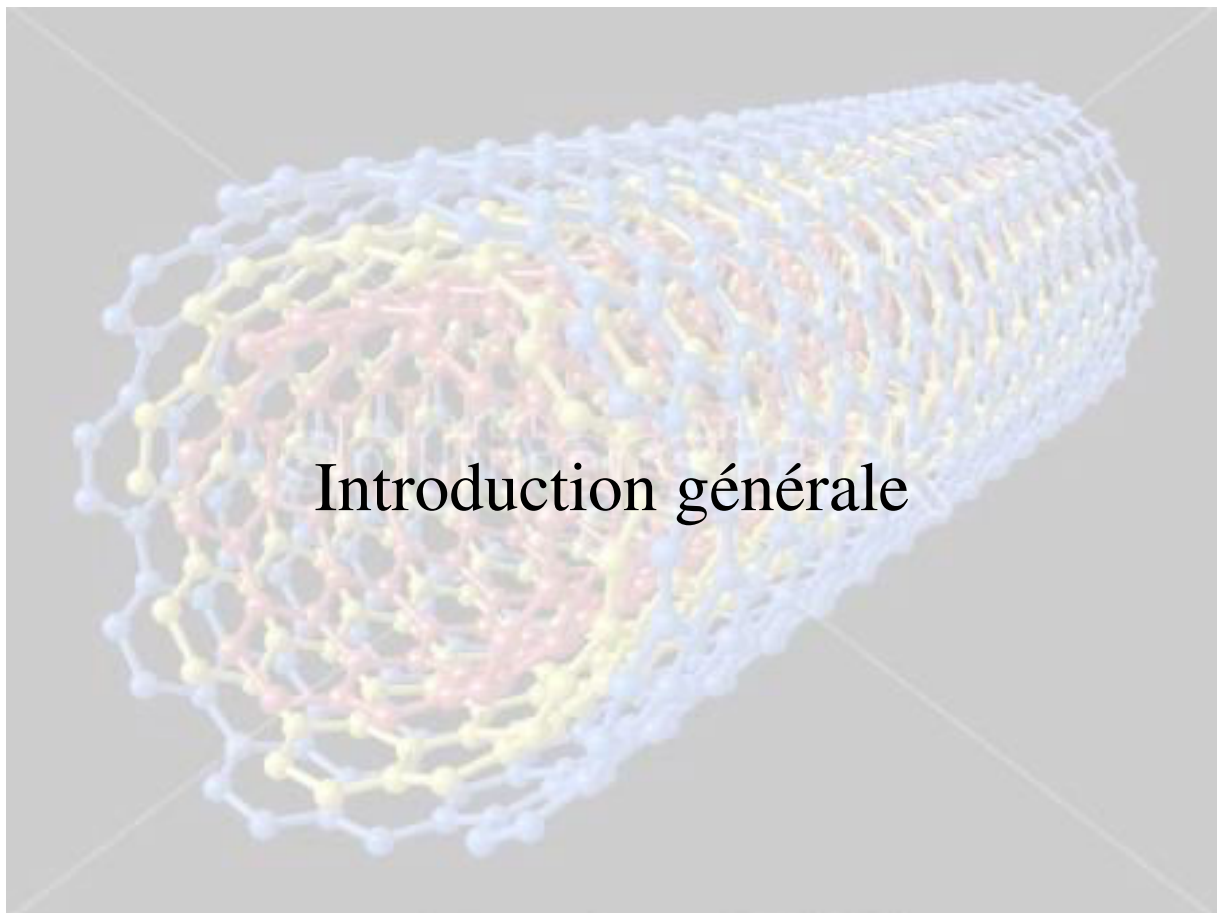
www.shutterstock.com · 104594399

Liste des notations

A	<i>La surface de la section d'un nanotube.</i>
a_1 a_2	<i>Les vecteurs de base du graphène.</i>
a et b	<i>Type de liaison carbone-carbone.</i>
α et β	<i>Les l'angles d'un hexagone.</i>
C	<i>La constante de la variation d'angle.</i>
ch	<i>Le vecteur chiral.</i>
C_{ijkl}	<i>Le tenseur de module d'élasticité.</i>
c	<i>Le coefficient d'interaction par unité de longueur.</i>
d_{in}	<i>Le diamètre du nanotube interne.</i>
E_a	<i>Le module de Young du nanotube type armchair.</i>
E_z	<i>Le module de Young du nanotube type zigzag.</i>
E_g	<i>Le module de Young du graphite.</i>
E_N	<i>Le module de Young du nanotube.</i>
E	<i>Le module de Young du nanotube dans un environnement déterminé.</i>
E_{MWNT}	<i>Le module de Young du nanotube multicouche.</i>
E_{SWNT}	<i>Le module de Young du nanotube monocouche.</i>
e_0	<i>Une constante appropriée à chaque matériel.</i>
e_0a	<i>Le rapport de petite échelle.</i>
F	<i>Force de traction.</i>
$f(x)$	<i>Une charge répartie appliquée par le milieu élastique.</i>
G	<i>Le module de cisaillement.</i>
h	<i>L'espacement entre les couches d'un nanotube de carbone.</i>
J	<i>Le constant de torsion correspond au cylindre mince.</i>
N	<i>Le nombre de mode.</i>
l_0	<i>La longueur de la liaison carbone-carbone.</i>
L	<i>La longueur du nanotube de carbone.</i>
L/d	<i>Le rapport longueur/diamètre.</i>
M	<i>Le moment de flexion.</i>
(n, m)	<i>Un couple de nombres entiers qui définit la structure du nanotube.</i>
n	<i>Le nombre de couche..</i>
$P(x)$	<i>L'interaction d'intertube de Van der Waals.</i>
R	<i>Le rayon du nanotube.</i>
t	<i>L'épaisseur de la couche d'un nanotube.</i>
T	<i>Le moment de torsion.</i>
u_i	<i>Le vecteur de déplacement.</i>
V	<i>La force de cisaillement.</i>
W_1	<i>L'amplitude de déflexions des tubes intérieurs.</i>
W_2	<i>L'amplitude de déflexions des tubes externes.</i>
W	<i>L'amplitude de déflexion du nanotube.</i>
w	<i>Le déplacement transversal.</i>
x	<i>L'axe des coordonnées axiales.</i>

Liste des notations

y	<i>Coordonnée mesurée positive à mi-distance dans la direction transversale.</i>
β	<i>Le coefficient correcteur de cisaillement.</i>
φ	<i>L'angle de torsion entre le plan b-b et plan a-b d'un hexagone.</i>
γ_x	<i>La déformation tangentielle.</i>
ν	<i>Le coefficient de poisson.</i>
θ	<i>L'angle chiral.</i>
ρ	<i>La masse volumique.</i>
σ	<i>La contrainte axiale.</i>
σ_{ij} et ε_{ij}	<i>Les tenseurs des contraintes et déformations.</i>
τ	<i>Contrainte tangentielle.</i>
$\omega_1, \omega_2, \omega_3$	<i>La vitesse de rotation des rouleaux.</i>
ω_{NE}	<i>La fréquence d'un nanotube de carbone monocouche basées sur le modèle non-local d'Euler-Bernoulli.</i>
ω_{LE}	<i>La fréquence d'un nanotube de carbone monocouche basées sur le modèle local d'Euler-Bernoulli.</i>
ψ	<i>L'angle de rotation de la section d'une poutre</i>



www.shutterstock.com · 104594399

Introduction générale

Depuis la découverte en 1991 par Sumio Iijima [1] des surprenantes propriétés électriques, mécaniques et thermiques des nanotubes de carbone, le monde scientifique et industriel s'est beaucoup penché sur les différents domaines d'application des nanotubes de carbone. En effet, ce matériau est d'ores et déjà utilisé pour l'élaboration d'alliages et de composites [2] de plus en plus solides (par exemple : les cadres de vélos Peugeot ou les pneus Michelin). Toutefois, ces applications n'exploitent qu'un faible pourcentage du potentiel de ces nanotubes et sont centrées sur leurs caractéristiques mécaniques alors que les propriétés électriques sont tout aussi exceptionnelles. Ainsi de nombreuses études visant l'utilisation possible des nanotubes de carbone dans le domaine de l'électronique ont été initiées. On peut citer entre autres l'élaboration de transistors à effets de champs [3], de diodes à effets tunnels ou encore de mémoire informatique non volatile présentant des capacités (théoriques) fréquentielles et/ou d'intégrations remarquables [4].

Ces recherches se sont intensifiées, motivées par l'expansion du domaine des télécommunications (spatiale ou terrestre) qui nécessite de nouveaux composants ayant un plus fort degré d'intégrabilité, de compacité et un besoin de plus en plus fort de fonctions reconfigurables ; et pour lesquelles les nanotubes de carbone sont apparus comme des candidats idéaux.

Les travaux de recherche se sont de plus en plus tournés vers l'exploitation des nanotubes de carbone pour réaliser des applications micro-ondes [5]. Leur élasticité et leur tenue mécanique permettent en effet d'envisager l'élaboration de composants plus résistants ayant une rapidité de fonctionnement accrue et des performances fréquentielles excellentes (citons par exemple les très attendus ordinateurs quantiques) [6].

Toutefois afin de pouvoir exploiter cette nouvelle technologie de la meilleure façon possible, nous devons incontestablement mettre en place des outils de développement spécifiques aux caractères remarquables et singuliers des nanotubes de carbone. C'est dans ce contexte que nos travaux de thèse se placent. Notre recherche,

réalisée au sein laboratoire de modélisation et simulation multi-échelles à l'Université djillali liabes de SIDI BEL ABBES.

Notre travail comporte deux volets: Premiers parties, nous avons défini les nouveaux matériaux comme par exemple : les nanotubes de carbone, avec leur caractéristique technologique, leur développement, leurs propriétés, leurs méthodes de synthèses et leurs domaines d'application, ensuite les développements sur les modèles théoriques des milieux continus (la théorie d'Euler-Bernoulli, la théorie de Timoshenko).

Deuxièmes parties, on a présenté un développement mathématique pour le modèle nonlocal appliqué aux nouveaux matériaux basé sur la théorie d'Euler-Bernoulli.

L'analyse des vibrations linéaires ou non linéaires est une thématique de recherche importante, tant d'un point de vue académique qu'industrielle et qui touche de nombreux domaines, tels que l'aéronautique, le génie civil, les transports, l'acoustique musicale ou encore le génie nucléaire. Pour ces vibrations, la gamme de techniques ou de logiciels dédiés à l'étude expérimentale ou numérique est très large et permet de traiter un grand nombre de problèmes de structures. La vibration et la stabilité des structures situées dans les fondations élastiques ont été largement adoptée par plusieurs recherches pour modéliser divers problèmes constructifs pendant les décennies passées [7].

Le but de ce travail est d'analyser la vibration libre d'un nanotube de carbone double couche (*DWCNT*), pour cela on a développé le modèle élastique nonlocal de la poutre Euler-Bernoulli sur la base de la théorie élastique nonlocal.

Différents paramètres qui influent sur les vibrations ont été utilisés comme le rapport de petite échelle ($e_0 a$), le rapport (L/d), le nombre de mode (N), et la chiralité du nanotube (n).

Ce travail est composé de quatre chapitres: Dans le premier chapitre, nous décrivons les différents types de nanotubes de carbone en détaillant leurs propriétés et les différentes techniques de synthèse tel que la méthode d'ablation laser, l'arc électrique, dépôt chimique en phase vapeur, en nous attachant à exposer les avantages et les inconvénients de chacun d'entre eux.

De nombreuses applications seront ensuite présentées.

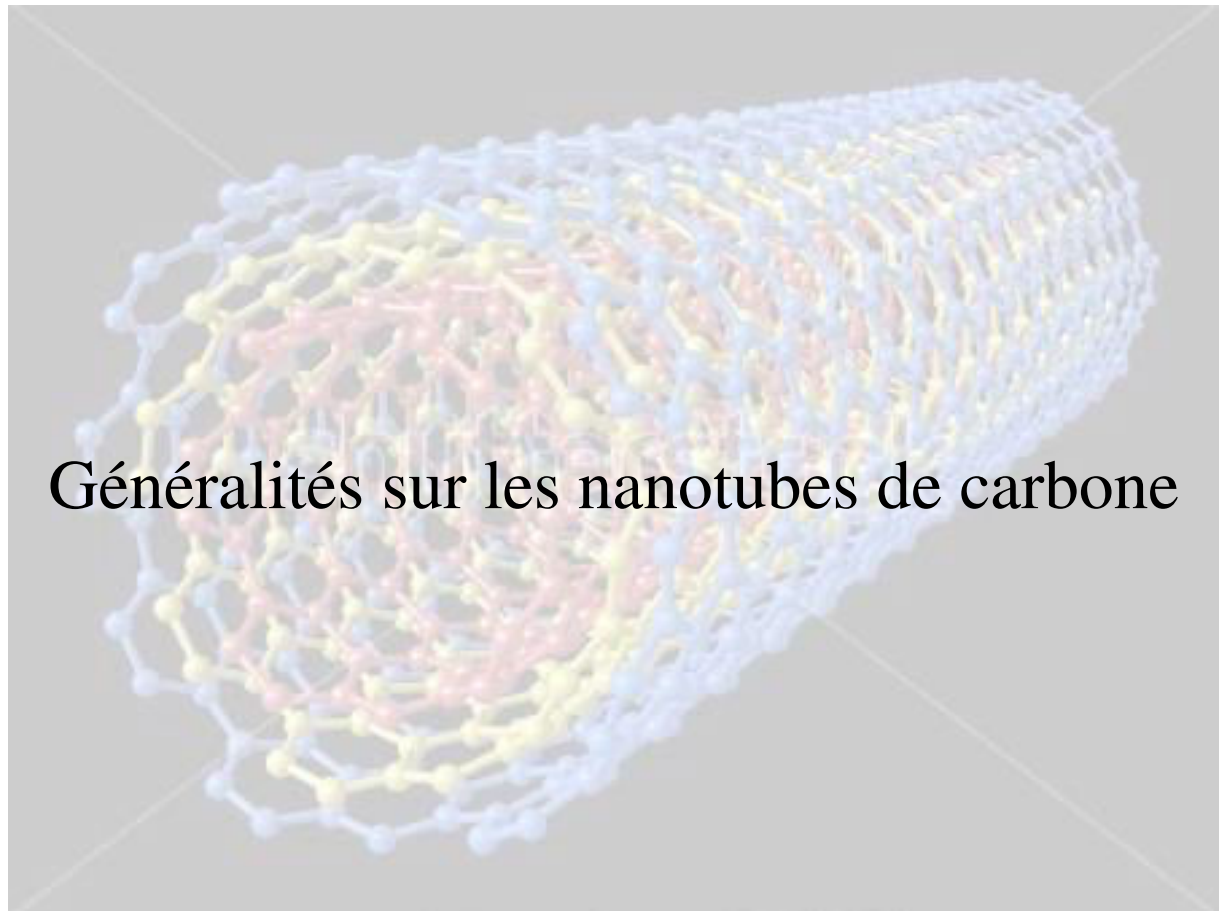
Enfin, nous donnerons les défauts des nanotubes de carbone et nous nous intéressons à leurs applications et leurs intérêts.

Le second chapitre présentera la différence entre le modèle local et non-local. Plus particulièrement on s'intéressera aux effets de non-local sur notre étude

Dans le troisième chapitre, nous présenterons le développement mathématique du modèle élastique nonlocal de la poutre Euler-Bernoulli. En suite nous utilisons différents paramètres peuvent influencer la vibration.

Le dernier chapitre sera consacré à l'interprétation des résultats obtenus.

Chapitre I



Généralités sur les nanotubes de carbone

1- Introduction

Les nanotubes de carbone représentent une nouvelle classe de matériaux aux propriétés spécifiques. Ce chapitre est consacré à une présentation générale des nanotubes de carbone. Nous commencerons par décrire les différentes formes du carbone tel que le graphite, le diamant et les Carbones "mal organisés" ainsi que Les nouvelles formes du carbone comme le fullerène, les nanotubes multicouches et monocouche. En suite nous nous focalisons sur les procédés de synthèse les plus répandus tels que la méthode d'ablation laser, l'arc électrique, dépôt chimique en phase vapeur, en nous attachant à exposer les avantages et les inconvénients de chacun d'entre eux. Après avoir présenté leurs propriétés mécaniques, thermiques, optiques et électroniques, nous donnerons les défauts des nanotubes de carbone. Enfin, nous s'intéressons à leurs applications [6].

2- Le carbone

Le carbone est le quatrième élément le plus abondant dans le système solaire et le sixième plus abondant dans l'univers.

Il existe dans la croûte terrestre à la teneur moyenne de 18 ppm il existe sous forme de composés, et dans l'atmosphère sous forme de CO₂ CO et de méthane [6].

L'atome de carbone a une masse molaire de $M=12$ u.m.et numéro atomique $Z=6$ sa configuration électronique était $1s^2 2s^2 2p^1 2p^1 2p^0$ [8].

Le carbone a trois isotopes ^{12}C (98,89%), ^{13}C (1,11%), et des traces de ^{14}C lequel est formé à partir de ^{14}N dans la haute atmosphère du fait de bombardement de neutrons [9].

L'atome de carbone capable de se lier d'une manière variée à un grand nombre d'atomes, ses orbitales atomiques sont capables de s'hybrider avec d'autre atomes pour former des orbitales moléculaires de type (sp^1 , sp^2 , ou sp^3), ce qui confère au carbone un caractère bi-tri ou tétravalent.il est donc possible de rencontre des structures carbonées monodimensionnelle, bidimensionnelle ou tridimensionnelle.

La seule forme stable du carbone est le graphite hexagonal, et les autres formes de carbone sont métastables dans les conditions normales de pression et de température [6].

à l'état naturel le carbone se trouve sous trois formes cristallines, le graphite, le diamant, et les carbones mal organisés (amorphe).

Il existe des nouvelles formes du carbone récemment découvertes telle que la famille des fullerènes, et les nanotubes de carbone monocouches et multicouches [9].

3- Les différentes formes de carbone

3.1- Le graphite

Le graphite est un solide noir et friable, il est notamment utilisé pour l'écriture, il présente une structure lamellaire constituée d'un empilement de feuillets. Chaque plan de graphène est constitué d'atomes de carbone en état d'hybridation sp^2 forme un réseau hexagonal de paramètre de maille 0.246 nm, la longueur de la liaison C-C étant de 0.142 nm. Il existe deux façons d'empiler les plans de graphène sur eux-mêmes.

La forme cristalline stable est le graphite hexagonal. Les plans de graphène sont empilés selon la séquence ABAB, les plans A et B étant décalés d'une longueur de liaison.

La distance inter-feuillets est de 0.335 nm (Figure 1.1).

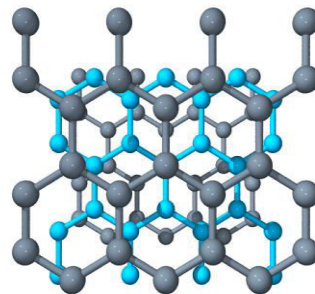


Figure 1.1 Forme cristalline de graphène

Il existe une autre forme cristalline de graphite est le graphite rhomboédrique, phase métastable de graphite hexagonal. Les plans de graphène sont empilés selon les séquences ABCABC, chaque plan étant décalé d'une longueur de liaison par rapport au plan précédant. La distance est toujours de 0.335 nm.

Le graphite se rencontre rarement sous la forme d'un monocristal bien que la croissance de monocristaux microscopique soit possible [10].

3.1.1- Paramètre de maille

Dans la figure 1.2 les vecteurs de base du réseau réel sont a_1 , a_2 et c tels que a_1 et a_2 font entre eux un angle de $\frac{\pi}{3}$ rad dans un repère orthonormé (OXYZ) les coordonnées des vecteurs du base du réseau s'expriment

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \vec{c} = c \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{où } a = 2.461 \text{ \AA} \text{ et } c = 6.7079 \text{ \AA}$$

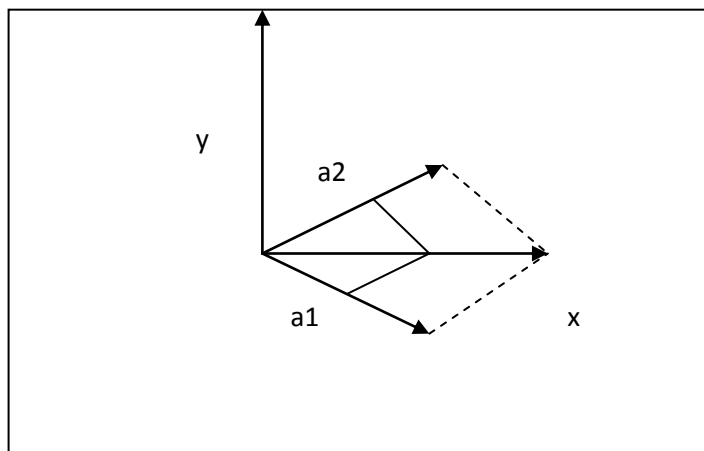


Figure 1.2 les vecteurs de base du réseau

3.1.2- Symétrie

Le graphène a une structure en nid d'abeille où l'on reconnaît en pointillés l'hexagone de la structure en 3D (figure 1.3).

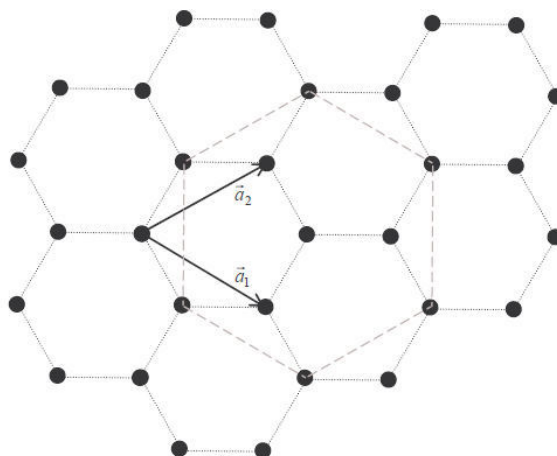


Figure 1.3 réseau du graphène

Dans la structure 3D du graphite deux types de symétrie : un axe hélicoïdal dirigé suivant C et un centre d'inversion entre chaque plan. (Figure 1.4).

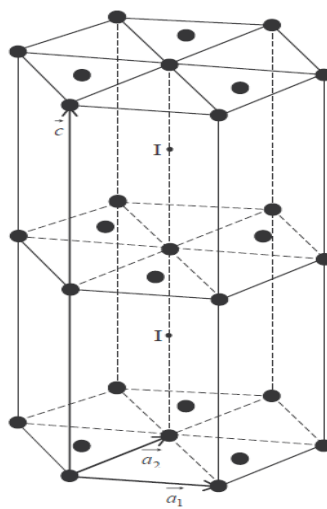


Figure 1.4 représentation du réseau du graphite

Les électrons P_z quant à servent aux liaisons π entre atomes du même plan ces liaisons sont délocalisées et sont responsables de la nature et de l'anisotropie de la conduction électrique dans le graphite métal semi-métal ou semi-conducteur.

Les plans sont très éloignés les uns des autres comparés à la distance qui sépare les plus proches voisins d'un même plan, ceci dû au fait que dans la structure les plans ne sont solidaires les uns des autres que grâce aux forces de Van De Wals, aussi les interactions entre les plans peut elle être négligée c'est pour quoi on utilise le graphite dans les mines de crayon ce sont les plans qui se détachent et qui laissent une trace sur la feuille.(rapport de ter Fr).

3.2- Diamant

Le diamant est le matériau le plus dur qui soit la dureté du diamant vient de sa structure dans laquelle chaque atome de carbone est relié par covalence à quatre autres atomes, il s'agit d'une hybridation de type sp^3 la mailles de diamant forment alors des tétraèdres signant un solide dense isotrope.

La distance entre atomes est de 0.136nm, c'est cet arrangement parfait qui donne sa résistance à la plupart des sollicitations extérieure [6].

La structure diamant est décrite la figure 1.5, son réseau de Bravais est cubique à faces centrés.

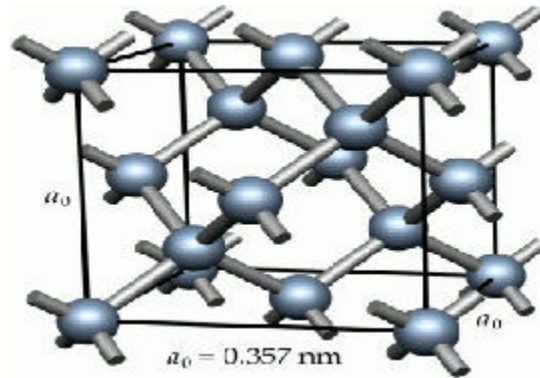


Figure 1.5 structure diamant

La masse molaire du diamant est de 12.02g.mol^{-1} et sa masse volumique mesurée est de 3520 kg/m^3 . La conductivité électrique du diamant est basse, car les électrons ne se regroupent pas comme dans un métal, néanmoins, il fait l'objet d'études en tant que semi-conducteur à large gap pour l'électronique de puissance (diode Schottky) par contre le diamant est un excellent conducteur thermique, la conductivité thermique est assurée par la vibration cohérentes des atomes de la structure.

Des valeurs de 2500w(m.k) ont été mesurée, que l'on peut comparer aux 401w(m.k) du cuivre et aux 429 w(m.k) de l'argent. Cette propriété en fait un candidat comme substrat pour le refroidissement des soumi-conducteurs [11].

Donc on peut citer des nombreuses propriétés remarquables du diamant qui sont résumé dans le tableau 1.1.

Tableau 1.1 – Propriétés et applications du diamant

Propriétés	Valeur	Application
Dureté	10^4 kg.mm^{-2}	Outil de découpe et de polissage, enclume de pression, NEMS
Module d'Young	1200 GPa	
Module de compressibilité	440 GPa	
Indice de réfraction	2,41 (à 590 nm)	Fenêtre optiques
Transparence	225 nm à IR lointain	
Réactivité chimique	Inerte < 600°C	Matériau d'interfaçage avec le vivant, capteur, biocapteur
Réactivité immunologique	Bio-inerte	
Largeur fenêtre électrochimique	2,5 - 3,5 V (dans l'eau)	
Bande interdite	5,48 eV (à 300K)	Dispositif pour l'électronique de puissance, Cellule beta-voltaïques, dissipateur thermique
Conductivité thermique	25 (à 300 K)	
Mobilité des électrons	$\text{cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$	
Mobilité des trous	$1000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$	
Champ de claquage	$2000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ 10 MV/cm	
Affinité électronique	Faible, voire négative	Dispositifs à émission d'électrons

3.3- Carbone mal organisé

Le carbone ne présente pas toujours une organisation cristalline. Des formes de carbone mal organisées peuvent exister. C'est notamment le cas du carbone amorphe. Il s'agit d'un réseau désordonné d'atomes de carbone, présentant des états d'hybridation (sp^2 et sp^3). A l'état naturel, le carbone amorphe est rare. Il faut aller le chercher dans les particules présentes dans les couches extérieures de l'atmosphère des étoiles froides, appelées poussières d'étoiles. Plus proche de nous, le carbone amorphe est synthétisé sous forme de couches minces, obtenues généralement par dépôt plasma. Il sert de revêtement apportant une tenue mécanique supplémentaire à des pièces industrielles. Dans ce cas, le carbone amorphe n'est jamais pur, mais légèrement hydrogéné

Le graphite peut également se rencontrer sous une forme partiellement organisée. Le désordre structural est créé par des défauts d'empilement des plans de graphène, ce qui éloigne la structure de ce graphite des formes ordonnées vues précédemment, on parle de graphite turbostratique [6].

4- Les nouvelles formes de carbone

4.1- Fullerène

Un fullerène est une molécule composée de carbone pouvant prendre une forme sphérique, ellipsoïdale, qui empêche la feuille d'être plate.

Le premier fullerène découvert, le C₆₀ est composé de 12 pentagones et de 20 hexagones, chaque sommet correspondant à un atome de carbone et chaque côté à une liaison covalente. Il a une structure identique au dôme géodésique. Pour cette raison, il est appelé « buckminsterfullerène », en l'honneur de Buckminster Fuller qui a conçu le dôme géodésique, ou « footballène » [12].

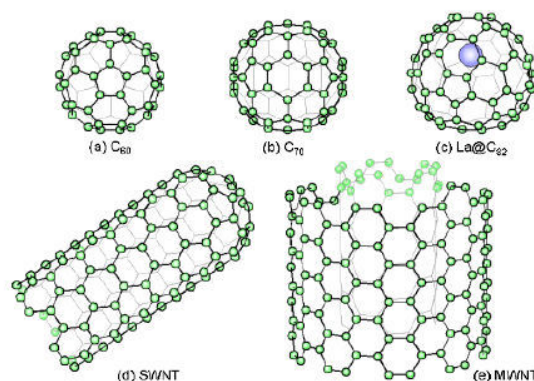


Figure 1.6 Représentation schématisée des différentes formes allotropiques du carbone

4.2- Nanostructures unidimensionnelles

Trois familles de nanostructures unidimensionnelles peuvent être distinguées sur des critères morphologiques: les nanotubes, les nanofibres et les nanocâbles.

Les nanotubes de carbone forment un exemple de nanostructures à une dimension, est une structure cristalline particulière, de forme tubulaire, creuse et close, composée d'atomes disposés régulièrement en pentagones, hexagones et/ou heptagones. L'enroulement d'un feuillet graphitique constitue un nanotube de carbone. La figure 1.7 est une représentation d'un nanotube de carbone.

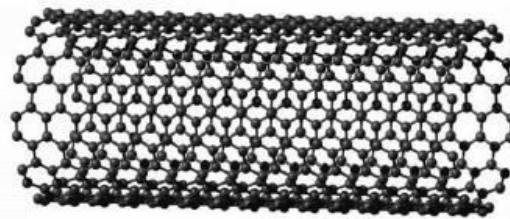


Figure 1.7 Structure cristalline d'un nanotube de carbone

Les nanofibres (Figure 1.8) sont des cylindres pleins de quelques nanomètres de diamètre (1-100nm) avec une longueur qui peut atteindre plusieurs centaines de micromètres. Les nanofibres peuvent être organiques, métalliques ou inorganiques (oxydes ou non oxydes), mono- ou polycristallines.

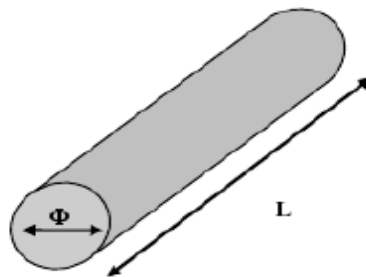


Figure 1.8 Représentation d'une nanofibre : un cylindre plein avec un grand aspect ratio

Les nanocâbles sont des nanocomposites coaxiaux formés d'une nanofibre centrale appelée le "cœur" qui est recouverte d'une ou plusieurs couches successives (Figure 1.9). Celles-ci se distinguent du cœur par leur composition chimique et/ou leur

structure cristallographique. Les couches successives peuvent être générées in situ ou post- synthèse par voie chimique et/ou physique.

Les nanocâbles ont habituellement un diamètre de quelques dizaines de nm pour une longueur de plusieurs micromètres. Ces nanostructures possèdent un grand nombre de propriétés liées à la fois à la nature chimique du cœur et au nombre et à la nature des différentes couches successives. Ce type de matériau n'est étudié que depuis une période assez récente.

Par ailleurs, les nanocâbles offrent des potentialités importantes pour des applications variées, comme par exemple dans le domaine des matériaux composites, la couche externe pouvant jouer le rôle d'interphase entre la matrice et la nanofibre centrale, ou dans celui de la microélectronique. Par exemple, la synthèse directe de dispositifs de type MOS (Métal Oxyde Semi-conducteur) est envisageable.

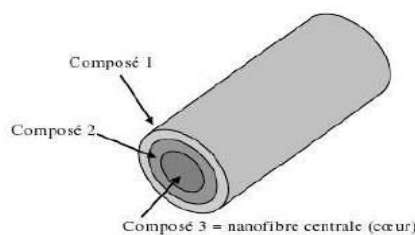


Figure 1.9 :Représentation d'un nanocable : 2 couches différentes superposées et entourées d'une nanofibre

4.2.1- Structure des nanotubes de carbone

Un nanotube de carbone peut être considéré comme un plan de graphène fini enroulé sur lui-même et fermés aux deux extrémités par une demi-molécule de C60. Il existe une infinité de configurations d'enroulement possible. Ces configurations peuvent être caractérisées par un vecteur de chiralité noté Ch ou bien par un angle d'hélicité θ , et un diamètre ϕ .

Considérons une feuille de graphène (Figure1.10). Sa représentation ressemble à une structure de type nid d'abeilles. a_1 et a_2 sont les vecteurs primitifs du réseau de la feuille de graphène et constituent la base de ce réseau. Le vecteur de chiralité Ch correspond au vecteur AB des deux nœuds qui se superposent après enroulement. Dans la base du réseau, ce vecteur peut donc être décomposé en deux composantes. Soient m et n, les scalaires tels que:

$C_h = n.a_1 + m.a_2$ n et m étant des nombres entiers.

Par ailleurs, en choisissant comme direction de référence une direction qui s'appuie sur un côté d'un hexagone, on définit l'angle d'enroulement, comme l'angle entre l'axe du cylindre et cette direction de référence. Cet angle, appelé hélicité, varie de 0 à 30° compte tenu de la symétrie du réseau hexagonal.

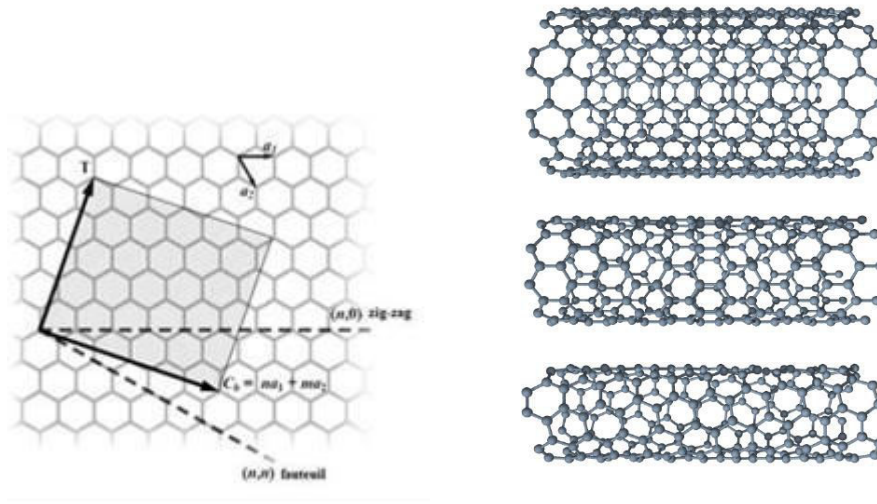


Figure 1.10 : Représentation de la structure d'une feuille de graphite ainsi que les différentes configurations d'enroulement d'un graphène.

Dans le cas où $\theta = 0^\circ$ ou $m=0$, les hexagones de carbone décrivent un cercle perpendiculaire à l'axe du tube. Cette configuration est appelée « zigzag ».

Dans le cas où $\theta = 30^\circ$, ou $m = n$, les hexagones de carbone sont alignés parallèlement à l'axe du tube. Cette configuration est appelée « armchair » (chaise).

Dans le cas où $0^\circ < \theta < 30^\circ$, ou $n \neq m$, on dit que le tube est chiral. π

Le diamètre du nanotube ainsi que son hélicité sont reliés aux indices de chiralité par les relations :

$$d = a \frac{\sqrt{3(n^2 + m^2 + nm)}}{\pi} \quad (1)$$

$$\theta = \text{artanh} \left(\frac{m\sqrt{3}}{m+2n} \right) \quad (2)$$

Après avoir décrit le corps d'un nanotube de carbone intéressons nous maintenant aux extrémités du tube. Pour fermer le nanotube de carbone il est indispensable d'introduire des défauts de courbure dans le plan de graphène. Pour satisfaire la

condition de fermeture du tube (condition connue sous le théorème d'Euler) un minimum de 12 pentagones est nécessaire. Il faut ainsi 6 pentagones à chaque extrémité du tube. Ces pentagones introduisent une courbure de 112° dans le feuillet. Les études montrent que la molécule de C₆₀ contient justement 12 pentagones et 20 hexagones: il s'agit donc du plus petit fullerène possible. Cependant, alors qu'une distribution théorique régulière de ces pentagones donne une forme hémisphérique, on observe le plus souvent une pointe de forme conique [12].

4.2.2- Nanotube de carbone monocouche et multicouche

Parmi les nanotubes de carbone on distingue les nanotubes de carbone monoparois et les nanotubes multiparois qui diffèrent de part leur structure, leur taille et a fortiori leurs propriétés physico-chimiques. Dans l'ordre chronologique se sont les nanotubes multiparois (ou MWNT pour Multi Wall Nano Tubes) qui ont été identifiés en premier en 1991 par Sumio Iijima [13], les nanotubes monoparois (ou SWNT pour Single Wall Nano Tubes) ont été découverts parallèlement par Béthune et Iijima [14] deux ans plus tard.

4.2.3- Nanotube de carbone monocouche (SWCNT)

Les nanotubes de carbone monocouche ou monoparois (SWCNT) sont structurellement les nanotubes de carbone les plus simples puisqu'ils ne possèdent qu'un plan de graphène enroulé sur lui-même pour former un cylindre unique. Les extrémités sont généralement fermées par deux dômes semblables à des demi-fullerènes bien que la question de la terminaison des SWCNT reste ouverte. Le diamètre d'un nanotube monoparois peut varier mais est en général compris entre 1 et 2nm, la longueur est encore plus variable (100nm jusqu'à quelques millimètres) et toujours bien supérieur au diamètre ce qui fait des nanotubes de carbone des objets quasi unidimensionnel. Les nanotubes monoparois se différencient par ce qu'on appelle la chiralité, qui est la façon dont le feuillet de graphène est enroulé autour de son axe (Figure.11). La chiralité est très importante, en particulier pour les électroniciens, car elle définit les propriétés physico-chimiques du nanotube et tout particulièrement les propriétés. C'est ainsi

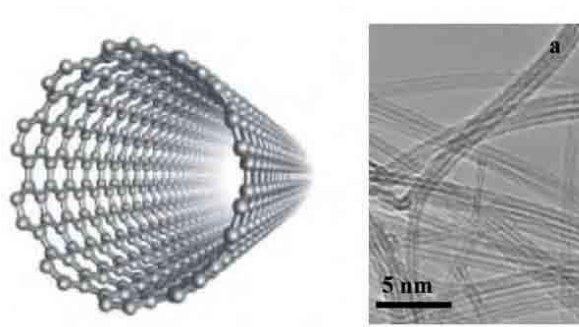


Figure 1.11 : Représentation graphique d'un SWCNT (gauche) et image de microscope électronique à transmission de plusieurs SWCNT (droite).

qu'on peut classer par chiralité des nanotubes conducteurs et d'autres semi-conducteurs. Cette définition du nanotube monoparois s'applique évidemment à un nanotube isolé or les techniques de synthèse actuelles ne permettent généralement pas d'obtenir des nanotubes isolés, ils se présentent plutôt sous la forme de faisceaux (ou fagots) de nanotubes monoparois (Figure 1.12).

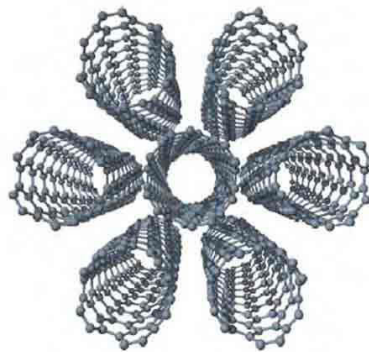


Figure 1.12 Schéma d'un cristal de 7 nanotubes

4.2.4- Nanotube de carbones multicouches (MWCNT)

Les nanotubes de carbone multicouches ou multiparois sont constitués d'un arrangement concentrique de feuilles de graphène, repliées sur elles-mêmes de manière à former des cylindres (Figure 1.13). Cette structure est communément appelée poupée russe, par analogie au jeu de poupées qui s'emboîtent les unes dans les autres. Le diamètre du plus petit tube interne détermine la taille du canal central du nanotube. Le diamètre interne d'un nanotube multiparois est de l'ordre de deux nanomètres, tandis que le diamètre externe peut atteindre une centaine de nanomètre mais est le plus souvent de l'ordre d'une vingtaine de nanomètres. La façon dont les

différentes couches graphitiques des nanotubes multiparois s'empilent est a priori aléatoire ce qui ne permet pas des les classiers comme les nanotubes monoparois. La distance moyenne inter-feuillets est de 0,344 nm, ce qui rapproche sa structure de celle du graphite. La structure du nanotube multiparois concentrique décrit précédemment est la plus communément admise, mais ce n'est pas la seule structure possible. Ainsi, certaines études expérimentales laissent envisager que les nanotubes multiparois pourraient être constituées d'une seule feuille de graphène enroulée sur elle-même à la façon d'un rouleau de parchemin. D'autres études suggèrent, surtout dans le cas des gros nanotubes, que les deux types de structure coexistent au sein des tubes multiparois, les tubes de petit diamètre, au centre, présentant une structure de type poupée russe, tandis que les tubes extérieurs possèdent une structure de type rouleau de parchemin. Enfin, une étude postérieure montre que la structure de type poupée russe est la plus fréquemment rencontrée, les nanotubes ne croissant selon le type rouleau de parchemin que dans des conditions particulières [15].

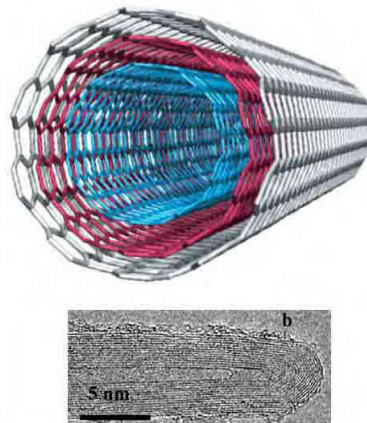


Figure 1.13: Représentation graphique d'un MWNT (en haut) et image de microscope électronique à transmission d'un MWNT (en bas).

5- Synthèse des nanotubes de carbone

À ce jour, il existe de nombreux procédés de synthèse des CNT. Chaque méthode a ses avantages et ses inconvénients. Une énumération et description des procédés les plus utilisés (décharge par arc, ablation par laser) permettra de décrire les méthodes pyrolytiques comme (CVD).

5.1- Décharge par arc électrique

Ce procédé nécessite l'emploi de deux électrodes de graphite, qui sont toutes les deux disposées dans une atmosphère d'hélium ou d'un gaz rare sous une pression de l'ordre de 600 mbar. Les électrodes sont distantes l'une de l'autre de quelques millimètres (de l'ordre de 2 à 3 mm). Sur l'anode se trouve un trou, qui est rempli de poudre de carbone et d'un catalyseur du type cobalt (Co) ou nickel (Ni). Une décharge, créée par un courant de l'ordre de 100 A, produit une chute de tension de 30-40 V, qui se traduit par une élévation de la température à la surface de l'anode. Les CNT grandissent au passage du courant sur l'anode à la vitesse d'un millimètre par minute à des températures situées entre 1000 et 1400 °C. Ainsi le temps de déposition n'excède pas 2 minutes. Cette technique permet une production massive de CNT avec, en outre, un haut degré de graphitisation [16].

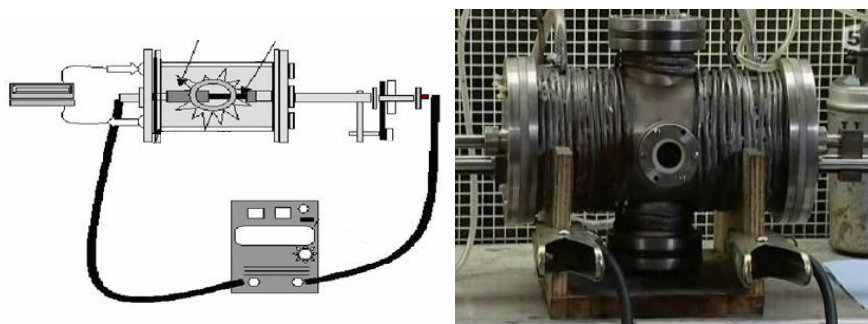


Figure 1.14 : Schéma d'un réacteur de synthèse de nanotubes de carbone par la méthode de l'arc électrique [17].

5.2- Ablation par laser

L'ablation par laser est un procédé de synthèse utilisant des lasers ayant une puissance variant entre 4.2 kW et 1 MW. On utilise les lasers du type IR, CO₂, UV ou encore ArF pouvant fonctionner de manière pulsée ou continue. Ils peuvent être couplés et ainsi élever la température effectuant la pyrolyse. En effet, le substrat et le mélange gazeux d'hydrocarbure sont chauffés simultanément par le laser et réagissent pour former la déposition sur le substrat. Les gaz utilisés sont le plus souvent le méthane (CH₄) et l'acétylène (C₂H₂). La température du substrat (par ex. Si, Inox ou Al) avoisine les 500 °C. Cette méthode permet de produire des couches de diamant

mais aussi de CNT à une seule couche. Ce procédé permet de découvrir et d'observer pour la première fois les fullerènes en, or, depuis, cette technique s'est révélée très génèreuse dans la synthèse de nanotubes fortement graphitisés et à une seule paroi [16].

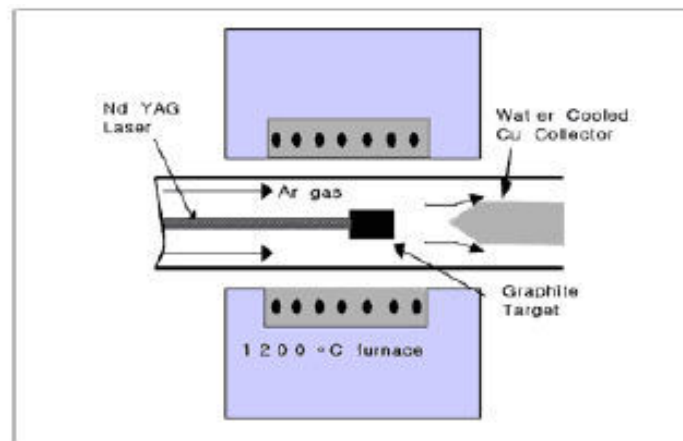


Figure 1.15: Schéma représentant un réacteur de type ablation laser permettant la production de nanotubes de carbone.

5.3- Elaboration par CVD (Chemical Vapor Deposition)

Le principe d'élaboration de nanotubes de carbone par CVD (Chemical Vapor Deposition) repose sur la décomposition d'un gaz carboné à la surface d'une particule catalytique nanométrique. Cette technique a déjà été utilisée en 1970 pour la croissance de nanofibres de carbone. Ce procédé a plusieurs avantages par rapport aux procédés de synthèse à haute température. Premièrement il permet une croissance localisée des tubes en contrôlant le positionnement des particules catalytiques. Ensuite il n'est plus utile de passer par des techniques de purification des nanotubes, ils sont directement utilisables.

La Figure 1.16 présente un schéma d'un réacteur CVD basique [12].

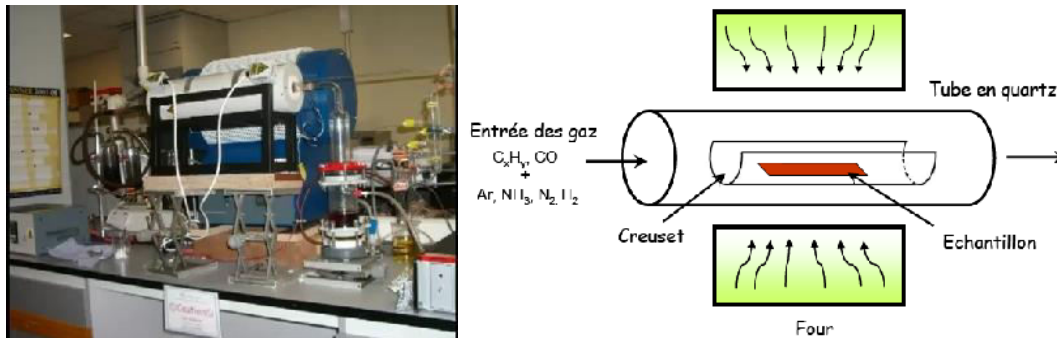


Figure 1.16: Schéma d'un réacteur CVD pour la croissance des (NTC) [18]

Il est constitué d'un four alimenté par un flux de gaz carboné (CH_4 , C_2H_2 , CO) dilué dans un gaz réactif NH_3 ou H_2 . L'échantillon est placé sur un porte substrat dans lequel se trouve le catalyseur. Le gaz est ainsi décomposé par chauffage du four. Dans certains réacteurs (procédé appelé Hot Filament CVD), un filament est placé au-dessus du substrat et est chauffé à une température comprise entre 1500 à 2000 °C. Les paramètres expérimentaux typiques utilisés sont une pression supérieure au Torr. Le temps de dépôt varie de la minute à quelques heures.

Il existe également des variantes de la CVD telle que le procédé aérosol. Il s'agit de composés organo-métalliques utilisés pour la croissance de nanotubes de carbone. Sous l'effet de la température, ces précurseurs se subliment et le catalyseur nécessaire à la formation des nanotubes est ainsi formé. La méthode aérosol la plus connue est le HiPCo. Les produits de la décomposition thermique de $(\text{FeCo})_n$ réagissent pour former des agrégats de fer en phase gazeuse. Ces derniers agissent comme des sites de nucléation [12].

6- Propriétés des nanotubes de carbone

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés physiques exceptionnelles.

- Très faible déformation sous charge : module d'Young axial (270-950 GPa) pour (MWNT) et (550-1060 GPa) pour (SWNT) contre 210 pour l'acier au carbone,
- Très forte résistance à la traction : (150 GPa), plus de 100 fois supérieure à l'acier ultra-résistant.

- Très forte conductivité thermique : ($3000-6000 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$) contre 400 pour le cuivre,
- Conductivité électrique : même niveau que le cuivre.

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

6.1- Propriétés mécaniques

La force des liaisons C-C confère aux nanotubes des propriétés mécaniques exceptionnelles. Des calculs théoriques prédisent tout d'abord ces propriétés : des valeurs de 1 à 5 TPa furent calculées pour le module d'Young axial de SWNTs (des valeurs comparables à celle du module d'Young tangentiel pour un feuillet graphène, à savoir $\sim 1,0 \text{ TPa}$). Les premières valeurs expérimentales du module d'Young ont été estimées sur des nanotubes multicouches isolés, par la mesure de leurs vibrations intrinsèques thermiques en microscopie électronique à transmission. Elles sont de l'ordre du TPa, avec une moyenne estimée à 1,8 TPa, mais avec des valeurs pouvant atteindre 4 TPa. D'autres mesures furent réalisées, en utilisant cette fois-ci la microscopie à force atomique. Elles donnèrent des valeurs de 1,3 TPa pour des MWNTs et de 1,0 TPa pour des SWNTs [19].

Les nanotubes peuvent subir en tension des déformations extrêmes (jusque 10 %-20 %) sans montrer de signes de déformation plastique ou de rupture fragile. La forte capacité des nanotubes à subir des déformations réversibles est due à la flexibilité du feuillet graphène, à la possibilité qu'ont les atomes de carbone de se réhybrider avec un degré d'hybridation sp^2/sp^3 dépendant de la contrainte. Ces réhybridations permettent, lors de l'application d'une contrainte, la propagation des défauts dans les réseaux graphènes des parois. Notons enfin que la compression de nanotubes monocouches conduit à une réduction de volume exceptionnellement grande et réversible. La densité augmente rapidement avec la pression, jusqu'à approcher celle du graphite, et retrouve sa valeur initiale après l'arrêt de l'application de la pression. Cette capacité des SWNTs à absorber réversiblement de l'énergie mécanique a été attribuée à un changement de forme réversible de la section transversale des tubes, passant de circulaire à elliptique et vice-versa.

6.2- Propriétés électroniques

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

- 1- Les nanotubes de configuration armchair (n,n) sont métalliques.
- 2- Les tubes (n,m) avec $n-m$ multiple de 3 non nul donc $n-m=3p$ sont métalliques.
- 3- Les autres nanotubes sont des semi-conducteurs à gap large ou des isolants.

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

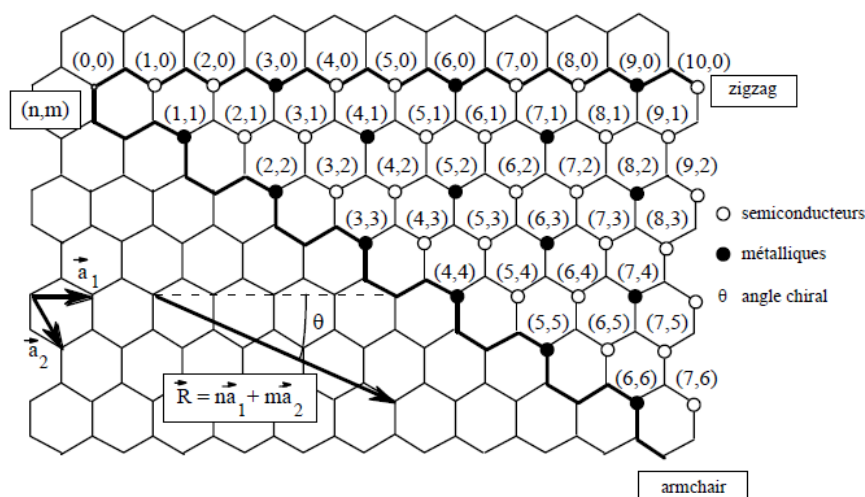


Figure 1.17. Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monocouches en fonction de leurs indices de chiralité (n,m).

Il est intéressant de comparer la dépendance en énergie des densités d'états pour des tubes métalliques et semi-conducteurs, et plus particulièrement près du niveau de Fermi E_F placé à $E=0$. La Figure 1.18 représente les densités d'états pour un tube métallique (9,0) et un tube semi-conducteur (10,0). Dans le cas du (10,0) il existe un gap autour du niveau de Fermi, la densité d'états y est nulle. Par contre, en ce qui concerne le (9,0), il existe une densité faible, mais non nulle, d'états autour du niveau de Fermi. Dans les deux cas on observe des pics répartis symétriquement par rapport à

$E = 0$. Ces différents pics sont appelés singularités de Van Hove et leur position dépend principalement du diamètre.

Cependant, ces données concernent des tubes infinis, idéaux et isolés et doivent par conséquent être relativisées. Ainsi certains paramètres géométriques, comme l'organisation des nanotubes en fagots, sont susceptibles de modifier la structure électronique. Il a été montré notamment que l'énergie des singularités de Van Hove dépend non seulement du diamètre mais aussi de la chiralité lorsque les nanotubes sont organisés en fagots.

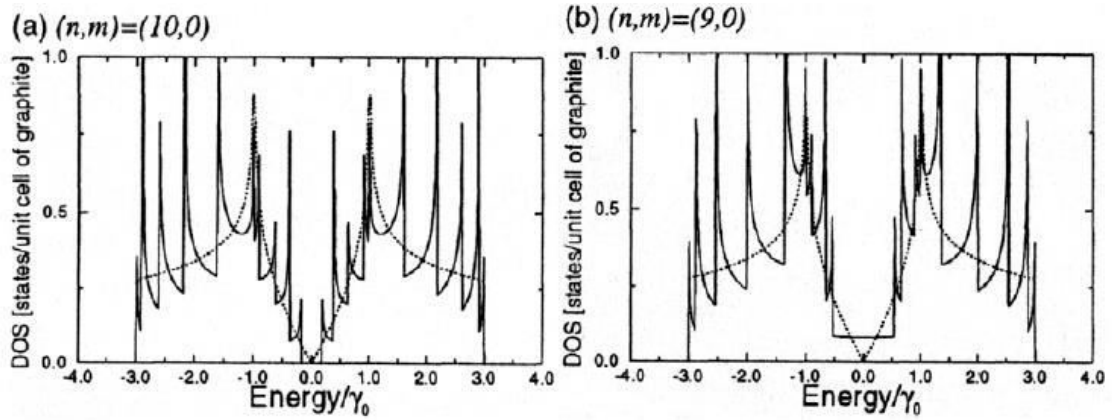


Figure 1.18. Densités d'états de deux SWNTs zigzag : (a) le nanotube (9,0), qui a un comportement métallique et (b) le nanotube (10,0) qui est semiconducteur. γ_0 est l'énergie d'interaction entre deux atomes de carbone adjacents. La ligne en pointillés représente la densité d'état d'un feuillet graphène [20].

Pour des nanotubes isolés, l'énergie E_{ii} correspondant à la transition entre la singularité i de la bande de valence et la singularité i de la bande de conduction est inversement proportionnelle au diamètre du nanotube et dépend de sa nature (métallique ou semi-conducteur)

$$E_{ii}^M = \frac{6a_{C-C}\gamma_0}{d} \quad (3)$$

$$E_{ii}^{SC} = \frac{2a_{C-C}\gamma_0}{d} \quad (4)$$

Où a_{C-C} représente la distance entre deux atomes de carbone adjacents (1,42 Å), γ_0 est l'énergie d'interaction entre deux C adjacents (2,9 eV) et d le diamètre du SWNT. On remarque que, pour un diamètre donné, l'énergie de transition d'un tube métallique est trois fois plus importante que celle d'un tube semiconducteur. Pour un SWNT

semiconducteur de diamètre donné, les transitions possibles sont E_{ii}^{SC} , $4E_{ii}^{SC}$, $5E_{ii}^{SC}$, $7E_{ii}^{SC}$ etc., et pour un tube métallique, E_{ii}^M , $2E_{ii}^M$, etc [24].

6.3- Propriétés thermiques

Les matériaux carbonés et les fibres de graphite sont utilisés industriellement pour améliorer la conductivité thermique. Le diamant et le graphite présentent les plus hautes conductivités thermiques jamais mesurées à température ambiante (la conductivité thermique tangentielle du graphite est $\sim 3000 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$). C'est pourquoi la découverte des nanotubes en 1991 a rapidement conduit à prédire pour cette nouvelle forme allotropique unidimensionnelle de carbone une conductivité thermique égale ou supérieure à celle du diamant ou du graphite. Les propriétés thermiques de nanotubes, qu'ils soient multicouches ou monocouches, ont encore été relativement peu explorées.

Des mesures aboutirent à des valeurs de conductivité thermique longitudinale allant de 1800 à $6000 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour un fagot isolé et à température ambiante. Des valeurs aussi élevées sont imputées à un libre parcours moyen particulièrement élevé pour les phonons (de l'ordre de 100 nm). Une valeur de $6600 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ fut obtenue pour un nanotube (10,10) isolé et à température ambiante, ce qui est comparable à la conductivité thermique d'un hypothétique feuillet de graphène isolé [21].

6.4- Propriétés optiques

Les nanotubes possèdent des propriétés de limitation optique dans une large gamme de longueurs d'onde, depuis le visible jusqu'au proche infrarouge. Des seuils faibles de non linéarité et de grandes densités optiques ont été obtenues lors de l'étude de dispersions aqueuses de nanotubes monocouches. Ces performances égalent ou surpassent celles d'autres bons limiteurs optiques, comme le C60 ou le noir de carbone, que ce soit dans le visible ou le proche infrarouge. Les dispersions liquides de nanotubes monocouches apparaissent donc comme des systèmes prometteurs pour une limitation optique à bande large. D'autres solvants ont été essayés, comme l'éthylène glycol ou le chloroforme. Plusieurs phénomènes optiques non linéaires peuvent être à l'origine d'une limitation optique : réfraction, absorption, diffusion. L'origine de la

limitation dans le cas des nanotubes est essentiellement une forte diffusion non linéaire engendrée par la formation de bulles de solvant à la surface des nanotubes et par une sublimation des tubes à plus forte fluence. Il est à noter que des MWNTs dispersés dans un film de polymère, en l'occurrence du PMMA, ont montré également des propriétés de limitation optique large bande [22].

7- Défauts des nanotubes de carbone

Du fait d'interactions van der Waals attractives entre parois, les nanotubes monocouches ont la plupart du temps tendance à s'agglomérer en faisceaux de nanotubes appelés fagots. Du fait de la présence de cycles non hexagonaux, il existe des défauts dans le réseau graphène constitutif d'une paroi, qu'il s'agisse d'un (MWNT) ou d'un (SWNT). Un pentagone introduit une courbure positive tandis qu'un heptagone conduira à une courbure négative (Figure 1.19).

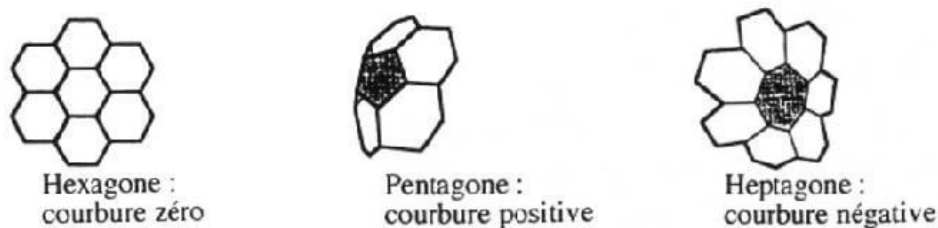


Figure 1.19: Influence du type de cycle sur la courbure de la surface

La combinaison de plusieurs de ces défauts sur un tube peut induire un grand nombre de géométries particulières. Ainsi, du fait de l'annulation de leurs courbures respectives à un niveau global mais non à un niveau local, une paire heptagone-pentagone (appelé défaut de Stone-Wales peut provoquer une variation de diamètre et de chiralité le long du tube (figure 1.20) [23].

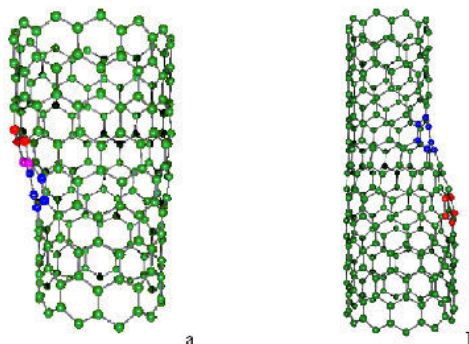


Figure 1.20: Introduction d'une paire pentagone-heptagone provoquant une variation de diamètre et de chiralité : a- de (11,0) à (12,0) ; b- de (9,0) à (12,0).

De telles combinaisons peuvent expliquer la forme torsadée de certains nanotubes multicouches produits par décomposition catalytique d'hydrocarbures. En introduisant ces défauts en plus grand nombre dans le réseau graphitique, il est possible d'imaginer une grande quantité de structures variées (jonctions en Y, en T, etc.) (figure 1.21) [24].

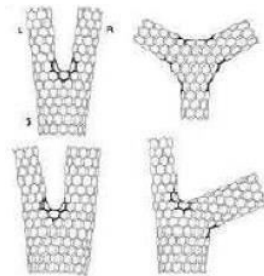


Figure 1.21: Défauts pentagonaux et heptagonaux se traduisant par des jonctions.

En plus de ces défauts qu'on pourrait qualifier d'intrinsèques, il faut tenir compte d'impuretés, carbonées ou non, s'ajoutant aux nanotubes. La nature de ces impuretés dépend naturellement du mode de synthèse des nanotubes [6].

8- Purification des nanotubes de carbone

Les nanotubes de carbone obtenus par les différentes méthodes de fabrication ne possèdent pas une structure parfaite et présentent une distribution plus ou moins large des diamètres et des longueurs. Ils sont également accompagnés d'impuretés de différente nature. La présence de ces hétérogénéités limite l'exploitation optimale des propriétés des nanotubes. Elles rendent également difficiles la description et la compréhension des comportements des CNTs.

Les méthodes de purification des NTC peuvent être classées en deux catégories : la voie sèche et la voie humide

8.1- La voie sèche

La voie sèche se réfère à une oxydation en phase gaz permettant d'enlever de manière sélective les particules de carbone amorphe, celles-ci étant plus réactives que les NTC. La technique la plus simple à mettre en œuvre est celle de l'oxydation à l'air à une température donnée. Cette méthode s'appuie sur le principe de l'oxydation du carbone par l'oxygène de l'air pour former du monoxyde ou du dioxyde de carbone [25].

Initialement développée pour les MWNT, cette méthode a dû être réajustée pour les SWNT, ceux-ci étant moins résistants aux traitements oxydants que les MWNT [26, 27]. De plus, l'oxydation à l'air des NTC entraîne aussi l'oxydation des nanoparticules métalliques mais pas leur élimination. Ce procédé est donc souvent couplé à une étape de traitement par ultrasons en milieu acide afin d'éliminer les restes de catalyseur.

Ainsi, pour les SWNT obtenus par ablation laser, Zimmerman et al, ont développé une méthode de purification en phase gaz incluant des mélanges de gaz Cl_2 , H_2O et HCl [27].

Pour les SWNT obtenus par arc-électrique, Moon et al, ont réalisé la purification par oxydation à l'air à 470°C [28]. Ils ont ainsi obtenus des NTC purs à 96 % et contenant moins de 1 % massique de restes métalliques. Enfin les nanotubes HiPCO peuvent être purifiés par des cycles d'oxydation sous atmosphère humide (Ar-O_2 à $180\text{-}300^\circ\text{C}$) et d'ultrasons (HCl) suivis par un recuit sous argon à 800°C [29]. Une fois purifiés, les NTC ne représentent plus que 30 % de la masse initiale. Cependant, le pourcentage atomique de métal initialement à 5 % tombe à 0,03 % prouvant que la purification a bien été efficace.

8.2- La voie humide

Les techniques dites par voie humide sont des oxydations chimiques des NTC en milieux aqueux avec des oxydants tels que HNO_3 , KMnO_4 ou encore H_2O_2 auxquelles sont souvent ajoutés des ultrasons. Elles peuvent être utilisées seules ou combinées à un traitement par voie sèche. En fait, la plupart des méthodes de purification par voie sèche sont suivies par un traitement à l'acide pour dissoudre les particules de catalyseurs métalliques ou les oxydes formés lors de l'oxydation en phase gaz [27, 28].

L'acide nitrique est l'oxydant le plus couramment utilisé, l'acide étant peu cher et efficace pour solubiliser en grande quantité les catalyseurs métalliques et les particules de carbone amorphe [30]. Typiquement les NTC sont mis à reflux dans l'acide concentré pendant 45 heures. Dillon et al. [31] ont décrit une méthode non destructive de purification en trois étapes leur permettant d'obtenir des nanotubes purs à 98 %. Ils utilisent une solution diluée d'acide nitrique portée à reflux pendant 16 heures,

détruisant toute particule de carbone n'étant pas un nanotube. Se forme alors sur les nanotubes un revêtement de carbone qui est ensuite éliminé par oxydation à l'air. Une autre expérience [32] similaire à celle de Dillon consiste à oxyder à l'air des NTC prétraités par HNO_3 et terminer la purification par un lavage des nanotubes à l'acide chlorhydrique.

La purification des nanotubes de carbone par le permanganate de potassium en milieu acide permet d'éliminer les particules de carbone amorphe [25].

Les effets du permanganate de potassium comme oxydant ont été étudiés par Hiura et al. [33] qui ont utilisé une solution acide de permanganate de potassium ($\text{KMnO}_4/\text{H}_2\text{SO}_4$) pour purifier des NTC synthétisés par arc électrique. Grâce à cette technique, ils ont pu récupérer 40 % (en masse par rapport à la masse initiale) de nanotubes purifiés.

Moins agressif que les acides, le peroxyde d'hydrogène est moins utilisé mais n'en demeure pas moins un bon oxydant. Quelques techniques plus élaborées ont fait l'objet de brevets. Ainsi l'équipe de R. E. Smalley a mis au point une méthode de purification des nanotubes de carbone utilisant le réactif de Fenton (mélange de peroxyde d'hydrogène et de sels ferreux) comme oxydant [34]. Le fer provient soit des restes du catalyseur métallique utilisé lors de la formation des nanotubes, soit d'un ajout d'une solution ferreuse. Les ions Fe^{2+} Catalysent la formation de radicaux hydroxyles.

Les radicaux formés sont de puissants oxydants bien meilleurs que le peroxyde d'hydrogène seul.

De plus, afin d'éviter la formation d'hydroxyde ferrique ($\text{Fe}(\text{OH})_3$) qui attaque les nanotubes, la suspension est maintenue en milieu à pH 3 en ajoutant de l'acide chlorhydrique.

Goto et al nt quant à eux mis au point un processus de purification des SWCNT [35] obtenus par arc électrique en présences de catalyseurs métalliques.

Les nanotubes croissent à partir des particules de catalyseur mais des couches sphériques de carbone se forment aussi autour de ces particules. Les nanotubes de carbone sont donc ensuite soumis à une méthode de purification en quatre étapes,

permettant d'éliminer progressivement carbone et catalyseurs, durant lesquelles ils subissent successivement :

- Une oxydation par voie sèche avec un chauffage allant de 350 à 600 °C ou un traitement peroxyde d'hydrogène.
- un reflux dans une solution d'acide nitrique.
- un traitement d'oxydation par du peroxyde d'hydrogène.
- un reflux dans une solution d'acide nitrique.

D'autres techniques de purification, plus atypiques, ont été mises en œuvre telles que la centrifugation, la filtration [36,37] ou encore la séparation sur colonne chromatographique [38].

9- Applications des nanotubes de carbone

Des nombreuses applications des nanotubes de carbone sont enregistrées dans les différents domaines car leurs propriétés exceptionnelles énoncées précédemment ouvrent de nombreuses perspectives.

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

9.1- Transistor a effet de champ (FET)

Des nombreuses recherches ont montré qu'un nanotube, déposé sur un substrat isolant SiO₂/Si, relié à deux contacts, se comportait comme un transistor à effet de champ (FET) dans lequel le courant entre les deux contacts est modulé par une tension de grille extérieure. Tous les FETs ainsi élaborés, sont de type p (fermé pour une tension de grille positive et ouvert pour une tension de grille négative).

Les circuits analogiques emploient aussi bien des FETs de type p que de type n. Il a été montré que le dopage par un élément électropositif, tel que le potassium, permettait de transformer un FET de type p en FET de type n. Une autre technique a été proposée

récemment par les chercheurs d'IBM, la transformation (FET p en FET n) par un simple recuit, sous vide, 200°C. Le montage doit être protégé par une couche d'encapsulation polymère (PMMA - poly(méthyl méthacrylate)) ou inorganique (oxyde de silicium) afin d'assurer sa stabilité lorsqu'il est exposé l'air figure 1.22 [39].

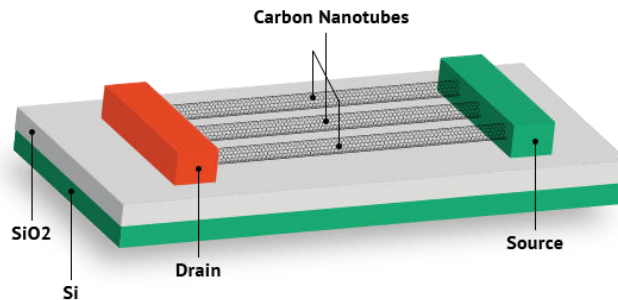


Figure 1.22 transistor à effet de champ de nanotube de carbone [40]

9.2- Source d'électrons

Les nanotubes de carbone sont particulièrement bien adaptés à l'extraction d'électrons à température ambiante. Cette propriété, directement liée à leur forme, peut être mise en œuvre dans deux types d'applications: la réalisation d'écrans plats et l'utilisation de micro-canon à électrons pour élaborer les circuits électroniques du futur.

L'émission d'électrons à partir d'un matériau conducteur est possible à température ambiante, lorsque ce matériau est soumis à un champ électrique d'une intensité importante (supérieure au millier de volts par micron). De ce fait l'extraction d'électrons d'une surface plane pose un problème technique majeur. L'utilisation de pointes aux rayons de courbure très faibles placées en regard d'une anode polarisée permet de contourner cette difficulté. Le champ local au sommet d'une pointe est le produit du champ appliqué par un certain coefficient. Ce coefficient, dépend essentiellement de la géométrie de la pointe. L'intensité du champ électrique ainsi nécessaire à l'extraction d'électrons devient raisonnable.

Par ailleurs, l'intensité du champ est d'autant plus forte que le rapport d'aspect entre la hauteur de la pointe et son rayon de courbure est grand. Les nanotubes de carbone ayant des dimensions exceptionnelles (diamètre de l'ordre de quelques nanomètres et

longueur de quelques centaines de micromètres) constituent d'excellent émetteur d'électrons. Quelques volts par micron suffisent pour extraire des électrons.

Une des applications directe des nanotubes est la production d'écrans où la taille pourrait atteindre un mètre de diagonale. Grâce à l'introduction des nanotubes, de nouvelles structures d'écrans ne comportant pas de motifs inférieurs à $10\mu\text{m}$, donc facilement réalisables sur une grande surface, ont été développées au Laboratoire d'électronique et de technologie de l'information (Leti) du CEA

Dans les années 1990, les écrans plats comportaient des émetteurs d'électrons constitués de micropointes en molybdène situées dans des trous de grille d'un diamètre de l'ordre du micron. Cette géométrie, imposée par le faible coefficient d'amplification de la pointe, est difficile à réaliser de façon économique sur une grande surface. Les grandes sociétés prévoient la commercialisation de ce type d'écran avant la fin de la décennie. La réalisation de ces écrans se fera par les moyens conventionnels à savoir dépôt et gravure de couches minces. Le dépôt de nanotubes sera ainsi effectué lors d'une étape de croissance à $600\text{ }^{\circ}\text{C}$. Cette croissance est localisée uniquement sur des plots de catalyseur très grands ($10 \times 6\text{ }\mu\text{m}$) par rapport aux nanotubes à réaliser.

Leur épaisseur, en revanche, n'est que de 10 nm . Pendant le chauffage de toute la structure à 600°C , la couche obtenue se fragmente en une multitude de gouttelettes dont le diamètre moyen est justement le diamètre des nanotubes. Ces gouttes constituent les germes de croissance de ces derniers qui vont s'organiser ensuite en tapis sur la zone initialement couverte par le plot de catalyseur. Cette technologie est intéressante, car elle permet de contrôler le diamètre et la densité des nanotubes sans avoir recours à des étapes coûteuses de lithographie [12].

9.3- Toxicité des nanotubes de carbone

La toxicité, un inconvénient majeur des (NTC), est directement liée à leur taille nanométrique et surtout à leur grand facteur de forme. En effet, tout comme les fibres d'amiante, les (NTC) peuvent facilement infiltrer les cellules et provoquer à long terme des cancers.

10- Conclusion

Dans ce chapitre, qui constitue une recherche bibliographique sur les nanotubes de carbone nous avons mis en évidence les caractéristiques exceptionnelles de nanotubes de carbone. Leurs dimensions particulières ainsi que leurs propriétés diverses ouvrent à l'industrie des perspectives d'innovations nombreuses et prometteuses.

Parmi les méthodes de synthèse de nanotubes de carbone nous avons détaillé quelques une afin d'expliquer les avantages et les inconvénients de chacune d'entre elles.

On notera également que la voie de synthèse par la méthode de dépôt chimique en phase vapeur CVD est plus prometteuse connaît un grand succès. Il permet de réaliser la croissance des (NTC) de manière localisée et orientée perpendiculaire au substrat. D'autre part, nous avons distingué les différentes propriétés d'un nanotube de carbone.

On notera également que la structure géométrique du nanotube a une grande influence sur ses propriétés électroniques. En effet, la propriété remarquable d'être métallique ou semiconducteur suivant son hélicité. En raison des propriétés physiques remarquables, Les nanotubes de carbone font l'objet d'une attention particulière. La combinaison de leurs propriétés mécaniques, thermiques et électriques renforcées avec des densités très faibles font penser que les (CNT) sont les candidats idéaux pour des matériaux composites polymères haute performance.

Nous venons de démontrer que les caractéristiques remarquables des nanotubes de carbone les rendent très attractifs pour des applications de renfort mécanique et de conductivité électrique. Ces caractéristiques sont les suivantes : leur rapport d'aspect important, leur faible résistivité, leur faible densité et leur module d'Young important. Elles demeurent toutefois à l'échelle individuelle et des contraintes techniques sont à surmonter pour pouvoir les exploiter. En effet, les nanotubes de carbone se présentent, en fin de synthèse, sous la forme d'une poudre compacte désorganisée et il faut donc développer des moyens pour les incorporer dans une matrice polymère.

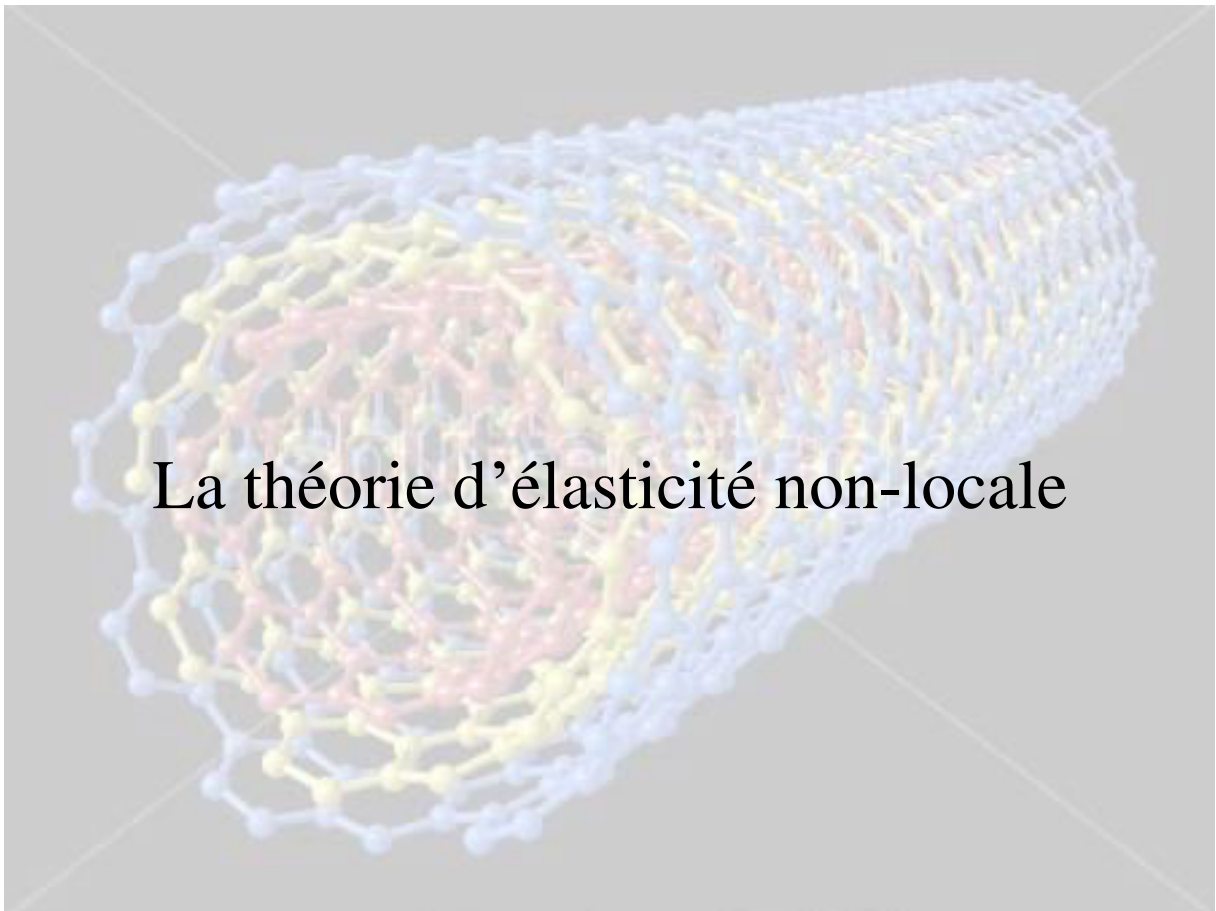
Références

- [1] S. Iijima, *Nature*, 354 :56 (1991)
- [2] Min YU, Elaboration de composites à matrice métallique d'alliages d'aluminium par projection à froid, thèse doctorat, Université de Technologie de Belfort-Montbéliard en Sciences pour l'Ingénieur, 2013.
- [3] S.J. Tans, A.R.M. Verschueren, C. Dekker, *Nature* 393 (1998) 49.
- [4] T. Rueckes, K. Kim, E. Joselevich, G. Y. Tseng, C.-L. Cheung et C. M. Lieber, Carbon nanotube-based nonvolatile random access memory for molecular computing. *Science*, volume 289, 2000, pages 94–97
- [5] R. Lefèvre, Propriétés électromécaniques des nanotubes de carbone multiparois, le grade de docteur ès sciences de l'université paris xi orsay, 2005.
- [6] M. Zidour, Etude du comportement mécanique des nanotubes en carbone entourés par une matrice polymère, thèse doctorat, université Djilali Liabes de Sidi bel abbes, 2012.
- [7] E. Garrido, fonctionnalisation de nanotubes de carbone pour leur incorporation dans des matrices métalliques, thèse doctorat, Université de Bordeaux, 2010.
- [8] M. Calafat, Formation de poudres dans des décharges d'acétylène en Plasma Micro-onde Multipolaire excité à la Résonance Cyclotronique Electronique Répartie. Etude des nanocomposites carbone-carbone et leurs applications. Université Toulouse III - Paul Sabatier
- [9] P. Marcoux, Réactivité et manipulation de nanotubes de carbone monocouches : fonctionnalisation de surface par greffage covalent et mise en œuvre comme agent structurant. Thèse doctorat, Université d'Angers, bâtiment K, 2, boulevard Lavoisier, 49 045 ANGERS
- [10] N. Izard, Nanotubes De Carbone : Systèmes Pour La Limitation Optique, thèse doctorat, Université Montpellier II, 2004.
- [11] G. Viswanathan et al., Single-Step in Situ Synthesis of Polymer-Grafted Single-Wall Nanotube Composites, *Journal of the American Chemical Society*, 125, 9258 (2003).
- [12] S. Rizk, Elaboration Et Caractérisation De Nanostructures Carbonées Par Procédé CDV Assisté Par Plasma Microonde, thèse, Université Henri Poincaré, Nancy I.
- [13] S. Iijima, T. Ichihashi, Single-shell carbon nanotubes of 1 nm diameter, *Nature*, 363, 603 (1993).
- [14] D. S. Bethune, C. H. Kiang, M. S. de Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez, R. Beyers, Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer wall, *Nature*, 363, 605 (1993).

- [15] J. Buchoux., Nanotubes de carbone comme sondes en microscopie à force atomique : nanomécanique et étude à l'interface air-liquide de fluides complexes, thèse doctorat, Université Bordeaux 1.
- [16] C. Emmengger, Nanostructures de carbone comme composants pour le stockage d'énergie dans les condensateurs électrochimiques à double couche (ECDL), thèse, Université de Fribourg (Suisse) 2002.
- [17] P. Marcoux, Réactivité et manipulation de nanotubes de carbones monocouches : fonctionnalisation de surface par greffage covalent et mise en œuvre comme agent structurant, thèse de doctorat, Université d'Angers, (2002)
- [18] A. Gohier, Cinétique de Croissance de Nanotube de Carbone Mono-Parois et Multi-Parois Orientés par Procède Plasma, Thèse de Doctorat, l'Université de Nantes (Sciences des Matériaux), 2007.
- [19] M.-F. Yu, B. S. Files, S. Arepalli, R. S. Ruoff, Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties, *Phys. Rev. Lett.*, 2000, 84, 5552-5555.
- [20] R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, Physical properties of carbon nanotubes, World Scientific, 1998.
- [21] S. Berber, Y.-K. Kwon, D. Tománek, Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes, *Phys. Rev. Lett.*, 2000, 84, 4613-4616.
- [22] X. Sun, R. Q. Yu, G. Q. Xu, T. S. A. Hor, W. Ji, Broadband optical limiting with multiwalled carbon nanotubes, , *Appl. Phys. Lett.*, 1998, 73, 3632-3634.
- [23] A. J. Stones, D. J. Wales, *Chem. Phys. Lett.*, (1986), 128, 501
- [24] . Yao, H. W. C. Postma, L. Balents, C. Dekker, Carbon nanotube intramolecular junctions, *Z Nature*, 1999, 402, 273-276.
- [25] Colomer, J.-F.; Piedigrosso, P.; Willems, I.; Journet, C.; Bernier, P. Van Tendeloo, G.; Fonseca, A.; Nagy, J. B.; *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions* 1998, 94, 3753–3758.
- [26] Xu, Y.-Q.; Peng, H.; Hauge, R. H.; Smalley, R. E.; *Nano Letters* 2005, 5, 163–168.
- [27] Zimmerman, J. L.; Bradley, R. K.; Huffman, C. B.; Hauge, R. H.; Margrave, J. L. *Chemistry of Materials* 2000, 12, 1361–1366.
- [28] Moon, J.-M.; An, K. H.; Lee, Y. H.; Park, Y. S.; Bae, D. J.; Park, G.-S.; *The Journal of Physical Chemistry B* 2001, 105, 5677–5681.

- [29] Chiang, I. W.; Brinson, B. E.; Huang, A. Y.; Willis, P. A.; Bronikowski, M. J. Margrave, J. L. Smalley, R. E.; Hauge, R. H.; The Journal of Physical Chemistry B 2001, 105, 8297–8301.
- [30] Liu, J.; Rinzler, A. G.; Dai, H.; Hafner, J. H.; Bradley, R. K.; Boul, P. J.; Lu, A. Iverson, T. Shelimov, K.; Huffman, C. B.; Rodriguez-Macias, F.; Shon, Y.-S. Lee, T. R.; Colbert, D. T.; Smalley, R. E.; Science 1998, 280, 1253–1256.
- [31] Dillon, A. C.; Gennett, T.; Jones, K. M.; Alleman, J. L.; Parilla, P. A.; Heben, M. J. Advanced Materials 1999, 11, 1354–1358.
- [32] Chiang, I. W.; Brinson, B. E.; Smalley, R. E.; Margrave, J. L.; Hauge, R. H.; The Journal of Physical Chemistry B 2001, 105, 1157–1161.
- [33] Hiura, H.; Ebbesen, T. W.; Tanigaki, K.; Advanced Materials 1995, 7, 275–276.
- [34] Smalley, R. E.; Wang, Y.; Hauge, R. H.; Shan, H.; WO 2006/072085, 2006.
- [35] Goto, H.; Furuta, T.; Fujiwara, Y.; Ohashi, T.; US2003/0007924, 2003.
- [36] Bandow, S.; Rao, A. M.; Williams, K. A.; Thess, A.; Smalley, R. E.; Eklund, P. C. The Journal of Physical Chemistry B 1997, 101, 8839–8842.
- [37] Shelimov, K. B.; Esenaliev, R. O.; Rinzler, A. G.; Huffman, C. B.; Smalley, R. E. Chemical Physics Letters 1998, 282, 429–434.
- [38] Duesberg, G. S.; Burghard, M.; Muster, J.; Philipp, G.; Chemical Communications 1998, 435–436.
- [39] V. Derycke, R. Martel, J. Appenzeller et Ph. Avouris. Nano Letters, page A, 2001
- [40] M. Freitag, Y. Martin, J.A. Misewich, R. Martel, Ph. Avouris, Nanoletters 3 1067 (2003).

Chapitre II



La théorie d'élasticité non-locale

1. Introduction

La théorie classique de l'élasticité ne permet pas de rendre compte de « l'effet d'échelle », i.e. des conséquences physiques intervenant lorsqu'on modifie certaines dimensions d'un matériau.

Plusieurs études expérimentales ont permis de mettre en évidence ce phénomène sur des nanotubes de carbone ou des films minces. L'augmentation de la viscosité d'un fluide s'écoulant dans des canaux microscopiques relève aussi de « l'effet d'échelle ».

Pour expliquer les limites de la théorie classique de l'élasticité, la communauté scientifique avance plusieurs explications physiques [1] parmi lesquelles l'influence croissante de l'énergie de surface aux petites échelles ou bien le rôle non négligeable de la microstructure interne du matériau. L'approche classique serait donc incapable de traiter des problèmes pour lesquels les événements se produisant à une échelle microscopique ou microstructurale ont une influence significative. Selon Eringen [2,3], cette incapacité est liée à l'absence d'une longueur interne, caractéristique du matériau, dans le modèle de comportement élastique classique.

Une solution possible est de revenir à une description discrète du matériau et d'utiliser les théories atomiques pour décrire le comportement du solide. Dans ce type d'approche, on suppose le plus souvent que le matériau possède une structure interne parfaite dépourvue de défauts. Cette hypothèse est très éloignée de la réalité. Les matériaux métalliques, par exemple, sont remplis de dislocations, lacunes et autres impuretés. Par ailleurs, le nombre d'atomes de la structure entraîne une explosion du nombre de degrés de liberté et requiert des capacités de calcul gigantesques dont nous ne disposons pas à ce jour.

Dans ce contexte, l'approche non-locale se présente comme une alternative intéressante, à mi-chemin entre les théories atomiques et la mécanique classique. L'idée principale est d'utiliser un modèle de milieu continu capable de prendre en compte l'influence de la microstructure.

2. Limites de la théorie classique et intérêt de l'approche non-locale

Comme le note Eringen dans la préface de son ouvrage « Nonlocal continuum theories » (2002), toutes les théories physiques possèdent un champ d'application en dehors duquel elles sont incapables de fournir des résultats précis et cohérents [3]. Cela se traduit par des prédictions numériques qui divergent de façon notable par rapport aux résultats expérimentaux ou des résultats théoriques présentant des singularités mathématiques inacceptables.

De nombreux exemples viennent illustrer cette assertion. Dans le cadre de la théorie classique de l'élasticité, le champ de contrainte prédit sur le front d'une fissure ou sur une ligne de dislocation est infini. Le même type de singularité est constaté au point d'application d'une force ponctuelle ou au voisinage de défauts ponctuels.

Les théories non-locales sont une généralisation des théories classiques pour lesquelles le comportement en un point matériel est influencé par l'état en chaque point du solide. Ce type d'approche, dont la formulation mathématique induit naturellement une longueur interne caractéristique du matériau, permet de décrire plus finement le comportement élastique par la prise en compte des interactions à longue distance.

On peut classer les théories non-locales en deux catégories :

- Les théories non-locales à gradient
- Les théories non-locales intégrales

2.1- Théories non-locales à gradient

Il existe deux formulations légèrement différentes de cette théorie. La première repose sur la philosophie suivante. Pour matérialiser l'influence de la microstructure interne, chaque point matériel du solide possède des degrés de liberté supplémentaires, qui correspondent à des microcontraintes et des microdéformations additionnelles. Les bases de la théorie ont été posées dans les années 60 par plusieurs auteurs [4-7]. Dès le début des années 1970, Eringen a lui aussi contribué à son développement [8].

Cette théorie a permis d'étudier de nouveaux modèles de comportement, à travers, notamment, la définition des milieux micromorphes, microstretches ou micropolaires [3]. Dans ce type de modèle, le solide est constitué d'un ensemble de

particules matérielles qui sont susceptibles de se dilater, se contracter ou tourner sur elles-mêmes.

Ces degrés de libertés supplémentaires engendrent des micro-contraintes qui viennent s'ajouter à la contrainte classique prévue par la théorie locale.

Citons aussi les travaux de Gao qui introduit dans les équations d'équilibre non-locales les moments liés aux rotations relatives des particules les unes par rapport aux autres [9].

Selon ces auteurs, l'introduction de gradients d'ordre supérieur permet de prendre en compte l'influence de la microstructure du matériau sur la loi de comportement.

Sous sa forme la plus simple, l'équation de comportement de la théorie des gradients s'écrit :

$$\sigma = C(\varepsilon - \lambda \nabla^2 \varepsilon) \quad (2-1)$$

Où σ et ε correspondent respectivement au tenseur de contrainte de Cauchy et au tenseur de déformation linéarisé. Rappelons que l'opérateur nabla (∇) a pour composantes en coordonnées cartésiennes, $\nabla(\cdot) = (\partial \cdot \partial x; \partial \cdot \partial y; \partial \cdot \partial z)$.

Le paramètre « λ » est homogène à une longueur, représentative de la microstructure interne du matériau. On peut d'ores et déjà remarquer que lorsque « λ » s'annule, on retrouve le modèle classique de comportement élastique (loi de Hooke généralisée).

Par ailleurs, notons que des formulations plus élaborées de l'équation de comportement (2-1) ont été proposées.

2.2- Théories non-locales intégrales

La théorie non-locale à gradients est une formulation non-locale souvent qualifiée de « faible ». il y a une autre théorie non-locale c'est l'approche non-locale intégrale ou « théorie non-locale forte ».

Cette formulation a été développée initialement dans les années 1960 par Krumhansl, Kroner, et Kunin [10-12]. Ces auteurs partent du même constat : dans le cadre de l'élasticité classique, les forces de cohésion à l'intérieur d'un solide sont modélisées par des forces de contact dont la portée est nulle. Or, les forces de cohésion dans un matériau réel possèdent clairement une certaine portée et ont donc un rayon

d'influence non nul. Pour remédier à cette insuffisance, Kroner propose d'affiner la théorie des milieux continus élastiques en y introduisant des forces d'interaction à longue distance. De son côté, Krumhansl a travaillé sur la conversion de la théorie des réseaux en une théorie continue.

Une formulation améliorée de l'approche non-locale, qui précise les relations de comportement dans le cadre de la thermodynamique, est présentée par Eringen et Edelen au début des années 1970[13]. Dans le cadre non-local, l'énergie interne en un point dépend du champ de déformation dans tout le solide. De ce fait, le premier principe de la thermodynamique doit être intégré sur l'ensemble du domaine d'étude. Notons Edelen et Laws [14,15] ont proposé une formulation « locale » du premier principe dans laquelle apparaît un terme d'énergie résiduel supplémentaire. Ce *résidu non-local* représente l'énergie transmise en un point par tous les autres points du solide.

Pour le cas particulier d'un matériau élastique nonlocal, isotrope et linéaire, Eringen et Kim [16] proposent une approche non-locale qui ne diffère de l'approche continue classique que par la relation entre les déformations et les contraintes. Dans ce cas, le champ de contrainte s'exprime le plus souvent comme une intégrale pondérée des déformations sur l'ensemble du domaine d'étude. Le modèle de comportement fait par ailleurs intervenir un paramètre « λ » homogène à une longueur, qui définit la « portée » des interactions et permet de prendre en compte l'influence de la microstructure du matériau.

La loi de comportement proposée par Eringen peut se mettre sous la forme suivante :

$$t_{ij}(x) = C_{ijkl} \int_{\Omega} \alpha(|\hat{x} - x|, l) \varepsilon_{kl}(\hat{x}) d\Omega(\hat{x}) \quad (2-2)$$

Où t et ε sont respectivement le tenseur de contrainte non-local et le tenseur des déformations linéarisé.

$$\varepsilon_{kl}(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l}(x) + \frac{\partial u_l}{\partial x_k}(x) \right) \quad (2-3)$$

C correspond au tenseur d'élasticité et $\alpha(|x'-x|, \lambda)$ est la fonction de caractérisation non-locale. Le paramètre « λ » représente une longueur interne caractéristique du matériau.

D'après, l'équation (2-2), le tenseur de contrainte au point x dépend des déformations en tout point à l'intérieur du domaine Ω . Ce modèle est donc très différent de la loi de Hooke généralisée où la contrainte dépend de la déformation en un point uniquement.

La fonction de caractérisation, ou fonction d'atténuation, dépend de « λ » et de la distance euclidienne entre x et x' .

Plus cette distance est grande devant la longueur interne, plus la valeur de la fonction est faible. Au-delà d'un certain rayon, $\alpha(|x'-x|, \lambda)$ est quasi nulle. Cette propriété permet de prendre en compte l'atténuation des forces d'interaction dans le matériau. Les déformations aux points x' éloignés du point x ont peu d'influence sur la valeur de la contrainte en ce point. Cette approche a été utilisée avec succès pour traiter des problèmes de fissures, de dislocations ou encore de défauts ponctuels [17-22]. Dans tous les cas, les singularités de contraintes sont éliminées. La méthode est appliquée avec la même réussite à des problèmes impliquant des forces ponctuelles [23,24].

Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes particulièrement intéressés à la théorie nonlocale de Eringen. Cette approche se présente comme une alternative aux théories non-locales, pour lesquelles des conditions aux limites non conventionnelles sont requises.

3. Conclusion

Cette approche a permis de résoudre de façon satisfaisante de nombreux problèmes de fissuration sans éliminer les singularités de contraintes.

Comme le souligne Eringen, la singularité des expressions asymptotiques montre les limitations de l'élasticité classique pour traiter les problèmes de rupture. Dans ce contexte, l'approche non-locale, qui permet d'introduire l'influence de la microstructure du matériau dans les lois de comportement, se présente comme une alternative intéressante. Nous avons présenté différents types d'approches non-locales. Parmi celles-ci, la théorie non-local de l'élasticité est intéressante par le fait qu'elle ne nécessite pas l'introduction de conditions aux limites non conventionnelles pour la

résolution d'un problème concret. Contrairement à l'élasticité classique, où la contrainte en un point dépend uniquement de la déformation au même point (loi de Hooke), le modèle de comportement non-local relie la contrainte en un point aux déformations dans l'ensemble du matériau.

Cette modélisation permet d'éliminer les singularités mathématiques produites par les théories classiques.

Références

- [1] M. Di Paola, G. Failla, M. Zingales, The mechanically-based approach to 3D non-local linear elasticity theory : long-range central interactions, *Int. J. Solids Struct.* 47, 2347-2358, 2010.
- [2] Eringen A.C., Theory of nonlocal elasticity and some applications, *Res Mechanica* 21 313- 342, 1987.
- [3] Eringen A.C., *Nonlocal continuum field theories*, Springer New-York, 2002.
- [4] Toupin R.A., Elastic materials with couple-stresses, *Archive of Rational Mechanics and Analysis* 11, 385-414, 1963.
- [5] Mindlin R.D., Micro-structure in linear elasticity, *Archive of Rational Mechanics and Analysis* 16, 51-78, 1963.
- [6] Krumhanls J.A., Some considerations of the relations between solid state physics and generalized continuum mechanics, In : Kroner (Ed.), *Mechanics of Generalized Continua*, Proc. IUTAM symposium, Springer-Verlag, 1967.
- [7] Kunin I.A., The theory of elastic media with microstructure and the theory of dislocations, In : Kroner (Ed.), *Mechanics of Generalized Continua*, Proc. IUTAM symposium, SpringerVerlag, 1967.
- [8] Eringen A.C., Edelen D.G.B., On nonlocal elasticity, *Int. J. Engng. Sci.* 10, 233-248, 1972
- [9] Gao J., An asymmetric theory of nonlocal elasticity. Part 2 : Continuum field, *International Journal of Solids and Structures* 36, 2959-2971, 1999-b
- [10] Krumhanls J.A., Generalized continuum field representation for lattice vibrations, In : Wallis R.F. (Ed.), *Lattice Dynamics*, Proc. of Int. Conference, Pergamon Press, London, 1963.
- [11] Kroner E., Elasticity theory of materials with long-range cohesives forces, *International Journal of Solids and Structures* 3, 731-742, 1967.
- [12] Kunin I.A., The theory of elastic media with microstructure and the theory of dislocations, In : Kroner (Ed.), *Mechanics of Generalized Continua*, Proc. IUTAM symposium, SpringerVerlag, 1967.
- [13] Eringen A.C., Non-local polar elastic continua, *International Journal of Engineering Science* 10, 1-16, 1972
- [14] Edelen D.G.B., Laws N., On the thermodynamics of systems with nonlocality, *Arch. Rat. Mech. Anal.* 43, 24-35, 1971.

- [15] Edelen D.G.B., Green A.E., Laws N., Nonlocal continuum mechanics, Arch. Rat. Mech. Anal. 43, 36-44, 1971.
- [16] Eringen A.C., Kim B.S., Stress concentration at the tip of a crack, Mech. Res. Commun. 1, 233-237, 1974.
- [17] Eringen A.C., Line Crack subjected to shear, Int. J. Fract 14, 367-379, 1978.
- [18] Eringen A.C., Line Crack subjected to anti-plane shear, Engng. Fract. Mech. 12, 1979.
- [19] Gao J., Dai T.M., On the study of a penny-shaped crack in nonlocal elasticity, Acta Mechanica Sinica 2, 253-269, 1989.
- [20] Minghao Z., Changjun C., Yuanjie L., Guoning L., Shishan Z., The method of analysis of crack problem in three-dimensional non-local elasticity, Applied Mathematics and Mechanics 20, 1999.
- [21] Lazar M., Maugin G.A., Aifantis E.C., On a theory of nonlocal elasticity of bi-Helmholtz type and some applications, Int. J. Sol. Struct. 43, 1404-1421, 2006.
- [22] Povstenko Y.Z., The nonlocal theory of elasticity and its applications to the description of defects in solid bodies, Journal of Mathematical Sciences 97, 1999.
- [23] Artan R., The nonlocal solution of the elastic half plane loaded by a couple, International Journal of Engineering Science 37, 1389-1405, 1999.
- [24] Povstenko Y.Z., Kubik I., Concentrated ring loading in a nonlocal elastic medium, International Journal of Engineering Science 43, 457-471, 2005.

Chapitre III



Etude théorique sur la vibration libre d'un
nanotube de carbone

www.shutterstock.com · 104594399

1. Introduction

L'étude et l'analyse des vibrations ont pris, au cours des dernières années, un essor considérable en raison du développement de techniques plus en plus sophistiquées et de besoins les plus variés dans différents domaines : mécanique (transports, machines...), acoustique, optique, transmission, etc.

Les préoccupations actuelles peuvent être, très schématiquement, divisées en trois catégories.

La paternité de la théorie des milieux continus est attribuée à Galilée, mais des études récentes indiquent que Léonard de Vinci l'aurait précédé. De Vinci avait supposé que la déformation variait de manière linéaire en s'éloignant de la surface neutre, le coefficient de proportionnalité étant la courbure, mais il ne put finaliser ses calculs car il n'avait pas imaginé la loi de Hooke.

De son côté, Galilée était parti sur une hypothèse incorrecte (il supposait que la contrainte était répartie uniformément en flexion), et c'est Antoine Parent qui obtient la distribution correcte.

Ce sont Leonhard Euler et Jacques Bernoulli qui émirent la première théorie utile vers 1750, alors que Daniel Bernoulli, le neveu du précédent, écrivit l'équation différentielle pour l'analyse vibratoire. À cette époque, le génie mécanique n'était pas considéré comme une science, et on ne considérait pas que les travaux d'une académie des mathématiques puissent avoir des applications pratiques.

Les préoccupations actuelles peuvent être, très schématiquement, divisées en trois catégories.

La première théorie a trait au calcul dynamique des structures en tant que prolongement de la résistance des matériaux et de la mécanique des milieux continus. S'il est possible dans les cas simples, c'est-à-dire pour un nombre restreint de problème, de calculer le comportement de celles-ci et leur isolation pour limiter les nuisances, dans la majorité des cas, les méthodes analytiques deviennent insuffisantes pour obtenir, par exemple, les fréquences de résonance d'ordre élevé de systèmes continus. Ainsi le calcul des premiers modes propres d'un matériau d'axe rectiligne, de section constante, encastrée à une extrémité, libre à l'autre, ne pose pas la moindre difficulté ; par contre, si on lui associe une ou plusieurs autres matériaux de directions

et de sections différentes, les solutions deviennent quasi impossibles à trouver. Et pourtant, dans de nombreux cas, il faut absolument connaître ces fréquences car, pour raisons économie de matière, les constructions sont de plus légères donc appelées à vibrer pour de basses fréquences, en générale situées dans des zones dangereuses pour la structure ou son environnement.

La deuxième concerne une aide extrêmement précieuse, bien que relativement récente, apporté aux bureaux d'études par la mise sur le marché d'ordinateurs et de micro-ordinateurs associés à des progiciels très performants fondés sur la méthode des éléments finis, d'un cout non prohibitif, rendant la partie calcul aisée. Si dans la plupart des cas les résultats sont valables, la plus grande prudence doit être de rigueur lors de l'exploitation des résultats, certains progiciels estompant, par exemple, des modes propres intermédiaires. Cela amène à tempérer, lors de la prise en main de l'outil informatique, l'ardeur des novices pour ces méthodes séduisantes de calcul, si elles permettent de prévoir le comportement de structures impossibles à envisager avec la seule aide de la calculatrice, l'opérateur doit rester extrêmement vigilant et critique vis-à-vis des valeurs affichées à l'écran, d'autant plus qu'il n'a pas eu à intervenir, une fois la modélisation terminée, le déroulement du programme étant complètement aveugle. Dans certaines circonstances, cette stratégie du presse- bouton peu réserver de bien désagréables surprises.

La dernière est d'ordre expérimental : en effet, certains progiciels calculent les modes propres d'ordre élevé avec des erreurs intolérables, aussi l'ultime recours reste l'expérimentation; la mesure réclame, elle aussi, de multiples connaissances et une extrême rigueur. Il ne suffit plus de brancher, étalonner et lire sur un écran).

Tout d'abord on va parler sur les méthodes et les modèles théoriques appliquées sur notre matériau qui est les nanotubes de carbone et tout d'abord on considère que notre milieu est continu dont l'hypothèse consiste à considérer des milieux dont les propriétés caractéristiques, c'est-à-dire celles qui nous intéressent tel que la densité, élasticité, etc.- sont continues.

Une fois appliqué aux nanotubes, ce modèle traite les molécules comme matériel continu avec une géométrie définie et des propriétés matérielles isotropes (par exemple module de Young).

Pour simplifier les essais on admet que les matériaux ont les mêmes propriétés mécaniques en tous points (homogènes) et dans toutes les directions (isotropes).

2. La théorie d'Euler Bernoulli

La théorie d'Euler-Bernoulli, est un modèle utilisé dans le domaine de la résistance des matériaux [1].

Puisque le matériau multicouche est homogénéisé dans notre cas on peut considérer une seule couche dont le nombre d'équation ne dépend pas du nombre de couches.

Dans cette théorie, les modèles sont basés sur une distribution linéaire des déplacements suivant l'épaisseur du matériau. L'hypothèse dans cette théorie :

- Après déformation, les déformations dues au cisaillement transversal sont négligées (pas de cisaillement sur la hauteur du matériau).
- La section transversale reste perpendiculaire à la ligne moyenne de matériaux et la section plane reste plane.
- La fonction $f(z)$ qui décrit la répartition de déplacement suivant l'épaisseur du matériau est nulle.

$$f(z) = 0 \quad (1)$$

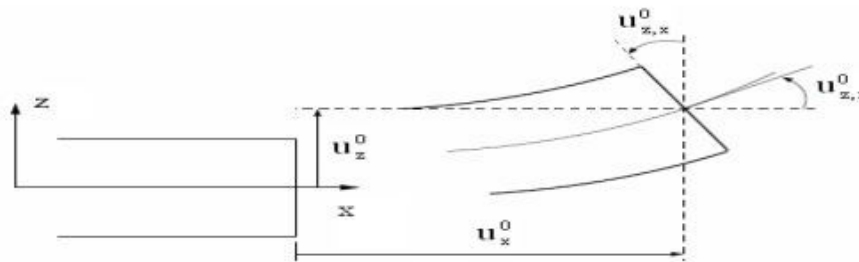


Figure 3.1 Cinématique d'Euler Bernoulli (Dufort, 2000) [2]

Pour le cas des matériaux élancés et d'après la théorie classique, le déplacement d'un point M est donné par les deux composantes suivantes :

$$U(M) = \begin{cases} u(x, z) = u_0(x) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} \\ w(x, z) = w_0(x) \end{cases} \quad (2)$$

$u(x, z)$: C'est le déplacement suivant x et $w(x, z)$ est le déplacement dans la direction de Z.

La rotation autour de l'axe Y, provoquée par la flexion est tel que :

$$\frac{\partial w_0(x)}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

Ou $u_0(x)$ et $w_0(x)$ sont les composantes de déplacement au milieu de la section et sur la ligne moyenne de nanomatériaux, respectivement le long des axes X et Z.

$$\gamma_{xz}(x) = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

Cela veut dire que la distorsion est nulle et par conséquent la contrainte de cisaillement est nulle puisque,

$$\tau_{xz} = G_{xz}\gamma_{xz} = 0 \quad (5)$$

Cette théorie ne tient pas en compte le cisaillement.

3. La théorie de Timoshenko

La théorie de Timoshenko est plus riche et plus générale que la théorie élémentaire des poutres au prix d'une fonction supplémentaire. Cette solution permet d'affiner les solutions analytiques issues de la théorie classique. Toutefois ces solutions sont entachées d'erreurs au voisinage des appuis et de la zone indentation où nous pouvons avoir des concentrations de contrainte et des champs de déplacement non homogènes [3].

Elle s'applique sur des poutres courtes, elle est basée sur le principe; qu'après déformation, la section plane reste plane mais elle perd sa perpendicularité par rapport à la ligne moyenne de la poutre (figure 3.2). Ceci est dû au cisaillement transversal, découvert par Timoshenko, sur l'épaisseur de la poutre. Cette théorie est analogue à la théorie de "Reissner-Mindlin" dans le cas des plaques épaisses [4]. Dans le cas où nous avons un élanement faible, l'effet du cisaillement devient plus important sur la déformée. Dans ce cas, la fonction $f(z)$ égale à z .

$$f(z) = z \quad (6)$$

Il existe un cisaillement uniforme et les déformations dues au cisaillement transversal ne sont pas négligées. C'est la théorie de premier ordre (FSDBT).

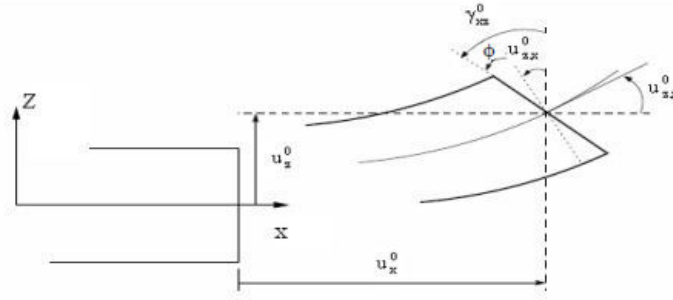


Figure 3.2. Cinématique de Timoshenko [4]

Le déplacement d'après Timoshenko s'écrit comme suit :

$$U(M) = \begin{cases} u(x, z) = u_0(x) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + z \varphi_0(x) \\ w(x, z) = w_0(x) \end{cases} \quad (7)$$

Où

$\varphi_0(x)$: est la rotation de la section mesurée sur la ligne moyenne de matériau.

Par définition, la distorsion est donnée par la relation suivante :

$$\gamma_{xz}(x) = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + \varphi_0(x) + \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} \quad (8)$$

$$\gamma_{xz}(x) = \varphi_0(x) \quad (9)$$

Sachant que la contrainte de cisaillement est égale :

$$\tau_{xz} = G_{xz} \gamma_{xz} = G_{xz} \varphi_0 \quad (10)$$

G_{xz} : est le module de cisaillement transversal qui est supposé constant.

Avec cette théorie, les contraintes tangentielles de cisaillement sont constantes et uniformes sur toute l'épaisseur du matériau, cela veut dire qu'elles existent même sur les bords supérieurs et inférieurs de matériaux et pourtant il n'y a aucun chargement qui induit le cisaillement.

Cette contradiction mène à introduire des coefficients de correction pour mieux considérer le cisaillement transversal. Ces coefficients correcteurs notés "k" dépendent de la forme géométrique de matériaux considérée.

La non nullité des contraintes tangentielles sur les bords extrêmes du matériau et l'introduction des coefficients de correction de cisaillement ont menés d'autres chercheurs à essayer de trouver une autre théorie pouvant tenir compte de ces facteurs, c'est « la théorie d'ordre élevé ». [1]

4. Théorie d'ordre élevé

Dans cette théorie la distribution des champs de déplacement est non linéaire selon l'épaisseur du matériau. Elle est plus précise que la théorie du premier ordre puisqu'elle introduit une fonction qui tient compte du phénomène de "gauchissement". Ce phénomène apparaît lorsque la section transversale du matériau perd sa planéité (figure 3.3). La fonction $f(z)$ représente le gauchissement et sa dérivée $f'(z)$ le cisaillement.

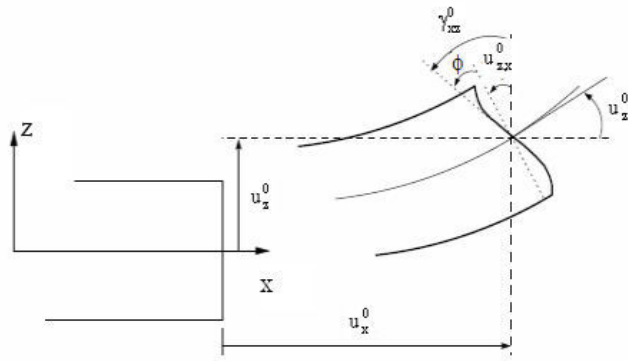


Figure 3.3 - Cinématique de la Théorie d'Ordre Elevé

Dans ce cas, le champ de déplacement devient:

$$U(M) = \begin{cases} u(x, z) = u_0(x) - z \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + f(z) \varphi_0(x) \\ w(x, z) = w_0(x) \end{cases} \quad (11)$$

$$\gamma_{xz}(x) = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} = - \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} + f'(z) \varphi_0(x) + \frac{\partial w_0(x)}{\partial x} \quad (12)$$

$$\gamma_{xz}(x) = f'(z) \varphi_0(x) \quad (13)$$

Pour que les contraintes tangentielles soient nulles sur les bords extrêmes de la poutre, on doit avoir:

$$\hat{f}(z) = \hat{f}\left(+\frac{h}{2}, -\frac{h}{2}\right) = 0 \quad (14)$$

C'est la condition qui nous permet d'avoir une répartition parabolique des contraintes de cisaillement sur l'épaisseur matériau d'une part et de choisir correctement des fonctions cubiques qui répondent à la condition (13).

Selon l'expression de la fonction de gauchissement, $f(z)$ quelques modèles sont présentés dans la littérature des nanomatériaux :

Le modèle Euler-Bernoulli (la théorie classique) ETB :

$$f(z) = 0 \quad (15)$$

Le modèle de Timoshenko ou bien la théorie du premier ordre FSDT

$$f(z) = z \quad (16)$$

Le modèle d'ordre élevé, avec l'approche de Levinson [5], Murthy [6] et Reddy [7]

$$f(z) = \frac{5z}{4} \left(1 - \frac{4z^2}{3h^2}\right) \quad (17)$$

Le modèle exponentiel proposé par Afaq et al [8]

$$f(z) = ze^{-2\left(\frac{z}{h}\right)^2} \quad (18)$$

Le modèle d'Aydogdu [9]

$$f(z) = z\alpha^{\frac{-2\left(\frac{z}{h}\right)^2}{\ln\alpha}} \quad (19)$$

Avec, h étant l'épaisseur du matériau.

Le choix de la fonction exponentielle permet un développement en puissance pair et impair de la variable z .

5. Vibration libre d'un nanotube de carbone double couche

Dans ce chapitre on a étudié la vibration libre d'un nanotube de carbone double couche par l'utilisation du modèle Euler-Bernoulli. La variation le paramètre (e_0a) , le nombre de mode (N) , le rapport (L/d) , et le nombre de maille (n) sont traitées pour étudier les rapports de fréquences (ω_N/ω_L) .

La propagation transversale d'onde dans les nanotubes de carbone double couche est étudiée en se basant sur le modèle de la poutre d'Euler Bernoulli, en utilisant la théorie d'élasticité nonlocal.

Sur la base du modèle d'élasticité non linéaire d'Eringen [10], la contrainte au niveau d'un point de référence (x) est considéré comme une fonction du champ de déformation estimée à chaque point dans le corps. Cette observation est conforme au modèle atomique et aux observations expérimentales sur la dispersion des photons. En outre, quand l'effet des contraintes aux autres points que (x) est négligé, la théorie nonlocal d'élasticité se conforme à la théorie (locale) classique d'élasticité ceci en mettant ($e_0a = 0$). Par conséquent, la théorie nonlocal fournit une description plus précise du comportement matériel comparée à la théorie (locale) classique d'élasticité. Les équations de mouvement de vibration transversale dans le cas du modèle d'Euler-Bernoulli d'un nanotube de carbone peuvent être obtenues comme (Doyle 1997) [11]

$$\frac{\partial T}{\partial x} + P(x) = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \quad (20)$$

Où $P(x)$ est la force transversale distribuée selon l'axe x qui représente les pressions de Van der Waals par unité de longueur axiale exercée sur les parois intérieures et extérieures du nanotube, w est le déplacement transversale, ρ est la densité, A est la section transversale du nanotube, et T est la force de cisaillement résultante sur la section transversale, dont le problème ici est que les effets des déformations du cisaillement transversal et de l'épaisseur d'étirement sont négligés. Récemment, la théorie de Euler Bernoulli a été largement utilisé avec succès pour étudier l'analyse des vibrations des plaques classées fonctionnellement en utilisant une théorie simple de la déformation du cisaillement, comme les plaques sandwich [12,13] et le concept de la position de surface neutre [14,15].

La relation constitutive non-locale unidimensionnelle pour le nanotube peut être approchée à

$$\sigma_x - e_0a^2 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} = E_{SWNT} \left(-z \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) \quad (21)$$

Où E_{SWNT} est le module de Young de nanotubes monocouches, w est le déplacement transversal. Ainsi, le coefficient (e_0a) dans la modélisation a un effet de petite taille

sur la réponse des nanostructures. En outre, e_0 est une constante appropriée à chaque matériau, et a est une longueur interne caractéristique du matériau (par exemple, la longueur de la liaison C-C, la distance granulaire).

Tu et Ou-Yang [16] ont indiqué que la relation entre le module de Young de nanotubes de carbone multicouches (MWCNT) et le nombre de couches N' peut être exprimé comme :

$$E_{\text{MWNT}} = \frac{N'}{(N' - 1 + t/h)} \frac{t}{h} E_{\text{SWNT}} \quad (22)$$

Où, E_{MWNT} , E_{SWNT} , t , N' et h sont le module Young de nanotubes multicouches, le module de Young de nanotubes monocouches, l'épaisseur de la couche effective des nanotubes monocouches, le nombre de couches et la distance entre les couches. Dans le cas de nanotubes de carbone monocouche, $N' = 1$ donc. $E_{\text{MWNT}} = E_{\text{SWNT}}$.

Les modules de Young utilisés dans cette étude de trois types de nanotubes de carbone double couches (DWCNT), armchair, zigzag et chiral tubules, sont calculés par Bao Wen Xing et al. [17] basé sur la simulation de la dynamique moléculaire (MD).

La simulation de la dynamique moléculaire (MD) consiste à calculer l'évolution d'un système de particules au cours du temps. Ces simulations servent de modèles structuraux et dynamiques pour la compréhension de résultats expérimentaux.

Les résultats numériques sont en accord avec les expérimentaux existants [18,19].

Le moment de flexion résultant M et la force de cisaillement peuvent être définis par:

$$M = \int_A z \sigma_x dA, \quad T = \frac{dM}{dx} \quad (23)$$

A partir des relations (21) et (23) on peut avoir

$$\sigma_x - e_0 a^2 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} = E \left(-z \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) \quad (24)$$

$$M = \int_A z e_0 a^2 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA - \int_A E z \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} dA \quad (25)$$

$$M = e0a^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} - \int_A Ez \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} dA \quad (26)$$

$$\left[1 - e0a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] M = -EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad (27)$$

Où $(I = \int_A z^2 dA)$ est le moment d'inertie.

Substituons l'équation. (20) et (23) dans (27), on aura :

$$M = -EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + (e0a)^2 \left[\rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - P(x) \right] \quad (28)$$

$$T = -EI \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} + (e0a)^2 \left[\rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} - \frac{\partial P(x)}{\partial x} \right] \quad (29)$$

On substituant l'équation (29) dans l'équation (20) pour obtenir l'équation différentielle générale de la vibration transversale d'un nanotube de carbone multicouche basé sur la théorie d'Euler-Bernoulli:

$$EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \left(1 - e0a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left(\rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - P(x) \right) = 0 \quad (30)$$

Les nanotubes de carbone double couches sont des matériaux élastique traditionnel se constitué d'un arrangement concentrique de deux nanotube, avec la force d'interaction de van der waals entre les deux couches. En supposant que les couches intérieur et extérieur ont la même épaisseur et des constantes de matériau effectif, l'équation (30) peut être utilisée pour chacun des couches intérieures et extérieures des nanotubes de carbone double couches. Par conséquence, l'équation générale de la vibration transversale du nanotube intérieure et extérieure respectivement est donnée comme suit :

$$\begin{cases} EI_1 \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} + \left(1 - e0a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left(\rho A_1 \frac{\partial^2 w_1}{\partial t^2} - P_{12}(x) \right) = 0 \\ EI_2 \frac{\partial^4 w_2}{\partial x^4} + \left(1 - e0a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left(\rho A_2 \frac{\partial^2 w_2}{\partial t^2} - P_{21}(x) \right) = 0 \end{cases} \quad (31)$$

Où les indices 1 et 2 désignent le nanotube intérieur et extérieur respectivement,

P_{12} , P_{21} sont les pressions axiales de Van der Waals par unité de longueur axiale exercée sur le nanotube intérieur par le nanotube extérieur et le nanotube extérieur par

le nanotube intérieur respectivement. la force d'interaction van der waals à un point quelconque entre deux tubes est une fonction linéaire comme suit :

$$\begin{cases} P_{12} = c(w_2 - w_1) \\ P_{21} = -P_{12} = -c(w_2 - w_1) \end{cases} \quad (32)$$

Où (c) est le coefficient d'interaction intertube par unité de longueur entre deux tubes, ce qui peut être estimé par Gafour et al [20]:

$$c = \frac{320(d_{in})_{\text{erg/cm}^2}}{0.16a^2} \quad (33)$$

Où (d_{in}) est le rayon du nanotube intérieur.

Considérons un nanotube de carbone à double paroi de longueur L dans lequel les deux extrémités sont simplement appuyées, de sorte que les modes vibratoires du (DWCNT) sont sous la forme [21].

$$w_1 = \overline{W}_1 e^{i\omega t} \sin(\lambda x), \quad w_2 = \overline{W}_2 e^{i\omega t} \sin(\lambda x), \quad \text{et } \lambda = \frac{N\pi}{L}, \quad (k = 1, 2, \dots) \quad (34)$$

Où $(\overline{W}_1 \text{ et } \overline{W}_2)$ sont les amplitudes de déflexions des tubes intérieurs et externes.

Substituant l'équation (32) et l'équation (34) dans l'équation (31) nous donne facilement le système homogène.

$$\begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \overline{W}_1 \\ \overline{W}_2 \end{Bmatrix} = 0 \quad (35)$$

Où

$$\begin{cases} K_{11} = EI_1 \lambda^4 + (1 + e0a^2 \lambda^2)(-\rho A_1 \omega^2 + c) \\ K_{12} = K_{21} = -c(1 + e0a^2 \lambda^2) \\ K_{22} = EI_2 \lambda^4 + (1 + e0a^2 \lambda^2)(-\rho A_2 \omega^2 + c) \end{cases}$$

La solution de l'équation (35) pour un nanotube de carbone double couches (DWCNT) dans lequel les effets de différents paramètres sont montrés est sous la forme :

$$\omega^2 = \frac{1}{2}(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4\beta}) \quad (36)$$

Où (α et β) sont définies par:

$$\alpha = \frac{c(A_1 + A_2)}{\rho A_1 A_2} + \frac{E\lambda^4(A_1 I_2 + A_2 I_1)}{\rho A_1 A_2(1 + (e_0 a)^2 \lambda^2)}$$

$$\beta = c\lambda^4 \frac{(E_1 I_2 + E_2 I_1)}{\rho^2 A_1 A_2(1 + (e_0 a)^2 \lambda^2)} + \lambda^8 \frac{E^2 I_1 I_2}{\rho^2 A_1 A_2(1 + (e_0 a)^2 \lambda^2)^2}$$

6. Conclusion:

Dans ce chapitre, nous avons vu les différentes théories et modèles qu'on peut exploiter sur notre étude qui est sur la vibration libre à savoir la théorie classique des poutres (Euler-Bernoulli), la théorie de déformation en cisaillement du premier ordre (Timoshenko) et la théorie de déformation de cisaillement d'ordre élevé.

Notre étude était basé sur le modèle d'élasticité non-local d'Euler-Bernoulli afin de simplifier les calculs et de trouver l'équation différentielle générale de la vibration transversale d'un nanotube de carbone double couche basé sur cette théorie.

Références

- [1] B. Kheroubi, L'étude de l'effet multi-échelle de nouveaux matériaux et applications technologiques thèse doctorat, université djilali liabes de sidi bel abbes, 2016.
- [2] L. Dufort, (2000), "Etude de cisaillement transverse dans des poutres stratifiés et sandwich: Aspect théorique et expérimentaux ", thèse doctorat, université Blaise Pascal-Clermont II.
- [3] S. H. Tagrara, Analyse de la flexion statique, le flambement et la vibration des structures composites renforcées par des nanotubes de carbone, thèse doctorat, université djilali liabes de sidi bel abbes, 2016.
- [4] S.P.Timoshenko et J.M.Gere,(1972), "Mechanics of Materials ". New York: D.VanNostrand Company.
- [5] J.N. Reddy, "A simple higher-order theory for laminated composite plates", Journal of Applied Mechanics. 51 (4): 745-752 (1984).
- [6] M. Levinson, "An accurate simple theory of the statics and dynamics of elastic plates", Mechanics Research Communications, 343–350 (1980).
- [7] M.V.V. Murthy, "An improved transverse shear deformation theory for laminated anisotropic plate. Rapport technique", NASA (1981).
- [8] K.S. Afaq, " Développement d'un nouveau modèle pour les structures composites multicouches et sandwichs avec prise en compte du cisaillement transverse et des effets de bord". PhD thesis, Université Toulouse III - Paul Sabatier (2003).
- [9] M. Aydogdu, "A new shear deformation theory for laminated composite plates", Composite Structures, 94–101 (2009).
- [10] A.C. Eringen, (1983), "On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves", J Appl Phys, 54, 4703–4710.
- [11] J.F. Doyle, (1997) "Wave Propagation in Structures", 2nd edition, Springer, New York,.
- [12] M. Bennoun, M.S.A. Houari, and Tounsi, A. (2016), "A novel five variable refined plate theory for vibration analysis of functionally graded sandwich plates", Mech. Adv. Mater. Struct., 23(4), 423-431.
- [13] A. Hamidi, M.S.A. Houari, S.R. Mahmoud, and, A. Tounsi, (2015), "A sinusoidal plate theory with 5-unknowns and stretching effect for thermomechanical bending of functionally graded sandwich plates", Steel Compos. Struct., 18(1), 235 - 253.
- [14] H. Bellifa, K.H. Benrahou, L. Hadji, M.S.A. Houari, and , A. Tounsi (2016), "Bending and free vibration analysis of functionally graded plates using a simple shear deformation

theory and the concept the neutral surface position", J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng., 38, 265-275.

[15] K.S. Al-Basyouni, A. Tounsi, and S.R. Mahmoud, (2015), "Size dependent bending and vibration analysis of functionally graded micro beams based on modified couple stress theory and neutral surface position", Compos. Struct., 125, 621-630.

[16] Z.C. Tu, and Ou-Yang, Z.C. (2002), "Single-walled and multiwalled carbon nanotubes viewed as elastic tubes with the effective Young's modulus dependent on layer number", Phys. Rev. B, 65, 233407.

[17] W.X. Bao Ch., Zhu, Ch. and W.Zh. Cui, (2004), "Simulation of Young's modulus of single- alled carbon nanotubes by molecular dynamics", Physica B, 352, 156-163.

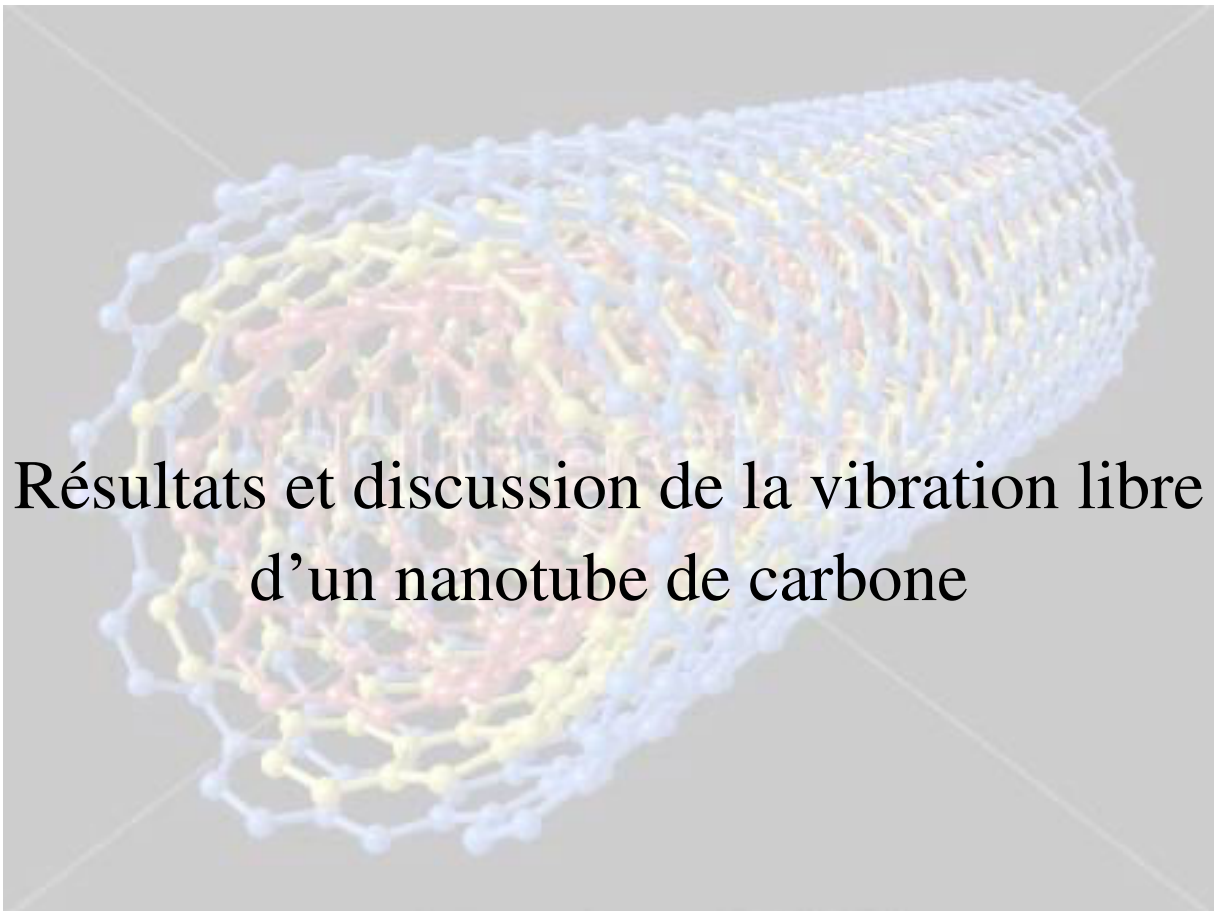
[18] J.Z. Liu, Q.S. Zheng, and Q. Jiang, (2001), "Effect of a rippling mode on resonances of carbon nanotubes", Phys. Rev. Lett., 86, 4843.

[19] T.W. Tomblor, C.W. Zhou, L. Alexseyev, et al. (2000), "Reversible nanotube electro-mechanical characteristics under local probe manipulation", Nature, 405, 769.

[20] Y. Gafour, M. Zidour, A. Tounsi, H. Heireche, and A. Semmah, (2013), "Sound wave propagation in zigzag double-walled carbon nanotubes embedded in an elastic medium using nonlocal elasticity theory", Physica E, 48, 118-123.

[21] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, and E.A. Adda Bedia, (2008), "Sound wave propagation in single-walled carbon nanotubes using nonlocal elasticity", Physica E., 40, 2791.

Chapitre IV



Résultats et discussion de la vibration libre
d'un nanotube de carbone

1. Introduction

Dans ce chapitre on va discuter sur les résultats numériques obtenus au cours de ce travail analytique concernant la vibration libre des nanotubes de carbone double couches sur la base de la théorie d'Euler–Bernoulli, comparé au celle de littérature, tous les calculs sont effectués théoriquement.

2. Discussions

Sur la base des données obtenues dans le chapitre 3 avec la théorie de poutre non local d'Euler-Bernoulli, l'effet du rapport (L/d) d'un nanotube de carbone double couches (DWCNTs), le nombre de modes de vibration, le coefficient de petite échelle et la chiralité du nanotube de carbone sur les propriétés de vibration sont discuté ici. Les paramètres utilisés dans les calculs des nanotubes de carbone double couches (DWCNT) de type zigzag, armchair, et chiral, sont les suivants: l'épaisseur effective des (CNTs) prise pour être 0.285 nm, la masse volumique $\rho = 2.3 \text{ g / cm}^3$, la distance de couche $h = 0.34 \text{ nm}$ et le coefficient de Poisson $\nu = 0.19$ [1,2].

Les modules de Young de nanotube de carbones monocouches (SWCNTs) et des nanotubes de carbone double couches (DWCNTs) utilisé dans cette étude (tableau 4.1), sont calculés par Bao Wen Xing et al.[3] et Tu et Ou-Yang [4] respectivement. Les résultats montrent la diminution du module de Young pour les nanotubes de carbone double couches (DWCNTs) pour toutes les chiralités du nanotube de. La raison de ce phénomène est attribuée aux faibles forces de van der Waals entre le tube intérieur et le tube extérieure.

Tableau 4.1: liste des valeurs du module de Young des nanotubes de carbone mono et double couches pour différentes chiralités.

(n,m)	Young's modulus (SWNT) (GPa) [3]	Young's modulus (DWNT) (GPa) [4]
Armchair		
(8,8) (12,12)	934.960	852.684
(10,10) (15,15)	935.470	853.149
(12,12) (17,17)	935.462	853.141
(14,14) (19,19)	935.454	853.134
(16,16) (21,21)	939.515	856.838
(18,18) (23,23)	934.727	852.471
(20,20) (25,25)	935.048	852.764
Zigzag		
(14,0) (23,0)	939.032	856.397
(17,0) (26,0)	938.553	855.960
(21,0) (30,0)	936.936	854.486
(24,0) (33,0)	934.201	851.991
(28,0) (37,0)	932.626	850.555
(31,0) (40,0)	932.598	850.529
(35,0) (44,0)	933.061	850.952
Chiral		
(12,6) (18,10)	927.671	846.036
(14,6) (20,10)	921.616	840.514
(16,8) (22,12)	928.013	846.348
(18,9) (24,13)	927.113	845.527
(20,12) (26,16)	904.353	824.770
(24,11) (30,15)	910.605	830.472
(30,8) (36,12)	908.792	828.818

Pour étudier l'effet du paramètre d'échelle sur les vibrations des nanotubes de carbone double-couches, les résultats incluant et excluant le paramètre non local sont comparés. Il en résulte que les rapports des résultats sont respectivement donnés par :

$$\chi = \frac{\omega_{NE}}{\omega_{LE}} \quad (1)$$

Où $(\omega_{LE}, \omega_{NE})$ sont la fréquence basée sur le modèle local et non local d'Euler Bernoulli respectivement.

$$\text{Tel que : } \omega^2 = \frac{1}{2}(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4\beta})$$

Pour les fréquences non locales

$$\alpha = \frac{c(A_1 + A_2)}{\rho A_1 A_2} + \frac{E\lambda^4(A_1 I_2 + A_2 I_1)}{\rho A_1 A_2(1 + (e_0 a)^2 \lambda^2)}$$

$$\beta = c\lambda^4 \frac{(E_1 I_2 + E_2 I_1)}{\rho^2 A_1 A_2(1 + (e_0 a)^2 \lambda^2)} + \lambda^8 \frac{E^2 I_1 I_2}{\rho^2 A_1 A_2(1 + (e_0 a)^2 \lambda^2)^2}$$

Pour les fréquences locales

$$\alpha = \frac{c(A_1 + A_2)}{\rho A_1 A_2} + \frac{E\lambda^4(A_1 I_2 + A_2 I_1)}{\rho A_1 A_2}$$

$$\beta = c\lambda^4 \frac{(E_1 I_2 + E_2 I_1)}{\rho^2 A_1 A_2} + \lambda^8 \frac{E^2 I_1 I_2}{\rho^2 A_1 A_2}$$

Dans cette étude, les (figures 4.1- 4.3) illustrent la dépendance du rapport de basse fréquence sur la chiralité des trois types de nanotubes de carbone à double couches (DWCNTs), armchaire, zigzag et chiral pour différentes valeurs de nombre de mode. Le rapport de la longueur au diamètre, L / d , est de 30 et le coefficient de petite échelle $e_0 a = 2\text{nm}$. Le rapport de fréquence (χ) sert d'indice pour évaluer quantitativement l'effet d'échelle sur la solution de vibration CNT. Cela signifie que l'application du modèle de poutre d'Euler Bernoulli local pour analyser le nanotube de carbone CNT conduirait à une surestimation de la fréquence si l'effet d'échelle entre les différents atomes de carbone dans les NTC est négligé.

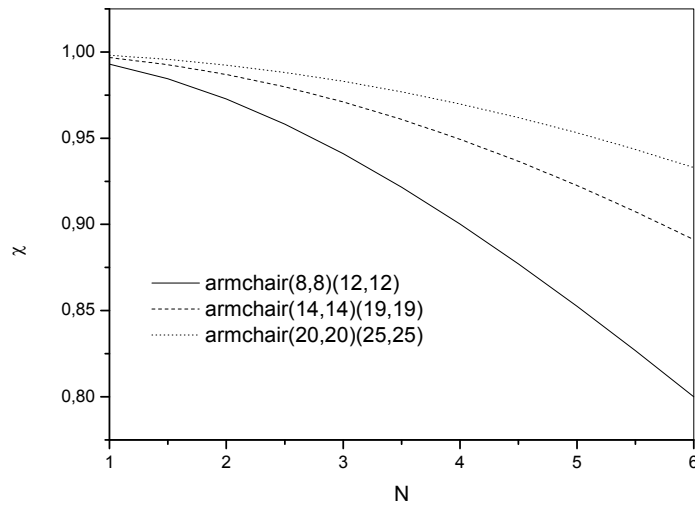


Figure 4. 1: Relation entre le rapport de basse fréquence de DWCNT, la chiralité du nanotube de carbone de type armchair et le numéro de mode; Les valeurs de (L/d) sont 30 et $(e_0a = 2\text{nm})$.

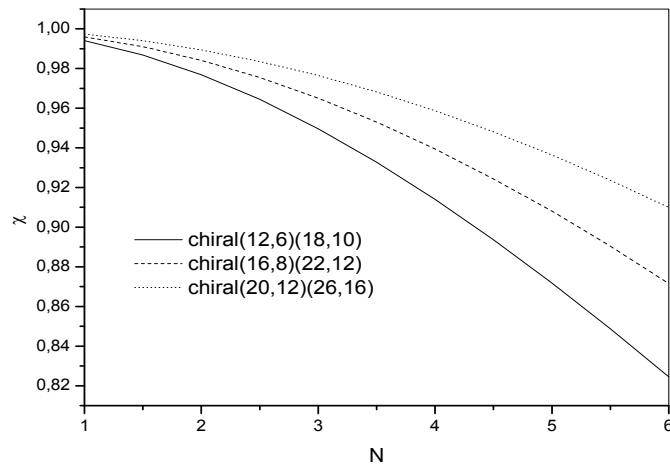


Figure 4. 2: Relation entre le rapport de basse fréquence de DWCNT, la chiralité du nanotube de carbone de type chiral et le numéro de mode; Les valeurs de (L/d) sont 30 et $(e_0a = 2\text{nm})$.

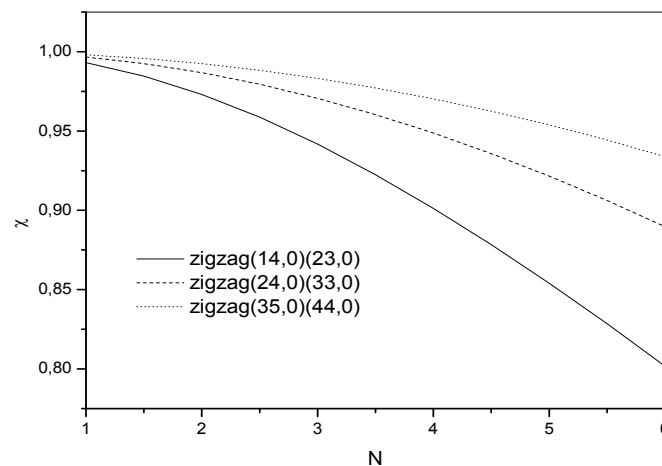


Figure 4.3: Relation entre le rapport de basse fréquence de DWCNT, la chiralité du nanotube de carbone de type zigzag et le nombre de mode; Les valeurs de (L / d) sont 30 et ($e_0a = 2\text{nm}$).

On observe clairement dans la (Figure 4.1) que les plages de rapport de fréquence de ces chiralités des nanotubes de carbone à double couches (DWCNTs) sont assez différentes, l'écart étant alors l'harmonie pour l'armchair (8,8) (12,12), mais la gamme est adjacente pour l'armchair (20,20) (25,25). La même variation de fréquence est clairement visible à partir des figures 4.2 et 4.3 pour les nanotubes de carbone de types chiral et zigzag. L'effet d'échelle diminue avec l'augmentation de l'indice de translation (n, m) et devient plus significatif avec l'augmentation du mode vibrationnel N .

La raison de cette différence est peut-être attribuée à l'augmentation ou à la diminution du diamètre des nanotubes de carbone.

L'effet du nombre de modes (N) sur les rapports de fréquence (χ) pour différentes chiralités de nanotubes de carbone double couches est démontré dans (figure 4.4) avec un rapport d'aspect ($L / d = 30$) et un coefficient de petite échelle ($e_0a = 2 \text{ nm}$). Sur cette figure, on observe qu'à mesure que le nombre de modes augmente, l'effet d'échelle sur les rapports de fréquence (χ_N) augmente et diminue avec l'augmentation de l'indice de translation (n, m). Il est clair que les gammes des rapports de fréquence (χ) sont très différentes, la gamme est la plus petite pour l'armchair (20,20) (25,25),

mais la gamme est la plus grande pour le zigzag (14,0) (23 , 0). La raison de cette différence est peut-être attribuée à l'augmentation ou à la diminution du diamètre des nanotubes de carbone.

L'effet d'échelle devient évident pour le nombre de mode de vibration plus élevé. Cette signification dans les modes supérieurs est attribuée au diamètre et à l'influence de la petite longueur d'onde. Pour les plus petites longueurs d'onde, les interactions entre atomes augmentent et ces charges augmentent l'effet non local.

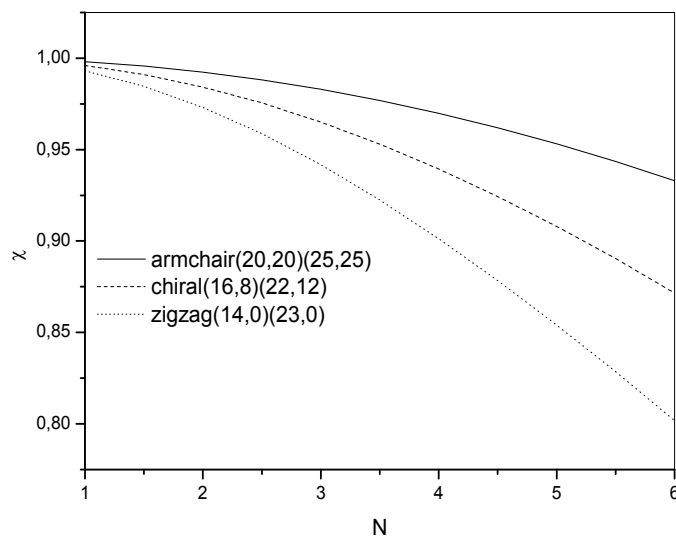


Figure 4.4: Relation entre le rapport de basse fréquence de DWCNT et le nombre de modes pour les différences de chiralité des nanotubes de carbone; Les valeurs de (L / d) sont 30 et $(e_0 a = 2\text{nm})$.

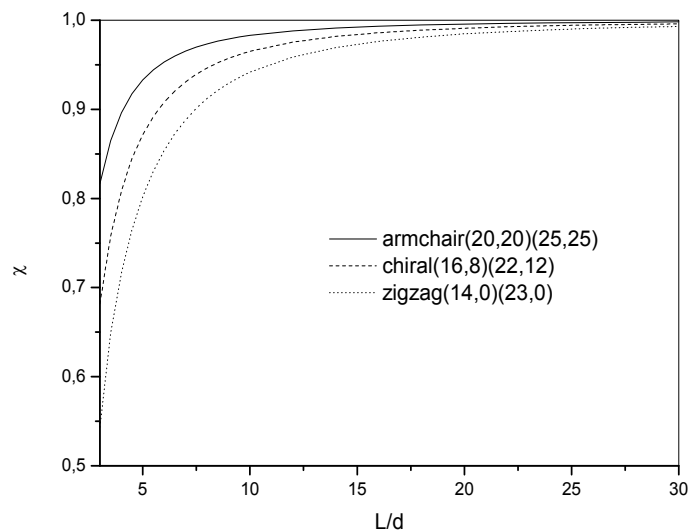


Figure 4.5: effet du rapport (L / d) et de la chiralité du nanotube de carbone double couches sur le rapport de basse fréquence de DWCNT avec ($e_0a = 2\text{nm}$, $N = 2$).

La figure 4.5 montre l'effet du rapport d'aspect (L / d) sur les rapports de fréquence (χ) pour différentes chiralités de nanotubes de carbone double couches (DWCNTs), armchair, zigzag et chiral avec un coefficient de petite échelle ($e_0a = 2\text{ nm}$) et $N = 2$. Sur ces figures, nous présentons l'effet du rapport (L/d) des nanotubes de carbone double couches (DWCNTs) sur les rapports de fréquence (χ). L'effet d'échelle augmente en passant de l'armchair (20,20) à la chiralité chirale (16,8) puis en zigzag (14,0) lorsque le diamètre du nanotube diminue. Cette augmentation de l'effet d'échelle est plus exprimée lorsque le nanotube est court. Cependant, on observe que les rapports de fréquence (χ) sont plus affectés par la longueur du nanotube. La raison de ce phénomène est qu'un nanotube de carbone avec un diamètre plus grand ou plus long a une plus grande courbure, ce qui entraîne une distorsion plus importante des liaisons (C-C).

Les effets de la chiralité, du nombre de mode et du rapport (L/d) présentés dans les figures précédentes sont détaillés dans les tableaux (4.2- 4.4). Pour les divers modes de chiralité, armchair, chiral et zigzag pour les premiers et deuxièmes modes avec différents rapports longueur / diamètre basés sur le modèle de poutre d'Euler Bernoulli non local sont listés dans (Tableau 4.2- 4.4). Les résultats montrent la dépendance des

différentes chiralités du nanotube de carbone, Aspect Ratio et le nombre de modes vibrationnels sur les rapports de fréquence (χ).

Tableau 4.2: liste des valeurs du rapport de basse fréquence pour différents chiralité armchair, nombre de mode (N) et rapports d'aspect (L / d) de nanotube de carbone, lorsque la valeur des coefficients d'échelle (e_0a) est 2nm.

Armchair	L/d =10		L/d =15	
	N=1	N=2	N=1	N=2
(8,8) (12,12)	0.94101	0.80002	0.97275	0.90018
(10,10) (15,15)	0.95472	0.83938	0.97932	0.92228
(12,12) (17,17)	0.96421	0.86877	0.98378	0.93796
(14,14) (19,19)	0.97104	0.89113	0.98695	0.94943
(16,16) (21,21)	0.97610	0.90840	0.98928	0.95804
(18,18) (23,23)	0.97996	0.92205	0.99104	0.96466
(20,20) (25,25)	0.98296	0.93292	0.99239	0.96985

Tableau 4.3: liste des valeurs du rapport de basse fréquence pour différents chiralité chiral, nombre de mode (N) et rapports d'aspect (L / d) de nanotube de carbone, lorsque la valeur des coefficients d'échelle (e_0a) est 2nm.

Chiral	L/d =10		L/d =15	
	N=1	N=2	N=1	N=2
(12,6) (18,10)	0.94964	0.82448	0.97690	0.91403
(14,6) (20,10)	0.95618	0.84391	0.98000	0.92469
(16,8) (22,12)	0.96508	0.87161	0.98419	0.93942
(18,9) (24,13)	0.97029	0.88869	0.98661	0.94818
(20,12) (26,16)	0.97648	0.90990	0.98945	0.95870
(24,11) (30,15)	0.97979	0.92157	0.99096	0.96439
(30,8) (36,12)	0.98301	0.93321	0.99242	0.96995

Tableau 4.4: liste des valeurs du rapport de basse fréquence pour différents chiralité zigzag, nombre de mode (N) et rapports d'aspect (L/d) de nanotube de carbone, lorsque la valeur des coefficients d'échelle (e_0a) est 2nm.

Zigzag	$L/d = 10$		$L/d = 15$	
	N=1	N=2	N=1	N=2
(14,0) (23,0)	0.94169	0.80184	0.97308	0.90126
(17,0) (26,0)	0.95365	0.83617	0.97882	0.92054
(21,0) (30,0)	0.96470	0.87033	0.98401	0.93878
(24,0) (33,0)	0.97062	0.88972	0.98676	0.94872
(28,0) (37,0)	0.97647	0.90970	0.98944	0.95866
(31,0) (40,0)	0.97979	0.92144	0.99096	0.96436
(35,0) (44,0)	0.98323	0.93393	0.99252	0.97032

3. Conclusion

Ce travail étudie la vibration des nanotubes de carbone double couches (DWCNTs) basée sur la théorie de l'élasticité non locale d'Eringen et la théorie de la poutre d'Euler-Bernoulli. On est bien remarqué l'influence du coefficient de petite échelle, du nombre de modes de vibration, du rapport (L/d) et de la chiralité sur la fréquence du nanotube de carbone de type, armchair, zigzag et chiral. Les résultats obtenus ont montré la dépendance et la relation entre les propriétés de vibration, la chiralité et le paramètre non local des DWCNT. Avec les résultats obtenus, on a discuté en détail les propriétés dynamiques de la poutre d'un nanotube de carbone double couche (DWCNT), ils sont très différentes de celles prévues par l'élasticité classique lorsque l'effet non-local devient considérables.

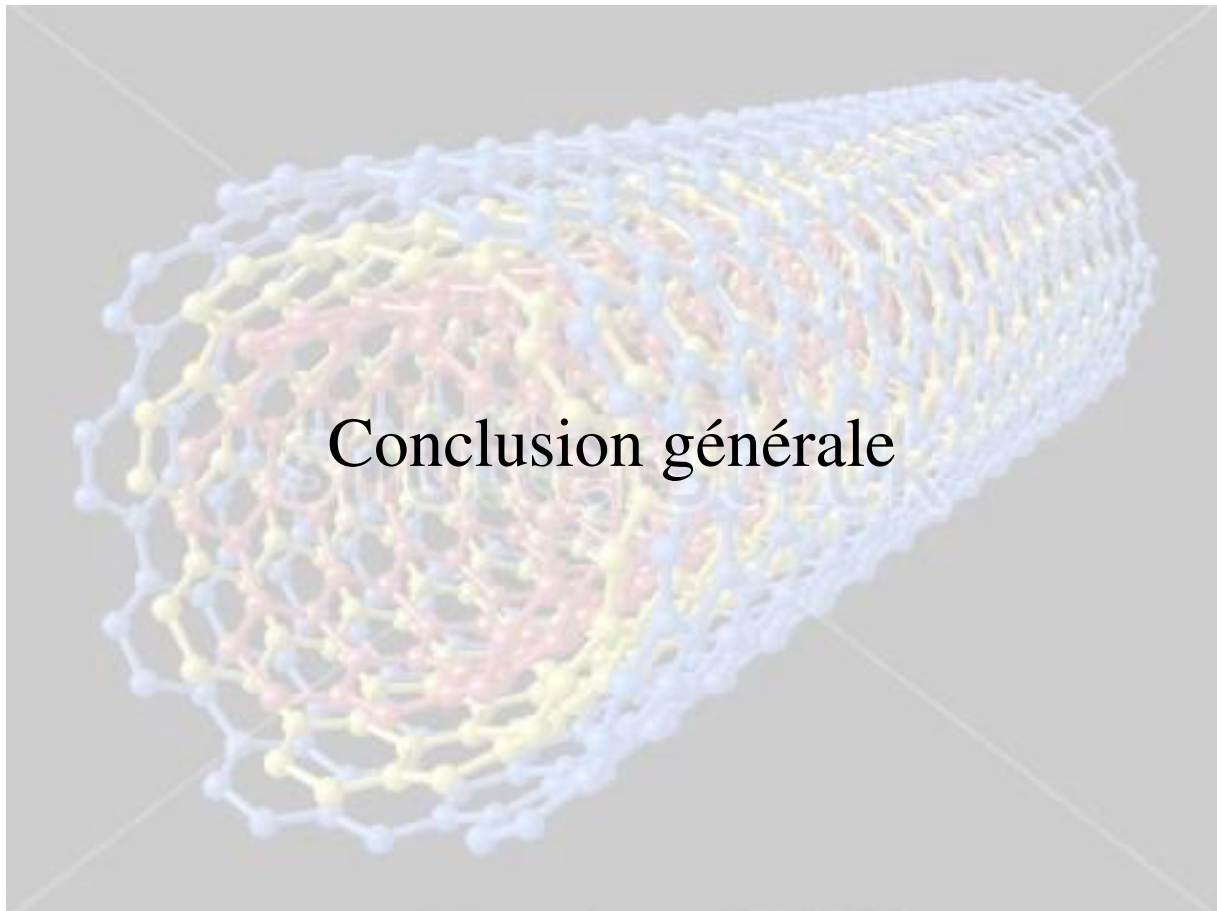
Selon l'étude, on observe que lorsque le nombre de modes augmente, les effets à petite échelle augmentent. La raison de ces augmentations est attribuée à l'influence de la petite longueur d'onde lorsque les interactions entre atomes augmentent. De plus, la basse fréquence est également affectée par l'augmentation ou la diminution de la longueur ou du diamètre de (DWCNTs). Cette affection est plus prononcée pour les

nanotubes courts. La raison de ce phénomène est qu'un nanotube de carbone de plus grande longueur a une plus grande courbure, ce qui entraîne une distorsion plus importante des liaisons (C-C).

La recherche présentée peut être utile dans l'application des DWCNT, tels que les résonateurs à très haute fréquence, les dispositifs d'émission d'électrons, les oscillateurs à haute fréquence et les capteurs mécaniques.

Références

- [1] Naceri, M., Zidour, M., Semmah, A., Houari, S.A., Benzair, A. and Tounsi, A. (2011), “Sound wave propagation in armchair single walled carbon nanotubes under thermal environment”, *Journal of applied physics*, 110, 124322.
- [2] Boumia, L., Zidour, M., Benzair, A. and Tounsi, A. (2014), “Timoshenko beam model for vibration analysis of chiral single-walled carbon nanotubes”, *Physica E*, 59, 186–191.
- [3] Bao, W.X., Zhu, Ch.Ch. and Cui, W. Zh. (2004), “Simulation of Young’s modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics”, *Physica B*, 352, 156–163
- [4] Tu Z.C. and Ou-Yang Z.C. (2002), “Single-walled and multiwalled carbon nanotubes viewed as elastic tubes with the effective Young’s modulus dependent on layer number”, *Phys Rev B*, 65, 233407.



www.shutterstock.com · 104594399

Conclusion générale

Dans le cadre de ce travail nous avons développé une étude analytique dépend de la vibration libre des nanotubes de carbone double couches en utilisant la théorie d'élasticité nonlocal. Cette étude détermine les différents paramètres pouvant influencer la distribution de la vibration libre d'un nanotube de carbone par l'utilisation du modèle élastique nonlocal de la poutre Euler-Bernoulli.

Ces deux modèles offrent la possibilité de déterminer la distribution des rapports de fréquences (ω_N , ω_L) d'un nanotube de carbone isolé. A titre d'exemple nous avons changé à chaque fois le paramètre (e_0a), le nombre de mode (N), le rapport (L/d), et le nombre de maille (n).

On a constaté que L'effet d'échelle augmente lorsque le diamètre du nanotube diminue. Cette augmentation de l'effet d'échelle est plus exprimée lorsque le nanotube est court. Cependant, on observe que les rapports de fréquence (χ) sont plus affectés par la longueur du nanotube. La raison de ce phénomène est qu'un nanotube de carbone avec un diamètre plus grand ou sa longueur plus grand a une plus grande courbure, ce qui entraîne une distorsion plus importante des liaisons (C-C).

D'autre par, sur la base de la théorie nonlocal de Euler-Bernoulli pour un nanotube de carbone double couche qui est isolé et simplement appuyer nous avons conclu que les valeurs du rapport de fréquences (ω_N , ω_L) diminuent avec l'augmentation du nombre de mode (N) et augmentent avec l'augmentation du rapport (L/d) et l'indice de chiralité (n).

Ce phénomène signifie que pour un nanotube de carbone avec des indices de maille plus petites (n) a une grande courbure, ce qui entraîne une déformation plus importante de liaisons (C-C) du nanotube. Tandis que l'effet d'échelle devient moins important avec l'augmentation du rapport (L/d) Par conséquent, il est clair que l'effet à petite échelle est important pour les nanotubes courts.

Conclusion générale

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