

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

BADJI MOKHTAR ANNABA-UNIVERSITY
جامعة

UNIVERSITE BADJI MOKHTAR ANNABA



باجي مختار عنابة

Année : 2022

Faculté : Sciences de L'ingéniorat

Département : mécanique

MÉMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de : MASTER

Intitulé :

Modélisation et caractérisation des polymères renforcés par des nanotubes de carbone avec application aux structures composites

Domaine : sciences et technologie

Filière : mécanique

Spécialité : construction mécanique

Présenté par : Talbi khouloud

DEVANT LE JURY

Encadrant : TEKILI SABAH

U.B.M Annaba

Jury de Soutenance :

Gouasmi saci

U.B.M Annaba

Kheireddine lamri

U.B.M Annaba

Laissaoui rachid

U.B.M Annaba

Remerciement



*Le plus grand merci revient à Dieu le tout puissant qui lui
seul*

M'a aidé et facilité tous les chemins afin de réaliser ce travail.

*Je exprime mes profondes gratitude à nos parents pour leurs
Encouragements leur soutien et pour les sacrifices qu'ils ont
endurés.*

*Je tiens à remercier infiniment mon encadreur M^{lle}. Tekeli
saliba Qui m'a conseillé et m'a aidé.*

*Je tiens à remercier tous qui m'aident de près ou de
Loin la réalisation de ce modeste travail.*



Dédicace



*Je dédie ce modeste travail avant
tout à les deux personnes les plus chère
au monde ma chère mère et mon père
A mes frères et sœurs et mon mari et
tous les membres de ma famille A tous
mes amis pour leurs soutiens A tous
mes enseignants et mes collègues de ma*



promotion

Résumé :

En raison de leurs propriétés mécaniques et physiques supérieures, les nanotubes de carbone semblent être très prometteurs en tant que matériau de renforcement idéal pour les composites à haute résistance et à faible densité. Cependant, dans la plupart des résultats expérimentaux à ce jour, seules des améliorations modestes de la résistance et de la rigidité ont été obtenues en incorporant des nanotubes de carbone dans des polymères. Dans le présent mémoire, l'effet de rigidité des nanotubes de carbone est étudié quantitativement par des méthodes de micromécanique. Particulier, les effets de l'ondulation et de l'agglomération des nanotubes de carbone sur les modules effectifs des composites renforcées de nanotubes de carbone droits et orientés aléatoirement.

ملخص

نظرًا لخصائصها الميكانيكية والفيزيائية الفائقة ، يبدو أن الأنابيب النانوية الكربونية تحمل وعودًا كبيرة باعتبارها مادة تقوية مثالية للمركبات عالية القوة ومنخفضة الكثافة. ومع ذلك ، في معظم النتائج التجريبية حتى الآن ، تم تحقيق تحسينات متواضعة فقط في القوة والصلابة من خلال تضمين الأنابيب النانوية الكربونية في البوليمرات. في هذه الأطروحة ، تمت دراسة تأثير الصلابة للأنابيب النانوية الكربونية كميًا بالطرق الميكانيكية الدقيقة. على وجه الخصوص ، تأثيرات تموج وتكتل الأنابيب النانوية الكربونية على المعادلات الفعالة للمركبات المقواة بأنابيب نانوية كربونية مستقيمة وعشوائية التوجه.

ABSTRACT:

Due to their superior mechanical and physical properties, carbon nanotubes seem to hold great promise as an ideal reinforcement material for high-strength, low-density composites. However, in most experimental results to date, only modest improvements in strength and stiffness have been achieved by incorporating carbon nanotubes into polymers. In this thesis, the stiffness effect of carbon nanotubes is studied quantitatively by micromechanical methods. In particular, the effects of carbon nanotube waviness and agglomeration on the effective moduli of composites reinforced with straight and randomly oriented carbon nanotubes.

- Polymérisation in situ25
- Mélange en solution25
- Mélange à l'état fondu26
- I.2.6 Procédés de fabrication27
 - a. Nano composites à base de nanotube de carbone27
 - b. Nano composites à base de nanoparticules28
 - c. Nano composites à base d'argile dans une matrice polymère27
- I.3 Conclusion29

Chapitre 02 : L'effet de l'ondulation et de l'agglomération des nanotubes de carbone

- Introduction générale.....31
- 2. NTC droits.....31.
 - 2.1 Composites renforcés avec des NTC alignés et droits.....31
 - 2.2.2 Composites renforcés avec des NTC droits et orientés aléatoirement.36
 - 2.3 Modèle de micromécanique pour les NTC courbes.....39
 - 2.3.1 Composites renforcés avec des NTC alignés et incurvés.....39
 - 2.3.3 Composites renforcés avec des NTC incurvés et orientés aléatoirement...40
 - 2.4 Agglomération des CNT.....40
 - 2.4.1 Un modèle d'agglomération à deux paramètres.....41
 - 2.4.2. Nanotubes alignés.....44

2.4.3 Nanotubes orientés aléatoirement.....	46
2.4.4 Agglomération de nanotubes orientés aléatoirement.....	47
2.4.4.1 Agglomération complète des NTC ($\zeta=1$).....	52
2.5.1 Nanotubes alignés.....	58
2.5.2 Nanotubes orientés aléatoirement.....	61
2.5.3 Agglomération de nanotubes orientés aléatoirement.....	62
4.2.2 Agglomération partielle des NTC.....	66
2.6 Conclusion	68
Chapiter03 : Analyse et application des deux modèles :de Voigt et de Mori-Tanaka.	
3.1 Introduction.....	70
3.2 application.....	70
3.2.1donnes	70
3.2.2 Programme I.....	71
3.2.3 Résultats et analyse	73
3.3 Application II	75
3.3.1Données	75
3.3.2 Programme II.....	76
3.3.3 Résultats et analyse	77
3.4 Application III	78
3.4.1Données.....	78
3.4.2 Programme III.....	79

3.4.3 Résultats et analyse	80
3.5 Conclusion	81
4Conclusion générale	83

Introduction générale :

Ce travail consiste à l'étude des relations structure-propriétés de polymères nano-composites. Un nouveau modèle micromécanique est développée pour considérer l'influence de l'agglomération des nanotubes sur la rigidité effective est analysée. Des expressions analytiques sont dérivées pour la rigidité élastique effective des composites renforcés de nanotubes de carbone avec les effets d'ondulation et d'agglomération. La présente étude fournit non seulement la relation entre les propriétés effectives et la morphologie des composites renforcés de nanotubes de carbone, mais peut également être utile pour améliorer et adapter les propriétés mécaniques des composites de nanotubes. Le travail est divisée en trois grandes parties.

Dans le premier chapitre, nous avons fait une généralité sur les différents types de nanotubes de carbone, pour essayer de donner un petit aperçu sur le monde des nanotubes, leurs différentes propriétés, structures ainsi que leurs procédures de fabrication. Dans le deuxième chapitre, nous avons parlé des différentes théories de la dynamique moléculaire (DM) et concept et champ d'application des nano-composites et leur fabrication.

La deuxième partie est consacrée à l'effet de l'ondulation et de l'agglomération des nanotubes sur la propriété élastique des composites renforcées de nanotubes de carbone avec des explications profondes des deux modèles utilisés pour étudier ces nanomatériaux qui sont le modèle de Voigt et le modèle de Mori-Tanaka après nous avons fait des développements mathématiques détaillés pour démontrer les équations utilisées dans le calcul des différents caractéristiques mécaniques.

Le dernier et troisième chapitre, est consacré à une application avec les deux méthodes de Voigt et de Mori-Tanaka pour la caractérisation des propriétés mécaniques des nano-composites.

Pour cela un code sous Matlab a été élaboré pour l'étude des caractéristiques mécaniques des nano-composites.

Enfin une conclusion générale et recommandations sont présentées à la fin de ce Mémoire.

Chapitre 01 :
Généralités sur les nano composites

GENERALITES SUR LES NANO-COMPOSITES

I -1 Etat des structures nano-composites dans le monde :

Un nano composite est un matériau solide multi phase dont une des phases a au moins une dimension inférieure à 100 nanomètres. Un nano composite est généralement la combinaison d'une matrice massive avec une phase de renfort nanométrique de propriétés différentes résultantes des différences structurales et chimiques.

Les propriétés mécaniques des nano composites sont différentes de celles des matériaux composites traditionnels à cause d'un rapport surface/volume élevé du renfort, et de son facteur de forme important. Le renfort peut être sous forme de particules (minéraux), de feuillets (argiles exfoliées) ou de fibres (nanotubes de carbone). L'interface matrice-renfort présente une grande surface qui est typiquement un ordre de grandeur plus grand que celle dans le cas d'un matériau composite traditionnel. Cette interface implique qu'une faible quantité de renfort nanométrique peut avoir un effet observable sur les propriétés macroscopiques du composite. Par exemple, l'ajout de nanotubes de carbone améliore les conductivités électrique et thermique d'un matériau composite. D'autres types de nanoparticules peuvent conduire à l'amélioration des propriétés optiques, diélectriques, la résistance au feu, ou des propriétés mécaniques.

En général, le renfort nanométrique est dispersé dans la matrice lors de l'élaboration du composite. Le taux massique de nanoparticules introduit est souvent très faible (entre 0,5 % et 5 %) à cause du seuil de percolation faible. Ceci est typiquement le cas pour les nanoparticules non-sphériques avec un facteur de forme élevé (par exemple, les argiles sous forme de feuillets, ou les nanotubes de carbone sous forme de fibres).

Les nano composites sont une catégorie de nouveaux matériaux, des composites pour lesquels au moins l'un des constituants affiche des dimensions de l'ordre du nanomètre. Dans ce cas, la matrice est généralement massive et le renfort nanométrique. Un tel matériau peut se présenter sous la forme de particules, de trichites, de fibres, de tubes, etc.

C'est notamment grâce à un rapport surface/volume élevé de leur renfort que les nano composites intéressent chercheurs et industriels. De fait, une petite quantité de renfort peut suffire à obtenir un effet observable sur les propriétés macroscopiques du matériau composite. Ainsi, un renfort de nanotubes de carbone en améliore les conductivités électrique et thermique.

D'après un rapport de la « business communication », le marché mondial total pour les nan composites polymères, en 2003, Figure I.1, a atteint (11123 tonnes) pour une valeur de (90,8 millions de dollars). Avec une croissance annuelle estimée à (18,4%), il devrait représenter, en 2008, (36000 tonnes) soit une valeur de (211 millions de dollars). Même si les productions des thermodurcissables et thermoplastiques sont sensiblement les mêmes en volume

actuellement, la valeur totale des thermoplastiques est 3,5 fois plus importante. En 2008, les thermoplastiques devraient représenter (77%) de la production en volume et (85%) en valeur. Concernant le marché de l’emballage pour les nano composites, BRG Townsend Inc. prévoyait, en 2002, que la consommation pourrait atteindre (2200 tonnes) par an d’ici 2007 et (45000 tonnes) en 2011.

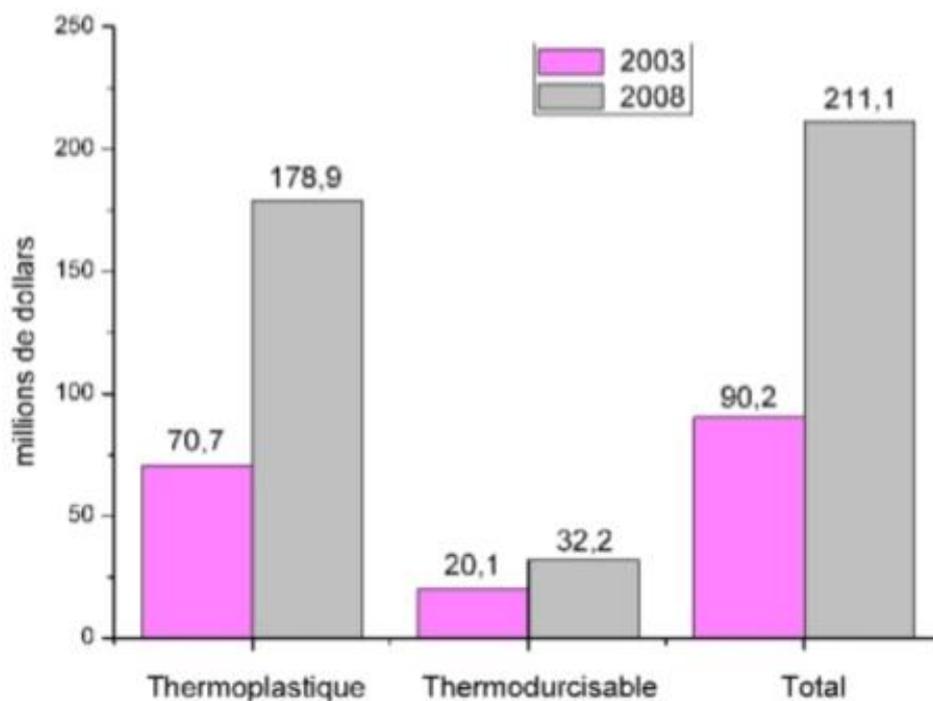


Figure I.1 Production mondiale (en tonnes) de nano composites polymères.
[Zidour 2012]

I -2 Concept et champ d’application des nano-composites :

Le terme de nano composite décrit un matériau biphasé dont la phase de renfort présente une dispersion de taille nanométrique. La matrice peut être métallique, céramique ou polymère ; dans le cadre de ce dossier, seul le dernier type sera considéré. D’un point de vue général, il est couramment admis de classer les nano composites suivant le facteur de forme de la charge incorporée (rapport entre la longueur et l’épaisseur ou le diamètre). Il est ainsi possible de

distinguer les nano composites à renforts lamellaires, fibrillaires, tubulaires, sphériques et autres.

Les nano composites sont les matériaux renforcés par des particules de taille nanométrique. Leur particularité, par rapport aux autres composites, est de présenter une très grande quantité d'interfaces, et une petite distance inter-particulaire. De fait, les phénomènes physiques, mis en jeu à la surface, vont jouer un rôle non négligeable dans le comportement mécanique des matériaux usinés. Les forces d'interaction entre particules de renforts mêmes faibles, peuvent donner lieu à une agrégation des charges, allant jusqu'à l'échelle de l'échantillon (percolation).

Le facteur de forme est le paramètre clé. Pour des valeurs comprises entre 50 à 2 000, les surfaces spécifiques sont de l'ordre de 750 à 800 m²/g dans le cas de renforts lamellaires. Ainsi, l'effet renforçateur des nanoparticules est non seulement lié à leur facteur de forme, mais aussi aux interactions matrice – particule qui en résultent. En faisant abstraction de la géométrie du renfort, un facteur de forme de 500 assure un effet renforçateur équivalent à un composite à fibres longues. En outre, lorsque leur fraction volumique est supérieure à une fraction volumique critique ϕ_m , des interactions fortes entre renforts apparaissent.

Il s'avère que les nano composites et le polymère sont source de progrès pour l'industrie mécanique. En associant les deux, nous obtenons de nouvelles matières synonymes de progrès pour la mécanique. Dans ce qui suit, il nous apparaît judicieux de faire une vulgarisation de ce concept.

Un polymère pur, très performant à température ambiante, verra souvent ses propriétés chuter lorsque la température augmente. Dans un nano composite, le polymère va jouer le rôle de matrice dans laquelle les charges renforçâtes vont être incorporées. L'idée de ce mélange est de conjuguer les avantages des polymères aux propriétés d'une phase inorganique rigide et de donner naissance à des matériaux aux propriétés modifiées et améliorées tels que par exemple, les nano fibres de carbone, les nanotubes de carbone, le graphène, le nano argiles, le nano silice, le nano cellulose.

Selon le constituant de la matrice, il existe plusieurs types de nano composites :

- Nano composites à matrice polymère.
- Nano composites à matrice céramique.
- Nano composites à matrice métallique.

Comme c'est le cas pour les matériaux composites classiques qui se rangent en trois catégories, les matériaux composites à matrice organique (CMO), les matériaux composites à matrice céramique (CMC) et les matériaux composites à matrice métallique (CMM), les matrices des nano composites peuvent être polymères, céramiques ou métalliques.

Dans la famille des nano composites à matrice céramique, le SiO₂/Fe pourrait servir de catalyseur haut performance. Dans celle des nano composites à matrice métallique, Ni/PZT pourrait servir à la conception de revêtements résistant à la chaleur. Enfin, dans celle des nano composites à matrice polymère, le polycaprolactone (un

polyester biodégradable) /SiO₂ pourrait être utile à la mise en œuvre d'os biodégradables pour la réparation de tissus du squelette.

I.2.1 Les nano composites et leurs différences avec les composites

« Classiques » :

Les nano composites (NTC/Polymère) font l'objet d'une littérature très abondante. [Yam 1995], [Tho 2001], [Rak 2001], [Lau 2002], [Pet 2003], [Pop 2004], [Tho 2005], [Col 2006].

Ils sont également composés d'une matrice contenant des charges. La différence par rapport aux matériaux composites classiques provient du fait que les charges possèdent au moins une dimension de l'ordre du nanomètre. Ces nano-charges peuvent être monodimensionnelles (NTC), bidimensionnelles (argiles en feuillets) ou encore tridimensionnelles (nano-sphères).

Les (NC) présentent plusieurs intérêts par rapport aux composites classiques (Tableau I.1). Un premier intérêt réside dans la surface inter faciale entre les nano charges et la matrice. Pour un poids donné, les nanoparticules présentent une surface d'échange beaucoup plus importante que les particules de taille microscopique. Les (NC) ont donc de meilleures propriétés comparativement aux composites classiques, comme par exemple une meilleure répartition des contraintes à l'intérieur de la matrice.

Bien que l'ajout de charges microscopiques dans une matrice permette d'améliorer quelques propriétés, cela se fait au détriment d'autres propriétés. Les (NC) présentent souvent des propriétés

similaires aux composites classiques mais pour des teneurs en charges jusque 20 fois inférieures, limitant ainsi par la même occasion la dégradation des propriétés provoquée par l'ajout de charges macroscopiques. [Penu 2008]

Tableau I.1 Avantages et inconvénients de l'ajout de nanoparticules aux polymères. [Koo 2006]

Propriétés améliorées	Inconvénients
<ul style="list-style-type: none"> -Propriétés mécaniques (ténacité, rigidité) -Barrière aux gaz -Retardateurs de flammes -Expansion thermique -Conductivité thermique -Résistance chimique -Renforcement 	<ul style="list-style-type: none"> Augmentation de la viscosité (processabilité) -Difficultés de dispersion - Coloration noire lorsque des particules de carbone sont utilisées.

I.2.2 Classification des nano composites :

On peut appliquer l'ancienne classification des composites suivant la nature de la matrice, dans l'ordre croissant de la température d'utilisation. Les matériaux composites à matrice organique ne peuvent être utilisés que dans un domaine de températures ne dépassant pas (200 à 300°C), alors que les autres types de composites sont utilisés au-delà : jusqu'à (600°C) pour une matrice métallique et jusqu'à (1000°C) pour une matrice céramique.

- **Les composites à matrice organique :**

Aussi appelés composites à matrice polymère, ils sont sûrement les plus développés du fait de l'importance commerciale de ces derniers et de la maîtrise (coût et savoir-faire) de nombreux processus de fabrication. Les composites à matrice organique se subdivisent en deux groupes :

- ✓ **Composites à matrices thermoplastiques (TP) :**

L'intérêt des thermoplastiques réside dans leur faible coût, résultant à la fois de matières premières disponibles et des procédés de fabrication. Toutefois, ce faible coût est lié à des propriétés mécaniques et thermomécaniques faibles. Cependant, ils possèdent la propriété de pouvoir être mis en forme plusieurs fois par chauffage et refroidissement successifs. Ils peuvent donc être récupérés et facilement recyclés.

- ✓ **Composites à matrices thermodurcissables (TD) :**

Contrairement aux composites à matrices thermoplastiques, les composites à matrices thermodurcissables ne peuvent être mis en forme qu'une fois. En effet, après polymérisation par apport de chaleur en présence d'un catalyseur, ces résines conduisent à un réseau très réticulé qui ne peut être détruit que par un apport important de chaleur. Ainsi, ils possèdent des propriétés mécaniques et thermiques plus élevées que les composites à matrices thermoplastiques.

- **Les composites à matrice métallique :**

Dont certains procédés de fabrication s'inspirent de la métallurgie des poudres. Les particules de seconde phase peuvent être des oxydes, borures, carbures, nitrures. Les composites à matrice métallique encore appelés (MMCS) (métal-matri composites) se sont développés grâce à la facilité et à la maîtrise des procédés de fabrication ainsi qu'à leur faible coût.

- **Les composites à matrice céramique :**

Ils sont utilisés pour des applications à plus haute température comme des oxydes, carbures ou nitrures. L'utilisation des céramiques est limitée notamment par leur ténacité à rupture, leur résistance à la fatigue et aux chocs thermiques. Pour résoudre ces problèmes, l'incorporation d'une seconde phase ductile dans la matrice céramique est une solution.

I.2.3 Propriétés des nano composites (polymère/NTC) :

- **Propriétés électriques :**

Le noir de carbone était, la charge conductrice la plus communément employée pour améliorer les propriétés électriques des polymères. Cependant, pour atteindre une conductivité électrique notable, un taux de noir de carbone proche de (15%) en masse doit être introduit. Cette quantité importante de charges affecte fortement les propriétés mécaniques du polymère par la création des défauts. L'utilisation de plus en plus abondante des (NTC) s'explique par la faible quantité de charge à introduire pour l'amélioration significative des propriétés électriques. Un taux

de charges inférieur à (5%) en masse suffit à l'obtention d'un polymère conducteur. Zhang et al [Zhang 2006], ont de cette manière amélioré la conductivité électrique de films de polyéthylène en incorporant (5%) en masse de (NTC). La conductivité électrique passe alors de (10-14 S/cm) pour le polymère vierge à (10-3S/cm) pour le polymère chargé, soit (1011) fois plus conducteur. Pötschke et al [Pötschke 2002]. Observent également une conductivité électrique de (10-3S/cm) pour le polycarbonate chargé à seulement (2%) en masse de (NTC). Une faible quantité de nanotubes, parfois proche de (0,5%), suffit à apporter des propriétés antistatiques voire conductrices aux polymères.

- **Conductivité thermiques :**

L'élaboration d'un matériau composite avec un niveau de conductivité thermique élevé est un défi important à relever du fait des applications prometteuses, en particulier dans la réalisation de composants électroniques. Diverses études ont récemment montré une augmentation de (40%) de la conductivité thermique d'une résine époxy ou du polyuréthane chargée à (0,5%) en masse de (CNTs). [Cai 2008], [Wang 2009]

- **Propriétés mécaniques :**

L'amélioration des propriétés mécaniques des polymères ne tient pas uniquement aux excellentes propriétés des nanotubes. En effet, la liaison inter faciale entre les charges et la matrice ainsi que la dispersion des charges sont également à prendre en compte. Ainsi la contrainte à la rupture peut être diminuée par la présence de défauts associés aux agglomérats de nanotubes [Andrews 2002].

- **Comportement au feu :**

L'utilisation de nano-charges comme alternative aux agents retardateurs de flamme conventionnels permet d'améliorer fortement le comportement au feu des polymères. La charge la plus communément utilisée à cet effet est l'argile. Cependant, l'étude de nano composites chargés en nanotubes de carbone montre l'efficacité de ces charges en tant qu'agent retardateur.

I.2.4 Interface matrice-renfort dans les nans composites à matrice polymère :

La liaison entre la matrice et les renforts est un phénomène physico-chimique fondamental qui est créé lors de la phase d'élaboration du matériau composite. C'est l'interface (matrice/renfort) qui sera déterminante au niveau des propriétés finales du composite, et notamment du point de vue mécanique. [Ajayan 2007] Il est à rappeler que pour la plupart des matrices polymères, la compatibilité avec les (CNTs) est faible du fait de leurs structures chimiques très différentes. En effet, l'adhésion entre un CNT et un polymère est mauvaise du fait des tensions superficielles trop élevées [Gao 2005]. Ce désagrément empêche par ailleurs une dispersion efficace et homogène des (CNTs) à l'intérieur de la matrice.

De nombreuses études sont menées afin de comprendre et d'améliorer les phénomènes à l'interface [Wei 2006], [Ajayan 2000]. Il s'agit principalement de travailler au niveau de la cohésion entre

les deux éléments constitutifs du composite. Ceci peut être réalisé grâce à une modification de surface des (CNTs) avant leur insertion dans la matrice charges. [Xiao 2007]

I.2.5 Techniques de mise en œuvre :

Les nanocomposites polymères/nanotubes de carbone (NTC) peuvent être mis en œuvre suivant plusieurs procédés : la polymérisation in-situ, le mélange en solution par voie solvant ou le mélange par voie fondue.

- **Polymérisation in situ :**

La fabrication de (NC) par un procédé de polymérisation in situ est divisée en plusieurs étapes. Dans un premier temps, les charges sont ajoutées au monomère liquide. Étant donné la faible viscosité de ce dernier, la dispersion des charges peut s'effectuer grâce à l'utilisation d'ultrasons ou encore via agitation mécanique en régimes turbulents. Une fois les charges bien

dispersées dans la matrice, on débute la polymérisation.

Lorsque la polymérisation est achevée, il ne reste plus qu'à extraire le monomère résiduel (exemple : Par dégazage sous vide). Le premier avantage de cette méthode est qu'elle ne nécessite pas l'utilisation de solvants qui sont coûteux et difficiles à éliminer. Le deuxième avantage est qu'elle permet d'obtenir un bon état de dispersion notamment grâce au fait que les charges sont introduites dans le monomère fondu qui a une faible viscosité. [Penu 2008]

- **Mélange en solution :**

Cette méthode est notamment utilisée pour l'élaboration d'élastomère [Sui 2008]. Mais aussi pour certain type de (TP) [Liu 2008]. Elle permet en effet d'abaisser la viscosité permettant ainsi de faciliter la dispersion des (NTC). Le solvant du polymère utilisé doit également pouvoir disperser de manière homogène les nanotubes de carbone. La matrice polymère est tout d'abord mise en solution dans son solvant. Les nanotubes sont de leur côté dispersés dans le même solvant sous agitation par ultrasons. Cette solution de (NTC) est ensuite ajoutée à la matrice solubilisée sous agitation. Les nanotubes peuvent de cette manière s'introduire entre les chaînes macromoléculaires du polymère. En fin Le solvant est extrait par évaporation.

L'un des principaux inconvénients de cette méthode est l'utilisation et l'élimination du solvant, sachant que ce solvant peut influencer les propriétés mécaniques du nano composite comme le montrent U. Khan et Al. [Khan 2007]. Un autre inconvénient provient de l'utilisation.

- **Mélange à l'état fondu :**

Cette méthode est la plus simple. Dans ce cas, le polymère et les nanotubes sont incorporés, dans une extrudeuse chauffée. Le cisaillement apporté par la rotation des vis est l'élément déterminant dans la qualité de la dispersion des charges. Les (NTC) peuvent ainsi circuler au se indu polymère fondu. Des nano composites à base de polyéthylène, polypropylène, polyamide, polycarbonate, polyéthylène téréphtalate, polyacide, poly méthacrylate de méthyle et autres polymères thermoplastiques ont été obtenus par cette

méthode. [Aubry 2009]. L'inconvénient de cette méthode est que la viscosité augmente considérablement avec le taux de (NTC) [Lee 2008].

La mise en forme de matériaux composites à matrice polymère, nécessite la mise en place de procédés très précis afin d'obtenir un matériau de qualité. En effet, la synthèse d'un polymère thermodurcissable s'avère plus complexe que celle d'un thermoplastique.

Le second paramètre à prendre en compte dans la fabrication de composites est la dispersion des renforts au sein de la matrice. La dispersion des renforts est certainement l'étape fondamentale du procédé de fabrication de composites.

I.2.6 Procédés de fabrication :

Le dénominateur commun entre les procédés de fabrication des différents types de nano composites est lié à la taille des renforts qui ne sont plus micrométriques mais nanométriques ; pour obtenir les propriétés requises, il faut une distribution et une dispersion homogène des renforts qui ne doivent pas s'agglomérer. Il faut donc parfois adapter les méthodes existantes ou en inventer de nouvelles qui tiennent compte de cet effet.

a. Nano composites à base de nanotube de carbone :

Outre le problème de purification et de séparation des différents types de nanotubes de carbone, la fabrication de nano composites à partir de ces derniers se heurte à une difficulté majeure : la dispersion des nanotubes. Il existe différentes techniques pour

obtenir une solution stable de nanotubes : bonification des nanotubes dans un solvant (préparation d'une émulsion à l'aide d'ultrasons) [1], modification de la surface par des surfactants qui ont le désavantage d'apporter des impuretés ou fonctionnalisation des extrémités ou des parois latérales. A noter que le procédé de fabrication ne doit pas endommager les nanotubes pour conserver l'intégrité de leurs propriétés notamment mécaniques.

b. Nano composites à base de nanoparticules :

Il existe trois voies pour disperser des nanoparticules dans une matrice polymérique [2] :

- Mélange direct du polymère et des nanoparticules soit en solution ou bien à l'état fondu.
- Polymérisation in situ en présence des nanoparticules.
- Formation in situ des nanoparticules et polymérisation in situ.

c. Nano composites à base d'argile dans une matrice polymère :

La fabrication de nano composites utilisant des argiles se fait en deux étapes, étant donné que l'argile à un caractère hydrophile une éventuelle réaction avec la plupart des matrices polymères n'est pas très facile même impossible parfois [3], l'étape préalable consiste donc à la rendre compatible en insérant un cation de taille plus importante. Pour faciliter l'intercalation de polymère dans les galeries inter foliaires de la montmorillonite ou obtenir son exfoliation, il faut modifier sa surface hydrophile et lui donner un caractère organophile. Parmi les méthodes de modification organophile, l'échange cationique est celle qui est la plus

couramment mise en œuvre. Elle consiste à substituer le cation compensateur de l'argile par la chaîne alkyl du tensio-actif, les plus utilisés sont les sels d'ammonium ou phosphonium [4] ; l'étape suivante est l'intercalation de l'argile modifiée avec le polymère.

Le polymère peut être incorporé dans l'espace inter foliaire soit sous forme de polymère ou de monomères qui polymériseront in situ pour aboutir au Nan composite final suivant trois stratégies possibles.

I.3 Conclusion :

Le présent chapitre est dédié à l'acquisition des connaissances théoriques nécessaires pour étudier notre problématique. Dans un premier temps, nous avons présenté quelques notions générales concernant les nano composites, un aperçu sur les différences entre Les nano composites et les composites « classiques ». Les nano composites constituent une classe de matériaux à part entière: bien qu'ils aient la même composition que les composites classiques, notamment concernant la nature de la matrice, leur différence réside dans la taille des composants (matrice ou renfort) et dans le fait que certaines propriétés spécifiques n'apparaissent qu'à l'échelle du nanomètre.

Chapitre 02

Etude et analyse de l'effet de l'ondulation et de l'agglomération des nanotubes de carbone

2.1.Introduction

Depuis la découverte des nanotubes de carbone par Iijima [5,6], les nanostructures sont de plus en plus utilisées en raison de leurs propriétés électroniques, thermiques et mécaniques supérieures [7 ; 8]. Autres études ont montré qu'ils ont de bonnes propriétés de sorte qu'ils peuvent être utilisés pour la nanoélectronique, nano-outils et nano composites [9 ; 10]. En raison des difficultés rencontrées dans les méthodes expérimentales pour prévoir les réponses des nanostructures dans différentes conditions de chargement, des simulations de la dynamique moléculaire (MD) sont utilisées. Cette approche représente la dynamique d'atomes ou de molécules des matériaux par une discrète solution des équations classiques de Newton du mouvement.

2.2. NTC droits

2.2.1 Composites renforcés avec des NTC alignés et droits.

Considérons une matrice polymère élastique linéaire renforcée par un grand nombre de NTC dispersés qui sont alignés, droits et de longueur infinie.

Choisissez un élément de volume représentatif (RVE) V du composite

La frontière ∂V de la RVE est soumise soit à des tractions correspondant à une contrainte globale uniforme σ_0 soit à des déplacements compatibles avec une déformation globale uniforme prescrite ε_0 .

Il existe de nombreuses méthodes pour estimer les propriétés globales d'un composite [28].

Nous utilisons la méthode Mori-Tanaka [36] dans la présente étude en raison de sa simplicité et de sa précision même à une fraction volumique élevée d'inclusions.

La méthode de Mori-Tanaka [36] suppose que chaque inclusion est noyée dans une matrice primitive infini soumise à une contrainte effective σ -mor une déformation effective ε -m en champ lointain, où σ_m et ε_m désignent respectivement la contrainte moyenne et la déformation moyenne sur la matrice.

Ainsi, le tenseur des modules élastiques effectifs \mathbf{C} du composite renforcé par des inclusions alignées de même forme est donné analytiquement par

$$\mathbf{C} = c_m \mathbf{C}_m + c_r \mathbf{C}_r : \mathbf{A} : (c_m \mathbf{I} + c_r \mathbf{A})^{-1} \quad (1)$$

Où, et tout au long de ce mémoire, une lettre en gras représente un tenseur du deuxième ou du quatrième ordre, et un deux-points entre deux tenseurs indique une contraction (produit interne) sur deux indices ; \mathbf{I} est le tenseur d'identité du quatrième ordre ; les indices m et r représentent respectivement les quantités de la matrice et de la phase de renforcement, c_m et c_r désignent les fractions volumiques,

et \mathbf{C}_m et \mathbf{C}_r désignent les tenseurs de modules d'élasticité des phases correspondantes; le tenseur de quatrième ordre \mathbf{A} rapporté les déformations moyennes ε_r et ε_m via $\varepsilon_r = \mathbf{A} : \varepsilon_m$ et il est donné par

$$\mathbf{A} = [\mathbf{I} + \mathbf{S} : (\mathbf{C}_m)^{-1} : (c_r - \mathbf{C}_m)]^{-1} \quad (2)$$

Où \mathbf{S} est le tenseur d'Eshelby qui est bien mémoireé dans la monographie de Mura [38].

Nous considérons d'abord un composite polymère renforcé de NTC droits alignés dans la direction de l'axe X_2 .

La matrice est supposée élastique et isotrope, de module d'Young E_m et de coefficient de Poisson ν_m

Chaque NTC droit est modélisé comme une longue fibre avec des propriétés élastiques transversalement isotropes.

Par conséquent, le composite est également transversalement isotrope, et sa relation constitutive $\sigma = C:\varepsilon$ peut être exprimée comme suit :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} k+m & l & k-m & 0 & 0 & 0 \\ l & n & l & 0 & 0 & 0 \\ k-m & l & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (3)$$

Où K , l , m , n et p sont les modules d'élasticité de Hill [37];

Les composantes non nulles du tenseur d'Eshelby s pour une longue fibre droite le long de la direction x_2 ne sont donnés par [38]

K est le module de compression en déformation plane normal à la direction de la fibre.

N est le module de traction uni axial dans la direction des fibres (x_2),

L est le module croisé associé,

M et p sont les modules de cisaillement dans des plans normaux et parallèles à la direction de la fibre, respectivement

$$\begin{aligned} s_{1111} = s_{3333} &= \frac{5 - 4\nu_m}{8(1 - \nu_m)} \\ s_{1122} = s_{3322} &= \frac{\nu_m}{2(1 - \nu_m)} \\ s_{1133} = s_{3311} &= \frac{4\nu_m - 1}{8(1 - \nu_m)} \\ s_{2323} = s_{1212} &= \frac{1}{4} s_{1313} = \frac{3 - 4\nu_m}{8(1 - \nu_m)} \end{aligned} \quad (4)$$

Sa substitution dans l'Eq. (2) conduit aux composantes non nulles :

$$\begin{aligned}
A_{1111} = A_{3333} &= -\frac{a_3}{a_1 a_2} \quad , & A_{1133} = A_{3311} &= \frac{a_4}{a_1 a_2} \\
A_{1122} = A_{3322} &= \frac{l_r(1-\nu_m-2\nu_m^2)-E_m\nu_m}{a_1} \quad , & A_{2222} &= 1 \\
A_{2323} = A_{1212} &= \frac{E_m}{E_m+2(p_r(1+\nu_m))} \quad , & A_{1313} &= \frac{2E_m(1-\nu_m)}{a_2} \quad (5)
\end{aligned}$$

$$a_1 = (-1 + 2\nu_m)[E_m + 2K_r(1 + \nu_m)]$$

$$a_2 = E_m + 2m_r(3 - \nu_m - 4\nu_m^2)$$

$$\begin{aligned}
a_3 &= E_m(1 - \nu_m)\{E_m(3 - 4\nu_m) \\
&\quad + 2(1 + \nu_m)[m_r(3 - 4\nu_m) + k_r(2 - 4\nu_m)]\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_4 &= E_m(1 - \nu_m)\{E_m(1 - 4\nu_m) + 2(1 + \nu_m)[m_r(3 - 4\nu_m) + k_r(2 - \\
&\quad 4\nu_m)]\} \quad (6)
\end{aligned}$$

et K_r , l_r , m_r , n_r et p_r sont les modules d'élasticité de Hill pour la phase de renforcement (CNT)

La substitution de l'équation (5) dans l'équation (1) donne le tenseur des modules élastiques effectifs du composite renforcé par des NTC rectilignes alignés.

En particulier, les modules d'élasticité de Hill sont trouvés comme suit :

$$\begin{aligned}
k &= \frac{E_m\{E_m c_m + 2k_r(1 + \nu_m)[1 + c_r(1 - 2\nu_m)]\}}{2(1 + \nu_m)[E_m(1 + c_r - 2\nu_m) + 2c_m k_r(1 - \nu_m - 2\nu_m^2)]} \\
l &= \frac{E_m\{c_m \nu_m [E_m + 2k_r(1 + \nu_m)] + 2c_r l_r(1 - 2\nu_m^2)\}}{2(1 + \nu_m)[2c_m k_r(1 - \nu_m - 2\nu_m^2) + E_m(1 + c_r - 2\nu_m)]}
\end{aligned}$$

$$n = \frac{E_m^2 c_m (1 + c_r - c_m v_m) + 2 c_m c_r (k_r n_r - l_r^2) (1 + v_m)^2 (1 - 2v_m)}{(1 + v_m) \{2 c_m k_r (1 - v_m - 2v_m^2) + E_m (1 + c_r - 2v_m)\}} + \frac{E_m [2 c_m^2 k_r (1 - v_m) + c_r n_r (1 + c_r - 2v_m) + 4 c_m c_r l_r v_m]}{2 c_m k_r (1 - v_m - 2v_m^2) + E_m (1 + c_r - 2v_m)}$$

$$p = \frac{E_m [E_m c_m + 2(1 + c_r) p_r (1 + v_m)]}{2(1 + v_m) [E_m (1 + c_r) + 2 c_m p_r (1 + v_m)]}$$

$$m = \frac{E_m [E_m c_m + 2 m_r (1 + v_m) (3 + c_r - 4v_m)]}{2(1 + v_m) \{E_m [c_m + 4 c_r (1 - v_m)] + 2 c_m m_r (3 - v_m - 4v_m^2)\}}$$

$$E_{//} = n - \frac{l^2}{k} E_- = \frac{4m(kn - l^2)}{kn - l^2 + mn}$$

$$G_{LT} = 2p \quad \quad \quad v_{LT} = \frac{l}{2k}$$

Le module de Young et le coefficient de Poisson du **polystyrène** sont respectivement

$$E_m = 1.9 \text{ GPa} \quad \quad \quad v_m = 0.3$$

À des fins d'illustration, nous utilisons les valeurs représentatives suivantes des constantes élastiques des **SWCNT** :

$$n_r = 450 \text{ GPa} \quad k_r = 30 \text{ GPa}, \quad m_r = 1 \text{ GPa}, \quad p_r = 1 \text{ GPa}, \quad l_r = 10 \text{ GPa}$$

qui sont tirés des résultats analytiques de Popov et al. [32], qui ont calculé les modules d'élasticité des NTC.

$$\begin{aligned}
C &= \begin{bmatrix} n_r & l_r & l_r & 0 & 0 & 0 \\ l_r & k_r + m_r & k_r - m_r & 0 & 0 & 0 \\ l & k_r - m_r & k_r + m_r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_r \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{1}{E_L} & -\frac{\nu_{TL}}{E_T} & -\frac{\nu_{ZL}}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{LT}}{E_T} & \frac{1}{E_T} & -\frac{\nu_{ZT}}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{LZ}}{E_Z} & -\frac{\nu_{TZ}}{E_Z} & \frac{1}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{TZ}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{ZL}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{LT}} \end{bmatrix}^{-1}
\end{aligned}$$

Il est à noter que les NTC sont hautement anisotropes, avec un module de Young dans la direction du tube supérieur de deux ordres de grandeur à celui normal au tube. Il est observé à partir de la figure 1 qu'en raison de la propriété anisotrope des NTC, le module d'élasticité E_i du composite dans la direction des NTC augmente beaucoup plus rapidement avec la fraction volumique C_r que E' perpendiculairement à la direction des NTC.

2.2.2 Composites renforcés avec des NTC droits et orientés aléatoirement.

L'effet des NTC droits orientés au hasard est étudié dans cette étude. L'orientation d'un CNT droit est caractérisée par deux angles d'Euler α et β , comme le montre la figure 2.1

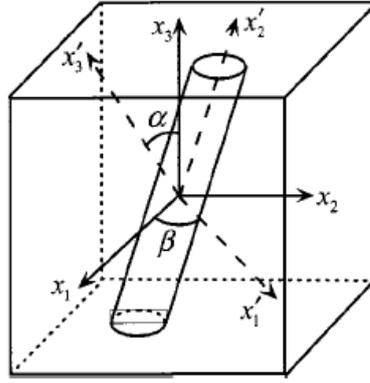


Fig. 2.1 Modules élastiques effectifs d'un composite renforcé de NTC droits alignés

Les vecteurs de base e_i et e'_i des systèmes de coordonnées global (0-x1x2x3) et local (0-x1'x2'x3') sont liés via la matrice de transformation

$$e_i = g_{ij} e'_j$$

$$g = \begin{bmatrix} \cos\beta & -\cos\alpha \sin\beta & \sin\alpha \sin\beta \\ \sin\beta & \cos\alpha \cos\beta & -\sin\alpha \cos\beta \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$$

La distribution d'orientation des NTC dans un composite est caractérisée par une fonction de densité de probabilité $p(\alpha, \beta)$ satisfaisant la condition de normalisation

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} p(\alpha, \beta) \sin\alpha \, d\alpha \, d\beta = 1$$

Si les NTC sont orientés complètement aléatoirement, la fonction de densité est

$$P(\alpha, \beta) = 1/2\pi$$

D'après la méthode de Mori-Tanaka, la déformation $e(\alpha, \beta)$ et la contrainte $\sigma(\alpha, \beta)$ du CNT sont liées à la contrainte de la matrice σ_m Par

$$\varepsilon_r(\alpha, \beta) = A(\alpha, \beta) : \varepsilon_m = A(\alpha, \beta) : c_m^{-1} : \sigma_m$$

$$\sigma_r(\alpha, \beta) = c_r : A(\alpha, \beta) : \varepsilon_m = [c_r A(\alpha, \beta) : c_m^{-1}] : \sigma_m$$

Où le tenseur de concentration de déformation $A(\alpha, \beta)$ est donné par l'Eq. (2).

Ensuite, la déformation et la contrainte moyennes dans tous les CNT orientés au hasard peuvent être écrites comme

$$\varepsilon_r = \left[\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} p(\alpha, \beta) A(\alpha, \beta) \sin \alpha \, d\alpha d\beta \right] : \varepsilon_m$$

$$\sigma_r = [p(\alpha, \beta) [c_r : A(\alpha, \beta) : c_m^{-1}] \sin \alpha \, d\alpha \, d\beta] : \sigma_m$$

Les crochets angulaires ($\langle \square \rangle$) représentent la moyenne sur des orientations spéciales.

En utilisant les théorèmes moyens $\sigma = c_m \sigma_m + c_r \langle \sigma_r \rangle$ et $\varepsilon = c_m \varepsilon_m + c_r \langle \varepsilon_r \rangle$ en conjonction avec la relation constitutive effective $\sigma = C : \varepsilon$ on peut obtenir le module effectif du composite comme

$$C = (c_m C_m + c_r \langle C_r : A \rangle) : (C_m I + c_r \langle A \rangle)^{-1}$$

Lorsque les NTC sont orientés de manière complètement aléatoire dans la matrice, le composite est alors isotrope et son module de compression K et son module de cisaillement G sont dérivés comme

$$K = K_m + \frac{c_r (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3(c_m + c_r \alpha_r)} \quad G = G_m + \frac{c_r (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2(c_m + c_r \beta_r)}$$

$$K_m = E_m G_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}$$

$$\alpha_r = \frac{3(K_m + G_m) + k_r - l_r}{3(K_m + k_r)}$$

$$\beta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{4G_m + 2k_r + l_r}{3(K_m + k_r)} + \frac{4G_m}{G_m + p_r} + \frac{2[G_m(3K_m + G_m) + G_m(3K_m + 7G_m)]}{3(3K_m + k_r) + m_r(3K_m + 7G_m)} \right\}$$

$$\delta_r = \frac{1}{3} \left[n_r + 2l_r + \frac{(2k_r + l_r)(3K_m + 2G_m - l_r)}{(G_m + k_r)} \right]$$

$$\eta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{2}{3} (n_r - l_r) + \frac{8G_m p_r}{G_m + p_r} + \frac{+2(k_r - l_r)(2G_m + l_r)}{G_m + p_r} + \frac{8m_r G_m (3K_m + 4G_m)}{3K_m (m_r + G_m) + G_m (7m_r + G_m)} \right\}$$

K_m et G_m sont respectivement les modules de volume et de cisaillement de la matrice.

Le module de Young effectif E et le coefficient de Poisson ν du composite sont donnés par

$$E = \frac{9KG}{3K + G} \quad \nu = \frac{3K - 2G}{6K + 2G}$$

2.3 Modèle de micromécanique pour les NTC courbes

2.3.1 Composites renforcés avec des NTC alignés et incurvés.

Des expériences ont montré que la plupart des NTC dans les composites existent dans un état incurvé [41,42]. Ceci est en partie dû au fait que les NTC ont une rigidité à la flexion très faible en raison du petit diamètre du tube (-1 nm). Fisher et al. [43-45] a étudié numériquement l'effet de l'ondulation des CNT sur les propriétés élastiques des composites en utilisant la méthode des éléments finis. Il n'existe pas encore de modèle théorique pour estimer l'effet raidisseur des NTC courbes. Nous présenterons ici une méthode analytique pour calculer les modules élastiques effectifs de composites contenant des NTC courbes.

Nous présentons dans ce qui suit un modèle micromécanique pour examiner l'effet d'ondulation des NTC incurvés sur les propriétés élastiques des composites renforcés de NTC. Comme le montre la figure 2.2, un CNT incurvé est modélisé comme un ressort hélicoïdal, D étant le diamètre du ressort, θ l'angle de spirale et φ l'angle polaire.

La longueur L du CNT courbe est liée à ces paramètres par :

$$L = \frac{\varphi D}{2 \cos \theta}$$

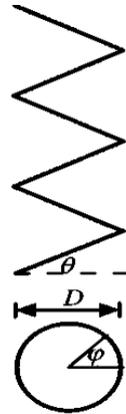


Fig. 2.2 le modèle de ressort d'un CNT courbe

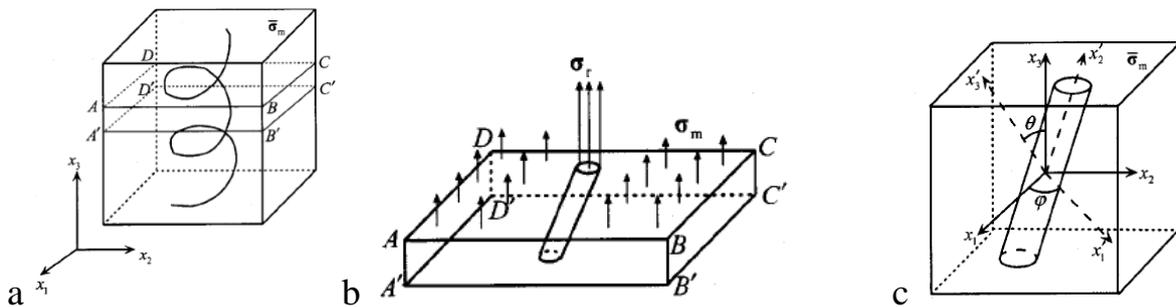


Fig. 2.3 Modèle de calcul de la déformation dans un NTC courbe :

- a. un CNT courbe dans le RVE
- b. une tranche d'épaisseur infinitésimale.
- c. Le modèle approximatif pour le calcul de la déformation dans la tranche.

2.3.3 Composites renforcés avec des NTC incurvés et orientés aléatoirement.

nous introduisons deux angles a et b pour exprimer l'orientation d'un NTC courbe dans le composite. La distribution d'orientation de tous les CNT est décrite par une fonction de densité de probabilité p(a,b). La méthode de Mori-Tanaka conduit au tenseur de rigidité effective

2.4 Agglomération des CNT

2.4.1 Un modèle d'agglomération à deux paramètres.

Les NTC ont une faible rigidité à la flexion (en raison de leur petit diamètre et de leur faible module d'élasticité dans la direction radiale) et un rapport d'aspect élevé, ce qui rend les NTC faciles à agglomérer dans une matrice polymère [34,35]. Afin d'obtenir les propriétés souhaitées des composites renforcés de NTC, il est essentiel de rendre les NTC uniformément dispersés dans la matrice [39].

Nous développons un modèle micromécanique dans ce mémoire pour étudier l'influence de l'agglomération des NTC sur les modules élastiques effectifs des composites renforcés de NTC.

Stéphane et al. [40] ont observé que dans l'échantillon de concentration de **7,5 %**, une grande quantité de NTC est concentrée dans des agrégats.

La distribution spatiale des NTC dans la matrice n'est pas uniforme, de sorte que certaines régions locales ont une concentration plus élevée de NTC que la fraction de volume moyenne dans le matériau. Ces régions avec des NTC concentrés sont supposées dans ce mémoire avoir des formes sphériques et sont considérées comme des « inclusions » avec des propriétés élastiques différentes de celles du matériau environnant, comme le montre la Fig. 2.4

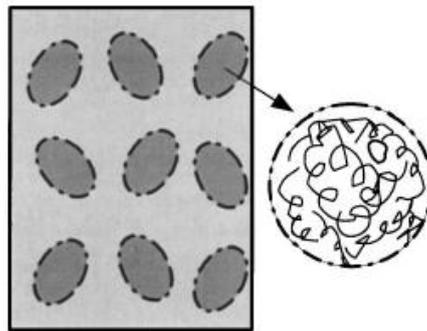


Fig. 2.4 Modèle d'inclusion d'Eshelby d'agglomération de NTC

Le volume total V_r des NTC dans le RVE V peut être divisé en deux parties suivantes :

$$V_r = V_r^{inclusion} + V_r^m$$

$$\xi = \frac{V_{inclusion}}{V^*}, \quad 0 \leq \xi \leq 1$$

$$\zeta = \frac{V_r^{inclusion}}{V_r}, \quad 0 \leq \zeta \leq 1$$

$$\frac{V_r^{inclusion}}{V_{inclusion}} = \frac{c_r \zeta}{\xi} \frac{V_r^m}{V^* - V_{inclusion}} = \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} \quad c_r = \frac{V^r}{V^*}$$

Les modules élastiques effectifs des inclusions hybrides et de la matrice peuvent être calculés par différentes méthodes de micromécanique. Supposons que toutes les orientations des CNT soient complètement aléatoires.

Nous utiliserons **deux méthodes pour estimer la propriété élastique des inclusions et de la matrice.**

Premièrement, le **modèle de Voigt** fournit le module effectif des inclusions E_{in} et leur E_{out} environnant comme [41]

[41] Jones, R. M., 1999, *Mechanics of Composite Materials*, Taylor & Francis, Philadelphia.

$$E_{out} = \frac{3}{8} \left\{ \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} E_{CNT} + \left[1 - \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} \right] E_m \right\} + \frac{5}{8} \left\{ \frac{(1-\xi) E_{CNT} E_m}{[(1-\xi) - c_r(1-\zeta)] E_{CNT} + c_r(1-\zeta) E_m} \right\}$$

$$E_{in} = \frac{3}{8\xi} [c_r \zeta E_{CNT} + c_r(\xi - c_r \zeta) E_m] + \frac{5}{8} \left[\frac{\xi E_{CNT} E_m}{(\xi - c_r \zeta) E_{CNT} + c_r \zeta E_m} \right]$$

où la matrice et les NTC sont considérés comme isotropes, avec les modules de Young E_m et E_{CNT} , respectivement. C'est-à-dire que l'influence de l'anisotropie des NTC est négligée.

Dans la deuxième méthode, nous supposons que les nanotubes sont transversalement isotropes. Les modules d'élasticité de la matrice hybride sont estimés par la méthode de **Mori-Tanaka**. On suppose que les NTC sont orientés aléatoirement dans les inclusions et, par conséquent, les inclusions sont isotropes.

Les modules de volume effectifs K_{in} et K_{out} et les modules de cisaillement effectifs G_{in} et G_{out} des inclusions et de la matrice sont donnés, respectivement, par :

$$\begin{aligned}
K_{in} &= K_m + \frac{c_r \zeta (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \alpha_r)} K_{out} \\
&= K_m + \frac{c_r (1 - \zeta) (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3[(1 - \xi) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \alpha_r]}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{in} &= G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \beta_r)} G_{out} \\
&= G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2[(1 - \xi) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \beta_r]}
\end{aligned}$$

$$\mathbf{K}_m = \mathbf{E}_m \mathbf{G}_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}$$

Pour une inclusion de sphère dans une matrice isotrope, le tenseur d'Eshelby lit est :

$$S_{1111} = S_{2222} = S_{3333} = \frac{7 - 5\nu_{out}}{15(1 - \nu_{out})}$$

$$S_{1122} = S_{3322} = S_{3311} = \frac{1 - 5\nu_{out}}{15(1 - \nu_{out})}$$

$$S_{1313} = S_{2323} = S_{1212} = \frac{4 - 5\nu_{out}}{15(1 - \nu_{out})}$$

ν_{out} est le coefficient de Poisson de la matrice hybride.

$$\nu_{out} = \frac{3K_{out} - 2G_{out}}{6K_{out} + 2G_{out}}$$

Enfin, le module de compression effectif K et le module de cisaillement effectif G du composite sont dérivés de la méthode de **Mori-Tanaka** comme

$$\mathbf{K} = K_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)}{1 + \alpha (1 - \xi) \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)} \right]$$

$$\mathbf{G} = G_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)}{1 + \beta(1 - \xi) \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)} \right]$$

où

$$\alpha = \frac{1 + \nu_{out}}{3(1 - \nu_{out})} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu_{out})}{15(1 - \nu_{out})}$$

2.4.2. Nanotubes alignés

Le premier modèle micromécanique fait intervenir le comportement élastique du CNRP renforcé de nanotubes alignés, rectilignes et infiniment longs. Dans le modèle micromécanique, les SWNT sont considérés comme des fibres solides avec des propriétés de matériau anisotropes et les valeurs des constantes élastiques sont tirées de Popov et al. [17]. La liaison à l'interface nanotube-polymère est considérée comme parfaite. Le composite est considéré comme transversalement isotrope. Le comportement élastique d'une cellule élémentaire du matériau composite peut être exprimé par

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} &= \begin{bmatrix} n & l & l & 0 & 0 & 0 \\ l & k+m & k-m & 0 & 0 & 0 \\ l & k-m & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2p \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{Bmatrix} C_r \\ &= \begin{bmatrix} n & l & l & 0 & 0 & 0 \\ l & k+m & k-m & 0 & 0 & 0 \\ l & k-m & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$C_r = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_L} & -\frac{\nu_{TL}}{E_T} & -\frac{\nu_{ZL}}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{LT}}{E_T} & \frac{1}{E_T} & -\frac{\nu_{ZT}}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{LZ}}{E_Z} & -\frac{\nu_{TZ}}{E_Z} & \frac{1}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{TZ}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{ZL}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{LT}} \end{bmatrix}^{-1}$$

k , l , m , n et p sont les modules élastiques de Hill ; n est le module de traction uniaxial dans la direction de la fibre (*direction1*), k est le module de compression en déformation plane normal à la direction de la fibre, l est le module transversal associé, m et p sont les modules de cisaillement dans les plans normaux et parallèles à la sens des fibres, respectivement, comme spécifié dans la Réf. [13].

Un composite avec une fraction volumique de phase de renforcement c_r , Le module de Young E_m et le coefficient de Poisson ν_m de la matrice mm sont considérés.

En utilisant la méthode de **Mori-Tanaka**, les modules élastiques de Hill's sont trouvés

$$k = \frac{E_m \{ E_m c_m + 2k_r (1 + \nu_m) [1 + c_r (1 - 2\nu_m)] \}}{2(1 + \nu_m) [E_m (1 + c_r - 2\nu_m) + 2c_m k_r (1 - \nu_m - 2\nu_m^2)]}$$

$$l = \frac{E_m \{ c_m \nu_m [E_m + 2k_r (1 + \nu_m)] + 2c_r l_r (1 - 2\nu_m) \}}{2(1 + \nu_m) [E_m (1 + c_r - 2\nu_m) + 2c_m k_r (1 - \nu_m - 2\nu_m^2)]}$$

$$n = \frac{E_m^2 c_m (1 + c_r - 2c_m v_m) + 2c_m c_r (k_r n_r - l_r^2) (1 + v_m)^2 (1 - 2v_m)}{(1 + v_m) \{ 2c_m k_r (1 - v_m - 2v_m^2) + E_m (1 + c_r - 2v_m) \}} + \frac{E_m [2c_r^2 k_r (1 - v_m) + c_r n_r (1 + c_r - 2v_m) + 4c_m c_r l_r v_m]}{22c_m k_r (1 - v_m - 2v_m^2) + E_m (1 + c_r - 2v_m)}$$

$$p = \frac{E_m [E_m c_m + 2(1 + c_r) p_r (1 + v_m)]}{2(1 + v_m) [E_m (1 + c_r) + 2c_m p_r (1 + v_m)]}$$

$$m = \frac{E_m [E_m c_m + 2m_r (1 + v_m) (3 + c_r - 4v_m)]}{2(1 + v_m) \{ E_m [c_m + 4c_r (1 - v_m)] + 2c_m m_r (1 + v_m) (3 - v_m - 4v_m^2) \}}$$

Où k_r , l_r , m_r , n_r et p_r sont les modules élastiques de Hill's pour la phase de renforcement.

Les expressions des modules du CNRP en fonction des constantes de rigidité sont déterminées pour un **composite unidirectionnel** comme suit :

$$E_{//} = n - \frac{l^2}{k} \quad E_{-} = n - \frac{4m(kn - l^2)}{kn - l^2 + mn} \quad G_{LT} = 2p \quad \nu_{LT} = \frac{l}{2k}$$

2.4.3. Nanotubes orientés aléatoirement

La distribution d'orientation des nanotubes dans le composite est caractérisée par une fonction de densité de probabilité pour les nanotubes orientés de manière aléatoire, auquel cas le composite est isotrope.

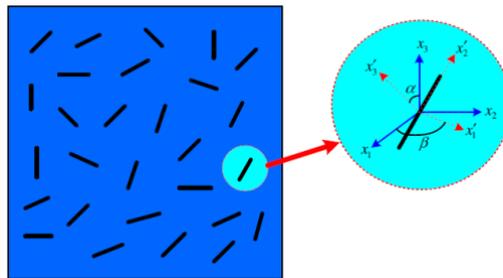


Fig. 2.5 Élément de volume représentatif (RVE) avec des NTC droits orientés au hasard.

Le module d'Young effectif E et le coefficient de Poisson ν du matériau sont donnés par :

$$E = \frac{9KG}{3K + G} \quad \nu = \frac{3K - 2G}{6K + 2G}$$

Shi et al. [13] expressions dérivées pour le module d'encombrement K et le module de cisaillement G d'un **composite renforcé de nanotubes droits orientés aléatoirement** en utilisant la **méthode de Mori-Tanaka** qui sont donnés comme

$$K_{in} = K_m + \frac{V^r \zeta (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3(V^r \zeta + V^r \zeta \alpha_r)} G_{in} = G_m + \frac{V^r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2(V^r \zeta + V^r \zeta \beta_r)}$$

$$\begin{aligned} K_{in} &= K_m + \frac{V^r \zeta (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3(\xi - V^r \zeta + V^r \zeta \alpha_r)} (A) K_{out} \\ &= K_m + \frac{V^r (1 - \zeta) (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3[(1 - \xi) - V^r (1 - \zeta) + V^r (1 - \zeta) \alpha_r]} (B) \end{aligned}$$

où K_m et G_m sont respectivement les modules de traction et de cisaillement de la matrice m .

$$K_m = E_m \quad G_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}$$

$$\alpha_r = \frac{3(K_m + G_m) + k_r - l_r}{3(K_m + k_r)}$$

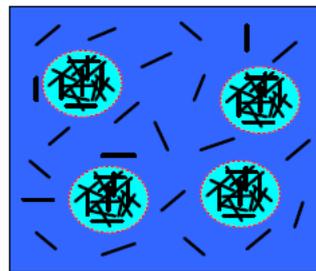
$$\begin{aligned} \beta_r &= \frac{1}{5} \left\{ \frac{4G_m + 2k_r + l_r}{3(K_m + k_r)} + \frac{4G_m}{G_m + p_r} \right. \\ &\quad \left. + \frac{2[G_m(3K_m + G_m) + G_m(3K_m + 7G_m)]}{3(3K_m + k_r) + m_r(3K_m + 7G_m)} \right\} \end{aligned}$$

$$\delta_r = \frac{1}{3} \left[n_r + 2l_r + \frac{(2k_r + l_r)(3K_m + 2G_m - l_r)}{(G_m + k_r)} \right]$$

$$\eta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{2}{3} (n_r - l_r) + \frac{8G_m p_r}{G_m + p_r} + \frac{+2(k_r - l_r)(2G_m + l_r)}{G_m + p_r} + \frac{8m_r G_m (3K_m + 4G_m)}{3K_m (m_r + G_m) + G_m (7m_r + G_m)} \right\}$$

2.4.4. Agglomération de nanotubes orientés aléatoirement

Il a été observé dans les composites renforcés de nanotubes de carbone qu'une grande quantité de nanotubes est concentrée dans des agglomérats. Un modèle d'agglomération micromécanique à deux paramètres est utilisé pour déterminer l'effet de l'agglomération des nanotubes sur les propriétés élastiques des composites CNRP orientés aléatoirement [13]. Les régions avec des nanotubes concentrés sont supposées être de forme sphérique et sont considérées comme des inclusions avec des propriétés élastiques différentes de celles du matériau environnant.



2.6 Élément de volume représentatif (RVE) avec modèle d'inclusion d'Eshelby d'agglomération de NTC.

$$V_F + V_{NCM} = 1$$

Le volume total V^r des nanotubes CNT dans l'élément de volume représentatif peut être divisé en deux parties :

$$V^r = V_r^{inclusion} + V_r^m$$

Où $V_r^{inclusion}$ et V_r^m désignent les volumes de nanotubes dispersés respectivement dans les inclusions et dans la matrice. Les deux paramètres utilisés pour décrire l'agglomération sont définis comme suit :

$$\xi = \frac{V_{inclusion}}{V^*}, \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad \zeta = \frac{V_r^{inclusion}}{V^r}, \quad 0 \leq \zeta \leq 1$$

Où

ξ désigne la fraction volumique d'inclusions, $V_{inclusion}$, par rapport au volume total du composite V^* (RVE) et

ζ désigne la fraction volumique de nanotubes dans les inclusions $V_r^{inclusion}$ par rapport au volume total de nanotubes V^r .

- Lorsque $\xi = 1$, les nanotubes sont uniformément dispersés dans la matrice, et avec la diminution de ξ , le degré d'agglomération augmente.
- Lorsque $\zeta = 1$, tous les nanotubes sont concentrés dans les inclusions avec la concentration de nanotubes dans les inclusions diminuant avec la diminution de ζ .
- Lorsque $\xi = \zeta$, les nanotubes sont uniformément répartis au sein de la matrice et ζ doit être supérieur à ξ pour que l'agglomération soit présente.

Les fractions volumiques de nanotubes dans les inclusions et dans la matrice sont exprimées respectivement en

$$\frac{V_r^{inclusion}}{V_{inclusion}} = \frac{V^r \zeta}{\xi} \frac{V_r^m}{V^* - V_{inclusion}} = \frac{V^r (1 - \zeta)}{(1 - \xi)}$$

Les modules de volume effectifs K_{in} et K_{out} et les modules de cisaillement effectifs G_{in} et G_{out} des inclusions et de la matrice, respectivement, sont calculés pour des nanotubes orientés aléatoirement :

$$K_{in} = K_m + \frac{V^r \zeta (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3(\xi - V^r \zeta + V^r \zeta \alpha_r)} (A) K_{out}$$

$$= K_m + \frac{V^r (1 - \zeta) (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3[(1 - \xi) - V^r (1 - \zeta) + V^r (1 - \zeta) \alpha_r]} (B)$$

$$G_{in} = G_m + \frac{V^r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2(\xi - V^r \zeta + V^r \zeta \beta_r)} (C) \quad G_{out}$$

$$= G_m + \frac{V^r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2[(1 - \xi) - V^r (1 - \zeta) + V^r (1 - \zeta) \beta_r]} (D)$$

$$K_m = E_m \quad G_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}$$

$$\alpha_r = \frac{3(K_m + G_m) + k_r - l_r}{3(K_m + k_r)}$$

$$\beta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{4G_m + 2k_r + l_r}{3(K_m + k_r)} + \frac{4G_m}{G_m + p_r} + \frac{2[G_m(3K_m + G_m) + G_m(3K_m + 7G_m)]}{3(3K_m + k_r) + m_r(3K_m + 7G_m)} \right\}$$

$$\delta_r = \frac{1}{3} \left[n_r + 2l_r + \frac{(2k_r + l_r)(3K_m + 2G_m - l_r)}{(G_m + k_r)} \right]$$

$$\eta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{2}{3} (n_r - l_r) + \frac{8G_m p_r}{G_m + p_r} + \frac{+2(k_r - l_r)(2G_m + l_r)}{G_m + p_r} + \frac{8m_r G_m (3K_m + 4G_m)}{3K_m (m_r + G_m) + G_m (7m_r + G_m)} \right\}$$

Le comportement élastique d'une cellule élémentaire du matériau composite peut être exprimé par :

$$\begin{aligned}
\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} &= \begin{bmatrix} n & l & l & 0 & 0 & 0 \\ l & k+m & k-m & 0 & 0 & 0 \\ l & k-m & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2p \end{bmatrix} C_r \\
&= \begin{bmatrix} n & l & l & 0 & 0 & 0 \\ l & k+m & k-m & 0 & 0 & 0 \\ l & k-m & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{1}{E_L} & -\frac{\nu_{TL}}{E_T} & -\frac{\nu_{ZL}}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{LT}}{E_T} & \frac{1}{E_T} & -\frac{\nu_{ZT}}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{LZ}}{E_Z} & -\frac{\nu_{TZ}}{E_Z} & \frac{1}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{TZ}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{ZL}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{LT}} \end{bmatrix}^{-1}
\end{aligned}$$

- k, l, m, n et p sont les modules élastiques de Hill ;
- n est le module de traction uniaxial dans la direction de la fibre (*direction1*),
- k est le module de compression en déformation plane normal à la direction de la fibre,
- l est le module transversal associé,
- m et p sont les modules de cisaillement dans les plans normaux et parallèles au sens des fibres, respectivement, comme spécifié dans la Réf. [13].

Le module de masse effectif K et le module de cisaillement effectif G du composite sont dérivés pour les composites particulières comme :

$$K = K_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)}{1 + \alpha(1 - \xi) \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)} \right] \quad \mathbf{G}$$

$$= G_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)}{1 + \beta(1 - \xi) \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)} \right]$$

$$\alpha = \frac{1 + \nu_{out}}{3(1 - \nu_{out})} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu_{out})}{15(1 - \nu_{out})} \nu_{out} = \frac{3K_{out} - 2G_{out}}{6K_{out} + 2G_{out}}$$

Le module d'Young effectif E et le rapport de Poisson ν sont à nouveau donnés

par : $E = \frac{9KG}{3K+G}$ $\nu = \frac{3K-2G}{6K+2G}$

$$\rho(z) = (\rho_r - \rho_m)V_r + \rho_m$$

$$V_F + V_{NCM} = 1$$

Le volume total V^r des nanotubes CNT dans l'élément de volume représentatif peut être divisé en deux parties :

$$V^r = V_r^{inclusion} + V_r^m$$

où $V_r^{inclusion}$ et V_r^m désignent les volumes de nanotubes dispersés respectivement dans les inclusions et dans la matrice. Les deux paramètres utilisés pour décrire l'agglomération sont définis comme

$$\xi = \frac{V_{inclusion}}{V^*}, \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad \zeta = \frac{V_r^{inclusion}}{V^r}, \quad 0 \leq \zeta \leq 1$$

Où

ξ désigne la fraction volumique d'inclusions, $V_{inclusion}$, par rapport au volume total du composite V^* (RVE) et

ζ désigne la fraction volumique de nanotubes dans les inclusions $V_r^{inclusion}$ par rapport au volume total de nanotubes V^r .

- Lorsque $\xi = 1$, les nanotubes sont uniformément dispersés dans la matrice, et avec la diminution de ξ , le degré d'agglomération augmente.
- Lorsque $\zeta = 1$, tous les nanotubes sont concentrés dans les inclusions avec la concentration de nanotubes dans les inclusions diminuant avec la diminution de ζ .
- Lorsque $\xi = \zeta$, les nanotubes sont uniformément répartis au sein de la matrice et ζ doit être supérieur à ξn pour que l'agglomération soit présente.

Les fractions volumiques de nanotubes dans les inclusions et dans la matrice sont exprimées respectivement en

$$\frac{V_r^{inclusion}}{V_{inclusion}} = \frac{c_r \zeta}{\xi} \frac{V_r^m}{V^* - V_{inclusion}} = \frac{c_r (1 - \zeta)}{(1 - \xi)}$$

2.4.4.1 Agglomération complète des NTC ($\zeta=1$).

Considérons d'abord le cas extrême d'agglomération où tous les CNT sont concentrés dans des sous-régions sphériques, c'est-à-dire $\zeta=1$

Considérons d'abord le cas extrême d'agglomération où tous les CNT sont concentrés dans des sous-régions sphériques, c'est-à-dire $\zeta=1$.

Ainsi, le modèle d'agglomération à deux paramètres ci-dessus est réduit à un seul paramètre d'agglomération,

Ensuite, la fraction volumique locale des NTC dans les « inclusions », qui sont, à leur tour, noyées dans la matrice polymère vierge, est écrite sous la forme

$$\frac{V_r}{V_{inclusion}} = \frac{c_r \zeta}{\xi} = \frac{c_r}{\xi}$$

Si l'influence de l'anisotropie des NTC est omise et que leur propriété élastique est décrite par le module de Young E_r et le coefficient de Poisson ν_r , les modules effectifs du composite avec les NTC agglomérés peuvent être estimés par l'équation. (31).

Premièrement, le **modèle de Voigt** fournit le module effectif des inclusions E_{in} et leur E_{out} environnant comme [41]

[41] Jones, R. M., 1999, *Mechanics of Composite Materials*, Taylor & Francis, Philadelphia.

$$\zeta = 1 \qquad 0 \leq \xi \leq 1$$

$$E_{out} = \frac{3}{8} \left\{ \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} E_{CNT} + \left[1 - \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} \right] E_m \right\} + \frac{5}{8} \left\{ \frac{(1-\xi) E_{CNT} E_m}{[(1-\xi) - c_r(1-\zeta)] E_{CNT} + c_r(1-\zeta) E_m} \right\}$$

$$E_{in} = \frac{3}{8\xi} [c_r\zeta E_{CNT} + c_r(\xi - c_r\zeta) E_m] + \frac{5}{8} \frac{\xi E_{CNT} E_m}{(\xi - c_r\zeta) E_{CNT} + c_r\zeta E_m}$$

où la matrice et les NTC sont considérés comme isotropes, avec les modules de Young E_m et E_{CNT} , respectivement. C'est-à-dire que l'influence de l'anisotropie des NTC est négligée.

Nous prenons les valeurs représentatives des NTC et de la matrice comme

$$E_r = 450 \text{ GPa}, E_m = 51.9 \text{ GPa}, \nu_r = \nu_m = 0.3$$

Sous différentes teneurs moyennes c_r de NTC dans le matériau, le module de Young effectif est tracé sur la figure 9(a) par rapport au paramètre d'agglomération ξ .

Lorsque les NTC sont uniformément dispersés dans le composite, c'est-à-dire $\xi = 1$, le module de Young effectif a la valeur maximale. Avec la diminution du paramètre d'agglomération ξ à partir de l'unité, la rigidité effective diminue très rapidement.

Lorsque $\xi < 1$, l'ajout de NTC ne produit pas d'effet de raidissement évident.

Si les NTC sont considérés comme transversalement isotropes, les modules élastiques effectifs du composite peuvent être déterminés par les équations. (17), (32) et (34).

Dans la **deuxième méthode**, nous supposons que les nanotubes sont transversalement isotropes. Les modules d'élasticité de la **matrice hybride** sont estimés par **la méthode de Mori-Tanaka**, comme décrit dans ce mémoire. On suppose que les NTC sont orientés aléatoirement dans les inclusions et, par conséquent, les inclusions sont isotropes.

$$\xi = 1 \qquad 0 \leq \zeta \leq 1$$

Les modules de volume effectifs K_{in} et K_{out} et les modules de cisaillement effectifs G_{in} et G_{out} des inclusions et de la matrice sont donnés, respectivement, par

$$\begin{aligned} K_{in} &= K_m + \frac{c_r \zeta (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \alpha_r)} K_{out} \\ &= K_m + \frac{c_r (1 - \zeta) (\delta_r - 3K_m \alpha_r)}{3[(1 - \xi) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \alpha_r]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_{in} &= G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \beta_r)} G_{out} \\ &= G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2[(1 - \xi) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \beta_r]} \end{aligned}$$

$$K_m = E_m = 1.9 \text{ GPa} \qquad G_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}$$

$$\alpha_r = \frac{3(K_m + G_m) + k_r - l_r}{3(K_m + k_r)}$$

$$\beta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{4G_m + 2k_r + l_r}{3(K_m + k_r)} + \frac{4G_m}{G_m + p_r} \right. \\ \left. + \frac{2[G_m(3K_m + G_m) + G_m(3K_m + 7G_m)]}{3(3K_m + k_r) + m_r(3K_m + 7G_m)} \right\}$$

$$\delta_r = \frac{1}{3} \left[n_r + 2l_r + \frac{(2k_r + l_r)(3K_m + 2G_m - l_r)}{(G_m + k_r)} \right]$$

$$\eta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{2}{3} (n_r - l_r) + \frac{8G_m p_r}{G_m + p_r} + \frac{2(k_r - l_r)(2G_m + l_r)}{G_m + p_r} \right. \\ \left. + \frac{8m_r G_m (3K_m + 4G_m)}{3K_m(m_r + G_m) + G_m(7m_r + G_m)} \right\}$$

Le module de masse effectif K et le module de cisaillement effectif G du composite sont dérivés pour les composites particulières comme :

$$K = K_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)}{1 + \alpha(1 - \xi) \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)} \right] \quad G$$

$$= G_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)}{1 + \beta(1 - \xi) \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)} \right]$$

$$\alpha = \frac{1 + \nu_{out}}{3(1 - \nu_{out})} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu_{out})}{15(1 - \nu_{out})} \nu_{out} = \frac{3K_{out} - 2G_{out}}{6K_{out} + 2G_{out}}$$

Le module d'Young effectif E et le rapport de Poisson ν sont à nouveau donnés par :

$$E = \frac{9KG}{3K + G} \quad \nu = \frac{3K - 2G}{6K + 2G}$$

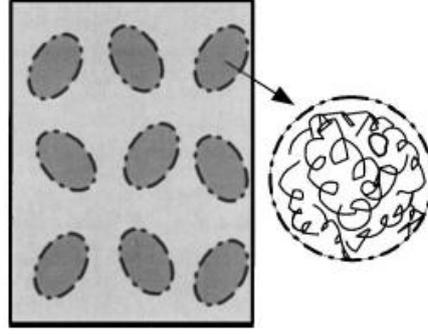


Fig.2.7 modèle d'inclusion d'Shelby d'agglomération de NTC

Le volume total V_r des NTC dans le RVE V peut être divisé en deux parties suivantes :

$$V_r = V^{inclusion} + V_r^m$$

$$\xi = \frac{V^{inclusion}}{V^*}, \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad \zeta = \frac{V_r^{inclusion}}{V_r}, \quad ,$$

$$0 \leq \zeta \leq 1$$

$$\frac{V_r^{inclusion}}{V^{inclusion}} = \frac{c_r \zeta}{\xi} \frac{V_r^m}{V^* - V^{inclusion}} = \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)}, \quad c_r = \frac{V_r}{V^*}$$

Les modules élastiques effectifs des inclusions hybrides et de la matrice peuvent être calculés par différentes méthodes de micromécanique. Supposons que toutes les orientations des CNT soient complètement aléatoires Fig.2.7.

Nous utiliserons deux méthodes pour estimer la propriété élastique des inclusions et de la matrice.

Premièrement, le modèle de Voigt fournit le module effectif des inclusions E_{in} et leur E_{out} Environnant comme [48]

$$E_{out} = \frac{3}{8} \left\{ \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} E_{CNT} + \left[1 - \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} \right] E_m \right\} + \frac{5}{8} \left\{ \frac{(1-\xi) E_{CNT} E_m}{[(1-\xi) - c_r(1-\zeta) E_m]} \right\},$$

$$E_{in} = \frac{3}{8\xi} [c_r \zeta E_{CNT} + c_r(\xi - c_r \zeta) E_m] + \frac{5}{8} \frac{\xi E_{CNT} E_m}{[(\xi - c_r \zeta) - c_r \zeta E_m]}$$

Où la matrice et les NTC sont considérés comme isotropes, avec les modules de Young E_m et E_{CNT} , respectivement. C'est-à-dire que l'influence de l'anisotropie des NTC est négligée.

Dans la deuxième méthode, nous supposons que les nanotubes sont transversalement isotropes. Les modules D'élasticité de la matrice hybride sont estimés par la méthode de Mori-Tanaka,

On suppose que les NTC sont orientés aléatoirement dans les inclusions et, par conséquent, les inclusions sont a isotropes.

Les modules de volume effectifs K_{in} et K_{out} et les modules de cisaillement effectifs G_{in} et G_{out} des inclusions et de la matrice sont donnés, respectivement, par

$$K_{in} = K_m + \frac{c_r \zeta (\delta_r - 3k_m \alpha_r)}{3(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \alpha_r)}$$

$$K_{out} = K_m + \frac{c_r (1 - \zeta) (\delta_r - 3k_m \alpha_r)}{3[(1 - \zeta) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \alpha_r]}$$

$$G_{in} = G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \beta_r)}, \quad G_{out} = G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2[(1 - \xi) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \beta_r]}$$

$$k_m = E_m, \quad G_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}$$

Pour une inclusion de sphère dans une matrice isotrope, le tenseur d'Eshelby lit

$$s_{1111} = s_{2222} = s_{3333} = \frac{7 - 5\nu_{out}}{15(1 - \nu_{out})}$$

$$s_{1122} = s_{3322} = s_{3311} = \frac{1 - 5\nu_{out}}{15(1 - \nu_{out})}$$

$$s_{1313} = s_{2323} = s_{1212} = \frac{4 - 5\nu_{out}}{15(1 - \nu_{out})}$$

ν_{out} est Le coefficient de poisson de la matrice hybride.

$$\nu_{out} = \frac{3K_{out} - 2G_{out}}{6K_{out} + 2G_{out}}$$

Enfin, le module de compression effectif K et le module de cisaillement effectif G du composite sont dérivés de la méthode de Mori-Tanaka comme

$$\begin{aligned} K &= K_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)}{1 + \alpha \left(1 - \xi \right) \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)} \right] G \\ &= G_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)}{1 + \beta \left(1 - \xi \right) \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)} \right] \end{aligned}$$

2.5.1. Nanotubes alignés

Le premier modèle micromécanique fait intervenir le comportement élastique du CNRP renforcé de nanotubes alignés, rectilignes et infiniment longs. Dans le modèle micromécanique, les SWNT sont considérés comme des fibres solides avec des propriétés de matériau anisotropes et les valeurs des constants élastiques sont tirées de Popov et al. [49]. La liaison à l'interface nanotube-polymère est considérée comme parfaite. Le composite est considéré comme transversalement isotrope. Le comportement élastique d'une cellule élémentaire du matériau composite peut être exprimé par

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} n & l & l & 0 & 0 & 0 \\ l & K+m & K-m & 0 & 0 & 0 \\ l & K-m & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2P \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix}$$

$$C_r = \begin{bmatrix} n & l & l & 0 & 0 & 0 \\ l & k+m & k-m & 0 & 0 & 0 \\ l & k-m & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p \end{bmatrix}$$

$$C_r = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_l} & -\frac{\nu_{tl}}{E_T} & -\frac{\nu_{ZL}}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{LT}}{E_T} & \frac{1}{E_T} & -\frac{\nu_{ZT}}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{LZ}}{E_Z} & -\frac{\nu_{TZ}}{E_Z} & \frac{1}{E_Z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{TZ}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{ZL}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{LT}} \end{bmatrix}^{-1}$$

K, L, m, n et p sont les modules élastiques de Hill ; n est le module de traction uni axial dans la direction de la fibre (direction I), k est le module de compression en déformation plane normal à la direction de la fibre, l est le module transversal associé, m et p sont les modules de cisaillement dans les plans normaux et parallèles à la sens des fibres, respectivement, comme spécifié dans la Réf. [50].

Un composite avec une fraction volumique de phase de renforcement C_r , Le module de Young E_m , et le coefficient de Poisson ν_m , de la matrice m sont considérés.

En utilisant la méthode de Mori-Tanaka, les modules élastiques de Hill's sont trouvés :

$$K = \frac{E_m \{E_m C_m + 2K_r(1 + \nu_m)[1 + C_r(1 - 2\nu_m)]\}}{2(1 + \nu_m)[E_m(1 + C_r - 2\nu_m) + 2C_m K_r(1 - 2\nu_m^2)]}$$

$$l = \frac{E_m \{\nu_m C_m [E_m + 2K_r(1 + \nu_m)] + [2C_r L_r(1 - \nu_m^2)]\}}{(1 + \nu_m)[2C_m K_r(1 - \nu_m - 2\nu_m^2) + E_m(1 + C_r - 2\nu_m)]}$$

$$n = \frac{E_m^2 C_m (1 + C_r - C_m \nu_m) + 2C_m C_r (k_r n_r - l_r^2)(1 + \nu_m)^2 (1 - 2\nu_m)}{(1 + \nu_m)[2C_m K_r(1 - \nu_m - 2\nu_m^2) + E_m(1 + C_r - 2\nu_m)]} + \frac{E_m [2C_m^2 K_r(1 - \nu_m) + C_r n_r(1 - 2\nu_m + C_r) - 4C_m l_r \nu_m]}{[2C_m K_r(1 - \nu_m - 2\nu_m^2) + E_m(1 + C_r - 2\nu_m)]}$$

$$P = \frac{E_m \{E_m C_m + 2(1 + C_r)[p_r(1 + \nu_m)]\}}{2(1 + \nu_m)[E_m(1 + C_r) + 2C_m P_r(1 + \nu_m)]}$$

$$m = \frac{E_m \{E_m C_m + 2m_r(1 + \nu_m)[3 + C_r - 4\nu_m]\}}{2(1 + \nu_m)[E_m(C_m + 4C_r(1 - \nu_m)) + 2C_m m_r(3 - \nu_m - 4\nu_m^2)]}$$

Où K_r , l_r , m_r , n_r et p_r sont les modules élastiques de Hill's pour la phase de renforcement.

Les expressions des modules du CNRP en fonction des constantes de rigidité sont déterminées pour un composite unidirectionnel comme suit :

$$E_{\parallel} = n - \frac{l^2}{k} \quad , \quad E_{\perp} = \frac{4m(kn - l^2)}{kn - l^2 + mn}$$

Le module de Young et le coefficient de Poisson du polystyrène sont respectivement

$$E_m = 1.9 \text{ GPa} \quad \nu_m = 0.3$$

A des fins d'illustration, nous utilisons les valeurs représentatives suivantes des constantes élastiques des SWCNT :

$$p_r = 1 \text{ GPa}, \quad l_r = 10 \text{ GPa} \quad m_r = 1 \text{ GPa}, \quad K_r = 30 \text{ GPa}, \\ N_r = 450 \text{ GPa}$$

Qui sont tirés des résultats analytiques de Popov et al. [32], qui ont calculé les modules d'élasticité des NTC.

Un composite avec une fraction volumique de phase de renforcement

$$C_r=0.2$$

La fraction volumique de la matrice polymère est donnée par

$$C_m = 1 - C_r = 0,8$$

$$G_{lt} = 2P, \quad \nu_{Lt} = \frac{l}{2K}$$

2.5.2. Nanotubes orientés aléatoirement

La distribution d'orientation des nanotubes dans Le composite est caractérisée par une fonction de densité de probabilité pour les nanotubes orientés de manière aléatoire, auquel cas le composite est isotrope.

Le module d'Young effectif E et le coefficient de Poisson du matériau sont donnés par :

$$E = \frac{9KG}{3K+G}, \quad \nu = \frac{3K-2G}{6K+2G}$$

Shi et al. [13] expressions dérivées pour le module d'encombrement K et le module de cisaillement G d'un composite renforcé de nanotubes droits orientés aléatoirement en utilisant la méthode de Mori-Tanaka qui sont donnés comme suit :

$$K_{in} = K_m + \frac{C_r \zeta (\delta_r - 3k_m \alpha_r)}{3(\xi - C_r \zeta + C_r \zeta \alpha_r)}$$

$$K_{out} = K_m + \frac{C_r (1 - \zeta) (\delta_r - 3k_m \alpha_r)}{3[(1 - \zeta) - C_r (1 - \zeta) + C_r (1 - \zeta) \alpha_r]}$$

$$G_{in} = G_m + \frac{C_r \zeta (\eta_r - 2G_M \beta_r)}{2(\xi - C_r \zeta + C_r \zeta \beta_r)}, \quad G_{out} = G_m + \frac{C_r \zeta (\eta_r - 2G_M \beta_r)}{2[(1 - \xi) - C_r (1 - \zeta) + C_r (1 - \zeta) \beta_r]}$$

où K et G , sont respectivement les modules de traction et de cisaillement de la matrice.

où k_m et G_m , sont respectivement les modules de traction et de cisaillement de la matrice m.

$$k_m = E_m \quad , \quad G_m = \frac{E_m}{2(1+\nu_m)}$$

$$\alpha_r = \frac{3(k_m + G_m) + K_r - l_r}{3(K_m + k_r)}$$

$$\beta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{4G_m + 2k_r + l_r}{3(k_m + k_r)} + \frac{4G_m}{G_m + p_r} + \frac{2[G_m(3k_m + G_m) + G_m(3k_m + 7G_m)]}{3(3k_m + k_r) + m_r(3k_m + 7G_m)} \right\}$$

$$\delta_r = \frac{1}{3} \left[n_r + 2l_r + \frac{(2k_r + l_r)(3k_m + 2G_m - l_r)}{(G_m + k_r)} \right]$$

$$\eta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{2}{3} (n_r - l_r + \frac{8G_m p_r}{G_m + p_r} + \frac{2(k_r - l_r)(2G_m + l_r)}{(G_m + p_r)} + \frac{8m_r G_m (3K_m + 4G_m)}{3k_m(m_r + G_m) + G_m(7m_r + G_m)} \right\}$$

2.5.3. Agglomération de nanotubes orientés aléatoirement

Il a été observé dans les composites renforcés de nanotube de Carbone qu'une grande quantité de nanotubes est concentré dans des agglomérats. Un modèle d'agglomération micromécanique à deux paramètres est utilisé pour déterminer l'effet de l'agglomération des nanotubes sur les propriétés élastiques des composites CNRP orientés aléatoirement (13). Les régions avec des nanotubes concentrés sont supposées être de forme sphérique et sont considérées comme des inclusions avec des propriétés élastiques différentes de celles du matériau environnant.

$$V_F + V_{NCM} = 1$$

Le volume total V^r des nanotubes CNT dans l'élément de volume représentatif peut être divisé en deux parties :

$$V^r = V_r^{inclusion} + V_r^m$$

Où $V_r^{inclusion}$ et V_r^m désignent les volumes de nanotubes dispersés respectivement dans les inclusions et dans la matrice. Les deux paramètres utilisés pour décrire l'agglomération sont définis comme

$$\xi = \frac{V_{inclusion}}{V^*}, \quad 0 \leq \xi \leq 1$$

$$\zeta = \frac{V_r^{inclusion}}{V^r}, \quad 0 \leq \zeta \leq 1$$

Où

ξ Désigne la fraction volumique d'inclusions, $V_{Inclusion}$ par rapport au volume total du composite V^* (RVE) et ζ désigne la fraction volumique de nanotubes dans les inclusions $V_r^{inclusion}$ par rapport au volume total de nanotubes.

- Lorsque $\xi=1$ les nanotubes sont uniformément dispersés dans la matrice, et avec la diminution de ξ , le degré d'agglomération augmente.
- Lorsque $\zeta=1$, tous les nanotubes sont concentrés dans les inclusions avec la concentration de nanotubes dans les inclusions diminuant avec la diminution de ζ .
- Lorsque $\xi=\zeta$, les nanotubes sont uniformément répartis au sein de la matrice et ζ doit être supérieur à ξ En pour que l'agglomération soit présente.

Les fractions volumiques de nanotubes dans les inclusions et dans la matrice sont exprimées respectivement en

$$\frac{V_r^{inclusion}}{V_{inclusion}} = \frac{c_r \zeta}{\xi} \frac{V_r^m}{V^* - V_{inclusion}} = \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)}, \quad c_r = \frac{V^r}{V^*}$$

Considérons d'abord le cas extrême d'agglomération où tous les CNT ont concentré dans des sous-régions sphériques, c'est-à-dire $\zeta=1$.

Ainsi, le modèle d'agglomération à deux paramètres ci-dessus est réduit à un seul paramètre d'agglomération.

Ensuite, la fraction volumique locale des NTC dans les a inclusions », qui sont, à leur tour, noyées dans la matrice polymère vierge, est écrite sous la forme

$$\frac{V_r}{V_{inclusion}} = \frac{c_r \zeta}{\xi} = \frac{c_r}{\xi}$$

Si l'influence de l'anisotropie des NTC est omise et que leur propriété élastique est décrite par le module de Young E_r et le coefficient de Poisson ν_r , les modules effectifs du composite avec les NTC agglomérés peuvent être estimés par l'équation. (31).

Premièrement, le modèle de Voigt fournit le module effectif des inclusions E_{in} et leur E_{out} environnant comme [41]

$$\zeta=1 \quad 0 \leq \xi \leq 1$$

$$E_{out} = \frac{3}{8} \left\{ \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} E_{CNT} + \left[1 - \frac{c_r(1-\zeta)}{(1-\xi)} \right] E_m \right\} + \frac{5}{8} \left\{ \frac{(1-\xi) E_{CNT} E_m}{[(1-\xi) - c_r(1-\zeta) E_m]} \right\},$$

$$E_{in} = \frac{3}{8\xi} [c_r \zeta E_{CNT} + c_r(\xi - c_r \zeta) E_m] + \frac{5}{8} \frac{\xi E_{CNT} E_m}{[(\xi - c_r \zeta) - c_r \zeta E_m]}$$

Où la matrice et les NTC sont considérés comme isotropes, avec les modules de Young E_m et E_{CNT} , respectivement. C'est-à-dire que l'influence de l'anisotropie des NTC est négligée.

Nous prenons les valeurs représentatives des NTC et de la matrice comme

$$E_r = 450 \text{ GPa} \quad \nu_m = \nu_r = 0.3$$

Sous différentes teneurs moyennes c_r de NTC dans le matériau, le module de Young effectif est tracé sur la figure 9(a) par rapport au paramètre d'agglomération ξ

Lorsque les NTC sont uniformément dispersés dans le composite, c'est-à-dire $\xi = 1$, le module de Young effectif a la valeur maximale. Avec la diminution du paramètre d'agglomération ξ à partir de l'unité, la rigidité effective diminue très rapidement

- Lorsque $\xi < 1$, l'ajout de NTC ne produit pas d'effet de raidissement évident.

Si les NTC sont considérés comme transversalement isotropes, les modules élastiques effectifs du composite peuvent être déterminés par les équations (17), (32) et (34).

Dans la deuxième méthode, nous supposons transversalement isotropes. Les modules d'élasticité de la matrice hybride sont estimés par la méthode de Mori-Tanaka.

On suppose que les NTC sont orientés aléatoirement dans les inclusions et, par conséquent, les inclusions sont isotropes

$$K_{in} = K_m + \frac{c_r \zeta (\delta_r - 3k_m \alpha_r)}{3(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \alpha_r)}$$

$$K_{out} = K_m + \frac{c_r (1 - \zeta) (\delta_r - 3k_m \alpha_r)}{3[(1 - \zeta) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \alpha_r]}$$

$$G_{in} = G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \beta_r)}, \quad G_{out} = G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2[(1 - \zeta) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \beta_r]}$$

$$k_m = E_m, \quad G_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}$$

$$\alpha_r = \frac{3(k_m + G_m) + K_r - l_r}{3(K_m + k_r)}$$

$$\beta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{4G_m + 2k_r + l_r}{3(k_m + k_r)} + \frac{4G_m}{G_m + p_r} + \frac{2[G_m(3k_m + G_m) + G_m(3k_m + 7G_m)]}{3(3k_m + k_r) + m_r(3k_m + 7G_m)} \right\}$$

$$\delta_r = \frac{1}{3} \left[n_r + 2l_r + \frac{(2k_r + l_r)(3k_m + 2G_m - l_r)}{(G_m + k_r)} \right]$$

$$\eta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{2}{3} (n_r - l_r + \frac{8G_m p_r}{G_m + p_r} + \frac{2(k_r - l_r)(2G_m + l_r)}{(G_m + p_r)} + \frac{8m_r G_m (3K_m + 4G_m)}{3k_m (m_r + G_m) + G_m (7m_r + G_m)} \right\}$$

Le module de masse effectif K et le module de cisaillement effectif G du composite sont dérivés pour les composites particulières comme

$$K = K_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)}{1 + \alpha (1 - \xi) \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)} \right] G$$

$$= G_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)}{1 + \beta (1 - \xi) \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)} \right]$$

$$\alpha = \frac{1 + \nu_{out}}{3(1 - \nu_{out})} \quad \beta = \frac{2(4 - 5\nu_{out})}{15(1 - \nu_{out})}$$

2.5.4 Agglomération partielle des NTC

Dans des cas plus généraux, les deux paramètres ξ et ζ sont nécessaires pour décrire l'agglomération des NTC. Le premier représente la quantité relative de NTC qui sont concentrés dans les régions locales ou « inclusions »,

et le second présente la fraction volumique de ces inclusions dans le composite.

$$K_{in} = K_m + \frac{c_r \zeta (\delta_r - 3k_m \alpha_r)}{3(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \alpha_r)}$$

$$K_{out} = K_m + \frac{c_r (1 - \zeta) (\delta_r - 3k_m \alpha_r)}{3[(1 - \zeta) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \alpha_r]}$$

$$G_{in} = G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2(\xi - c_r \zeta + c_r \zeta \beta_r)}, \quad G_{out} = G_m + \frac{c_r \zeta (\eta_r - 2G_m \beta_r)}{2[(1 - \xi) - c_r (1 - \zeta) + c_r (1 - \zeta) \beta_r]}$$

$$k_m = E_m = 1.9GPA, \quad G_m = \frac{E_m}{2(1 + \nu_m)}$$

$$\alpha_r = \frac{3(k_m + G_m) + K_r - l_r}{3(K_m + k_r)}$$

$$\beta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{4G_m + 2k_r + l_r}{3(k_m + k_r)} + \frac{4G_m}{G_m + p_r} + \frac{2[G_m(3k_m + G_m) + G_m(3k_m + 7G_m)]}{3(3k_m + k_r) + m_r(3k_m + 7G_m)} \right\}$$

$$\delta_r = \frac{1}{3} \left[n_r + 2l_r + \frac{(2k_r + l_r)(3k_m + 2G_m - l_r)}{(G_m + k_r)} \right]$$

$$\eta_r = \frac{1}{5} \left\{ \frac{2}{3} \left(n_r - l_r + \frac{8G_m p_r}{G_m + p_r} + \frac{2(k_r - l_r)(2G_m + l_r)}{(G_m + p_r)} + \frac{8m_r G_m (3K_m + 4G_m)}{3k_m(m_r + G_m) + G_m(7m_r + G_m)} \right) \right\}$$

Le module de masse effectif K et le module de cisaillement effectif G du composite sont dérivés pour les composites particulières :

$$\begin{aligned} K &= K_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)}{1 + \alpha(1 - \xi) \left(\frac{K_{in}}{K_{out}} - 1 \right)} \right] G \\ &= G_{out} \left[1 + \frac{\xi \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)}{1 + \beta(1 - \xi) \left(\frac{G_{in}}{G_{out}} - 1 \right)} \right] \end{aligned}$$

$$\alpha = \frac{1 + \nu_{out}}{3(1 - \nu_{out})} \beta = \frac{2(4 - 5\nu_{out})}{15(1 - \nu_{out})}$$

$$\nu_{out} = \frac{3K_{out} - 2G_{out}}{6K_{out} + 2G_{out}}$$

Le module d'Young effectif E et le rapport de Poisson sont à nouveau donnés :

$$E = \frac{9KG}{3K+G}, \quad \nu = \frac{3K-2G}{6K+2G}.$$

2.6 Conclusion :

Deux méthodes ont été étudiées dans ce mémoire afin de calculer les caractéristiques mécaniques des nano-tubes :

la première est la méthode de Voigt et la deuxième est la méthode de Mori-Tanaka, la méthode de Voigt utilise des valeurs numériques des propriétés des nano-tubes. La deuxième méthode est la méthode Mori-Tanaka, elle utilise plus de données intrinsèques du problème.

Chapitre 03

Analyse et application des deux modèles :
de Voigt et de Mori-Tanaka.

3.1 Introduction

Dans ce chapitre On a élaboré trois programmes sous **Matlab** pour la caractérisation des propriétés mécaniques des nano-composites pour cela les deux méthodes, la méthode de Voigt et la méthode de Mori-Tanaka, présenter au chapitre 2 sont utilisées.

La première application :

est utilisé pour le calcul de G_{12} , G_{23} , E et coefficient de poisson ν en fonction de C_r en employant le deuxième modèle de Mori-Tanaka.

La deuxième pour le calcul de l'effet de l'agglomération sur E et la variation de ξ en fonction de ζ en utilisons le modèle de Voigt.

3.2 Application I : étude de calcul de G_{12} , G_{23} , E et coefficient de poisson ν en fonction de C_r en employant le deuxième modèle de Mori-Tanaka.

3.2.1 Données

Les inclusions sont isotropes.

$$\xi = 1$$

$$0 \leq \zeta \leq 1$$

3.2.2 Programme I : élaboration d'un code sous **Matlab** pour calculer G_{12} , G_{23} , E et coefficient de poisson ν .

```
1- clear all;
2-
3- % INPUTS
4-
5- kr=30;
6- lr=10;
7- mr=1;
8- nr=450;
9- pr=1; % {GPa}
```

```

10-
11-      :
12-      Em=1.9; vm=0.3;
13-      %CALCULATIONS
14-
15-      N=1000;
16-      t=1/N;
17-
18-      cr=0:t:1;
19-      for i=1:N+1
20-          cm(i)=1-cr(i);
21-
22-          k(i)=(Em*(Em*cm(i)+2*kr*(1+vm)*(1+cr(i)*(1-
23-              2*vm))))/(2*(1+vm)*...
24-              (Em*(1+cr(i)-2*vm)+2*cm(i)*kr*(1-vm-2*vm^2)));
25-          l(i)=(Em*(cm(i)*vm*(Em+2*kr*(1+vm))+2*cr(i)*lr*(1-
26-              vm^2)))/...
27-          n(i)=(Em^2*cm(i)*(1+cr(i)-
28-              cm(i)*vm)+2*cm(i)*cr(i)*(kr*nr-lr^2)*...
29-              (1+vm)^2*(1-2*vm))/((1+vm)*(2*cm(i)*kr*(1-vm-
30-              2*vm^2)+Em*...
31-              (1+cr(i)-2*vm)))+(Em*(2*cm(i)^2*kr*(1-
32-              vm)+cr(i)*nr*(1-2*vm+cr(i))*...
33-              -4*cm(i)*lr*vm))/(2*cm(i)*kr*(1-vm-
34-              2*vm^2)+Em*(1+cr(i)-2*vm));
35-          p(i)=(Em*(Em*cm(i)+2*(1+cr(i))*pr*(1+vm)))/(2*(1
36-              +vm)*(Em*(1+cr(i))+...
37-              2*cm(i)*pr*(1+vm)));
38-      end
39-
40-      %OUTPUT
41-      %graphs
42-
43-      figure(1)
44-      clf
45-      semilogy(cr,E11 , cr,E22)
46-      xlabel('cr','FontSize',12)
47-      ylabel('Effective elastic modulus (Gpa)','FontSize',12)
48-      title('Effective elastic modulus','FontSize',12)
49-      legend('EL','ET')
50-      plottedit on
51-
52-      figure(2)
53-      clf
54-      plot(cr,v12)
55-      xlabel('cr','FontSize',12)
56-      ylabel('Effective Poisons Ratio v12','FontSize',12)
57-      title('Effective Poisons Ratio V','FontSize',12)
58-
59-      figure(3)

```

```

57-   clf
58-   plot(cr,G12)
59-   xlabel('cr','FontSize',12)
60-   ylabel('Effective Shear Modulus G12 (GPa)','FontSize',12)
61-   title('Effective Shear Modulus','FontSize',12)
62-   plottedit on
63-
64-   figure(4)
65-   clf
66-   plot(cr,G23)
67-   xlabel('cr','FontSize',12)
68-   ylabel('Effective Shear Modulus G23 (GPa)','FontSize',12)
69-   title('Effective Shear Modulus','FontSize',12)
70-   plottedit on

```

3.2.3 Résultats et analyse :

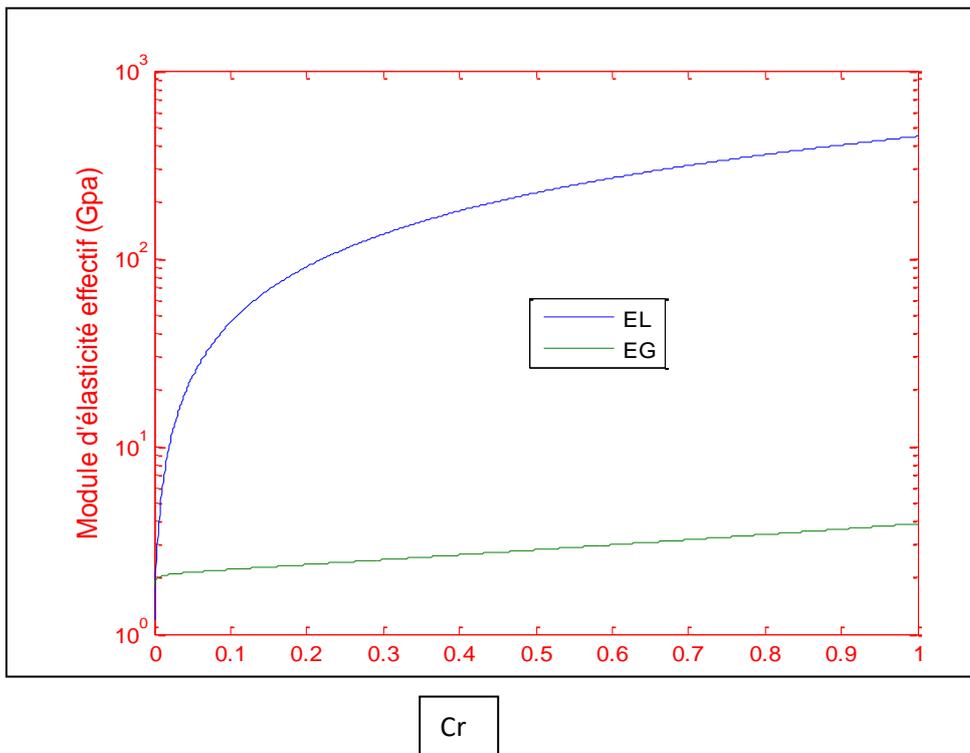


Fig 3.1 Un CNT avec un système de coordonnées globale et local

La figure 3.1 montre les modules élastiques effectifs d'un composite de polystyrène renforcé par des NTC alignés et droits. Les modules d'élasticité EL et EG parallèles et normaux aux NTC sont présentés en fonction de la fraction volumique Cr des NTC, où EL et EG sont liés aux modules d'élasticité de Hill par Le module de Young et le coefficient de Poisson du polystyrène.

Il est à noter que les NTC sont hautement anisotropes, avec un module de Young dans la direction du tube supérieur de deux ordres de grandeur à celui normal au tube. Il est observé à partir de la figure 3.1 qu'en raison de la propriété anisotrope des NTC, le module d'élasticité **EL** du composite dans la direction des NTC augmente beaucoup plus rapidement avec la fraction volumique **cr** que EG perpendiculairement à la direction des NTC.

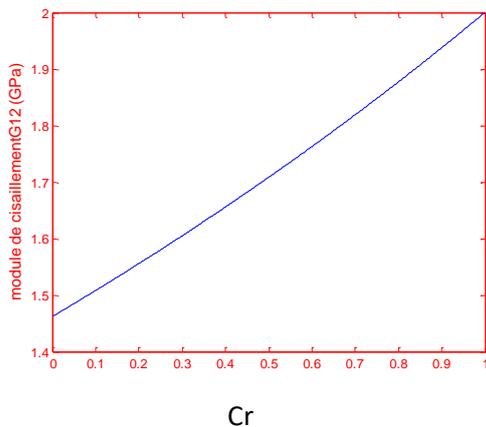


Fig 3.2 Variation du module de cisaillement G23 fonction de Cr

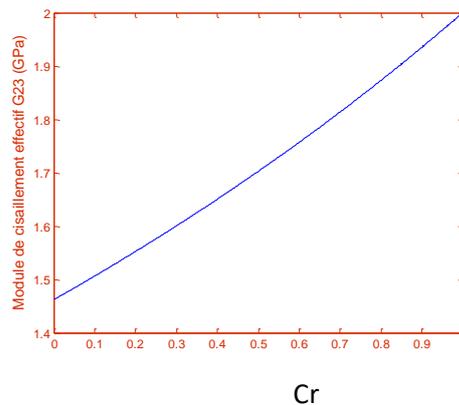
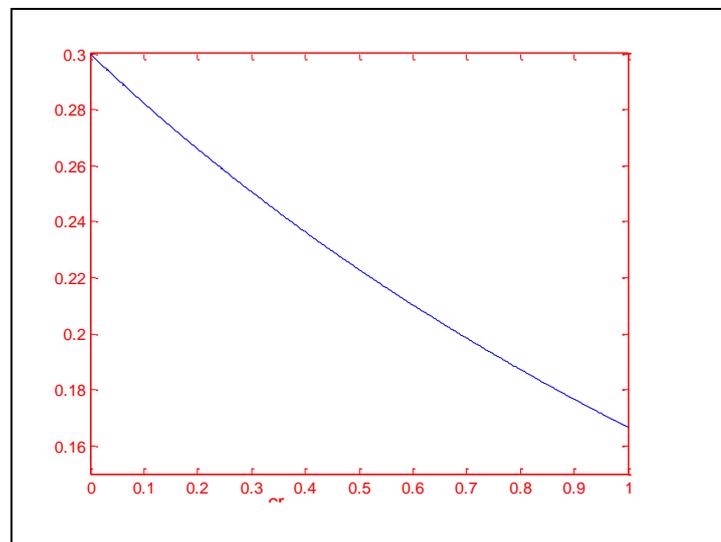


Fig 3.3 Variation du module de en cisaillement G12 fonction de Cr

La fraction volumique a un effet important sur les modules de cisaillements G12 et G23 l'augmentation de Cr entraîne une augmentation rapide des module de cisaillement. Les résultats des deux modules sont typiques

Module de poisson



Cr

Fig 3.4 Coefficient de poisson effectif en fonction de Cr

Le Coefficient de poisson effectif diminue avec l'augmentation de Cr pour une fraction volumique Cr=1 Coefficient de poisson effectif $\nu = 0.17$.

3.3 Application II : étude de calcul de l'effet de l'agglomération sur E en utilisons le modèle de Voigt. :

3.3.1 Données :

Le module de Young et le coefficient de Poisson du **polystyrène** sont respectivement

$$E_m = 1.9 \text{ GPa} \quad \nu_m = 0.3$$

À des fins d'illustration, nous utilisons les valeurs représentatives suivantes des constantes élastiques des **SWCNT** :

$$n_r = 450 \text{ GPa} \quad k_r = 30 \text{ GPa}, \quad m_r = 1 \text{ GPa}, \\ p_r = 1 \text{ GPa}, \quad l_r = 10 \text{ GPa}$$

qui sont tirés des résultats analytiques de Popov et al. [32], qui ont calculé les modules d'élasticité des NTC.

[32] Popov, V. N., Doren, V. E., and Balkanski, M., 2000, "Elastic Properties of Crystals of Single-Walled Carbon Nanotubes," Solid State Commun., **114**, pp.395–399.

Un composite avec une fraction volumique de phase de renforcement

$$c_r = 0.2$$

La fraction volumique de la matrice polymère est donnée par

$$c_m = 1 - c_r = 0.8$$

3.3.2 Programme II : élaboration d'un code sous **Matlab** pour calculer l'effet de l'agglomération sur E :

```
E_m=1.9;
E_r=450.; %GPa
E_CNT=E_r;
v_m=0.3;
v_r=0.3;

zita =0.04;
c_r=0.2;
c_m=1-c_r;

N=100;
K=1/N;

for i=1:N
    exi(1)=0;
    deltaexi=abs(1/N);
    exi(i+1) =exi(i)+deltaexi;
    E_out(i)=(3/8)*((c_r*(1-zita))/((1-exi(i)))*E_CNT+(1-(c_r*(1-zita)))/((1-
exi(i))))*E_m)+...
    (5/8)*(((1-exi(i))*E_CNT* E_m)/(((1-exi(i))-c_r*(1-
zita))*E_CNT+c_r*(1-zita)*E_m));
    E_in(i)=(3/(8*exi(i)))*(c_r*zita*E_CNT+(exi(i)-c_r*zita)*E_m)+...
    (5/8)*(exi(i)*E_CNT*E_m)/((exi(i)-c_r*zita)*E_CNT+c_r*zita*E_m);
end

figure(1)
plot(exi(40:N-K),E_out(40:N-K),'.-b');
xlabel('exi');
ylabel('E_out');
hold on
```

3.3.3 Résultats et analyse :

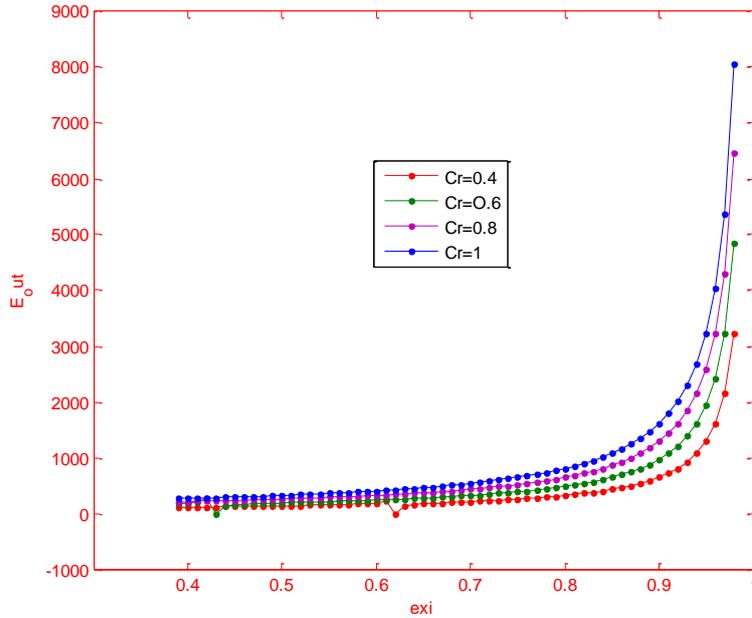


Fig 3.5 Effet de l'agglomération des NTC sur le module élastique effectif avec $\nu = 1$, dans lequel les NTC sont supposés isotropes

On voit qu'avec l'augmentation de la quantité relative ζ des NTC agglomérés dans les inclusions, le module Young effectif du composite augmente rapidement après un $\xi=0.9$.

Quand les NTC sont considérés comme isotropes, les modules de Young effectifs sont

Les courbes changeantes des modules de traction effectifs avec le paramètre d'agglomération ξ sont données sur la figure 9). Il est également clairement démontré que l'agglomération des NTC exerce un effet affaiblissant significatif sur les composites renforcés de NTC.

Sous différentes teneurs moyennes C_r de NTC dans le matériau, le module de Young effectif est tracé sur la figure 9 par rapport au paramètre d'agglomération ξ .

Lorsque les NTC sont uniformément dispersés dans le composite, c'est-à-dire $\xi = 1$, le module de Young effectif a la valeur maximale. Avec l'augmentation du paramètre d'agglomération ξ à partir de l'unité, la rigidité effective augmente très rapidement.

Lorsque $\xi < 1$, l'ajout de NTC ne produit pas d'effet de raidissement évident.

3.4 Application III : étude de calcul de la variation de ξ en fonction de ζ utilisons le modèle de Voigt.

3.4.1 Données

Le module de Young et le coefficient de Poisson du **polystyrène** sont respectivement

$$E_m = 1.9 \text{ GPa} \quad \nu_m = 0.3$$

À des fins d'illustration, nous utilisons les valeurs représentatives suivantes des constantes élastiques des **SWCNT** :

$$n_r = 450 \text{ GPa} \quad k_r = 30 \text{ GPa}, \quad m_r = 1 \text{ GPa}, \\ p_r = 1 \text{ GPa}, \quad l_r = 10 \text{ GPa}$$

qui sont tirés des résultats analytiques de Popov et al. [32], qui ont calculé les modules d'élasticité des NTC.

[32] Popov, V. N., Doren, V. E., and Balkanski, M., 2000, "Elastic Properties of Crystals of Single-Walled Carbon Nanotubes," *Solid State Commun.*, **114**, pp.395–399.

Un composite avec une fraction volumique de phase de renforcement

$$c_r = 0.2$$

La fraction volumique de la matrice polymère est donnée par

$$c_m = 1 - c_r = 0.8$$

3.4.2 Programme III : élaboration d'un code sous Matlab pour calculer la variation de ξ en fonction de ζ

```

1-clear all
2- kr=30;
3- lr=10;
4- mr=1;
5- nr=450;
6- pr=1; %(GPa)
7-
8-
9- Em=1.9; %GPa
10-     vm=0.3;
11-
12-
13-     Km=Em
14-     Gm =Em/(2*(1+vm ));
15-
16-     N=1000;
17-     t=1/N;
18-
19-     x=0:t:1-t;
20-     z=0:t:1-t
21-
22-     br=((4*Gm+2*kr+lr)/(3*(Gm+kr)))+(4*Gm)/(Gm+pr)+(2*(Gm*(3*Km+Gm)+Gm*
23-     ...
24-     (3*Km+7*Gm)))/(Gm*(3*Km+Gm)+mr*(3*Km+7*Gm))/5;
25-
26-     dr=(nr+2*lr+((2*kr+lr)*(3*Km+2*Gm-lr))/(Gm+kr))/3;
27-
28-     nnr=((2/3)*(nr-
29-     lr)+(8*Gm*pr)/(Gm+pr)+(8*mr*Gm*(3*Km+4*Gm))/(3*Km*(mr+Gm)...
30-     +Gm*(7*mr+Gm)))+(2*(kr-
31-     lr)*(2*Gm+lr))/(3*(Gm+kr))/5;
32-
33-
34-     Gin=Gm+(cr*z(j)*(nnr-2*Gm*br))/(2*(x(i)-
35-     cr*z(j)+cr*z(j)*br));
36-     Gout=Gm+(cr*(1-z(j))*(nnr-2*Gm*br))/(2*(1-x(i)-cr*(1-
37-     z(j))+cr*(1-z(j))*br));
38-
39-     vout=(3*Kout-2*Gout)/(2*(3*Kout+Gout));
40-
41-     a=(1+vout)/(3*(1-vout));
42-     b=2*(4-5*vout)/(15*(1-vout));
43-     K=Kout*(1+(x(i)*(Kin/Kout-1))/(1+a*(1-
44-     x(i))*(Kin/Kout-1)));
45-     G=Gout*(1+(x(i)*(Gin/Gout-1))/(1+b*(1-
46-     x(i))*(Gin/Gout-1)));
47-
48-
49-
50-
51-
52-
53-
54-
55-
56-
57-
58-
59-
60-
61-
62-
63-
64-
65-
66-
67-
68-
69-
70-
71-
72-
73-
74-
75-
76-
77-
78-
79-
80-
81-
82-
83-
84-
85-
86-
87-
88-
89-
90-
91-
92-
93-
94-
95-
96-
97-
98-
99-
100-

```

```

43- EE=E/E(2,2);
44- figure(1)
45- [C,h] = contour(xx,zz,EE,v)
46- % clabel(C,h,'manual')
47- xlabel('\xi','FontSize',12)
48- ylabel('\zeta','FontSize',12)
49-
50-

```

3.4.3 Résultats et analyse :

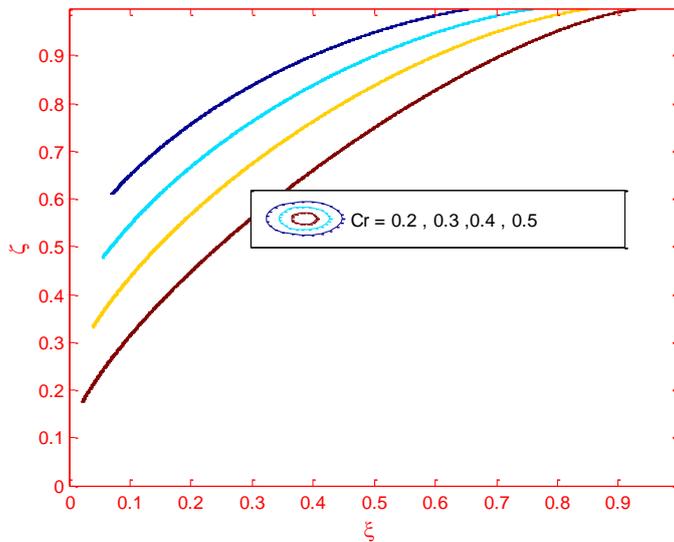


Fig 3.6 variation de ξ en fonction de ζ

Dans des cas plus généraux, les deux paramètres ζ et ξ sont nécessaires pour décrire l'agglomération des NTC. Le premier représente la quantité relative de NTC qui sont concentrés dans les régions locales ou « inclusions », et le second présente la fraction volumique de ces inclusions dans le composite. L'augmentation de la fraction volumique d'inclusions ξ entraîne l'augmentation de la fraction volumique de nanotubes dans les inclusions ζ pour différents Cr.

Ces résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux existants. La caractéristique de propagation de l'onde transversale (NTC) est étudiée et les effets de ces paramètres de la petite échelle et chiralité des nanotubes de

carbone sont discutés. Ce travail devrait être utile dans la conception des structures nono-composites.

3.5 Conclusion :

L'étude précédente nous en mène à les conclusions suivantes :

- les modules élastiques effectifs d'un composite de polystyrène renforcé par des NTC alignés et droits. Les modules d'élasticité EL et EG parallèles et normaux aux NTC sont présentés en fonction de la fraction volumique C_r des NTC, où EL et EG sont liés aux modules d'élasticité de Hill par Le module de Young et le coefficient de Poisson du polystyrène .
- Les NTC sont considérés comme isotropes, les modules de Young effectifs pour $\xi = 0.5$.
- Le module de Young mesuré est beaucoup plus petit que le modèle théorique actuel.
- Les deux paramètres ζ et ξ sont nécessaires pour décrire l'agglomération des NTC. Le premier représente la quantité relative de NTC qui sont concentrés dans les régions locales ou « inclusions », et le second présente la fraction volumique de ces inclusions dans le composite.
- l'agglomération des NTC sur les modules effectifs des composites renforcés de NTC sont étudiés dans le document suivant.

Lorsque $\xi = 1$, les nanotubes sont uniformément dispersés dans la matrice, et avec la diminution de ξ , le degré d'agglomération augmente.

Lorsque $\zeta = 1$, tous les nanotubes sont concentrés dans les inclusions avec la concentration de nanotubes dans les inclusions diminuant avec la diminution de ζ .

Lorsque $\xi = \zeta$, les nanotubes sont uniformément répartis au sein de la matrice et ζ doit être supérieur à ξ pour que l'agglomération soit présente.

Remarque :

Dans notre étude on a pas utilisé une étude comparative entre les deux méthodes de Voigt et de Mori-Tanaka, sachant que cette dernière elle est plus précise car elle utilise plus de donnée intrinsèque du problème (les propriétés des nano-carbone sont évalués correctement avec leurs paramètres l,m,k)

La première méthode est une méthode simplificative, elle utilise des valeurs numériques des propriétés des nano-tubes .

Conclusion générale :

Dans ce mémoire, on a étudié les effets de l'ondulation et de l'agglomération dans les nanotubes de carbone qui sont examinés théoriquement en utilisant des méthodes de micromécanique analytique. Plusieurs nouveaux modèles de programmation sous **Matlab** sont suggérés pour considérer l'effet d'ondulation ou de courbure des NTC, qui sont supposés avoir une forme en tube ou en spirale. L'influence de l'agglomération des NTC sur la rigidité effective est analysée en utilisant un modèle d'inclusion d'Eshelby, où le composite est supposé avoir des inclusions sphériques avec des NTC concentrés. Il est établi que ces deux mécanismes peuvent réduire significativement l'effet raidissant des NTC. La présente étude fournit non seulement la relation importante entre les propriétés effectives et la morphologie des composites renforcés de NTC, mais peut également être utile pour améliorer et adapter leurs propriétés mécaniques. Les résultats obtenus indiquent qu'un composite renforcé de NTC ne peut éventuellement atteindre des propriétés mécaniques supérieures que si les NTC sont contrôlés pour avoir une forme droite et pour être dispersés uniformément dans l'ensemble du matériau. Ces exigences élevées ne sont en aucun cas faciles à satisfaire, mais des évolutions considérables ont eu lieu.

Bibliographie

- [5] S. Iijima, Nature 354(1991)56.
- [6] S. Iijima, T. Ichihashi, Nature 363(1993)603.
- [7] M.S. Dresselhaus, P. Avouris, Top.Appl.Phys.80(2001)1.
- [8] B. Adrian, H. Peter, N. Takeshi, D. Cees, Science 294(2001)1317.
- [9] H. Dai, J. H. Hafner, A. G. Rinzler, D. T. Colbert, R. E. Smalley, Nature 384(1996)147.
- [10] E. T. Thostenson, Z. Ren, T. W. Chou, Compos. Sci. Technol. 61(2001)1899
- [11] A. R. Ranjbar, A. Ghorbanpour, B. Soltani, Physica E 39(2007)230.
- [12] Y. Jin, F. G. Yuan, Compos. Sci. Technol. 63(2003)1507.
- [13] C. F. Cornwell, L. T. Wille, Solid State Commun. 101(1997)555.
- [14] D. W. Brenner, Phys. Rev. B 42(1990)9458.
- [15] E. W. Wong, P. E. Sheehan, C. M. Lieber, Science 277(1997)1971.
- [16] C. Q. Ru, Phys. Rev. B 62(2000)10405.
- [17] X. Wang, H. Cai, Acta Mater. 54(2006)2067.
- [18] J. N. Reddy, S. D. Pang, J. Appl. Phys. 103(2008)023511.
- [19] Q. Wang, V. K. Varadan, S. T. Quek, Phys. Lett. A 357(2006)130.
- [20] Amara, A. Tounsi, I. Mechab, E. A. Adda Bedia, Appl. Math. Model. 34(2010)3933.
- [21] A. Benzair, A. Tounsi, A. Besseghier, H. Heireche, N. Moulay, L. Boumia, J. Phys. D 41(2008)225404.
- [22] L. Wang, H. Hu, Phys. Rev. B 71(2005)195412.
- [23] Y. G. Hu, K. M. Liew, Q. Wang, J. Appl. Phys. 106(2009)044301.

- [24] T.Murmu,S.C.Pradhan,Comput.Mater.Sci.46(2009)854.
- [25] B.I. Yakobson,C.J.Brabec,J.Bernholc,Phys.Rev.Lett.76(1996)2511.
- [26] V.M. Harik,SolidStateCommun.120(2001)331.
- [28] A.C.Eringen,Int.J.Eng.Sci.10(1972)1.
- [29] A.C.Eringen,J.Appl.Phys.54(1983)4703.
- [30] J. Peddieson,R.Buchanan,R.P.McNitt,Int.J.Eng.Sci.41(2003)305.
- [31] Y.Zhang,G.Liu,X.Han,Phys.Lett.A340(2005)258.
- [32] P.Lu,H.P.Lee,C.Lu,P.Q.Zhang,J.Appl.Phys.99(2006)073510.
- [33] P.Lu,H.P.Lee,C.Lu,P.Q.Zhang,Int.SolidsStruct.44(2007)5289.
- [34] H.
Heireche,A.Tounsi,A.Benzair,I.Mechab,J.Appl.Phys.104(2008)014301.
- [35] W.X.Bao,C.C.Zhu,W.Z.Cui,PhysicaB352(2004)156.
- [38].Mura, T, 1987, Micromechanics of Defects in Solids,
MartinusNijhoffPublishers, Dordrecht