

N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE & POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR & DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILLALI LIABES  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES  
SIDI BEL ABBES

# ***THESE DE DOCTORAT***

*Présentée par*  
*Mr Liani Mohamed*

*Spécialité : Sciences physiques*  
*Option : Physiques des matériaux*

*Intitulée*

*Etude des propriétés physiques et  
mécaniques des nanotubes en carbone par  
le modèle de Timoshenko*

*Soutenue le 26/05/2022*

*Devant le jury composé de :*

<b>Président :</b> Mr Boucif ABBAR	Professeur	UDL SIDI BEL ABBES
<b>Examineurs :</b>		
Mr Lakhdar BOUMIA	MCA	UNIV EL Wancharrissi Tissemsilt
Mr Hadj Moulay Ahmed MAZOUZ	MCA	UNIV Bougara de Boumerdes
Mr Aze Eddine ADJADJ	MCA	UNIV Ibn Khaldoun Tiaret
<b>Directeur de thèse :</b>		
Mr Nouredine MOULAY	MCA	UDL SIDI BEL ABBES
<b>Co-Directeur de thèse :</b>		
Mr Djillali BENSALID	Professeur	UNIV Ain Temouchent

*Année universitaire :2021/2022.*

## *Dédicace*

*Je dédie ce travail de thèse de doctorat à :*

*La mémoire de mon père*

*Ma mère*

*Mes enseignants depuis l'école primaire*

*Tous ceux qui me sont chers*

# Remerciements

Tous les éloges et les remerciements sont à ALLAH l'un, le seul créateur et gouverneur de cet univers. Envers qui nous sommes reconnaissant de ce que nous sommes devenus et pour tout ce qu'il nous a accordé bien qu'il ne puisse jamais être remercié assez.

Je remercie profondément mon encadreur, Mr Noureddine MOULAY Maître de conférences de l'université de Djilali liabes de Sidi-Bel-Abbès, pour m'avoir fait confiance et avoir bien voulu se lancer avec moi dans la nanotechnologie. Merci pour ta disponibilité et tes conseils avisés, sans lesquels ce travail ne serait pas arrivé là où il en est aujourd'hui.

Je remercie vivement Mr Djillali BENSAID Professeur auprès de centre universitaire d'Ain Temouchent pour son aide et son soutien jusqu'à l'aboutissement de ce travail.

Je tiens à remercier particulièrement Mr Boucif ABBAR Professeur auprès de l'université de Djilali liabes de Sidi-Bel-Abbès, qui a accepté de présider le jury.

Je remercie vivement Mr Lakhdar BOUMIA Maître de conférences de centre universitaire de TISSEMSILET pour son aide et son soutien jusqu'à l'aboutissement de ce travail et m'honorer de faire partie du jury.

De sincères remerciements également à Mr Hadj Moulay Ahmed MAZOUZ Maître de conférences de l'université Bougara de Boumerdes, d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je voudrais remercier Aze Eddine ADJADJ Maître de conférence de l'université Ibn Khaldoune de TIARET pour d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je tiens en particulier et avant tout à remercier mes parents, sans lesquels je n'aurais pu terminer ce travail et qui m'ont toujours apporté tout leur soutien et leur appui. Enfin à tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin pour réaliser ce travail, à tous encore Merci.

# Résumé

## Résumé :

Dans ce travail, le model non-local de Timochenko est utilisé pour étudier les propriétés physiques tels que l'influence thermique sur les fréquences naturelles d'un nanotube de carbone monoparois (SWCNT) de type chiral, zigzag et armchair. En se basant sur la théorie nonlocal d'élasticité, les équations gouvernantes du mouvement sont formulées en considérant l'effet thermique. Les effets du paramètre d'échelle, le nombre de modes de vibration, la chiralité des SWCNT, le rapport de dimension et le changement de température sur les propriétés de vibration thermique des nanotubes de carbone monoparois sont examinées et discutées. Les résultats obtenus ont montrés une dépendance significative des fréquences naturelles sur le paramètre non local, le changement de température, le rapport de dimension et la chiralité des SWCNTs. Ce travail devrait être une référence utile pour l'application et la conception de dispositifs nanoélectroniques et nanoélectromécaniques qui utilisent les propriétés de vibration thermique des SWCNTs.

**Les mots clés :** *model non-local de Timochenko ; nanotube de carbone monoparois (SWCNT) ; l'effet de petite échelle ; l'effet thermique ; propriétés vibratoires*

## Abstract:

In this work, the nonlocal Timoshenko beam model is used to study the physical properties such as the thermal influence on the natural frequencies of a single-walled carbon nanotube (SWCNT) of chiral, zigzag and armchair type. Based on the nonlocal theory of elasticity, the governing equations of motion are formulated by considering thermal effect. The effects of small scale parameter, the chirality of SWCNTs, the vibrational mode number, the aspect ratio of SWCNTs and temperature changes on the thermal vibration properties of single-walled nanotubes are examined and discussed. The results obtained showed a significant dependence of the natural frequencies on the nonlocal parameter, the temperature change, the aspect ratio and the chirality of the SWCNTs. This work should be a useful reference for the application and design of nanoelectronics and nanoelectromechanical devices that make use of the thermal vibration properties of SWCNTs.

**Keywords :** *nonlocal Timoshenko beam model; singled walled carbon nanotubes (SWCNTs); nonlocal theory of elasticity ; small-scale effect; thermal effect; vibration properties*

## المخلص:

في هذا العمل ، تم استخدام نموذج شعاع تيموشينكو غير المحلي لدراسة الخصائص الفيزيائية مثل التأثير الحراري على الترددات الطبيعية للأنبوب النانو الكربوني أحادي الجدار من النوع اللولبي والمتعرج والكرسي بذراعي. بناءً على النظرية غير المحلية للمرونة ، تتم صياغة معادلات الحركة من خلال مراعاة التأثير الحراري . تم فحص ومناقشة تأثيرات معلمة المقياس ، شيرالتي أنبوب النانو الكربوني أحادي الجدار ، رقم الوضع الاهتزازي ، ونسبة العرض إلى الارتفاع للأنبوب النانو الكربوني أحادي الجدار و تغيرات درجة الحرارة. أظهرت النتائج التي تم الحصول اعتمادًا على الترددات الطبيعية على المعلمة القياس الغير المحلية ، وتغير درجة الحرارة ، ونسبة العرض إلى الارتفاع وشيرالتي للأنبوب النانو الكربوني أحادي الجدار. يمكن أن يكون هذا العمل مرجعًا مفيدًا لتطبيق وتصميم الإلكترونيات النانوية والأجهزة الكهروميكانيكية النانوية التي تستفيد من خصائص الاهتزاز الحراري الخاصة بالأنابيب النانو الكربوني أحادي الجدار.

**الكلمات المفتاحية :** نموذج شعاع تيموشينكو غير المحلي ؛ الأنابيب النانوية الكربونية أحادية الجدار ؛ نظرية ؛ تأثير حراري ؛ خصائص الاهتزاز ؛ تأثير صغير الحجم المرونة غير المحلية



# Sommaire

Remerciements	
Résumé	
Sommaire	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction Générale .....	2
Références.....	6

## Chapitre I : Généralités sur les nanotubes de carbone

I.1 Introduction.....	9
I.2 Les Allotropes de carbone.....	9
I.2.1 Diamant.....	10
I.2.2 Graphite.....	11
I.2.3 Les Fullerènes.....	11
I.2.4 Le graphène.....	13
I.2.5 Conclusion.....	14
I.3 Historique Du $C_{60}$ aux nanotubes monocouches.....	14
I.4 Les types des nanotubes de carbone.....	18
I.4.1 Les nanotubes monofeuillets ou monoparois(SWCNTs).....	18
I.4.2 Les nanotubes multifeuillets ou multiparois ( <i>DWCNTs</i> ou <i>MWCNTs</i> ) .....	20
I.4.2 Structures du nanotube de carbone.....	21
I.6 Propriétés générales des nanotubes de carbone.....	27
I.6.1 propriétés physiques.....	28
I.6.2 propriétés mécaniques.....	28
I.6.3 propriétés électroniques.....	31
I.6.4 propriétés électriques.....	33
I.6.5 propriétés thermiques.....	35

<b>I.6.6 Propriétés optiques.....</b>	<b>38</b>
<b>I.6.7 Propriétés d'émission de champ.....</b>	<b>40</b>
<b>I.9.8 Propriétés de capillarité.....</b>	<b>41</b>
<b>I.6.9 Propriétés chimiques et physico - chimiques .....</b>	<b>42</b>
<b>I.7 Fagots et défauts structuraux des nanotubes de carbone.....</b>	<b>43</b>
<b>I.8 Toxicité des nanotubes de carbone.....</b>	<b>44</b>
<b>I.9 Conclusion.....</b>	<b>45</b>
<b>Références.....</b>	<b>46</b>

## **CHAPITRE II : Les méthodes de synthèse et de caractérisation des CNTs et applications**

<b>II.1 Les méthodes de synthèse des nanotubes de carbone.....</b>	<b>57</b>
<b>II. I.1 Introduction.....</b>	<b>57</b>
<b>II.1.2 Procédés de synthèse à haute température .....</b>	<b>58</b>
<b>II.1.2.a Méthode de l'arc électrique.....</b>	<b>58</b>
<b>II.1.2.b Méthode d'ablation laser .....</b>	<b>60</b>
<b>II.1.3 Procédés de synthèse à basses température.....</b>	<b>62</b>
<b>II.1.3.1 Méthode de dépôt chimique en phase vapeur (CVD).....</b>	<b>62</b>
<b>II.1.3.1.a La CVD thermique.....</b>	<b>63</b>
<b>II.1.3.1.b La CVD assistée par plasma (PECVD) .....</b>	<b>64</b>
<b>II.1.3.1.c La CVD assistée par laser (LCCVD) .....</b>	<b>64</b>
<b>II.2 Méthodes de caractérisation.....</b>	<b>65</b>
<b>II.2.1 Introduction.....</b>	<b>65</b>
<b>II.2.2 Microscopies.....</b>	<b>66</b>
<b>II.2.3 Spectroscopies.....</b>	<b>68</b>
<b>II.3 Applications.....</b>	<b>70</b>
<b>II.3.1 Mécaniques.....</b>	<b>70</b>
<b>II.3.2 L'électronique.....</b>	<b>71</b>
<b>II.3.3 Le stockage d'énergie.....</b>	<b>72</b>
<b>II.3.4 Les capteurs.....</b>	<b>73</b>
<b>II.3.5 Medical.....</b>	<b>73</b>

<b>II.4 conclusion.....</b>	<b>74</b>
<b>Références.....</b>	<b>75</b>

### **CHAPITRE III. MODELES DES MILIEUX CONTINUS(MMC) ET FORMULATIONS**

<b>III.1.Introduction.....</b>	<b>81</b>
<b>III.2.Les conditions de calcul.....</b>	<b>81</b>
<b>III.3. Le modèle continu nonlocal dans un nanotube de carbone.....</b>	<b>81</b>
<b>III.3.1Modèle Euler- Bernoulli.....</b>	<b>82</b>
<b>III.3.2.Modèle Timoshenko.....</b>	<b>85</b>
<b>III.4. La structure atomique du nanotube de carbone monoparoi (SWCNT).....</b>	<b>89</b>
<b>III.5 Conclusion .....</b>	<b>92</b>
<b>Références.....</b>	<b>93</b>

### **Chapitre V.RESULTATS ET DISCUSSIONS**

<b>V.1 Introduction .....</b>	<b>95</b>
<b>V.2 Données .....</b>	<b>95</b>
<b>V.3 Conclusion .....</b>	<b>114</b>
<b>Références.....</b>	<b>115</b>
<b>Conclusion Générale .....</b>	<b>117</b>

# Liste des figures

## CHAPITRE I

Figure. I.1 :	Allotropes du graphène. (Image de [1]).....	9
Figure. I.2 :	Schéma représentatif des différentes formes allotropiques de carbone.[2].....	10
Figure. I.3 :	Structure cristalline du Diamant où $a_0$ est le paramètre du réseau cubique .....	10
Figure. I.4 :	Structure cristalline du graphite hexagonal [7].....	11
Figure. I.5 :	(a) Structure du Buckminster fullerène $C_{60}$ similaire à (b) un icosaèdre tronqué ou c) un ballon de football [8].....	12
Figure. I.6 :	Du $C_{60}$ au $C_{80}$ : les atomes ajoutés au $C_{60}$ rouge [10]. Pour obtenir le $C_{70}$ et le $C_{80}$ sont représentés en rouge [10].....	12
Figure. I.7 :	Nanotube de carbone monocouche. [10].....	13
Figure I.8 :	Le graphène, modèle de base des autres matériaux du carbone : mis en boule en fullerènes, enroulé en nanotubes ou empilé en graphite [13] .....	13
Figure. I.9 :	Allotropes du carbone. [16].....	14
Figure. I.10 :	Image TEM de l'extrémité d'un nanotube multicouche. [27] .....	15
Figure. I.11:	Image MET de faisceaux de nanotubes monocouches (collerette brute produite par arc électrique au GDPC, échantillon employé pour les essais de synthèse de composites MCM 41/SWNTs ....	16
Figure. I.12:	Coupe transversale (image MET) d'oignons de carbone observés dans un échantillon de nanotubes monocouches (collerette brute produite par arc électrique au GDPC). [31].....	16
Figure.I.13:	Image réalisée par microscopie à effet tunnel (STM) d'un nanotube de carbone monoparoi (SWCNT). La barre d'échelle en bas à gauche représente une distance d'1 nm [57].....	18
Figure I.14 :	Un nanotube monocouche fermé par deux demi fullerènes.....	19
Figure I.15 :	à gauche: Représentation graphique d'un SWNT et à droite: image de microscope électronique à transmission de plusieurs SWNT.....	19
Figure. I.16 :	à gauche : Schéma d'un cristal de 7 nanotubes. À droite: Image MET de faisceaux de nanotubes monocouches (collerette brute produite par arc électrique). [61].....	19
Figure. I.17 :	à gauche: Représentation graphique d'un DWCNT et à droite: image de microscope électronique à transmission MET de plusieurs DWCNT [64].....	20
Figure.I.18. :	à gauche: Représentation graphique d'un MWCNT et à droite: image de microscope électronique à transmission MET de MWCNT produit au laboratoire [64].....	21
Figure.I.19 :	Différents enroulements. [65].....	21
Figure.I.20 :	Repliement d'un feuillet graphène et raccordement de manière à former un nanotube zigzag.[66,67].....	22
Figure.I.21 :	Repliement d'un feuillet graphène et raccordement de manière à former un nanotube armchair.[66,67].....	22
Figure.I.22 :	Repliement d'un feuillet graphène, translation d'un bord parallèlement à l'axe du nanotube, puis raccordement de manière à former un nanotube chiral. Cette chiralité provient de son caractère hélicoïdal. [66,67].....	23

Figure.I.23 :	a) Représentation schématique des relations entre le rayon $r$ , l'angle d'hélicité $\theta$ et le vecteur chiral $\vec{C}_h$ pour un nanotube de carbone monofeuillet. On enroule le feuillet de manière à ce que le point A coïncide avec le point B, formant ainsi un nanotube dont les 3 types de chiralité sont indiquées sur la figure [I.10]. b) Image HRTEM d'un nanotube de carbone monofeuillet obtenu par Hashimoto et al [74] qui représente dans la figure.h). L'image fait apparaître la surface atomique du graphène composant le nanotube et sa chiralité (ici 'zigzag').....	24
Figure.I.24 :	Différents modes d'enroulement d'un nanotube de carbone. a) Nanotube chaise (armchair), b) Nanotube zigzag, c) Nanotube chiral [69] .....	25
Figure.I.25 :	Fermeture d'un nanotube.....	26
Figure.I.26 :	Bouchon" de 12 pentagones [65].....	26
Figure.I.27 :	Différents fullerènes.....	27
Figure.I.28 :	Suppression et rétrécissement de certains pentagones [65].....	27
Figure.I.29 :	a) Simulation de la structure atomique d'un coude obtenu par pliure d'un CNT monoparoi. b) micrographie en champs claire d'un coude formé sur b) MWCNT et C) SWCNT sous contraintes mécaniques [86].....	30
Figure.I.30 :	Nanotube de carbone sous contrainte. Sur chaque image la barre blanche représente 500 nm [87].....	31
Figure.I.31 :	Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monocouche en fonction de leurs indices de chiralité $(n, m)$ .....	32
Figure.I.32 :	a) Densité d'états pour un nanotube semi-conducteur (10,0). (b) et un nanotube métallique (9,0). La ligne hachurée est la densité d'états du graphène [92].....	33
Figure.I.33 :	Conductivité électrique des MWCNTs de différents diamètres et des SWCNTs en fonction de leur longueur [101].....	34
Figure.I.34 :	Courbe $I=f(U)$ (a) pour le test 2-pointes et (b) pour le test à 4-pointes [104].....	35
Figure.I.35 :	Exemple de diagramme de kataura [116].les points reliés à l'intérieur de cercle constituent une aide visuelle afin de voir les familles de tubes $(2n+m)=const$ et $(n-m)=const$ [117].....	39
Figure.I.3 :	Fe encapsulé dans un MWCNT [119].....	41
Figure.I.37 :	(a, b) Images TEM à haute résolution de SWCNTs remplis avec des $C_{60}$ (a, b) [37]. Les $C_{60}$ forment une chaîne unidimensionnelle continue à l'intérieur d'un SCWNT individuel (a). L'extrémité d'un fagot de SWCNTs partiellement rempli de $C_{60}$ est représentée en (b). (c) Image TEM d'un SWCNT individuel rempli avec $Gd@C_{82}$ [126] où chaque fullerène est lui-même rempli d'un atome de Gd. Les points plus foncés à l'intérieur des $C_{82}$ en (c) et les points de couleur jaune sur le schéma (d) représentent les atomes de Gd.....	42
Figure.I.38 :	Absorption de pyrènes et enroulement de polymères. ....	42
Figure.I.39 :	Défauts présents aux extrémités et à la paroi des CNTs. [130] .....	43

## CHAPITRE II

Figure.II.1:	Différentes techniques de synthèse à hautes températures.....	57
--------------	---	----

Figure. II.2: Différentes méthodes de synthèse à basses température.....	58
Figure.II.3: Schéma d'un réacteur de synthèse de nanotubes de carbone par la méthode de l'arc électrique [14] .....	59
Figure.II.4: Schéma de l'appareillage d'ablation laser.....	61
Figure.II.5: A gauche : Schéma du système de production de nanotubes de carbone par ablation laser utilisé par l'équipe de R. Smalley à Rice [16]. A droite : Cordes de nanotubes monoparois.....	61
Figure.II.6: a) schéma d'un réacteur CVD pour la croissance des CNTs b) Synthèse de nanotubes de carbone par voie CVD en utilisant des particules métalliques déposées sur un substrat comme catalyseur [24].....	63
Figure.II.7 : Image MEB d'un échantillon de nanotubes produits par arc électrique (GDPC). Chacun des tubes observés sur cette image correspond à un fagot, les « boules » quant à elles sont des nanoparticules de catalyseur. [39].....	66
Figure.II.8: Images MEB de films de nanotubes multicouches alignés. (A) Les tubes ont leurs axes perpendiculaires à la surface observée, de telle sorte que l'on aperçoit leurs pointes. (B) Après un traitement mécanique, les nanotubes sont couchés parallèlement à la surface. On peut distinguer une direction préférentielle. [42].....	67
Figure.II.9: Images STM à résolution atomique de nanotubes monocouches individuels. Le réseau graphène observé en surface des nanotubes permet une identification de la chiralité. T correspond à l'axe du tube et H à la direction d'enroulement des hexagones. Les tubes 10, 11 et 1 sont chiraux, tandis que le tube 7 est zigzag et le 8 est armchair. Un réseau graphène est schématisé en surimpression de l'image STM du tube n°8, de manière à mettre en évidence sa structure armchair. [45].....	67
Figure.II.10 : Analyse thermogravimétrique d'un échantillon brut de nanotubes produits par arc électrique. Le signal ATG (masse w en % en fonction de la température t) est représenté en trait continu. La courbe dérivée $-dw/dt$ est représentée en pointillés longs. La décomposition de cette courbe de DTG en Lorentziennes est représentée en pointillés courts [58].....	70
Figure.II.11: a) Cadre de vélo BMC en résine renforcée par des nanotubes et b) Tête de club de golf Wilson Staff renforcé par les nanotubes.....	71
Figure.II.12: Schéma d'un dispositif d'affichage à l'aide de nanotube de carbone [73].....	72
Figure.II.13: Inclusions moléculaires dans un nanotube : un « cheval de Troie »[80] .....	74

## CHAPITRE III

Figure.III.1 : Vibration transversale d'un nanotube de carbone.....	81
Figure III.2 : Différence entre la déformation d'une poutre Timochenko et d'Euler Bernoulli.....	86
Figure.III.3 : Le diagramme 2D en feuille de graphèn montrant une classification de structure vectorielle utilisée pour définir la structure de CNT [19].....	90
Figure.III.4 : Structure des CNTs avec différentes chiralités: armchair, zigzag et chiral. [20].....	91

## CHAPITRE V

Figure V.1 : Les valeurs du rapport de fréquence ( $\omega_{NT} / \omega_{NE}$ ) du nanotube de carbone de zigzag (14,0), en fonction du rapport longueur/diamètre pour différents nombre de mode(N) obtenue en utilisant le modèle nonlocal de Timoshenko (NT) et le modèle nonlocal d'Euler, le paramètre d'échelle est égale à ( $e_0a=2nm$ ). .....	98
Figure. V.2 : Les valeurs du rapport de fréquence $\chi_N = \omega_{NT} / \omega_{LT}$ de nanotube de carbone de type armchair (8,8), en fonction du rapport longueur/diamètre pour différents nombre de mode(N) obtenue en utilisant le modèle non local de Timoshenko, le paramètre d'échelle est égale à ( $e_0a = 1nm$ ).....	99
Figure.V.3 : Relation entre les valeurs du rapport $\chi_N$ et les nombres de mode (N) pour différents valeur du rapport $L/d$ du nanotube de carbone armchair (8,8). La valeur de $e_0a$ est égale à 1nm. ....	100
Figure.V.4 : Relation entre les valeurs du rapport $\chi_N$ et les nombres de mode (N) pour différents valeur de la petite échelle $e_0a$ du nanotube de carbone armchair (8,8). La valeur de $L/d$ est égale à 40.....	101
Figure.V.5 : Relation entre les valeurs du rapport $\chi_N$ et les rapports $L/d$ pour différents valeur de la petite échelle $e_0a$ du nanotube de carbone chiral (30,8). La valeur de N est 1.....	103
Figure.V.6 : Relation entre les valeurs du rapport $\chi_N$ et les petites échelles $e_0a$ pour différents valeur du rapport $L/d$ du nanotube de carbone zigzag (21,0).La valeur de N est 2.....	104
Figure.V.7 : l'effet du rapport de dimension $L/d$ et la chiralité sur les valeurs du rapport $\chi_N$ du SWCNT avec N=2 et $e_0a = 1nm$ .....	105
Figure.V.8 : l'effet du rapport $L/d$ sur les valeurs du rapport $\chi_N$ pour différente chiralité (n, m) du SWCNT type armchair avec N=2 et $e_0a = 1nm$ .....	105
Figure.V.9 : l'effet de nombre de mode(N) sur les valeurs du rapport $\chi_N$ pour différente chiralité (n, m) du SWCNTs avec un diamètre (d) différente. Le paramètre d'échelle ( $e_0a = 1nm$ ) .....	106
Figure.V.10 : l'effet de nombre de mode(N) sur les valeurs du rapport $\chi_N$ pour différente chiralité (n, m) du SWCNTs avec un diamètre (d) identique. N=2 et $e_0a = 1nm$ .....	107
Figure.V.11 : l'effet du paramètre d'échelles $e_0a$ sur les valeurs du rapport $\chi_N$ pour différente chiralité (n, m) du SWCNT avec $L/d = 10$ et N=2.....	108
Figure.V.12 : la relation entre les valeurs du rapport $\chi_N$ et les valeurs du rapport $L/d$ pour différents nombre de mode de vibration (N) du anotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de basse température et $\theta = 70K, e_0a = 3nm$ .....	109
Figure.V.13 : la relation entre les valeurs du rapport $\chi_N$ et les valeurs du rapport $L/d$ pour différents nombre de mode de vibration (N) du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de haute température et $\theta = 70K, e_0a = 3nm$ .....	109
Figure.V.14 : la relation entre les valeurs du rapport $\chi_{th}$ et les valeurs du rapport $L/d$ pour différents températures $\theta$ du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de $e_0a = 3nm$ et $N = 3$ .....	111

**Figure.V.15 :** la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_{th}$  et les valeurs du rapport  $L/d$  pour différents températures  $\theta$  du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de haute température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $N = 3$  .....111

**Figure.V.16 :** la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_{th}$  et le nombre de mode(N) pour différents températures  $\theta$  du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $L/d = 20$ .....112

**Figure.V.17 :** la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_{th}$  et le nombre de mode(N) pour différents températures  $\theta$  du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de haute température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $L/d = 20$ .....112

**Figure.V.18 :** L'effet thermique sur la fréquence de vibration pour différents valeur du rapport  $L/d$  du nanotube de carbone type chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $N = 3$  .....113

**Figure.V.19 :** L'effet thermique sur la fréquence de vibration pour différents valeur du nombre de mode(N) du nanotube de carbone type chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $L/d = 5$ .....114

**Figure.V.20 :** L'effet thermique sur la fréquence de vibration pour différents valeur du paramètre des petites d'échelles  $e_0a$  du nanotube de carbone type chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $N = 3$  et  $L/d = 5$ .....114

## Liste des tableaux

### CHAPITRE I

**Tableau I.1 :** Caractéristiques structurales d'un nanotube de carbone mono- paroi en fonction de sa symétrie [61] .....25

**Tableau I.2 :** les caractéristiques dimensionnelles des nanotubes de carbone [75] .....28

**Tableau I.3 :** Comparaison des propriétés mécaniques des CNTs avec celle de d'autres matériaux.[84] .....29

**Tableau I.4 :** Modules de Young et contraintes à la rupture des CNTs d'après Référence [85].....30

**Tableau I.5:** Mesures expérimentales de la conductivité électrique de MWCNTs d'après Référence [85] .....35

**Tableau I.6:** Conductivités thermiques à 300 K des allotropes du carbone en comparaison à celles de quelques matériaux [105] .....36

**Tableau I.7:** Mesures expérimentales de la conductivité thermique de CNTs d'après Référence [85] .....37

**Tableau I.8:** Valeurs de conductivité thermique de CNTs calculées par modélisation d'après Référence [85] .....38



## CHAPITRE II

Tableau.II.1 : Les trois méthodes de synthèse des CNTs, données 2005 [38] .....	65
---	----

## CHAPITRE V

Table V. 1: listes des valeurs des modules d' Young pour différentes rayons de tube et différentes chiralités en utilisant la simulation de la MD (Bao et al, 2004) [1].....	96
--	----

Table V. 2: listes des valeurs des rapports de fréquence $\chi_N$ pour différentes nombre de mode de vibration (N), paramètre non local $e_0a$ et les rapports $L/d$ du nanotube de carbone type armchair (8,8) en utilisant le modèle nonlocal de Timoshenko.....	102
--	-----

# *Introduction générale*

Aujourd'hui, les nanotubes de carbone et Grâce à Leur dimension nanométrique et leurs propriétés spécifiques sont des matériaux très intéressants du point de vue des applications. C'est en 1991 que S. Iijima [1] observe pour la première fois dans un sous produit de synthèse de ces fullerènes, des structures tubulaires. Ces tubes, sont appelés nanotubes. Depuis leur découverte, les nanotubes de carbone font l'objet d'un grand intérêt de la part de la communauté scientifique, notamment du fait de leurs propriétés physiques, électroniques, thermiques et mécaniques remarquables [2]. Ces propriétés montrent que les *CNTs* peuvent être utilisés pour les nanoélectroniques, nano-dispositifs, nano-sensors et nano-composites. [3,4]. L'étude expérimentale du comportement mécanique des *CNTs*, y compris le module de Young, le module de cisaillement, le comportement au flambement et les réponses vibratoires a été le sujet de nombreuses études récentes de recherche.

Par exemple, les recherches expérimentales de Treacy et al. [5], ont utilisé la technique de la microscopie électronique à transmission (*TEM*) pour mesurer le module de Young des *MWCNTs*, ont rapporté une valeur moyenne de 1,8 *Tpa* avec une variation de 0,40 à 4,15 *Tpa*. Krishnam et al. [6] aussi utilisé *TEM* pour observer la vibration d'un *SWCNT* avec un diamètre compris entre 1,0 et 1,5 nm, et le module d'élasticité a été mesuré la valeur moyenne de 1,25 *TP* pour 27 *SWCNTs*. Ombler et al. [7] et Salvetat et al. [8] utilisé la technique du microscope à force atomique (*AFM*) et sont trouvé que la valeur moyenne du module de Young des *MWCNTs* était de 1,2 *TPa* et 0,81 *TPa*. Yu et al. [9] et ils ont rapporté que les modules de Young sont 0.32–1.47 *TPa* pour les *SWCNT* et 0,27–0,95 *TPa* pour les *MWCNTs*, respectivement. Demczyk et autres [10] rapporté que le module de Young des *MWCNTs* compris entre 0,8 et 0,9 *TPa* et la résistance à la traction estimée à 150 GPa utilisés *TEM*. Lourie et Wagner [11] ont également mesuré les propriétés élastiques des *CNTs* utilisant la spectroscopie micro Raman et ont rapporté un module de Young de 2,825 à 3,577 *TPa* pour les nanotubes de carbone mono paroi (*SWCNT*) avec un rayon du tube de 0,7 nm et de 1,718 à 2,437 *TPa* pour des nanotubes de carbone multi paroi (*MWCNT*) avec un rayon moyen de 5-10 nm. Xiao et al. [12], rapporté pour *SWCNT* que le module de traction varié de 0,27 à 3,6 *TPa*, tandis que la résistance finale varié de 11 à 200 GPa. Dans l'expérience, il est très difficile de mesurer les propriétés mécaniques des *CNTs*, directement en raison de leur très petite taille. La simulation a été considérée comme un outil puissant pour modéliser les propriétés des *CNTs*. on général, deux types principaux d'approches pour la simulation et la modélisation des propriétés mécaniques des *CNTs*. Ce sont (a) l'approche atomistique telle que l'Ab-initio [13], la dynamique moléculaire (*MD*) [14] et le *MD* à liaison étroite (*TBMD*) [15] et (b) l'approche de la

mécanique des milieux continus [16]. Parmi les techniques de modélisation disponibles, L'approche de la simulation *MD* représente la dynamique d'atomes ou de molécules des matériaux par une discrète solution des équations classiques de Newton du mouvement. Mais le problème de calcul est que les étapes de temps impliquées dans les simulations (*MD*) sont limitées par les modes de vibration des atomes [17]. Cependant, la simulation *MD* est limitée aux systèmes avec un nombre d'atomes maximal d'environ  $10^9$  en raison de l'échelle et du coût du calcul [18]. Hernandez et al. [15] étudie des propriétés mécaniques des *SWCNTs*, en utilisant la méthode *MD* avec approche de liaison étroite (*TBMD*) et ont trouvé que le module de Young et le coefficient de Poisson les plus élevés, qui sont égale à environ  $1,24 \text{ TPa}$  et  $0,262$ , respectivement. En utilisant des simulations ab initio basées sur la théorie de la fonction de densité pseudo-potentielle, Sánchez-Portal et al. [19] ont étudié des propriétés structurelles, mécaniques et vibration des *SWCNTs* avec différents rayons et chiralités. En utilisant des simulations de *MD*, Hsieh et al. [20] ont étudié les vibrations thermiques intrinsèques des *SWCNTs* avec le rayon et la température du tube. Jin et al. [21] utilisé (*MD*) et de l'approche de force constant et signalé le module de Young des (*SWCNTs*) d'environ  $1236 \pm 7 \text{ GPa}$ . Cornwell et Wille [22] ont utilisé la (*MD*) avec le potentiel Tersoff-Brenner [23] pour obtenir le module de Young des (*SWCNTs*) et qui est égale à environ  $0,8 \text{ TPa}$ . Bao et al [24] ont utilisé l'approche *MD* et ont indiqué que les valeurs moyennes du module de Young étaient rapportées respectivement par  $935.805 \pm 0.618 \text{ GPa}$ ,  $935.287 \pm 2.887 \text{ GPa}$  et  $918.309 \pm 10.392 \text{ GPa}$  pour les *SWCNT* Armchair, Zigzag et Chiral. . Kalamkarov et al [25] ont utilisé l'approche d'homogénéisation asymptotique (analytique) et ont indiqué que le module de Young est égal de  $1,71 \text{ TPa}$  et que le module de cisaillement est égal de  $0,32 \text{ TPa}$ . Puisque les expériences nano-échelles sont difficiles, et les simulations dynamiques moléculaires demeurent chères et particulièrement complexe pour des systèmes à grande échelle, les modèles élastiques continus ont été largement utilisées avec succès pour étudier le comportement mécanique des matériaux à l'échelle nanométrique[26], comme l'analyse thermomécanique de (CNT) [27], la déflexion statique[28], le flambement[29], la propagation des ondes [30,31] , libre vibration[32] et les vibrations thermiques [33]. Selon cette théorie, deux méthodes générales de modélisation des nanostructures sont les modèles de Timoshenko / Bernoulli – Euler [34] et les modèles de coque [35]. Il est bien connu que la théorie classique de la mécanique des milieux continus est indépendante de la taille, car elle ne peut intégrer l'effet à petite échelle dans la structure à l'échelle nanométrique. Dans la théorie de la mécanique des milieux continus local, la contrainte au niveau d'un point ne dépend que de

la déformation au même point, alors que dans la théorie de la mécanique des milieux continus non local, avancée par Eringen [36,37] est basée sur l'hypothèse que, la contrainte en un point est une fonction de déformations à tous les points du milieu continu. Wang et al. [38] ont étudié l'effet à petite échelle sur le flambement élastique des *CNTs* par les modèles de milieux continus non locaux. Baghdadi et al. [39] ont étudié l'effet thermique sur les vibrations des *SWCNTs* type armchair et zigzag à l'aide d'un modèle de faisceau Reddy non local. Heireche et al. [40] ont étudié les contraintes initiales et les effets de petite échelle sur la propagation des ondes de nanotubes de carbone à double paroi (*DWCNT*) à l'aide d'un modèle de faisceau non local d'Euler – Bernoulli. Torabi et al [41] ont étudié la vibration transversale libre de nanofaisceaux fissurés en utilisant la théorie de l'élasticité non locale et la théorie du faisceau de Timoshenko. Ponnusamy et Amuthalakshmi [42] ont étudié l'influence des champs thermiques et magnétiques sur les vibrations transversales des *DWCNTs* à l'aide de la théorie du faisceau de Timoshenko non locale (*NT*). Bahrami et al [31] ont étudié l'effet de petite échelle sur la réflexion des ondes dans *CNTs* en utilisant la théorie du faisceau de Timoshenko et l'approche de propagation des ondes non locales. Sur la base de la théorie du faisceau de Levinson non locale, l'analyse des vibrations des nanotubes *CNTs* incluant l'effet de surface a été étudiée par Lee [43]. L'analyse des vibrations des *SWCNTs* type armchair incluant l'effet thermique a été étudiée par Naceri et al. [44] en utilisant le modèle de faisceau de Levinson. Tounsi et al. [45] ont étudié l'effet de la petite échelle sur la fréquence propre inférieure et supérieure des *DWCNTs* sous champ de température en utilisant la théorie du faisceau d'Euler – Bernoulli. Heireche et al. [46] ont étudié la propagation des ondes sonores dans *SWCNTs* par la théorie non-locale des faisceaux de Bernoulli – Euler et Timoshenko. En utilisant la théorie de l'élasticité du gradient de déformation, Amara et al [47] ont montré que les propriétés mécaniques des *DWCNTs* incorporés dans une matrice polymère sont liées au changement de température. Sur la base de la théorie du faisceau de Timoshenko non locale, Benzair et al [33] ont analysé les vibrations libres des nanotubes de carbone mono paroi (*SWCNT*), y compris les effets thermiques. Dans des travaux similaires, la théorie des faisceaux non locale de Timoshenko a été utilisée par Zidour et al. [48] et Yang et al. [49] pour l'analyse de vibrations libres des nanotubes de carbone mono paroi (*SWCNT*).

Dans ce travail, une théorie non locale de modèle de Timoshenko est proposée pour analyser la vibration libre des nanotubes de carbone mono paroi (*SWCNT*) sous l'effet thermique. Le module de Young de *SWCNT* est prédit à l'aide de la simulation de la dynamique moléculaire (*MD*) réalisée par Bao et al [24]. Ces résultats sont en bon accord

avec les résultats expérimentaux existants. Les effets du paramètre nonlocal de petite échelle, de la chiralité des *SWCNTs*, du nombre de modes de vibration, du rapport de déformations et des changements de température sur la fréquence des *SWCNTs* sont étudiés et discutés. Ces travaux devraient constituer un guide utile pour l'étude et la conception et l'application de la prochaine génération de nanodispositifs utilisant les propriétés de vibration thermique des *SWCNTs*. Mon thème de thèse de doctorat consiste à présenter une méthodologie simple pour analyser la réponse des nanotubes monoparois dans le cas de la vibration libre pour différents paramètres.

Ce travail est composé de quatre chapitres: Le premier chapitre est consacré à une étude bibliographique sur les nanotubes. Dans un Premier temps de ce chapitre, nous décrivons une généralité sur les différentes formes allotropiques du carbone, les différents types de nanotubes de carbone et un court historique sur la découverte des nanotubes de carbone sont présentés. Ensuite, suivra une présentation sur les propriétés générales des nanotubes de carbone tel que les propriétés physique, mécaniques, électriques, thermiques, optiques et électronique. Enfin, nous donnerons les défauts des nanotubes de carbone leurs risques de Toxicication.

Dans le deuxième chapitre, nous avons parlés les différentes techniques de synthèse des nanotubes de carbone tel que la méthode d'ablation laser, l'arc électrique, dépôt chimique en phase vapeur (*CVD*), en nous attachant à exposer les avantages et les inconvénients de chacun d'entre eux. Ensuite, nous avons parlé sur les différents techniques de caractérisation des nanotubes de carbone soit par les microscopies est soit par les spectroscopies. Enfin, nous avons énoncé quelques domaines de leurs applications des *CNTs*.

Dans le troisième chapitre, nous avons parlés sur les modèles utilisés pour étudier ces nanomatériaux qui sont le modèle d'Euler- Bernoulli et le modèle de Timoshenko de la théorie élastique nonlocal, après nous avons fait des développements mathématiques détaillés pour démontrer les équations utilisées dans le calcul des différents phénomènes physiques. Le dernier chapitre sera consacré à l'interprétation des résultats obtenus.

**References**

- [1] S. Iijima, *Nature* 354 (1991) 56.
- [2] J. Robertson, *Mater. Today* 7, 46 (2004).
- [3] H. Dai, J.H. Hafner, A.G. Rinzler, D.T. Colbert, R.E. Smalley, *Nature* 384 (1996) 147.
- [4] P. Dharap, *Nanotechnology* 15 (2004) 379.
- [5] M. M. J. Treacy, T. W. Ebbesen, J.M.Gibson, , *Nature* 381 (1996) 678.
- [6] A.Krishmen, E. Dujardin, T.W.Ebbesen, P.N.Yianilos,M.M.Treacy, *Phys. Rev. Lett.* 58 (1998) 14013.
- [7] T.W. Tomblor, C.W. Zhou, L. Alexseyev, J.Kong,H. Dai,L. Liu,C.S. Jayanthi,M. Tang,S.Y. Wu, *Nature* 405 (2000) 769.
- [8] J.P.Salvetat, J.M.Bonard ,N.H. Thomson , A.J.Kulik ,L. Farro,W.Bennit,L. Zuppiroli.*J. Appl. Phys. A* 69(1999) 255.
- [9] M.F. Yu, O. Lourie, M.J. Dyer, K. Moloni, T.F. Kelly, R.S. Ruoff, *Science* 287 (2000) 637.
- [10] B.G. Demczyk, Y.M. Wang, J. Cumings, M. Hetman, W. Han, A. Zettl,R.O. Ritchie, *Mater. Sci. Eng. A* 334 (2002) 173.
- [11] O.Lourie , H.D.Wagner . *J. Mater. Res* .13 (1998) 2418.
- [12] J.R.Xiao ,B.A. Gama, J.W .Gillespie , *Int.J. Solids. Stru.* 42(2005) 3075.
- [13] Y.E. Lin-Hui, Liu Bang-Gui, Wang Ding-Sheng. *Chin.Phys.Lett* 18( 2001) 1496
- [14] S.J.V. Frankland, V.M. Harik, G.M. Odegard, D.W. Brenner, T.S. Gates.*Compos. Sci.Tech.* 63 (2003) 1655.
- [15] E. Hernandez , C.Goze,P. Bernier,A. Rubio. *Phys. Rev.Lett.*80 (1998) 4502.
- [16] Q .Wang , *J. Appl. Phys* .98 (2005) 124301.
- [17] J.Tersoff ,R.S.Ruoff. *Phys. Rev.Lett.*73 (1994) 676.
- [18] B. Tadmor, G. S. Smith, N. Bernstein, E. Kaxiras. *Phys. Rev. B* 59(1999) 235.
- [19] D.Sanchez-Portal,E. Artacho,J.M. Soler ,A. Rubio ,P. Ordejon *Phys. Rev. B* 59 (1999) 12678.
- [20] J-Y. Hsieh, J-M Lu, M-Yi Huang ,C-C Hwang. *Nanotechnology* 17 (2006) 3920.
- [21] Y.Jin,F.G.Yuan,*Compos.Sci.Technol.*63(2003)1507.
- [22] C.F.Cornwell,L.T.Wille,*SolidStateCommun.*101(1997)555.
- [23] D.W.Brenner,*Phys.Rev.B*42(1990)9458.
- [24] W.X. Bao, C.C. Zhu, W.Z. Cui, *Physica B* 352 (2004) 156.
- [25] A.L. Kalamkarov, A.V. Georgiades , S.K. Rokkam ,V.P. Veedu, M.N. Ghasemi-Nejhad. *Int.J. Solids. Stru.* 43 (2006) 6832.

- [26] T. Natsuki, X. W. Lei, Q. Q. Ni, and M. Endo. *Phys. Lett. A* 374(2010) 2670.
- [27] C. Guoxin, C. Xi, W. Kysar, *J. Mech. Phys. Solids*. 54 (2006) 1206.
- [28] E.W. Wong, P.E. Sheehan, C.M. Lieber, *Science* 277 (1997) 1971–1975.
- [29] M.R. Falvo, G.J. Clary, R.M. Taylor, V. Chi, F.P. Brooks, S. Washburn. *Nature* 389 (1997) 582–584.
- [30] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, I. Mechab, *J. Appl. Phys.* 104 (2008) 014301.
- [31] A. Bahrami, A. Teimourian. *Composites Part B* 91 (2016) 492.
- [32] A. Tounsi, S. Benguediab, E.A. Adda Bedia, A. Semmah, M. Zidour, *Adv. Nano Res.* 1 (2013) 1.
- [33] A. Benzair, A. Tounsi, A. Besseghier, H. Heireche, N. Moulay, L. Boumia, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 41 (2008) 225404.
- [34] M. Simsek, H.H. Yurtcu. *Composite Structures* 97 (2013) 378–386.
- [35] R. Ansari, H. Rouhi, S. Saeid. *J. vib. control.* 20 (2015) 670.
- [36] A.C. Eringen, *Int. J. Eng. Sci.* 10 (1972) 1.
- [37] A.C. Eringen, *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 4703.
- [38] Q. Wang, V.K. Varadan, S.T. Quek, *Phys. Lett. A* 357 (2006) 130.
- [39] H. Baghdadi, A. Tounsi, M. Zidour, A. Benzair, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures* 23 (2014) 266.
- [40] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, *Nanotechnology* 19 (2008) 185703.
- [41] K. Torabi, J. Nafar Dastgerdi, *Thin Solid Films* 520 (2012) 6595.
- [42] P. Ponnusamy, A. Amuthalakshmi, *Proce. Mater. Sci* 10 (2015) 243.
- [43] H.L. Lee, W.J. Chang. *J. Appl. Phys.* 108 (2010) 093503.
- [44] M. Naceri, M. Zidour, A. Semmah, M. S.A. Houari, A. Benzair, A. Tounsi, *J. Appl. Phys.* 110 (2011) 124322.
- [45] A. Tounsi, H. Heireche, H. M. Berrabah, A. Benzair, L. Boumia, *J. Appl. Phys.* 104 (2008) 104301.
- [46] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. Adda Bedia, *Physica E* 40 (2008) 2791.
- [47] K. Amara, B. Mokhtar, A. Besseghier, A. Tounsi, E. A. Adda-Bedia, *European Journal of Academic Essays* 1(2) (2014) 70.
- [48] M. Zidour, K.H. Benrahou, A. Semmah, M. Naceri, H.A. Belhadj, K. Bakhti, A. Tounsi, *Comput. Mater. Sci* 51 (2012) 252.
- [49] J. Yang, L.L. Ke, S. Kitipornchai, *Physica E* 42 (2010) 1727.



# Chapitre I

## *Généralités sur les nanotubes de carbone*

## Chapitre I : Généralités sur les nanotubes de carbone

### I.1 Introduction

Dans ce premier chapitre, est consacré à une présentation générale des nanotubes de carbone. Nous commencerons par décrire les différentes formes allotropiques du carbone tel que le graphite, le diamant et le graphène ainsi que Les nouvelles formes du carbone comme le fullerène, les nanotubes de différents types comme les nanotubes multi-feuillets (*MWCNTs*), double -feuillets (*DWCNTs*) et mono-feuillets (*SWCNTs*) et leur structure. Enfin, Après avoir présenté leurs propriétés physiques, mécaniques, thermiques, optiques et électroniques, nous donnerons les Défauts des nanotubes de carbone et leurs risques de Toxicication.

### I.2 Les Allotropes de carbone

Le carbone est le 15<sup>ème</sup> élément naturel le plus présent sur terre, il est l'élément du groupe VI de la table de Mendeleïev, qui comporte six électrons avec une configuration atomique de l'état fondamental  $1s^2, 2s^2 2p^2$ . Il se présente sous de nombreux allotropes dont le plus anciennement connu est le graphite, utilisé comme mine de crayon dès le 16<sup>ème</sup> siècle. Une vue schématique de ces différents allotropes de carbone est donnée dans la figure I.1. Ces allotropes cristallins couvrent les trois dimensions spatiales du fullerène 0D (*0 dimensions*), nanotubes de carbone 1D, le graphène 2D et du graphite 3D et des diamants.

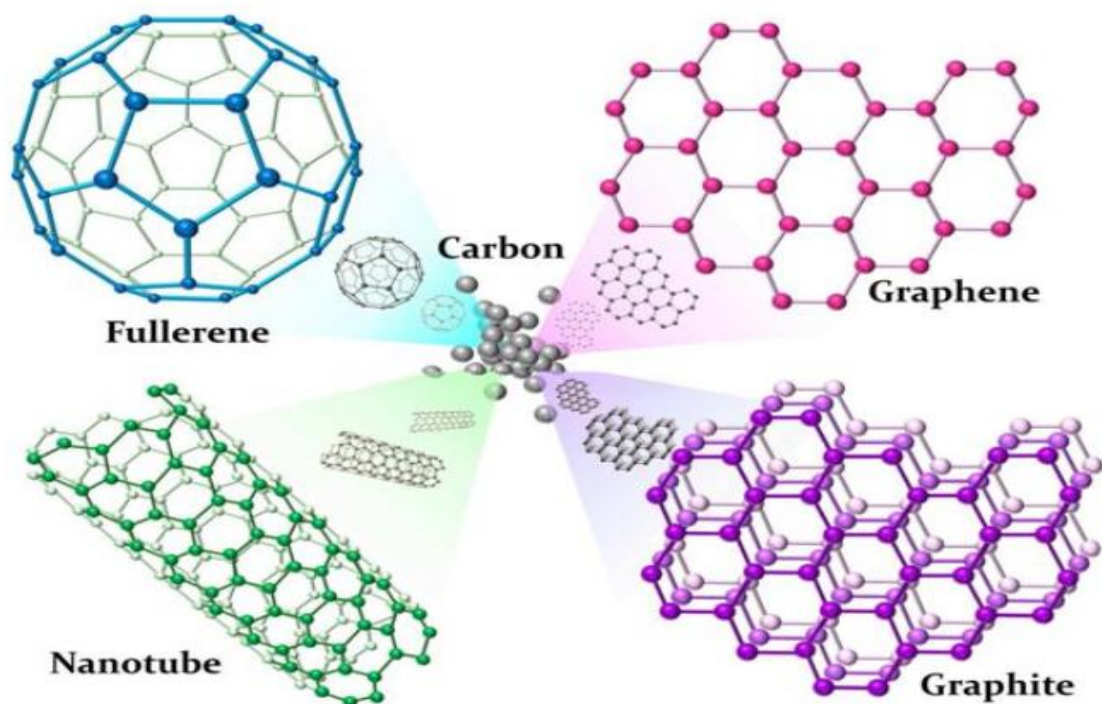


Figure I.1 : Allotropes du graphène. (Image de [1])

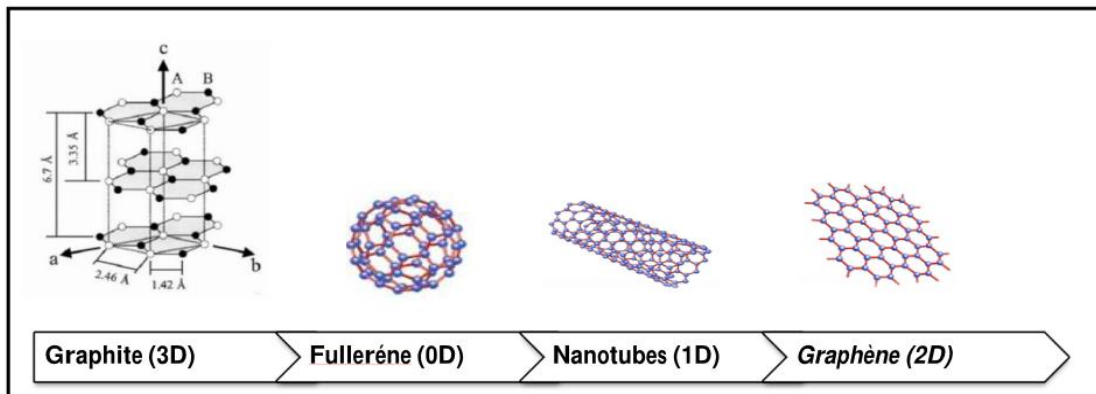


Figure I. 2 : Schéma représentatif des différentes formes allotropiques de carbone.[2]

### I.2.1 Diamant

Le diamant est une forme allotropique de carbone, le plus transparent dans le visible, connu pour sa conductivité thermique élevée et son extrême dureté par rapport à de nombreux matériaux. Le module de Young du diamant est de l'ordre de  $1.05$  à  $1.22$  TPa respectivement dans le plan  $(100)$  et le plan  $(111)$  [3]. La structure de diamant se compose uniquement de l'élément de carbone 'C'.

Les atomes de carbone en position de tétraèdres réguliers stable qui forme la structure du diamant. Dans cette structure les atomes de carbones sont unis par des liaisons covalente  $\sigma$  chaque atome est lié par une liaison aux 4 atomes voisins les plus proches (voir Figure I.3). Les deux atomes de carbone sont liés d'une façon tétraédrique à la position un à  $(0, 0, 0)$  et l'autre à  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ . La distance des deux atomes de carbone voisins est de  $d_{c-c} = 1.545 \text{ \AA}$ . La taille des atomes de carbone conduit à des liaisons courtes, ainsi le chevauchement des orbitales d'électrons de deux atomes de carbone adjacents. Le diamant est un semi-conducteur avec une large bande interdite indirecte de  $5.47 \text{ eV}$  [4]. Le diamant est également connu pour son extrême dureté, par rapport à de nombreux autres transparents dans le visible.

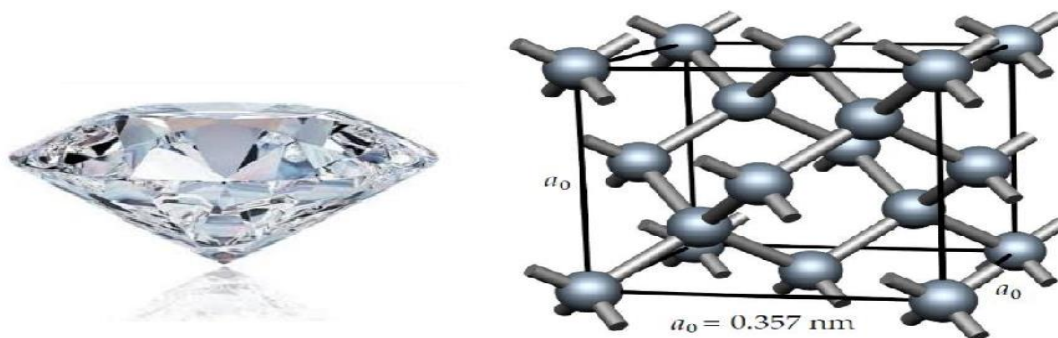


Figure I.3 : Structure cristalline du Diamant où  $a_0$  est le paramètre du réseau cubique. (Image de [5])

## I .2 .2 Graphite

Le graphite est une autre forme allotropique des éléments de carbone, la structure du graphite se constitue de feuillets hexagonaux d'atome de carbone non compacts, appelés graphène (voir figure I.4). Dans le plan de base la distance interatomique  $d_{c-c}=1.42 \text{ \AA}=0.142\text{nm}$ , l'espacement entre les couches est de  $d=3.35 \text{ \AA}$  [6]. Dans la structure de graphite (l'hybridation  $sp^2$ ), seulement trois des quatre électrons de valence de carbone forment des liaisons covalentes régulières (liaison  $\sigma$ ) avec les atomes de carbone adjacents et des liaisons  $\pi$  permettant une délocalisation importante d'une partie des électrons (électron libre  $2pz$ ) apportant un caractère métallique fort. Les couches de graphite interagissent entre elles par une faible interaction de Van der Waals.

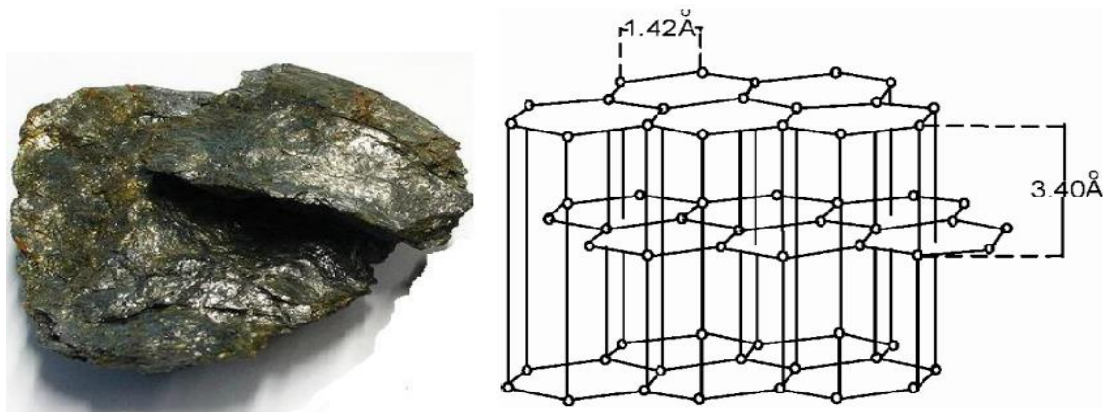
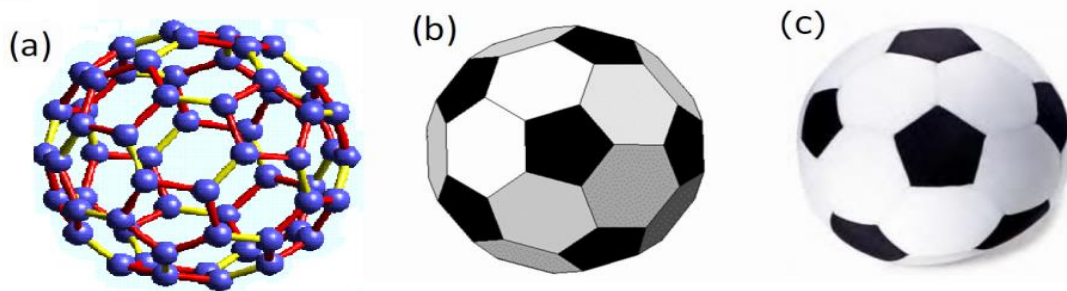


Figure I.4 : Structure cristalline du graphite hexagonal [7]

## I .2 .3 Les Fullerènes

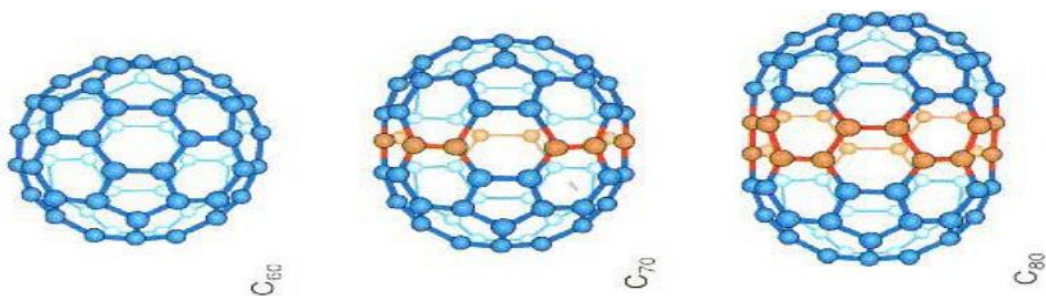
En 1985, H. Kroto et al, découvrent une structure stable de 60 atomes de carbone sont obtenus par vaporisation du graphite sous une atmosphère du gaz d'hélium ou d'argon. Pour expliquer cette stabilité tout en respectant la valence du carbone, ils proposent un modèle de structure comparable à celle d'un ballon de football où les sommets sont remplacés par des atomes de carbone, soit un polygone composé de 32 faces : 12 pentagones et 20 hexagones [8] (Figure I.5). Les Fullerènes sont caractérisée par la longueur entre les deux hexagones  $d_{c-c}=1.39 \text{ \AA}$ , la distance entre les pentagones  $d_{c-c}=1.43 \text{ \AA}$  [9] et leur diamètre estimé à  $7 \text{ \AA}$ , on entre dans le domaine des nanomatériaux De cette structure, similaire à celle du dôme géodésique de l'architecte Buckminster Fuller, ils baptisèrent ce nouvel allotrope du carbone Buckminster fullerene ou plus simplement fullerènes. Cette découverte leur valut le prix Nobel de chimie en 1996.[18]

Immédiatement Kroto et al. imaginent des dérivés du  $C_{60}$  combinés avec d'autres éléments ( $C_{60}Fe$ ,  $C_{60}F$ ) ou la possibilité de mettre un atome à l'intérieur donnant ainsi naissance à de nouvelles molécules pouvant avoir des propriétés inhabituelles [8]. Le fullerène  $C_{60}$  est la forme la plus étudiée de cette famille mais il en existe une grande variété ( $C_{70}$ ,  $C_{72}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{84}$ ...) offrant ainsi de nouvelles bases pour développer de nouvelles branches de la chimie organique ou inorganique. Le fullerène a attiré beaucoup d'attention durant cette dernière décennie par ses propriétés électriques qui permettent des applications dans divers domaines ; électronique, cellules solaires organiques. La structure lubrifiante de cette nanoparticule a aussi un champ d'application dans le domaine pharmaceutique.



**Figure I.5 :** (a) Structure du Buckminster fullerène  $C_{60}$  similaire à (b) un icosaèdre tronqué ou (c) un ballon de football [8].

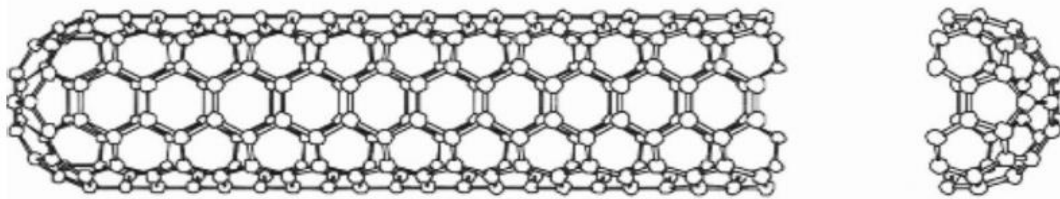
On peut arriver au  $C_{70}$  et le  $C_{80}$  à partir de  $C_{60}$ . En coupant en deux parties égales le  $C_{60}$  et en ajoutant des atomes de carbone avant de refermer la structure (fig. 7), on peut construire le  $C_{70}$  (25 hexagones, 12 pentagones) et le  $C_{80}$  (30 hexagones, 12 pentagones). (Figure I.6) [10]



**Figure I.6.** Du  $C_{60}$  au  $C_{80}$  : les atomes ajoutés au  $C_{60}$  rouge [10]. Pour obtenir le  $C_{70}$  et le  $C_{80}$  sont représentés en rouge [10].

On peut arriver à un fullerène allongé par l'ajout des atomes de carbone. Avec plusieurs centaines à plusieurs millions d'hexagones et 12 pentagones, on obtient un nanotube de carbone monocouche (Figure I.7).[10]

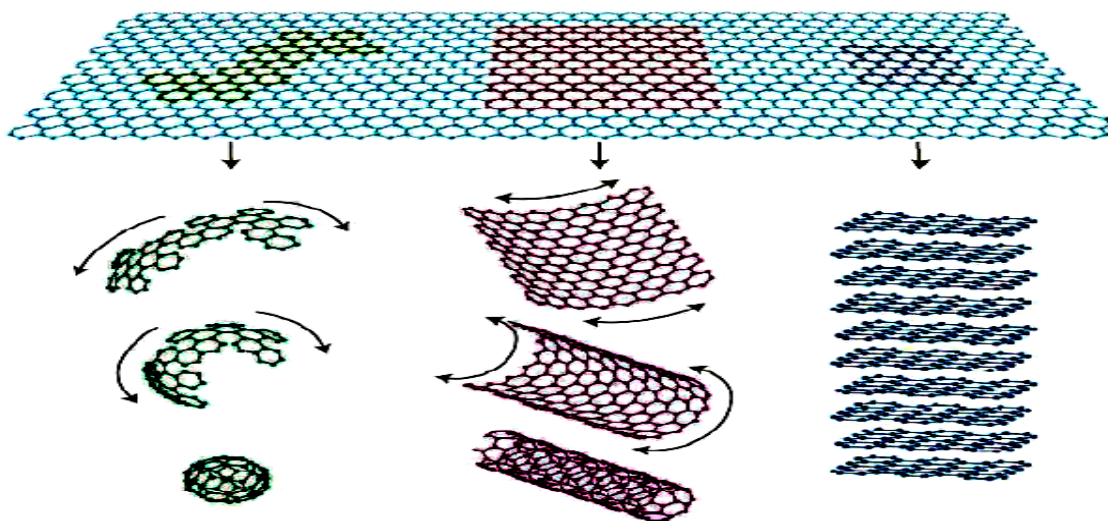




*Figure I.7. Nanotube de carbone monocouche. [10]*

#### I.2.4 Le graphène

Le graphène est le nom que l'on donne à un plan d'atomes de carbone assemblés en 2 dimensions (2D) selon une structure en nid d'abeille. Il peut être considéré comme un matériau 2D parfait puisqu'il n'est constitué que d'une seule couche d'atomes. Le graphène sert de matériau de base pour des matériaux graphitiques de toutes dimensionnalités : fullerènes (0D), nanotubes (1D) [11] ou graphite (3D) comme le montre la Figure I.8 [12]. En effet, la taille nanométrique des fullerènes les rend assimilables à un point sans dimension et du fait de leur longueur largement supérieure à leur diamètre, les NTC sont assimilables à une ligne et donc à un objet unidimensionnel.

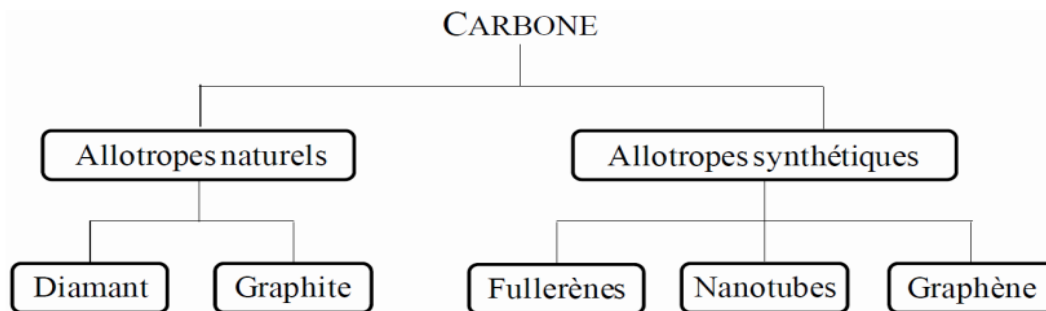


*Figure I.8.: Le graphène, modèle de base des autres matériaux du carbone : mis en boule en fullerènes, enroulé en nanotubes ou empilé en graphite [13].*

Bien que connu comme faisant partie intégrante de ces allotropes, on a longtemps pensé que le graphène ne pouvait exister. Jusqu'à récemment, il était utilisé comme objet théorique permettant de modéliser les propriétés des autres matériaux carbonés. En 2004, le modèle devint réalité lorsque les premiers plans de graphène furent isolés [14]. Il fait ainsi depuis quelques années l'objet d'un intérêt croissant [15].

## I .2 .5 Conclusion

En somme, il existe donc plusieurs formes allotropiques du carbone. (*Figure I.9*) Parmi celles-ci, deux sont naturelles : le diamant et le graphite. Les fullerènes, les CNTs et le graphène sont trois nouveaux allotropes du carbone, découverts coup sur coup lors des trois dernières décennies.



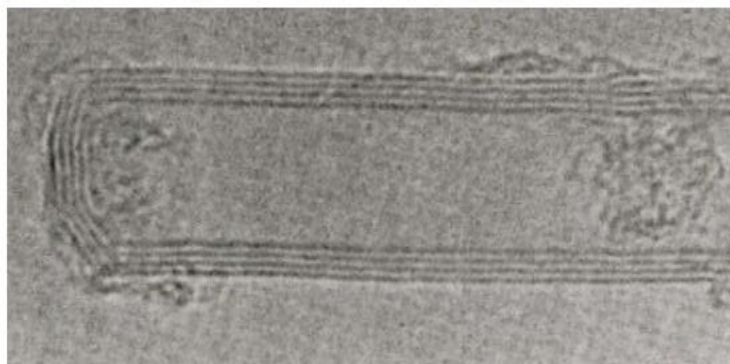
*Figure I.9 : Allotropes du carbone. [16]*

## I .3 Historique

### Du $C_{60}$ aux nanotubes monocouches

La découverte du  $C_{60}$  à l'Université de Rice a été publiée en 1985 [17]. Elle a été récompensée par le Prix Nobel de Chimie en 1996 [18]. Le  $C_{60}$  fut à l'origine produit par une vaporisation laser d'une cible de graphite à basse pression. Un nuage de vapeur de carbone se formait au-dessus de la cible. Ces vapeurs étaient entraînées dans une tuyère jusqu'à des vitesses supersoniques par une injection d'hélium. Puis le mélange des gaz était détendu et refroidi. A ce moment les molécules de  $C_{60}$  se formaient. Elles étaient ensuite ionisées par un faisceau d'électrons et accélérées jusqu'à un spectromètre de masse. Le pic dominant, à 720 *u.m.a.*, était la seule preuve de la présence de  $C_{60}$ . Un pic considérablement plus faible, mais distinct, était observé à 840 *u.m.a.* était attribué à la présence de  $C_{70}$ . Cette signature spectroscopique était également découverte par une équipe d'Exxon mais ils l'attribuèrent à une espèce de polyène [19]. Après, des considérations théoriques confirmaient l'existence de telles molécules sphériques constituées uniquement de carbone [20]. En outre, le groupe de Rice réalisa une expérience de vaporisation laser sur une cible de carbone dopée [21]. Un intense pic apparaissait dans le spectre à 859 *u.m.a.*, attribué à un atome dans une cage de  $C_{60}$ . Cela apportait une preuve supplémentaire de la nature sphérique du  $C_{60}$  et constituait le premier exemple de fullerène rempli. En 1990 fut mise au point une méthode de synthèse de  $C_{60}$  en grosses quantités. Il s'agissait d'une méthode de l'arc électrique entre deux électrodes de carbone sous atmosphère inerte (100 torr). Le  $C_{60}$

et le  $C_{70}$  produits étaient isolés du carbone amorphe par sublimation [22]. Avec le progrès des méthodes de synthèse et de purification (chromatographie en phase liquide), il était possible d'obtenir des données cristallographiques et spectroscopiques précises sur le  $C_{60}$ . Bien qu'aucune application commerciale n'ait émergé des recherches sur le  $C_{60}$  et ses dérivés, il possède quelques propriétés intéressantes qui peuvent être potentiellement utiles. En 1991, un solide cristallin à base de  $C_{60}$  dopé, le  $K_3C_{60}$ , se révéla supraconducteur en dessous de  $18 K$  [23]. Le  $C_{60}$  présentait une transition de phase vers le diamant à des pressions bien plus basses que le graphite [24]. Les nanotubes de carbone étaient découverts en 1991 par un microscopiste japonais de NEC, Sumio Iijima, dans des suies issues d'une synthèse de fullerènes par arc électrique [25]. Des nanotubes multicouches (c'est-à-dire regroupant plusieurs parois cylindriques concentriques, cf. *Figure I.10*) furent alors observés par microscopie à transmission. L'année suivante, Thomas Ebbesen, un collègue de Iijima chez NEC, mettait au point une méthode de synthèse des nanotubes multicouches en grandes quantités [26]. Il s'agissait également d'un réacteur à arc électrique, mais à des pressions en *He* plus élevées ( $500 \text{ torr}$ ) que celles employées pour la synthèse du  $C_{60}$ . La suie récoltée contenait un mélange de nanotubes de différents diamètres, longueurs et nombre de couches.

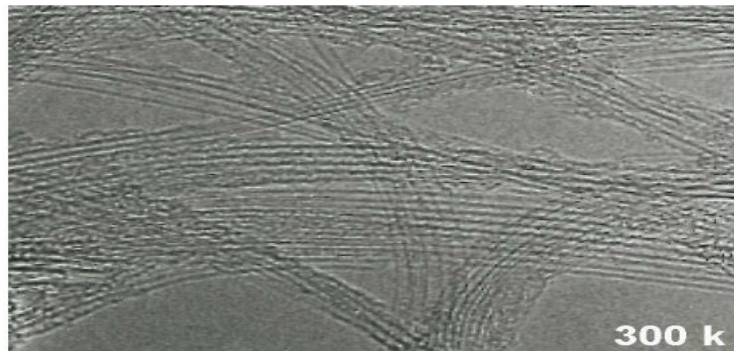


**Figure I.10:** Image TEM de l'extrémité d'un nanotube multicouche. [27]

En 1993, les nanotubes de carbones monocouches (*Figure I.11*) étaient découverts indépendamment par Iijima [28], Bethune et coll. chez IBM [29]. Ils étaient également synthétisés dans un réacteur à arc électrique sous atmosphère inerte ( $500 \text{ torr}$ ), mais le graphite était mélangé à un catalyseur métallique (*Ni* et *Co*). Lorsque le carbone gazeux se condensait, les nanoparticules de métal servaient comme germes à partir desquelles les nanotubes pouvaient croître. Il est à noter qu'aujourd'hui encore, les mécanismes de



croissance des nanotubes sont relativement méconnus et demeurent un sujet d'étude de premier plan.



**Figure I.11.** Image MET de faisceaux de nanotubes monocouches (collerette brute produite par arc électrique au GDPC, échantillon employé pour les essais de synthèse de composites MCM 41/SWNTs) [30].

Un type de fullerène a été découvert avant le  $C_{60}$  et demeure peu étudié à l'heure actuelle. Il s'agit des oignons de carbone (ou buckyonions), constitués de plusieurs couches de graphène empilées les unes sur les autres en une structure fermée (*Figure I.12*). L'intérêt porté aux oignons, découverts en 1980 par Lijima [30] se développa en 1992[31], lorsque D. Ugarte [32] découvrit une technique de synthèse reproductible de ces nouvelles structures de carbone. La technique proposée par Ugarte, qui reste à ce jour la plus connue, consiste à irradier dans un MET des nanostructures de carbone qui se transforment progressivement en des objets nanométriques généralement décrits comme des arrangements de sphères de carbone concentriques séparées d'une distance de  $3,4 \text{ \AA}$ . Les études portant sur leurs propriétés physiques sont assez peu nombreuses car les différents modes de synthèse (techniques de recuit, de dépôt CVD, implantation ionique) ne peuvent encore en produire que de très faibles quantités.



**Figure I.12.** Coupe transversale (image MET) d'oignons de carbone observés dans un échantillon de nanotubes monocouches (collerette brute produite par arc électrique au GDPC). [31]

L'histoire des nanotubes ne s'arrête pas ici, voici quelques dates intéressantes pour bien suivre le développement des nanotubes de carbone:

**1995** - Propriétés d'émission de champ. [33]

**1996** - Synthèse de fagots de nanotubes monocouches par ablation laser. [34]

**1997** - Conduction quantique dans les nanotubes de carbone. [35]

**1998** - Synthèse par dépôt chimique en phase vapeur de films de nanotubes multicouches alignés. [36]

**1998** - Insertion de ( $C_{60}$ ) dans des nanotubes monocouches (peapods). [37]

**1998** - Coupure et fonctionnalisation de nanotubes. [38]

**1999** - Stockage de l'hydrogène dans des nanotubes monocouches. [39]

**2000** - Les nanotubes en tant que conducteurs thermiques idéaux. [40]

**2000** - Alignement macroscopique de nanotubes monocouches. [41]

**2001** - Circuits logiques et nanotubes monocouches. [42]

**2001** - Supraconductivité intrinsèque de nanotubes de carbones monocouches. [43]

**2008** - Dynamique des fullerènes ( $C_{60}$ ) dans les nanotubes de carbone: [44]

**2008** - Sound wave propagation in single-walled carbon nanotubes using nonlocal elasticity. [45]

**2008** -The thermal effect on vibration of single-walled carbon nanotubes using nonlocal Timoshenko beam theory. [46]

**2010**- Nonlocal elasticity effect on column buckling of multiwalled carbon nanotubes under temperature field [47]

**2011** - Thermal buckling analysis of double-walled carbon nanotubes considering the small-scale length effect. [48]

**2011** - A nonlocal Levinson beam model for free vibration analysis of zigzag single-walled carbon nanotubes including thermal effects. [49]

**2011** - The thermal effect on vibration of zigzag single walled carbon nanotubes using nonlocal Timoshenko beam theory. [50]

**2011** - Sound wave propagation in armchair single walled carbon nanotubes under thermal environment. [51]

**2014**- Thermal Effect on Vibration Characteristics of Armchair and Zigzag Single-Walled Carbon Nanotubes Using Nonlocal Parabolic Beam Theory [52]

**2014**- A Timoshenko beam model for vibration analysis of chiral single-walled carbon nanotubes [53]

**2017**- Nonlocal effect in carbon resonators: A comprehensive review [54]

2019- Size-dependent vibration analysis of carbon nanotubes [55]

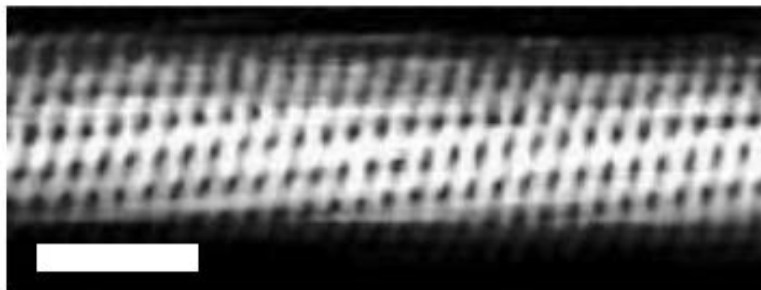
## I.4 Les types des nanotubes de carbone

Il existe deux types de nanotubes de carbone :

- les nanotubes de carbones monofeuillets, (single-walled carbone nanotubes, *SWNT* ou *SWCNT*) ;
- les nanotubes de carbones multifeuillets, (multi-walled carbone nanotubes, *MWNT* ou *MWCNT*). On parle aussi de nanotubes de carbones double-feuillets (double-walled carbone nanotubes, *DWNT* ou *DWCNT*) aux propriétés à mi-chemin entre les deux types précédents.

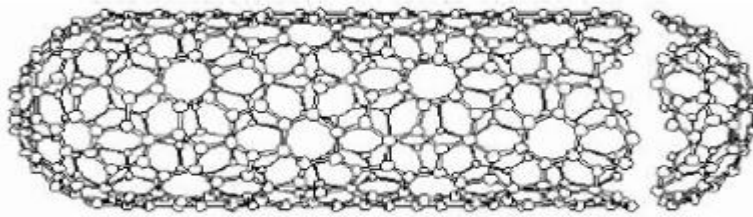
### I.4.1 Les nanotubes monofeuillets ou monoparois (*SWCNTs*) :

Ce genre de nanotubes de carbone a été découvert en parallèle par les deux savants Béthune et Iijima en 1993 [28],[56]. Un nanotube de carbone monofeuillet est constitué d'un unique feuillet de graphène enroulé sur lui même pour former un cylindre creux, Le nano-objet obtenu est alors unidimensionnel. Les atomes de carbone restent dans un état d'hybridation ( $sp^2$ ). Une image réalisée par microscopie à effet tunnel (*STM*) d'un *SWCNT* est représentée sur la figure I.13 où on peut observer l'arrangement des atomes de carbone dans le nanotube.



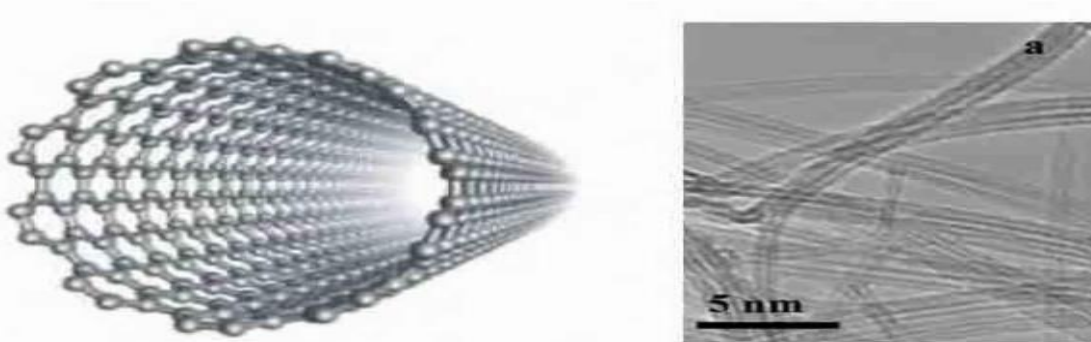
**Figure I.13** – Image réalisée par microscopie à effet tunnel (*STM*) d'un nanotube de carbone monoparois (*SWCNT*). La barre d'échelle en bas à gauche représente une distance d'1 nm [57].

Le nanotube de carbone ainsi formé présente deux extrémités qui peuvent être fermées par deux dômes, comme des demi-fullerènes (Figure I.14) mais pouvant comporter des défauts dans le cas d'un nanotube réel. L'enroulement de la feuille de graphène va définir la structure (zigzag, armchair et chiral) et les propriétés du nanotube formé particulièrement les propriétés électriques. C'est ainsi qu'on peut classer par chiralité des nanotubes conducteurs et d'autres semi-conducteurs. Le diamètre d'un nanotube monoparois peut varier entre 1 et 2nm, la longueur est encore plus variable (100nm à quelques millimètres)[58].

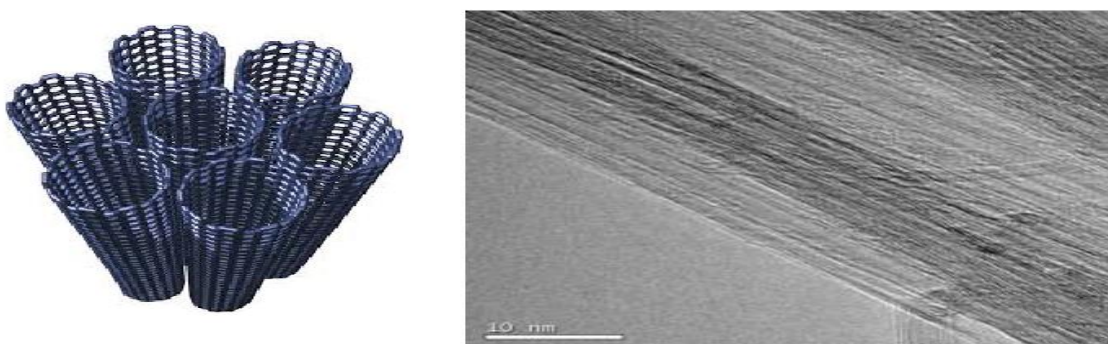


**Figure I.14:** Un nanotube monocouche fermé par deux demi fullerènes.

Les différentes structures de nanotubes mono feuillets décrivent uniquement le nanotube sous forme isolée. Généralement Les nanotubes mono feuillets produits présentent un arrangement bidimensionnel hexagonal compact sous forme de nano cristaux couramment appelés fagot. Ces structures ont généralement tendance à se regrouper en « bundle » ou fagots sous l'effet de force de Van der Waals (figure I.16). Le nombre de tubes dans un fagot est généralement d'une vingtaine à une centaine de tubes. [59], [60] La distance, centre à centre, entre deux tubes est égale à deux fois le rayon, plus l'espace inter-tubes. Les fagots sont constitués de nanotubes de même diamètre, comme représenté sur la (figure I.16). [61]



**Figure I.15:** à gauche: Représentation graphique d'un SWNT et à droite: image de microscope électronique à transmission de plusieurs SWNT [62]

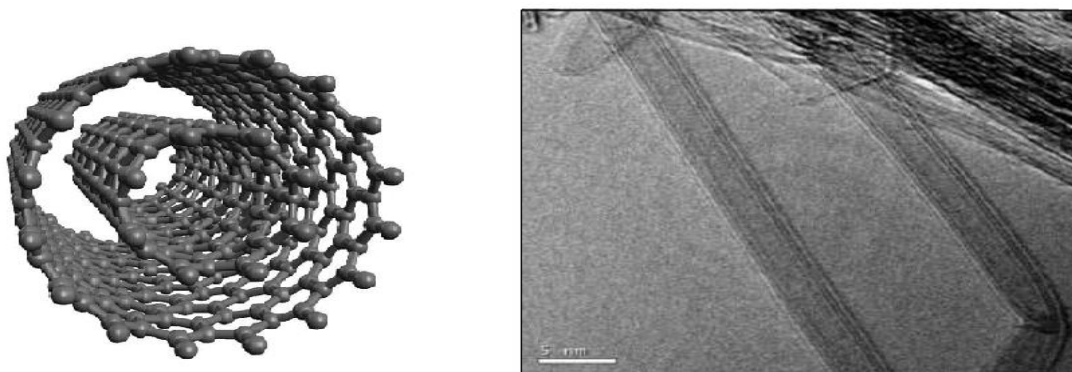


**Figure I.16:** à gauche : Schéma d'un cristal de 7 nanotubes. À droite: Image MET de faisceaux de nanotubes monocouches (collerette brute produite par arc électrique). [61]



## I.4.2 Les nanotubes multifeuillets ou multiparois (DWCNTs ou MWCNTs)

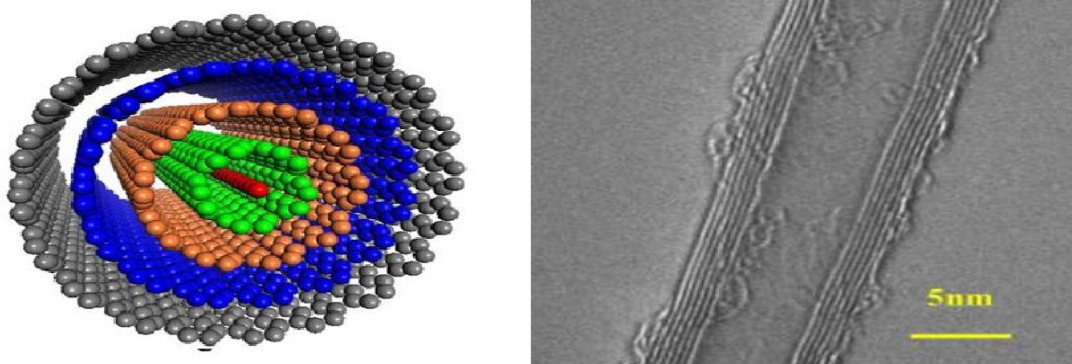
La découverte des fullerènes en 1985 créa un véritable engouement pour la recherche et la caractérisation de nouvelles nanostructures carbonées. Les techniques de caractérisation, et notamment la microscopie électronique, permirent à Sumio Iijima de mettre en évidence en 1991 [25], dans le produit d'évaporation du graphite par arc électrique, des nanostructures graphitiques unidimensionnelles, baptisées nanotubes multifeuillets (MultiWall NanoTubes, MWNT). Ces nanotubes de carbone multi-paroi sont constitués d'au moins deux feuillets de graphène enroulés sur eux mêmes formant ainsi deux cylindres. Concentriques parallèles à leur axe de croissance. La distance entre deux tubes consécutifs est légèrement supérieure à la distance entre deux plans de graphène (0,340 nm contre 0,335 nm). Cet écart est dû, comme dans le cas des nanotubes mono-paroi, à l'enroulement des feuillets de graphène. De plus, on distingue plusieurs cas particuliers de nanotubes multi-parois : les nanotubes « doublewalled » ou « double parois » (Figure I.17) dont les propriétés sont à l'interface entre mono- et multi-parois, les nanotubes « bamboo-like » ou de type bambou qui présentent une compartimentation due à la fermeture d'un ou plusieurs plans de graphène et ceci de façon répétée voire régulière et les nanotubes « coiled » ou « entortillés » qui ont une structure en forme d'hélice provenant de la présence d'heptagones ou de pentagones à intervalles réguliers dans les plans de graphène.



**Figure I.17:** à gauche: Représentation graphique d'un DWCNT et à droite: image de microscope électronique à transmission MET de plusieurs DWCNT [64]

De façon générale, les diamètres internes des nanotubes multi-parois sont de l'ordre de 5 à 20 nm pour des diamètres externes allant de 10 à 50 nm (dans le cas des nanotubes double-parois, les diamètres externes sont plutôt de l'ordre de 1 à 3 nm, tandis que le diamètre externe est de l'ordre d'une vingtaine de nanomètres [63]). Le nombre de

parois varie de deux à plusieurs dizaines et les longueurs peuvent aller d'une centaine de nanomètres à plusieurs dizaines (voire centaines) de micromètres (Figure I.18).



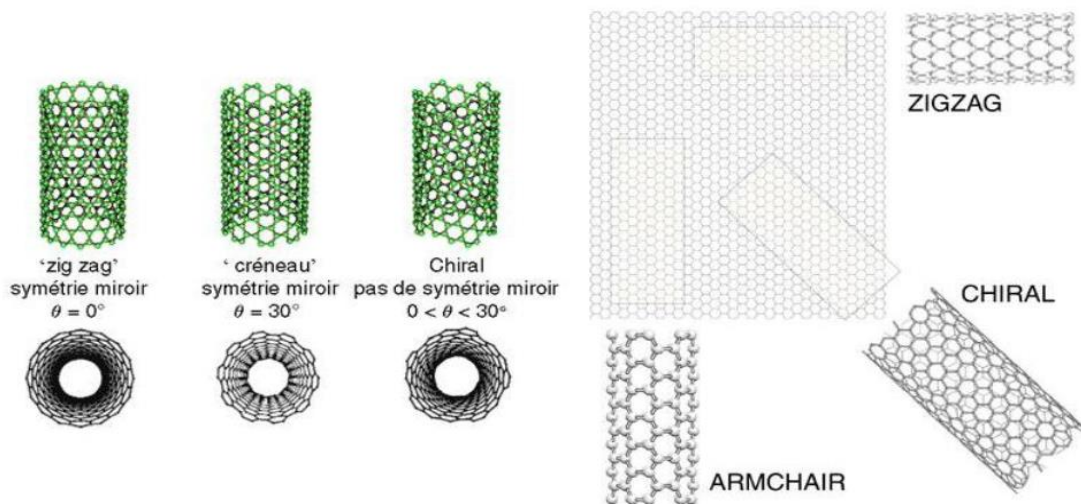
**Figure I.18:** à gauche: Représentation graphique d'un MWCNT et à droite: image de microscope électronique à transmission MET de MWCNT produit au laboratoire [64]

## I.5 Structures du nanotube de carbone

### I.5.1 L'enroulement :

L'enroulement consiste à superposer deux hexagones du feuillet de graphène. C'est le choix de ces deux hexagones qui va déterminer le diamètre du nanotube ainsi que son hélicité (en degré). Pour définir cette hélicité :

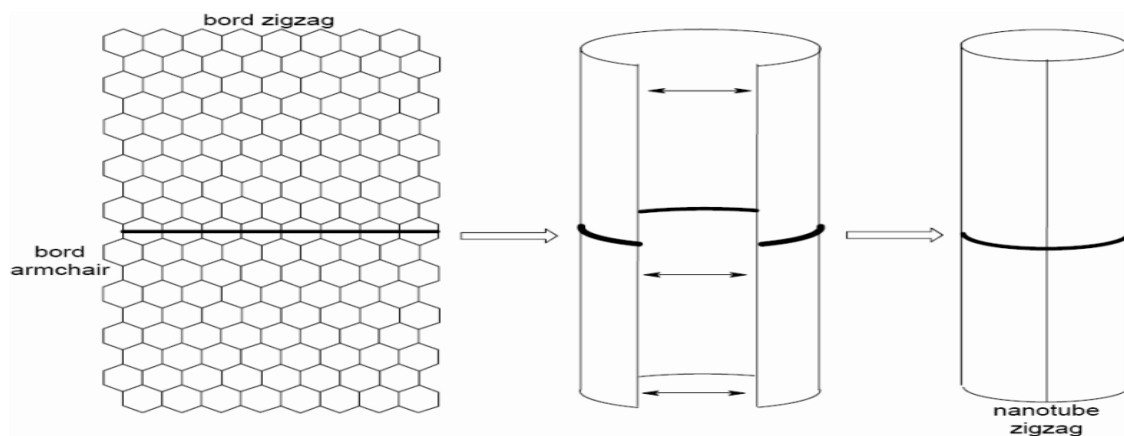
- On prend une direction de référence parallèle à une cote d'un hexagone
- On mesure l'hélicité comme l'angle entre l'axe du cylindre forme et cette direction de référence.



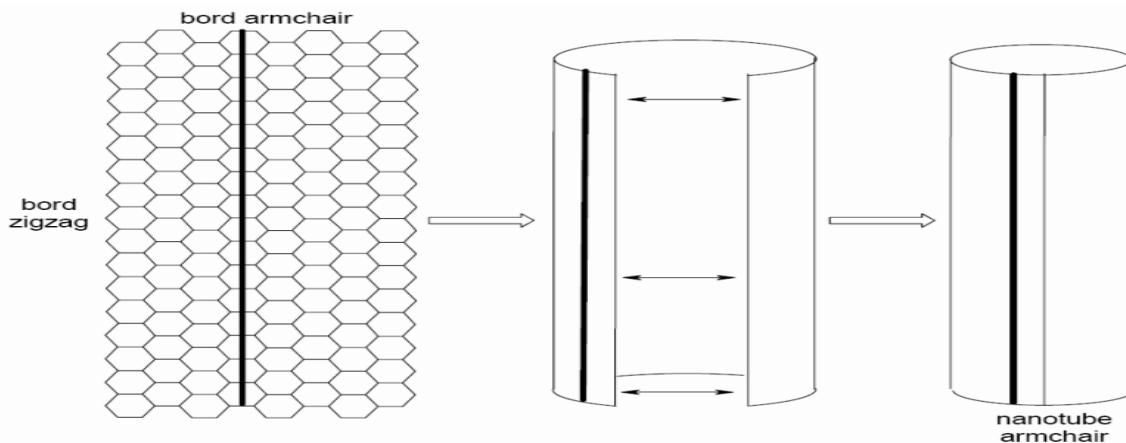
**Figure I.19–** Différents enroulements. [65]

De même que le principe de construction des fullerènes, On prend un feuillet graphène fini et on le replie de manière à former un tube, comme schématisé sur la figure 44. Le feuillet graphène possède deux bord, nommes armchair et zigzag du fait de leur

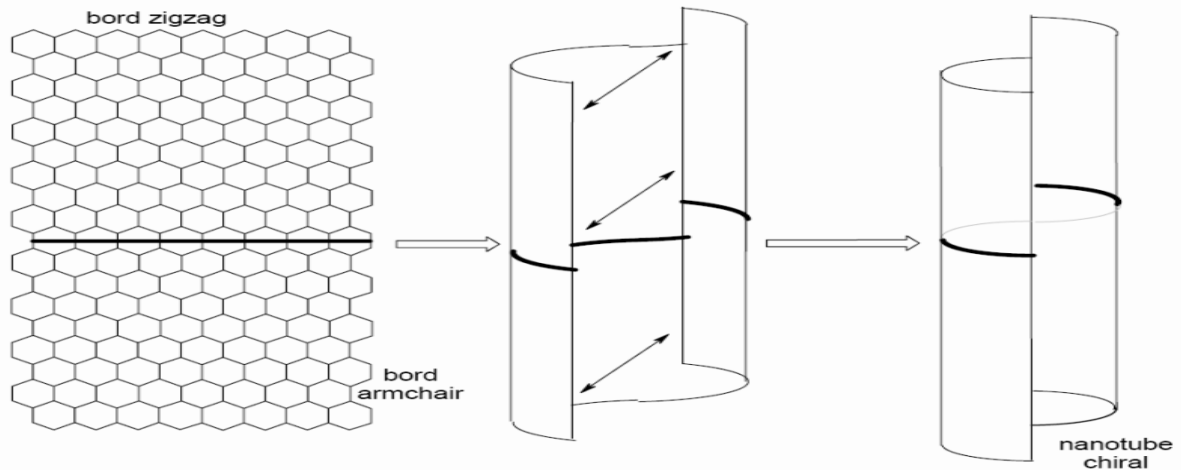
apparence. Si on trace une ligne parallèle au bord zigzag (Figure I.20), on replie le feuillet de graphène en un rouleau et on raccorde ses deux bords armchair pour former un tube: on obtient un nanotube zigzag. Les hexagones décrivent des cercles perpendiculaires à l'axe du tube [66]. On peut prendre aussi un feuillet de graphène où le bord long est le bord zigzag (Figure I.21) et on conserve la ligne repère parallèle au bord zigzag. Replions le feuillet puis raccordons ses deux bords zigzag : il résulte alors un autre type de tube, nommé nanotube armchair. Les hexagones s'alignent parallèlement à l'axe du tube. On peut aussi effectuer une translation d'un bord du feuillet de graphène par rapport à l'autre, parallèlement à l'axe du tube (Figure I.22), avant de raccorder les bords pour former le tube. Le résultat est un nanotube chiral. La chiralité vient du fait que l'on a introduit une hélicité en combinant deux opérations de symétrie, une translation le long de l'axe du tube (le glissement d'un bord du feuillet par rapport à l'autre) combinée à une rotation autour de ce même axe (le raccordement des deux bords). Les hexagones s'enroulent autour de l'axe du nanotube de manière hélicoïdale.[66]



**Figure I.20.** Repliement d'un feuillet graphène et raccordement de manière à former un nanotube zigzag.[66,67]



**Figure I.21.** Repliement d'un feuillet graphène et raccordement de manière à former un nanotube armchair.[66,67]



**Figure I.22.** Repliement d'un feuillet graphène, translation d'un bord parallèlement à l'axe du nanotube, puis raccordement de manière à former un nanotube chiral. Cette chiralité provient de son caractère hélicoïdal. [66,67]

De ce fait, l'angle varie de  $0$  à  $30^\circ$  ( $0 < \theta < 30^\circ$ ) Compte tenu de la symétrie du réseau hexagonal. Cet angle permet de classer les nanotubes de carbone en différentes familles selon leur hélicité. On obtient deux grandes familles de nanotubes : les nanotubes chiraux et les nanotubes non chiraux.

Les nanotubes non chiraux sont ceux dont les hexagones de la partie supérieure du cylindre ont la même orientation que ceux de la partie inférieure. Dans ce cas pour lesquels  $\theta = 0^\circ$ , le tube est appelé « zig zag » et quand l'angle  $\theta = 30^\circ$ , le tube est appelé « armchair ». Ils ne présentent donc pas d'hélicité. Le nanotube est de type chiral pour lesquels  $0 < \theta < 30^\circ$ , c'est-à-dire qu'ils ne sont pas superposables à leur image par un miroir. [68]

Lorsque les orientations des hexagones sont différentes (les rangées d'hexagones des parties supérieure et inférieure font entre elles un angle de valeur  $2\theta$ ) on a des tubes chiraux qui forment une vis d'Archimède. [69] (voir la figure I.24 (d).)

### I.5.2 Chiralité des nanotubes :

La structure d'un nanotube peut aussi être caractérisée par deux nombres entiers ( $n$ ,  $m$ ) appelés indices de Hamada (indices de chiralité), du nom de celui qui les a introduits pour la première fois en 1992 [70,71]. Ces deux nombres déterminent à eux seuls le rayon  $r$  du nanotube et son angle de chiralité  $\theta$ . Ils sont obtenus de la manière suivante : considérons la circonférence d'un nanotube commençant en un point  $A$  et se terminant en un point  $B$  cristallographiquement équivalent à  $A$ . Lorsqu'on déroule ce nanotube, on obtient le feuillet de graphène à plat (Figure I.23(a)). Le cercle  $AB$  devient une ligne droite reliant deux positions cristallographiquement équivalentes du feuillet de



graphène. Le vecteur  $AB$ , appelé vecteur de chiralité  $\vec{C}_h$ , est une combinaison linéaire des vecteurs unitaires  $\vec{a}_1$  et  $\vec{a}_2$  du réseau de Bravais du feuillet de graphène, telle que [72]

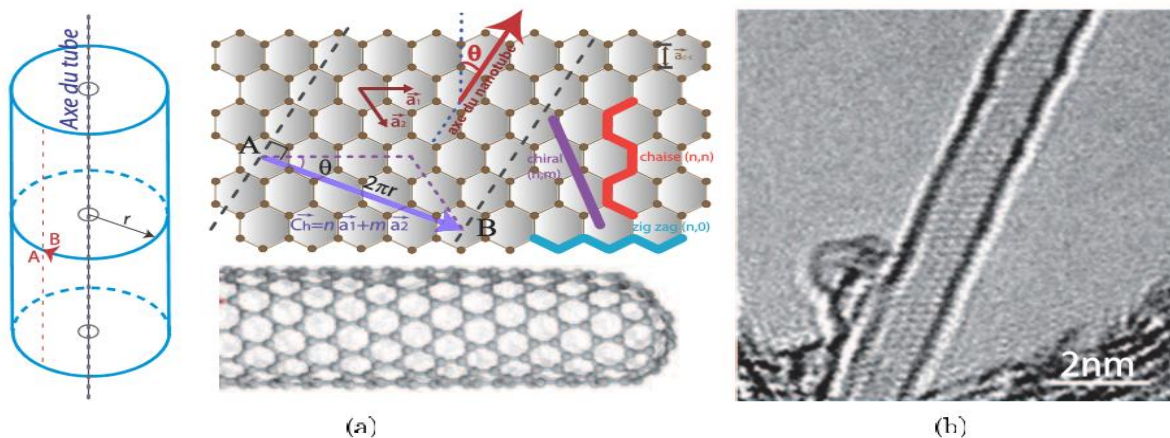
$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (\text{I.1})$$

Où  $n$  et  $m$  sont les indices de Hamada. La norme de  $\vec{C}_h$  est égale à la circonférence du nanotube et l'angle entre  $\vec{C}_h$  et  $\vec{a}_1$  vaut  $\theta$ . Le rayon  $r$  et l'angle  $\theta$  du nanotube peuvent être calculés par les relations suivantes :

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

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

Où  $a$  est le vecteur unitaire définie comme  $a = \sqrt{3}a_{C-C}$  avec la distance entre deux atomes de carbone voisins ( $C-C$ ) (égale à  $1,421\text{\AA}$  pour le graphène). [73]



**Figure I.23.** a) Représentation schématique des relations entre le rayon  $r$ , l'angle d'hélicité  $\theta$  et le vecteur chiral  $\vec{C}_h$  pour un nanotube de carbone monofeuillet. On enroule le feuillet de manière à ce que le point A coïncide avec le point B, formant ainsi un nanotube dont les 3 types de chiralité sont indiquées sur la figure [I.10]. b) Image HRTEM d'un nanotube de carbone monofeuillet obtenu par Hashimoto et al [74] qui représente dans la figure.h). L'image fait apparaître la surface atomique du graphène composant le nanotube et sa chiralité (ici 'zigzag').

On peut ainsi définir tout un ensemble de vecteurs de chiralité sous la forme de couples d'entiers  $(n, m)$ . Chaque couple représente une manière différente d'enrouler le feuillet de graphène pour former un nanotube. Suivant l'angle de chiralité  $\theta$  et le

rayon  $r$ , donc suivant les couples d'entiers  $(n,m)$ , les propriétés des nanotubes de carbone varient.

- Les nanotubes indicés  $(n, 0)$  avec  $m=0$  et  $\theta = 0^\circ$  correspondent à des nanotubes 'zigzag' et ceux indicés  $(n, n)$  avec  $n=m$  et  $\theta = 0^\circ$  à des nanotubes 'armchair' (chaise). [69]
- Les nanotubes  $(n, n)$  et  $(n, 0)$  présentent une symétrie miroir plane normale à l'axe du nanotube. Quant aux nanotubes  $(n, m)$  avec  $n \neq m \neq 0$  et  $0 < \theta < 30^\circ$ , ils correspondent à des nanotubes chiraux. [69]

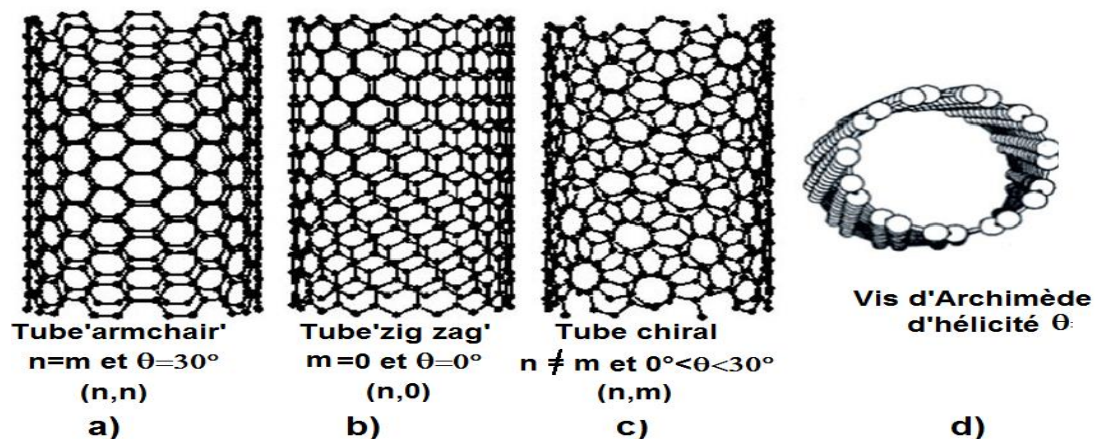


Figure I.24: Différents modes d'enroulement d'un nanotube de carbone. a) Nanotube chaise (armchair), b) Nanotube zigzag, c) Nanotube chiral [69]

Le tableau ci-dessous présente les différentes chiralités de nanotube mono-paroi.

Tableau I.1 : Caractéristiques structurales d'un nanotube de carbone mono-paroi en fonction de sa symétrie [61]

Symétrie	Indices	Angle de chiralité	Diamètre	Exemple
zigzag	$(n,0)$ $n = 0$ ou $m = 0$	$\theta = 0^\circ$	$d = a_{cc} \frac{\sqrt{3} m}{\pi}$	 $(9,0) \Rightarrow d = 7,0 \text{ \AA}$
armchair	$(n,n)$ $n = m$	$\theta = 30^\circ$	$d = a_{cc} \frac{3n}{\pi}$	 $(5,5) \Rightarrow d = 6,8 \text{ \AA}$
chirale	$(n,m)$ $n \neq m$	$0 < \theta < 30^\circ$ $\theta = \text{Arctan} \left( \frac{m\sqrt{3}}{2n+m} \right)$	$d = a_{cc} \frac{\sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{\pi}$	 $(10,5) \Rightarrow d = 10,4 \text{ \AA} ; \theta = 11^\circ$

### I.5.3 Les extrémités :

Le nanotube est ouvert à ses deux extrémités, il reste à le fermer.

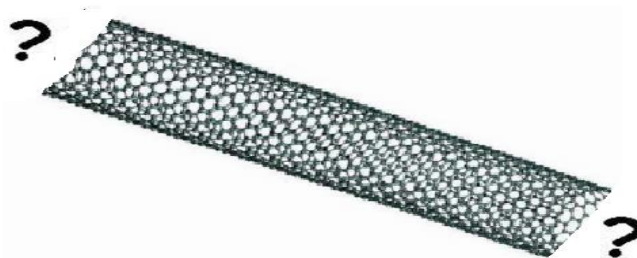


Figure I.25– Fermeture d'un nanotube.

Pour cela, il faut introduire des défauts pour créer des courbures dans le plan de graphène, ces défauts seront créés en remplaçant des hexagones par des pentagones. De ce fait, ces pentagones vont générer une courbure de  $112^\circ$  dans le feuillet et les lois mathématiques d'Euler montrent qu'il faut un minimum de 12 pentagones pour obtenir une sphère et pouvoir ainsi fermer le feuillet, soit six pentagones à chaque extrémité du tube.

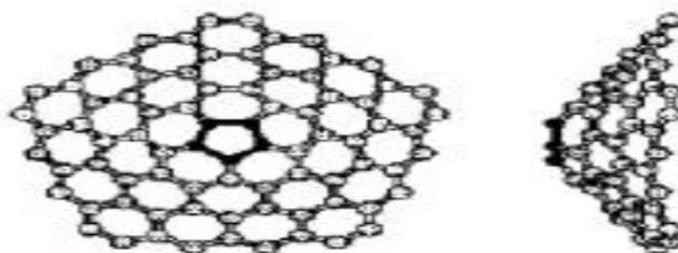


Figure I.26– "Bouchon" de 12 pentagones [65]

Avec le même principe, la molécule de  $C_{60}$  contient 12 pentagones et 20 hexagones, il s'agit donc du plus petit fullerène possible. En introduisant une rangée supplémentaire d'hexagones, la molécule  $C_{60}$  - parfois appelé « ballon de foot » - se trouve étirée et donc donne naissance à une nouvelle molécule en forme conique, c'est la molécule  $C_{70}$  - parfois appelée « ballon de rugby ». De même, en ajoutant une seconde rangée d'hexagones, la molécule  $C_{70}$  se change en  $C_{80}$ .

Ils obtenus en insérant des molécules heptaédriques et en ajoutant des molécules hexaédriques des manières à former des structures arrondies possédant 60, 70 ou plus d'atomes de carbone.

- Si on roule la feuille de carbone sans décalage, on peut obtenir un nanotube qui peut être fermé par deux demi-fullerènes  $C_{60}$ , les plus petits fullerènes possibles

- Pour obtenir des nanotubes d'un diamètre plus grand il faut le rouler avec un décalage angulaire mais il ne pourra plus être fermé avec un  $C_{60}$ . Pour cela on va fabriquer des demi fullerènes  $C_{70}$ ,  $C_{80}$  ou plus encore dont la structure sera compatible avec le bord de la feuille enroulée. Plus un nanotube sera grand plus il faudra introduire des pentagones supplémentaires et en rétrécir quelques-uns.

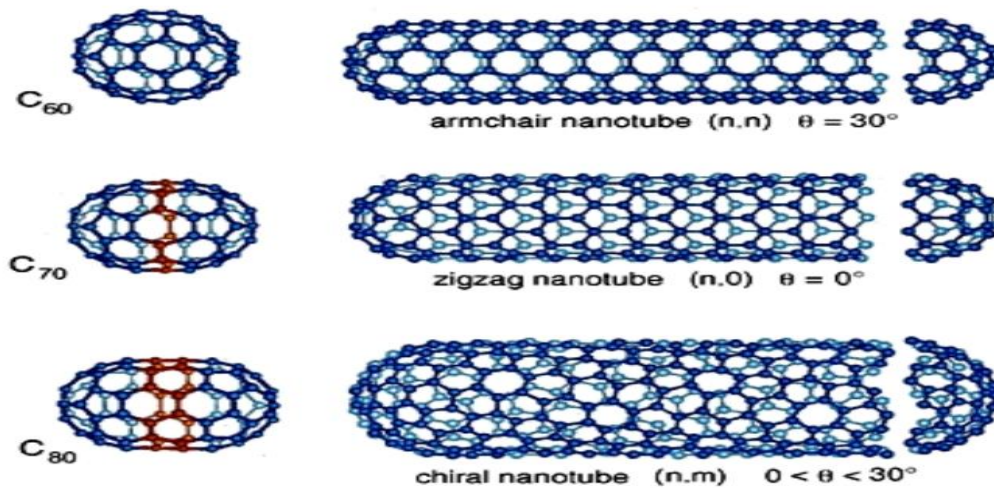


Figure I.27– Différents fullerènes

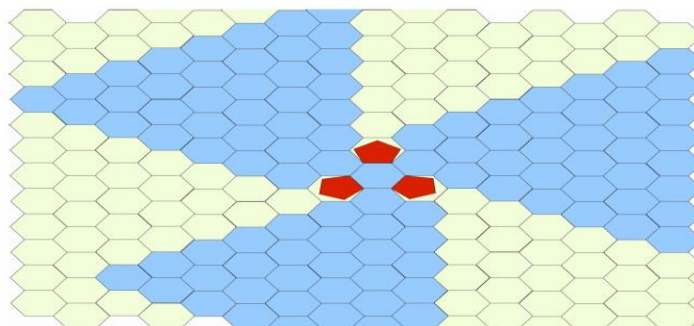


Figure I.28 – Suppression et rétrécissement de certains pentagones [65]

## I.6 Propriétés générales des nanotubes de carbone :

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés physiques exceptionnelles.

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



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

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

### I.6.1 Propriétés physique

Le diamètre du nanotube de carbone dépend naturellement du nombre de feuillets de graphène comme indiqué dans le tableau I.2

**Tableau I.2.** les caractéristiques dimensionnelles des nanotubes de carbone [75]

<i>Nanotube de carbone</i>	<i>Monoparois</i>	<i>Multiparois</i>
<i>Diamètre externe</i>	<i>0.4 à 3 nm</i>	<i>2 à 25 nm</i>
<i>Longueur</i>	<i>100nm à plusieurs <math>\mu\text{m}</math></i>	<i>1 <math>\mu\text{m}</math> à 1cm</i>

les nanotubes de carbone monofeuillet (SWCNTs) se regroupent sous forme de fagots dont le diamètre peut varier de 10 à 30 nm. un diamètre de 1 nm est de l'ordre de la taille de la double hélice de la molécule d'ADN indiquant le caractère moléculaire d'un nanotube de carbone. par ailleurs, du fait de leur dimensions (nanométrique pour la section et micrométrique pour la longueur), les nanotubes de carbone sont considérés comme des molécules unidimensionnelles se fibres (longueur supérieure à  $5 \mu\text{m}$ , diamètre inférieur à  $3 \mu\text{m}$  et rapport  $L/D$  supérieur à 3. [75]

### I.6.2 Propriétés mécaniques

La base des propriétés mécaniques extraordinaires des nanotubes vient de leur structure composée uniquement de liaisons covalentes C-C hybridées  $sp^2$  (l'une des plus fortes et des plus stables de la nature). Depuis leur découverte, de nombreux travaux théoriques ont prévu un module d'Young très élevé pour les nanotubes. Les premiers résultats obtenus sur les propriétés mécaniques des CNTs, obtenus par simulations, montrent un grand module de Young comparable à celui du graphite (environ 1 TPa [76]). Parmi ces premières simulations, Lu [77] a trouvé, à partir de un modèle numériques empirique, un module de Young de (1.06 TPa) pour les nanotubes monoparois. Il montre aussi que le module de Young, ainsi que d'autres modules élastiques (cisaillement) sont dépendants des caractéristiques géométriques des tubes

(Chiralité, diamètre...). Une synthèse de ces simulations sur les propriétés mécaniques a été publiée par Sears et Batra [78]. Cette synthèse montre un large éventail de valeurs trouvées pour le module de Young compris entre 0, 5 et 5,5 TPa, cette dispersion a été attribuée aux différentes valeurs d'épaisseur des feuillets des nanotubes prises en compte dans ces simulations. La dimension nanométrique des CNTs rend l'étude de leurs propriétés mécanique très difficile en raison d'importants moyens techniques de microscopie nécessaires pour leurs caractérisations. Ainsi, la première expérience sur la mesure du module de Young a été réalisée par Treacy et al. [79] en 1996. Cette mesure a été effectuée à l'aide d'un Macroscopie Electronique en Transmission sur un amas de MWCNT fixé à une extrémité sur un substrat et l'autre extrémité soumis à une source de chaleur. L'analyse des vibrations thermiques en fonction de la température a permis une estimation du module de Young d'une moyenne de 1,8 TPa. Par la suite, Krishnan et al. [80] ont trouvé par la même méthode une valeur de module de Young comparable, d'environ 1,21 TPa pour un SWCNT de 1,5nm de diamètre moyen. En utilisant un microscope à force atomique (AFM), Salvétat et al. [81] ont mesuré un module de Young moyen de 1,31 TPa pour un SWCNT de 3nm de diamètre. Cette même équipe a étudié l'influence des techniques de fabrication des MWCNTs sur leurs propriétés mécaniques, et a montré que les MWCNTs produits par arc électrique ont en moyenne un module Young 30 fois supérieur à ceux fabriqués par la méthode chimique, montrant ainsi la dégradation des propriétés mécaniques apportée par les défauts structurels causés par cette méthode de fabrication [82]. Cependant, Lukic' et al. [83] ont réussi par une approche chimique la fabrication de MWCNT de faible diamètre (< 5nm) avec un module de Young d'environ 1 TPa. Le Tableau I.3 ci-dessous compare les propriétés mécaniques des nanotubes à des matériaux commerciaux conventionnels.

**Tableau I.3** Comparaison des propriétés mécaniques des CNTs avec celle de d'autres matériaux.[84]

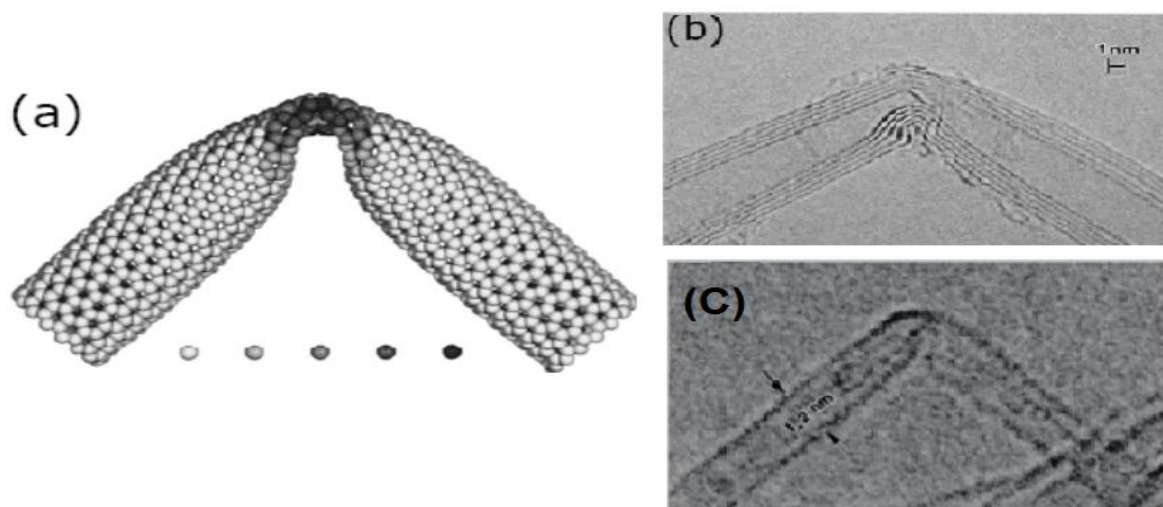
Matériau	Module de Young (GPa)	Résistance à la traction (GPa)
SWCNT	1050-1300	45-50
MWCNT	600-1200	30-150
CNF	100-700	10-170
Fibres de carbone	200-600	1,7-5
Acier	208	0,4
Kevlar	186	3,44
Résines époxy	3,5	0,005
Bois	16	0,008

Le Tableau I.4 présente les valeurs de Modules de Young et contraintes à la rupture des *CNTs* mesurées expérimentalement. On notera que les valeurs réelles donné par l'expérimentales présentées sont bien plus basses que les valeurs déterminées théoriquement (qui vont jusqu'à 5,5 *TPa* pour les modules de Young [78] de *CNT* ). Ceci s'explique par la présence de défauts structuraux dans les nanotubes de carbone.

**Tableau I.4** : Modules de Young et contraintes à la rupture des *CNTs* d'après Référence [85]

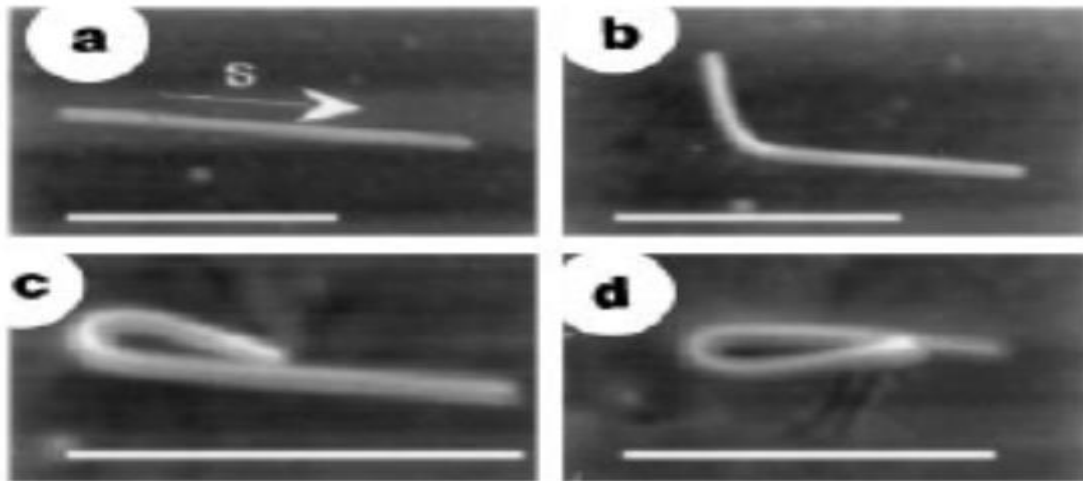
Module de Young (TPa)	Contrainte à la rupture (GPa)	Type de nanotubes	Méthode de synthèse	Méthode de caractérisation	Référence bibliographique
1,25		SWNT	Ablation laser	MET (vibrations)	[86]
1	30			MEB (traction)	[90]
1,8		MWNT	Arc électrique	MET (vibrations)	[85]
1,28			Arc électrique	AFM	[83]
0,81			Arc électrique	AFM	[84]
0,45	3,6		CVD	MEB (traction)	[89]
0,27 – 0,95	11 - 63		Arc électrique	MEB (traction)	[88]
0,9	150		Arc électrique	MET (traction)	[87]

Iijima et al. En ont conclu que les *CNTs* pouvaient subir de fortes déformations, se courber selon des angles très importants allant jusqu' à  $110^\circ$  (Figure I.29), se déformer ou bien se tordre. Ainsi, les *CNTs* sont très flexibles, capables de supporter de fortes déformations en traction, torsion et flexion [86]. Ce comportement est dû à la possibilité pour les atomes de carbone d'une feuille de graphène de se réorganiser en formant des pentagones et des heptagones.



**Figure I.29** a) Simulation de la structure atomique d'un coude obtenu par pliure d'un *CNT* monoparoie. b) micrographie en champs claire d'un coude formé sur b) *MWCNT* et c) *SWCNT* sous contraintes mécaniques [86].

Enfin, Falvo et al. ont étudié par *AFM* la réponse des *CNTs* soumis à de fortes contraintes de déformation [87]. Ils ont ainsi pu observer des *MWCNTs* se pliant à de grands angles sans subir de dommage. La Figure I.30 montre un nanotube (10,5 nm de diamètre et 850 nm de longueur) soumis à des contraintes : le tube est plié d'abord vers l'avant (b), jusqu'à être complètement replié sur lui-même (c), avant d'être déplié et replié dans l'autre sens (d), prouvant ainsi que les nanotubes sont effectivement très flexibles.



**Figure I.30** : Nanotube de carbone sous contrainte. Sur chaque image la barre blanche représente 500 nm [87]

### I.6.3 Propriétés électronique

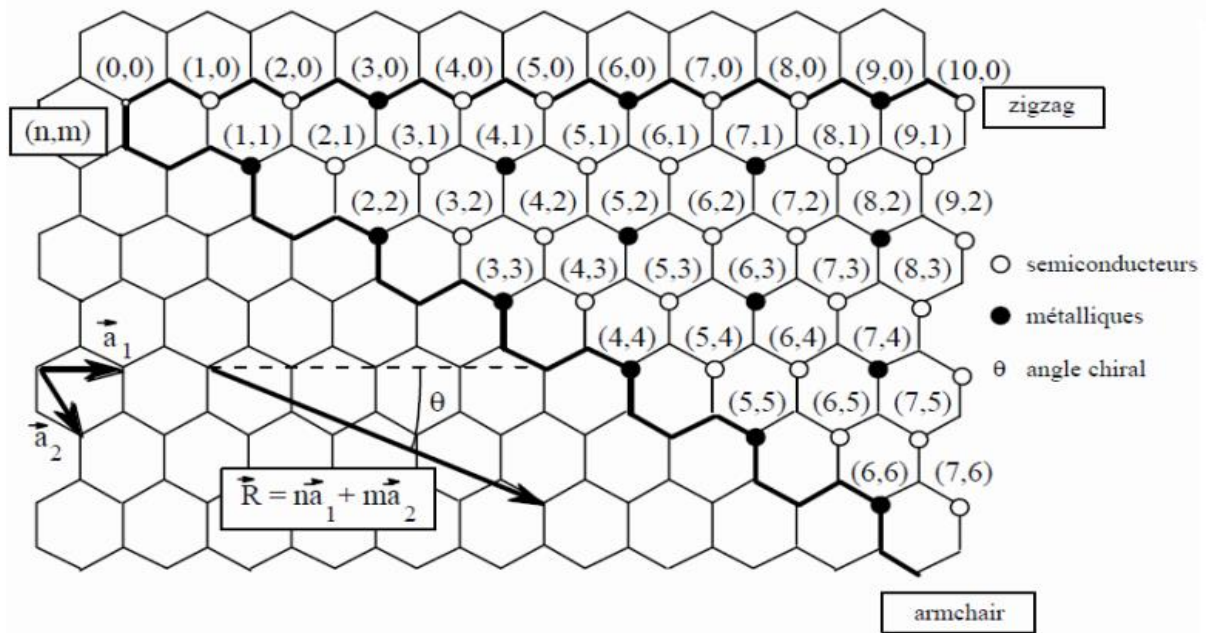
Les propriétés du transport électronique des *CNTs* ont attiré beaucoup d'attention dans la communauté scientifique pour deux raisons :

- la première concerne les nombreuses applications possibles (transistors à effet de champ et nanocapteurs par exemple).
- la deuxième, purement fondamentale, concerne la possibilité d'étude physique du transport électronique dans les systèmes à une dimension.

La modélisation des bandes d'énergies a montré que la conductivité électrique d'un nanotube de carbone dépend de son hélicité, donc de ses indices de chiralité, et que tous les *CNTs* possèdent une bande interdite, donc un comportement semi-conducteur. Néanmoins, il existe un cas particulier pour lequel un nanotube de carbone peut présenter un comportement métallique, et on montre que cela est possible si et seulement si  $n - m$  est un multiple de 3 (*0 inclus*) [88]. Ce cas représente un tiers des *CNTs* de type chiral, et on peut en déduire par ailleurs que tout les *CNTs* de type chaise ont un comportement métallique ( $n - m = 0$ ). Figure I.31 résume ces résultats [61].



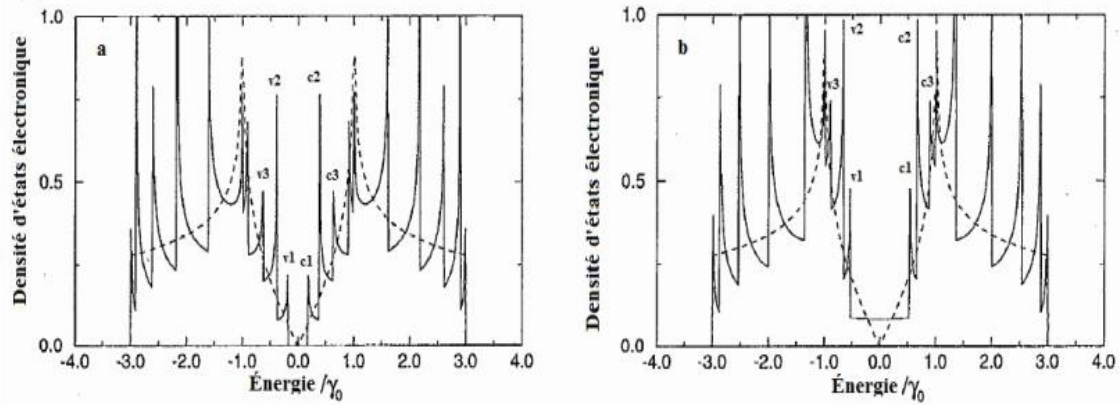
- Si  $n-m=0 \rightarrow n=m$ , les nanotubes de configuration armchair  $(n, n)$  sont métalliques.
- Si  $n-m=3i$  (où  $i$  est un entier), les nanotubes sont semi-conducteurs à gap étroit.
- Si  $n-m \neq 3i$ , les nanotubes sont semi-conducteur a gap large ou isolants.



**Figure I.31:** Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monocouche en fonction de leurs indices de chiralité  $(n, m)$ .

On montre aussi que la bande interdite des CNTs de type semi-conducteur est de l'ordre de  $0,7 \text{ eV}$  pour un diamètre  $d = 1 \text{ nm}$ , et que celle-ci décroît en  $1/d$  pour les diamètres supérieurs [89]. Les densités de courant des nanotubes de carbone métalliques sont de  $10^9 \text{ A/cm}^2$  [90], une valeur très élevée par rapport à celles d'un métal usuel de  $10^6 \text{ A/cm}^2$ . Cependant, les nanotubes semi-conducteurs présentent des portes logiques laissant, ou non, passer le courant dans des dispositifs tels que les transistors à effet de champ [91].

D'après référence [92], la figure I.32 représente les densités d'états pour un tube métallique  $(9,0)$  et pour un tube semi-conducteur  $(10,0)$ . Dans le cas du tube semi-conducteur, la densité d'état est nulle. Puis par contre pour un tube métallique, il existe une faible densité. Dans les deux cas, nous pouvons observer des pics repartis symétriquement par rapport à  $E=0$ . Ces derniers sont appelés singularités de Van Hove et leurs positions dépendent du diamètre du tube. [67]



**Figure I.32:** a) Densité d'états pour un nanotube semi-conducteur (10.0). (b) et un nanotube métallique (9.0). La ligne hachurée est la densité d'états du graphène [92]

#### I.6.4 Propriétés électriques

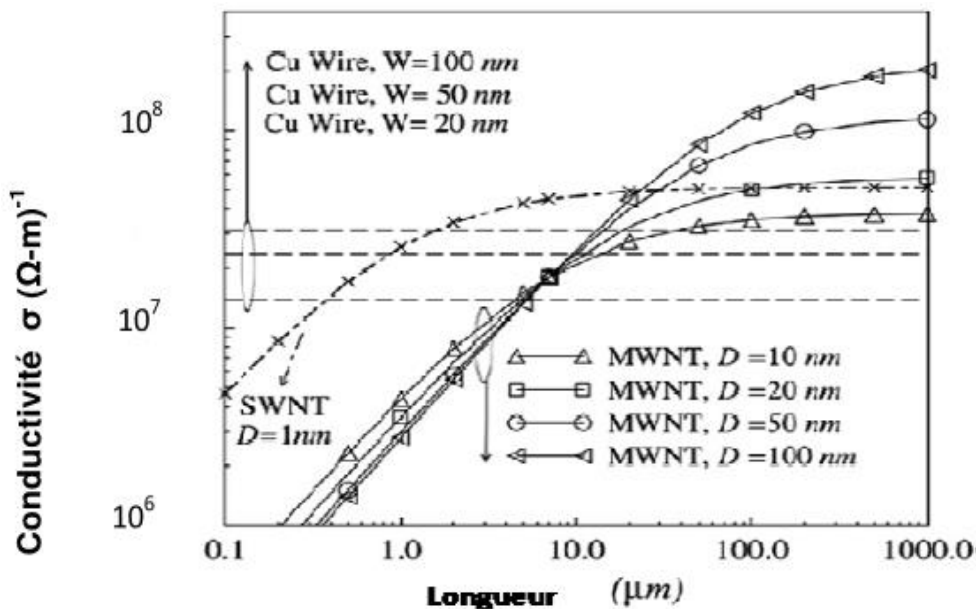
Les dimensions nanométriques des *CNTs* leur confèrent une conduction d'électricité de type particulière, dite balistique [93, 94]. En effet, dans un nanotube isolé sans défauts structurels, la mobilité des électrons à l'intérieur du nanotube est très importante car le libre parcours moyen qui caractérise la distance moyenne entre deux collisions élastiques d'électrons est supérieur à la longueur de nanotube. Cette absence de collisions se traduit par une résistance intrinsèque quasi nulle. Cependant, la résistance totale d'un nanotube dépend aussi d'autres types de résistances à savoir :

- la résistance quantique qui est due aux effets quantiques liés aux dimensions nanométriques, d'environ  $6,5 \text{ k}\Omega$  [95].
- la résistance de contact à l'interface métal/nanotube, qui représente la difficulté qu'éprouvent les électrons pour passer du métal au nanotube. Cette résistance peut être réduite ou éliminée en utilisant des contacts en palladium ou en titane [96].

Ce transport balistique du courant a été mis en évidence expérimentalement par Poncharal et al. [97] en utilisant un Microscope Electronique en Transmission. L'expérience consistait à plonger un faisceau de *MWCNT* dans du mercure liquide et à mesurer la conductance électrique en fonction de l'enfoncement des nanotubes dans le mercure. Poncharal et al. [97] ont constaté que la conductivité électrique ne varie pas linéairement en fonction de l'enfoncement mais avec un pas constant, ainsi, à chaque fois qu'un nanotube rentre en contact avec le mercure la conductance augmente d'une valeur  $G_0$  correspondant à la conductance du quantum. En plus de leur transport balistique du courant, les *CNTs* peuvent supporter une forte densité de courant. Yao et al. [98] ont rapporté une densité de courant qui dépasse  $10^9 \text{ A Cm}^{-2}$  pour des *SWCNTs*

métalliques d'environ  $1\text{ nm}$  de diamètre. Cette valeur importante du courant qui peut être supportée par ces *CNTs* est attribuée à leur environnement de mesure qui permet une bonne évacuation de la chaleur car d'autres essais sur des *CNTs* suspendus ont donné des valeurs beaucoup plus faibles [99].

Le cuivre est généralement utilisé dans les applications où une conductivité élevée est nécessaire, cependant il ne conserve pas sa conductivité apparente à l'échelle de dimensions nanométriques [100]. La Figure I.33 montre effectivement que la conductivité électrique des nanotubes de carbone augmente avec la longueur du nanotube, alors que la conductivité d'un fil de cuivre n'augmente pas avec la longueur, mais avec son diamètre. Ce diagramme montre aussi que la conductivité électrique des *CNTs* devient supérieure à celle du cuivre (à diamètre équivalent), pour des longueurs supérieures à  $10\ \mu\text{m}$  [101].



**Figure I.33:** Conductivité électrique des MWCNTs de différents diamètres et des SWCNTs en fonction de leur longueur [101].

Les mesures de résistivité électrique réalisées sur des tubes multi-feuillets isolés montrent que chaque tube possède ses propres caractéristiques électriques conduisant à un comportement métallique ou non avec des valeurs comprises entre  $8 \cdot 10^{-6}\ \Omega\text{m}$  et  $1,2 \cdot 10^{-4}\ \Omega\text{m}$  [102]. Thomas Ebbesen et al. trouvent des résistances de  $10^8\ \Omega$  pour un nanotube de diamètre  $10\ \text{nm}$  et  $2 \cdot 10^2\ \Omega$  pour un diamètre  $18,2\ \text{nm}$ ; en termes de résistivité électrique, ils trouvent respectivement  $8 \cdot 10^{-3}\ \Omega\text{m}$  et  $5,1 \cdot 10^{-8}\ \Omega\text{m}$  [103].

Du fait du manque de reproductibilité des mesures sur des tubes isolés, des tests électriques 2- pointes et 4- pointes ont été réalisés sur des faisceaux de *CNT* [104] de

12 nm de diamètre moyen et de 180  $\mu\text{m}$  de long. Les résistances électriques mesurées dans l'axe des CNTs sont respectivement pour le test 2-pointes et 4-pointes de 3,75  $\Omega$  et 0,0056  $\Omega$  (Figure I.4.3). Ces auteurs ont par la suite déterminé la résistivité d'un seul tube évalué à  $2,44 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot \text{m}$ . Sur ces graphes, on remarque que les CNTs présentent bien un comportement ohmique, cependant la gamme de variation en tension pour les tests 4-pointes reste faible ( $\pm 2 \text{ mV}$ ).

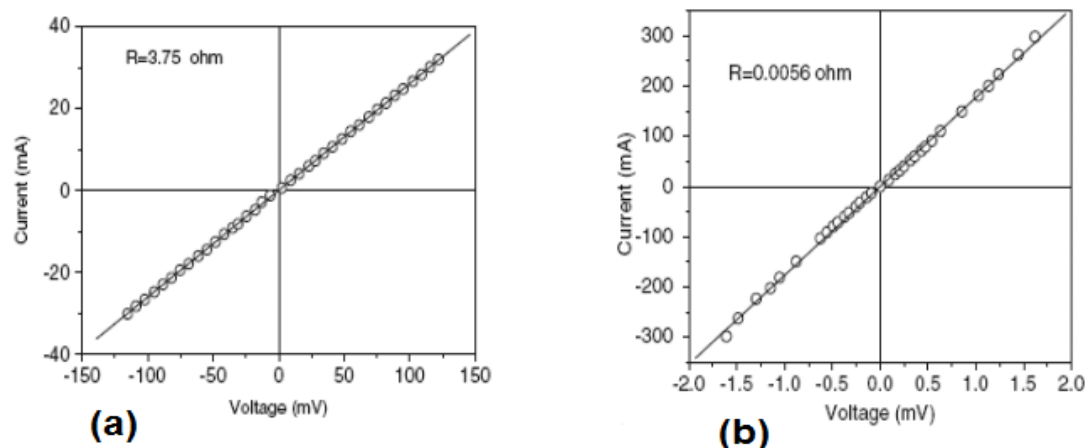


Figure I.34 : Courbe  $I=f(U)$  (a) pour le test 2-pointes et (b) pour le test à 4-pointes [104]

Tableau I.5: Mesures expérimentales de la conductivité électrique de MWCNTs d'après Référence [85]

Réf.	Type de CNT	Diamètre (nm)	Longueur ( $\mu\text{m}$ )	Conductivité électrique (S/m)	Méthode de mesure
[23]	MWCNT	13,9	1	$1,4 \cdot 10^5$	Lithographie et AFM avec pointe conductrice
[24]	MWCNT	3,6 - 10,2	0,3 - 1	$1,7 \cdot 10^1 - 2,0 \cdot 10^7$	Mesure à quatre fils
[25]	MWCNT	31,1	1	$1,9 \cdot 10^5$	Mesure à deux fils
[26]	MWCNT	20	3,4	$6,3 \cdot 10^4 - 1,9 \cdot 10^5$	Mesure à deux fils
[27]	Ruban de MWCNTs	-	-	$7,9 \cdot 10^4 - 2,3 \cdot 10^5$	Mesure à quatre fils
[28]	MWCNT	-	15-50	$1 \cdot 10^4 - 4 \cdot 10^4$	Mesure à deux fils
[29]	MWCNTs désordonnés	-	-	$1,7 \cdot 10^4$	Mesure à quatre fils

### I.6.5 Propriétés Thermiques

Les structures cristallines du carbone possèdent les conductivités thermiques les plus élevées de tous les matériaux. Le Tableau I.6 présente les différentes conductivités thermiques des allotropes du carbone en comparaison à celle de différents métaux commerciaux conventionnels. Dans ce tableau, on voit que la conductivité thermique de

CNT est bien plus grande que celle de l'argent, de l'or ou du cuivre, métaux connus pour avoir une forte conductivité thermique.

**Tableau I.6:** Conductivités thermiques à 300 K des allotropes du carbone en comparaison à celles de quelques matériaux [105]

Matériaux	Conductivité thermique ( $W.m^{-1}.K^{-1}$ )
Diamant	1000 - 2600
Graphène	3080 - 5150
NTC	3000 - 6600
Aluminium	237
Alumine	23
Argent	429
Cuivre	401
Or	317
Palladium	72

Ainsi, à température ambiante, le diamant et le graphite présentent des conductivités thermiques comprises entre  $400$  et  $2200 Wm^{-1} K^{-1}$ . Cette conductivité très élevée est due principalement à la rigidité de ces structures composées de liaisons covalentes de type  $sp^2$  et  $sp^3$  entre atomes de carbone favorisant une transmission de la chaleur par vibration des réseaux cristallins (*phonons*) [99]. Concernant les nanotubes de carbone, différentes simulations ont été effectuées pour des nanotubes de carbone de haute pureté et sans défauts structuraux montrant une grande conductivité thermique comparable ou supérieure à celle du diamant [40–106]. Berber et al. [40] ont calculé une conductivité thermique longitudinale théorique basée sur la dynamique moléculaire à température ambiante voisine de  $6600 Wm^{-1} K^{-1}$  pour un nanotube monofeuillet isolé d'indices de chiralité  $(10,10)$  sans défaut structurel, cette valeur reste la plus élevée connue. Elle dépasse largement celle du diamant. Che et al. [107] à leur tour ont calculé une conductivité thermique longitudinale d'environ  $2980 Wm^{-1} K^{-1}$  pour un nanotube monofeuillet isolé d'indices de chiralité  $(10,10)$  à température ambiante, en prenant en compte les défauts structuraux.

Des valeurs expérimentales à température ambiante comparables ont été rapportées. Ainsi, Kim et al. [108] ont mesuré une conductivité thermique d'environ  $3000 Wm^{-1} K^{-1}$  pour un nanotube multifeuillet isolé de  $14nm$  de diamètre. Pop et al. [99] et Fujii et al. [109] ont mesuré respectivement  $3600 Wm^{-1} K^{-1}$  et  $2000 Wm^{-1} K^{-1}$  pour un nanotube

monofeuillet isolé de 2,4nm et 9,8nm de diamètre. Cependant, les nanotubes de carbone ne se trouvent jamais isolés, ils se regroupent en faisceaux par des interactions faibles de type Van der Waals et forment ainsi des pelotes ou des fagots. En prenant en considération ce regroupement de nanotubes, plusieurs expériences ont montré une chute brutale de la conductivité thermique, ainsi, des conductivités thermiques d'environ  $200 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$  et de  $35 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$  ont été respectivement mesurées pour des films composés de SWCNT alignés et non alignés par Hone et al. [110]. Des valeurs de  $25 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$  et  $15 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$  ont aussi été rapportées respectivement par Yi et al. [111] et Yang et al. [112] pour des films massifs de MWCNT. En effet, la conductivité thermique des nanotubes de carbone, à l'instar du graphite et du diamant, est régie par le transport des phonons à toutes les températures, et elle est proportionnelle à  $Cvl$ , avec  $C$  la chaleur spécifique,  $v$  la vitesse du son et  $l$  le libre parcours moyen des phonons [113]. La conductivité thermique est maximale dans des nanotubes isolés car leur longueur, pratiquement quelques  $\mu\text{m}$ , dépasse celle du libre parcours moyen des phonons, estimé à quelques centaines de nanomètres [108]. Cependant, la concentration des défauts structuraux et des lacunes ont une incidence significative sur la valeur de la conductivité thermique des nanotubes isolés [107]. Dans les films massifs constitués d'enchevêtrement de CNT, la chute de la conductivité thermique est attribuée aux nombreux contacts entre les CNT qui présentent de fortes résistances thermiques [114], et qui sont aussi le siège des phénomènes de dispersion de phonons, réduisant ainsi le libre parcours moyen des phonons.

**Tableau I.7:** Mesures expérimentales de la conductivité thermique de CNTs d'après Référence [85]

Réf.	Type de CNT	Diamètre (nm)	Longueur ( $\mu\text{m}$ )	Conductivité thermique ( $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ )	Méthode de mesure
[28]	MWCNT	-	15-50	200	Réflexion photothermique pulsée
[31]	MWCNT	9,8	-	2069	Echantillon attaché à un capteur en T
[32]	SWCNT	1,7	2,6	3500	(I – V)
[33]	MWCNT	20	1,4	$300 \pm 20$	Méthode $3 \omega$
[34]	MWCNT	60-150	20	750	Laser flash
[35]	MWCNT	10	15	950	Delta V(gs)
[36]	SWCNT	1,8	20,5	$2400 \pm 400$	Raman spectra shift
	MWCNT	8,2	32	$1400 \pm 250$	



**Tableau I.8:** Valeurs de conductivité thermique de CNTs calculées par modélisation d'après Référence [85]

Réf.	Conductivité thermique ( $W.m^{-1}.K^{-1}$ )	Méthode de mesure
[37]	6600	Dynamique moléculaire
[38]	2980	Dynamique moléculaire
[39]	4000	Equation de transport des phonons de Boltzmann-Peierls
[40]	200	Dynamique moléculaire
[41]	340	Méthode de Müller-Plathe
[42]	474	Equation de transport des phonons de Boltzmann-Peierls

Le Tableau I.7 ci-dessus présente les valeurs de conductivité thermique mesurées expérimentalement tandis que le Tableau I.8 regroupe des valeurs de conductivité thermique calculées par modélisation. On notera que les valeurs réelles données par expérimentales présentées ci-dessus sont bien plus basses que les valeurs calculées par modélisation théoriquement (qui vont jusqu'à  $6600 Wm^{-1} K$  pour la conductivité thermique [85]). Ceci s'explique par la présence de défauts structuraux dans les nanotubes de carbone.

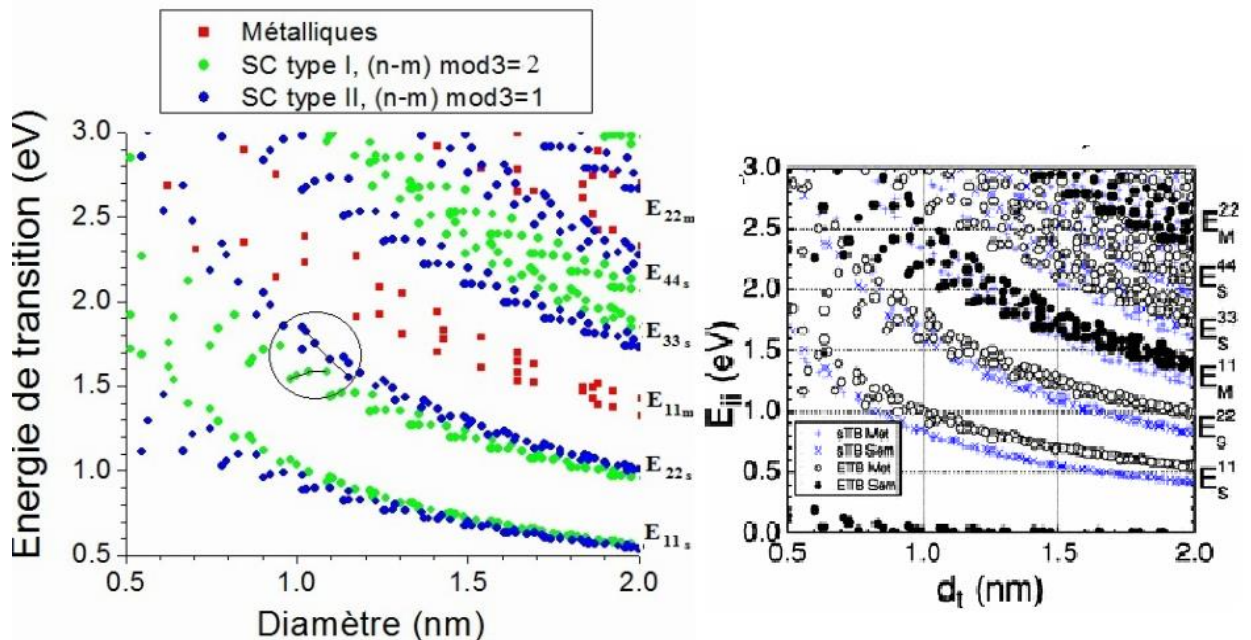
### I.6.6 Propriétés Optiques

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés optiques intéressantes. Le matériau le plus noir jamais conçu par l'homme est un tapis de nanotubes disposés verticalement, réalisé par des chercheurs l'Université Rice autour du professeur Pulickel Ajayan avec un indice de réfraction de  $0,045$  % [115], il est trente fois plus sombre que le carbone, ce qui lui permet d'absorber  $99,9$  % de la lumière qu'il reçoit. C'est trois fois mieux que ce que permettait l'alliage de nickel-phosphore qui était le matériau réputé le plus sombre. Ces inventions pourraient intéresser les secteurs militaire, de la communication, de l'énergie (solaire notamment), de l'observation, des colorants, etc... De plus la photophysique des nanotubes en fait un matériau très prometteur pour la conception d'une nouvelle famille de détecteurs infrarouge.

En plus, les nanotubes se comportent comme un semi-conducteur à gap direct, dont la valeur varie typiquement entre  $0,1 eV$  et  $1 eV$ , en fonction du diamètre des nanotubes et selon leur géométrie spatiale (symétrie) ou leur composition (mono ou multi-feuillet).

Les nanotubes présentent donc des propriétés d'absorption intéressantes dans l'infrarouge. Des chercheurs d'IBM ont indiqué avoir réussi à faire émettre de la lumière infra-rouge par des *CNTs* semi-conducteurs placés dans une géométrie de transistor.

Les propriétés électroniques originales des tubes induisent des propriétés optiques également originales. La structure électronique d'un nanotube de carbone noté  $(n, m)$  renferme plusieurs sous bandes et donc plusieurs singularités de van Hove. La densité d'états des nanotubes monofeuillets est caractérisée par l'existence de singularités de Van Hove (Figure I.32) [92]. Les transitions électroniques possibles entre singularités du même ordre déterminent le spectre d'absorption. Ces transitions dépendent évidemment du type de nanotube, métallique ou semi-conducteur, mais également du diamètre  $d$  du nanotube considéré. Il est possible de représenter sur une même figure l'énergie de toutes les transitions entre singularités de Van Hove en fonction du diamètre pour tous les types de nanotubes (Figure I.35). Ce type de figure est appelé diagramme de Kataura. Ce diagramme représente les transitions  $E_{ii}$  en fonction du diamètre du tube comme schématisé dans la Figure I.35. En raison des règles de sélections, les transitions optiques se produisent entre deux crêtes symétriques par rapport au niveau de Fermi. Ces transitions sont notées  $E_{11}$ ,  $E_{22}$ ,  $E_{33}$  ...  $E_{ii}$  ou l'indice  $i$  représente le rang du pic par rapport au niveau de Fermi.



**Figure I.35 :** Exemple de diagramme de kataura [116].les points reliés à l'intérieur de cercle constituent une aide visuelle afin de voir les familles de tubes  $(2n+m)=const$  et  $(n-m)=const$ [117]



Dans le diagramme de Kataura, on peut y discerner plusieurs caractéristiques importantes. D'abord, les énergies de transition sont généralement inversement proportionnelles au diamètre du CNTs.

On remarque aussi qu'il y a des regroupements de transitions qui forment de familles distinctes de point de transitions qui s'aliment. Une première catégorie regroupe les familles de nanotubes des séries  $(2n+m)=Const$ , ayant des diamètres semblables mais des chiralités différentes. L'autre regroupe les familles du type  $(n-m)=Const$ . il ya également les regroupements  $mod [(2n+m),3]=0, 1, 2$ , ou  $mod 0$  correspond au NT métalliques et  $mod 1$  et  $2$  aux semi-conducteurs. les  $mod 1$  et  $2$  forment des sous-branches dans les branches de transition  $E_{ii}$ , une inférieure et une supérieure. ces deux dernières s'alternent d'une transition à l'autre, c'est-à-dire que si le  $mod 1$  est la sous-branche supérieure de la transition  $E_{ii}$ , elle sera la sous-branche inférieure de la transition  $E_{i+1, i+1}$  ( voir la figure I.35) [117].

Afin que la diagramme de Kataura serve d'outil utile pour comparer les mesures expérimentales à la théorie, il est souvent nécessaire de corriger les énergies de transition calculées. Cela se fait par l'intermédiaire du paramètre de recouvrement des orbitales. D'un point de vue expérimental, un léger changement des énergies des transitions est observé avec un changement de la constante du milieu environnant. L'intérêt majeur de ce diagramme de Kataura est qu'il permet de choisir les longueurs d'ondes ou encore les énergies d'excitation laser favorable aux transitions optiques.

### I.6.7 Propriétés d'émission de champ

Comme nous l'avons vu précédemment, les nanotubes de carbone présentent une longueur extrêmement grande devant leur diamètre. Soumis à un champ électrique, ils vont donc présenter un très fort effet de pointe. Ainsi, avec des tensions relativement faibles, on peut générer à leurs extrémités des champs électriques colossaux capables d'arracher des électrons de la matière et de les émettre vers l'extérieur. C'est l'émission de champ. Cette émission est extrêmement localisée (à l'extrémité du tube) et peut donc servir à envoyer des électrons sur un lieu bien précis, un petit élément de matériau phosphorescent qui constituera le pixel d'un écran plat, par exemple. Le matériau phosphorescent évacue alors l'énergie reçue sous forme de lumière [118].

### I .6 .8 Propriétés de capillarité

Le nanotube peut être considéré comme un « nanofil » creux qu'il est possible de combler par capillarité. On peut ainsi encapsuler à l'intérieur du nanotube des métaux [27], [119] (Figure I.36) ou bien des macromolécules comme des fullerènes [120] (Figure I.37 (a) et (b)). Ces structures à base de fullerène appelées « peapods » ont été observées la première fois par Smith et al. [37] . Pour réaliser des « peapods », la méthode de Sublimation est bien adaptée pour remplir des nanotubes avec des fullerènes (figure 2.3). Les nanotubes sont mélangés avec les fullerènes et l'échantillon est ensuite chauffé au-delà de la température de sublimation des fullerènes. Une grande variété de peapods a ainsi été synthétisée en remplissant des *SWCNTs* avec des  $C_{60}$  [37],  $C_{70}$  [121],  $C_{80}$ ,  $C_{84}$  [122],  $C_{78}$ ,  $C_{90}$  [123], ... . Cette méthode peut également s'appliquer au remplissage des *MWCNTs* [124]. Des fullerènes endohédriques, dont la cage est elle-même remplie par un ou plusieurs atomes étrangers ont également été insérés ou encapsulés dans des *SWCNTs*, comme  $La_2@C_{80}$  [125],  $Dy@C_{82}$  [123] ou encore  $Gd@C_{82}$  [126] (Figure I.37 (c) et (d)).

De nombreux métaux (le plus souvent des terres rares) peuvent être ainsi isolés à l'état atomique et arrangés sous la forme d'une chaîne [120]. Il s'agit là d'une des très rares structures où des atomes peuvent être observés et analysés de manière isolée. [127]. La grande affinité électronique des fullerènes avec les nanotubes conduit à l'adsorption des fullerènes en phase gazeuse à la surface des nanotubes. Les fullerènes peuvent diffuser en surface jusqu'à ce qu'ils rencontrent des ouvertures au niveau des défauts ou des extrémités des nanotubes. Ils peuvent alors rentrer à l'intérieur de la cavité interne, cette configuration étant plus stable énergétiquement. Les fullerènes forment alors de longues chaînes unidimensionnelles à l'intérieur des *SWCNTs*. Les taux d'encapsulation peuvent être très élevés et atteindre jusqu'à 100% de *SWCNTs* remplis avec des fullerènes.

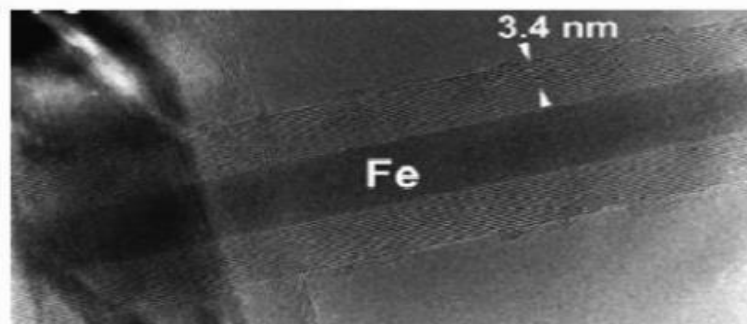
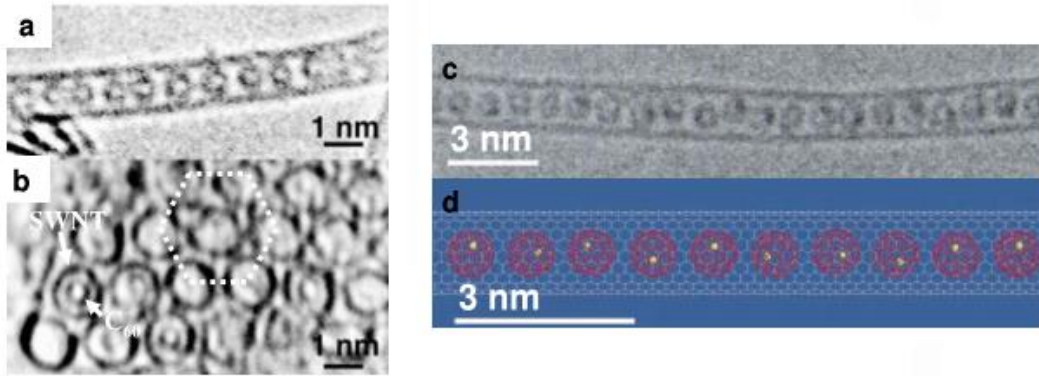


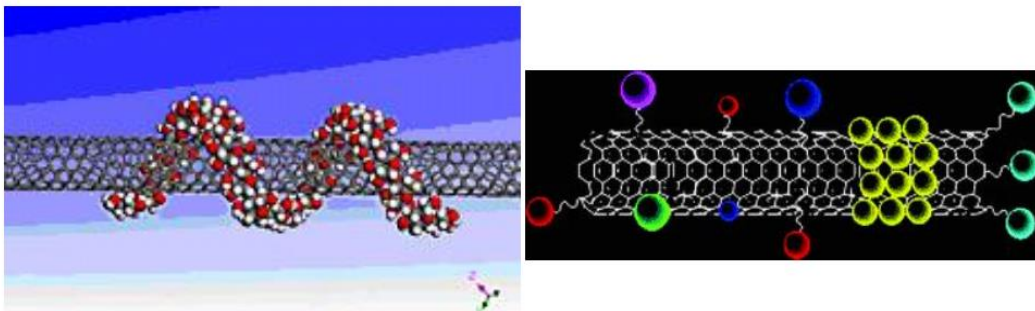
Figure I.36 ; Fe encapsulé dans un MWCNT [119]



**Figure I.37**– (a, b) Images TEM à haute résolution de SWCNTs remplis avec des  $C_{60}$  (a, b) [37]. Les  $C_{60}$  forment une chaîne unidimensionnelle continue à l'intérieur d'un SCWNT individuel (a). L'extrémité d'un fagot de SWCNTs partiellement rempli de  $C_{60}$  est représentée en (b). (c) Image TEM d'un SWCNT individuel rempli avec  $Gd@C_{82}$  [126] où chaque fullerène est lui-même rempli d'un atome de Gd. Les points plus foncés à l'intérieur des  $C_{82}$  en (c) et les points de couleur jaune sur le schéma (d) représentent les atomes de Gd.

### I.6.9 Propriétés chimiques et physico - chimiques

Les CNTs sont hydrophobes, ils ne se dispersent pas spontanément dans l'eau. On peut, cependant, les disperser à l'aide des molécules tensioactives. La partie hydrophobe de ces dernières est adsorbée sur le nanotube. Les têtes hydrophiles isolant les CNTs du solvant permettent leur dispersion. Si le solvant est autre que l'eau, le tensioactif utilisé doit être compatible avec la nature du solvant organique. D'autre part, de nombreux travaux se sont orientés vers la fonctionnalisation, covalente ou non, des nanotubes. Rakov [128] présente une revue détaillée des principales propriétés chimiques et physico-chimiques des CNTs et de différentes méthodes de fonctionnalisation des nanotubes. Une chimie de greffage de nanotubes s'est développée (adsorption de tensioactifs, enroulement de polymères, d'ADN, adsorption de pyrènes, etc.).



**Figure I.38**– Absorption de pyrènes et enroulement de polymères

### I.7 Fagots et défauts structuraux des nanotubes de carbone

Des interactions de type  $\pi$  peuvent également être présentes dans le cas des nanotubes de carbone mono-paroi, conduisant à des réseaux hexagonaux  $2D$  très structurés à l'échelle nanométrique [129]. Ces réseaux, appelés fagots, sont quasiment cristallins. Ils se forment lors de la synthèse des *SWCNT*, et les énergies mises en jeu par ces interactions de type empilement- $\pi$  sont très importantes, puisque les surfaces de contact sont considérables. Entre les fagots quasi-cristallins, des interactions existent aussi mais les énergies mises en jeu sont moindres, les surfaces de contact étant moindres elles aussi. Un échantillon réel de nanotube de carbone peuvent présenter des défauts structuraux qui peuvent avoir une influence notable sur les propriétés mécaniques. Ces défauts peuvent se présenter sous forme de vides atomiques qui sont des atomes manquants dans la structure du graphène ; ou bien de défauts de Stone Wales, quant au lieu de former des hexagones, les atomes de carbone se réarrangent en pentagones ou en heptagones [130]. La présence de tels cycles aura pour effet de modifier la structure en imposant localement une courbure différente au nanotube. Les pentagones introduisent une courbure positive à l'image de ce que l'on observe dans les fullerènes alors que les heptagones apportent une courbure négative. Cette modification induit un changement du diamètre des *CNTs* et par conséquent une modification de sa chiralité avec une variation de certaines propriétés. On retrouve également comme défauts, des groupements chimiques déjà présents sur la surface des *CNTs*.

Ce sont ces nombreux défauts présents aux extrémités des tubes et sur leurs parois qui permettent de facilement fonctionnaliser les nanotubes de carbone. Les propriétés électriques sont aussi affectées par ces défauts. En général, la zone présentant un défaut est moins bonne conductrice. Il en est de même pour les propriétés thermiques.

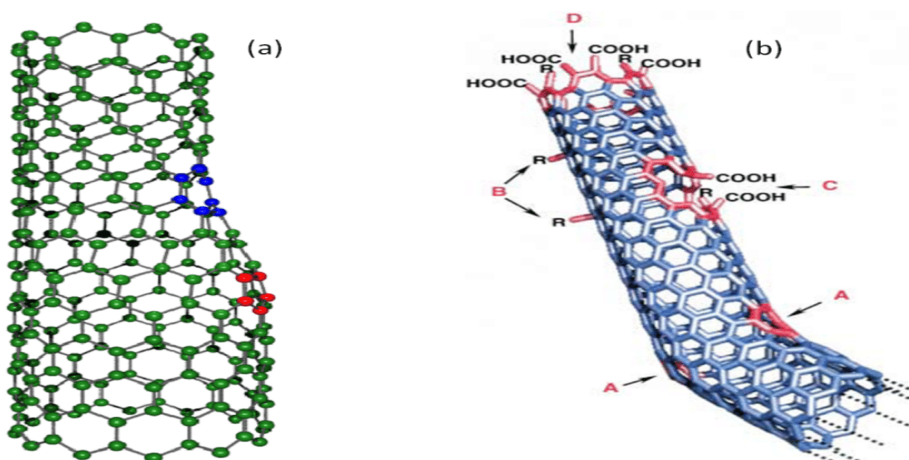


Figure I.39 : Défauts présents aux extrémités et à la paroi des *CNTs*. [130]

## I.8 Toxicité des nanotubes de carbone

Plusieurs études *in vitro* [131-132] ont montré que les nanotubes de carbone seraient capables de traverser la membrane cellulaire pour pénétrer dans la cellule, s'y accumuler et provoquer une cytotoxicité. Sur ce dernier point, Jia et coll. [132] ont cherché à comparer la toxicité de différentes nanostructures carbonées : fullerènes ( $C_{60}$ ), *SWCNTs* et *MWCNTs*. Ils constatent tout d'abord que les fullerènes n'entraînent aucune inflammation des cellules aux contraires des nanotubes de carbone, pour lesquels il semblerait qu'à concentration massique égale, les *SWCNTs* soient plus cytotoxiques. *In vivo* [133], on constate que des *SWCNTs* administrés à des souris par voie intra péritonéale se distribuent dans tout l'organisme, à l'exception du cerveau, et s'accumulent particulièrement dans les os. De plus, les auteurs ont noté qu'après 11 jours, 80% des nanotubes avaient été excrétés avec une distribution de 94% dans l'urine et 6% dans les fèces. Les études de toxicité *in vivo* chez l'animal sont faites généralement en fonction des trois voies d'exposition potentielles : l'inhalation, l'ingestion et le contact cutané. En ce qui concerne l'inhalation, toutes les études [134-135] montrent que les nanotubes ont une capacité à engendrer des inflammations pulmonaires ainsi qu'une fibrose pulmonaire. Les travaux de Lam [134] ont cependant montré que l'importance de cette toxicité pouvait dépendre des caractéristiques physico-chimiques des nanotubes. Ainsi, il a été montré que des nanotubes purifiés ne déclenchaient aucun signe clinique sur des souris en ayant inhalé contrairement à des matériaux bruts qui, eux, ont entraîné des signes de léthargie, d'hypothermie ou encore de perte de poids. Ceci montre l'importance de travailler avec des nanotubes les plus purs possibles, pour ne pas ajouter à leur toxicité éventuelle celle du catalyseur. Il n'existe pas de données relatives à ce jour sur la toxicité *in vivo* des nanotubes de carbone par ingestion. En ce qui concerne celle par contact cutané, une expérience [136] menée sur des volontaires présentant des irritations et une susceptibilité allergique a montré qu'aucune réaction n'a été constatée après 4 jours d'application d'un patch saturé en *SWCNTs*.

Très peu de connaissances sont actuellement disponibles sur la toxicité pour l'homme des nanotubes de carbone. La plupart des données toxicologiques proviennent d'études réalisées *in vitro* ou *in vivo* chez l'animal. Ces travaux sont de surcroît de portée limitée (exposition unique de courte durée pour la détection rapide d'effets éventuels) et les caractéristiques physiques et chimiques des nanotubes utilisés y sont rarement précisées (types, granulométrie, présence de métaux, etc.). Or les propriétés

toxicologiques des nanotubes de carbone sont directement corrélées à leurs caractéristiques physico-chimiques [137]. L'extrapolation des résultats de ces études, souvent contradictoires, à l'homme doit donc être faite avec précaution en tenant par ailleurs compte des multiples différences anatomiques, biologiques et physiologiques entre l'homme et l'animal de laboratoire. Ainsi, en l'absence de résultats définitifs, seul le principe de précaution fait loi à l'heure actuelle.

## **I.9 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons présenté des généralités sur les nanotubes de carbone. On s'est intéressé à la découverte par sumio lijima et caractéristiques géométriques de ces structures particulièrement prometteuses. Cette présentation montre que le nanotube est une structure cristalline particulière, de forme tubulaire. En plus, la structure s'obtient en enroulant du feuillet de graphène, les nanotubes de carbone peuvent être mono parois (*SWCNT*) ou multi parois (*MWCNT*) et suivant l'orientation du feuillet de graphène par rapport à l'axe du nanotube on aura trois catégories des nanotubes (chaise (armchair), zigzag et chirale). Puis nous avons vu les différentes propriétés d'un nanotube de carbone. Enfin, comme dans de nombreux matériaux, nous avons présenté l'existence de défauts affecte ses propriétés. La toxicité, un inconvénient majeur des *CNTs*, est directement liée à leur taille nanométrique et surtout à leur grand facteur de forme. Après que nous avons parlé des généralités et essayé de donner un aperçu sur les nanotubes de différents types, leurs structures et leurs différentes propriétés, nous allons essayer de parler, dans le chapitre. II des méthodes de synthèses des *CNTs* qui sont les méthodes de fabrication à haute température et les méthodes de fabrication à basse température. Enfin, nous avons parlé des méthodes de caractérisation des *CNTs* par les microscopies et les spectroscopies et leurs applications dans quelques domaines.



## Références

- [1] L.-C. Cheng, X. Jiang, J. Wang, C. Chen, et R.-S. Liu, Nano–bio effects, interaction of nanomaterials with cells , *Nanoscale*, 5(2013) 3547.
- [2] Meryem Gomri, Nanocomposites à base de polymères chargés par des nanocarbone : Etudes physico-chimiques et application aux dispositifs électroniques, thèse de Doctorat , Université Sidi Mohamed Ben Abdellah (2007).
- [3] H.J. McSkimin et W. L. Bond, Elastic moduli of diamond, *Phys. Rev.*, 105 (1957) 116.
- [4] C. Kittel et J. F. Masi, « Introduction to Solid State Physics », *Phys. Today* , 7 (1954) , p. 18-19.
- [5] X. Jia , J. Campos-Delgado, M. Terrones, V. Meunier, et M. S. Dresselhaus, Graphene edges a review of their fabrication and characterization, *Nanoscale*, 3(2011) 86.
- [6] Pierre Delhaes, Graphite and prec ursors, CRC Press., 1(2000).
- [7] F. Xia, T. Mueller, Y. Lin, A. Valdes-Garcia, P. Avouris, Ultrafast grapheme photodetect- or, *Nat. Nanotechnol.*, 4(2009) 839.
- [8] H.W. Kroto, H.W. Heath, J.R. O'Brien, S.C. Curl, R.F. Smalley, R.E. Nature, 318(1992) 162.
- [9] H.W. Kroto, A.W. Allaf, S.P. Balm, *C<sub>60</sub>: Buckminsterfullerene*, *Chem. Rev.*, 91(1991) 1213.
- [10] Mahroug Rabiaa, Modélisation et simulation des propriétés physique et électronique des nanotubes de carbne : application ou CNTFET, Mémoire de Magister en électronique, Université Hassiba Benbouali , Chlef (2008-2009).
- [11] Y. Chen, J. Wang, H. Liu, M. N. Banis, R. Li, X. Sun, T.-K. Sham, S. Ye and S. Knights, the *Journal of Physical Chemistry C*, 115(2011) 3769.
- [12] A. Benyounes, M. Kacimi, M. Ziyad and P. Serp, *Chinese Journal of Catalysis.*, 35(2014) 970.
- [13] P. Zhang, Y. Gong, H. Li, Z. Chen and Y. Wang, *Nat Commun*, 4(2013), 1593.
- [14] Y. Cao, H. Yu, F. Peng and H. Wang, *ACS Catalysis.*, 4(2014) 1617.
- [15] W. J. Lee, U. N. Maiti, J. M. Lee, J. Lim, T. H. Han and S. O. Kim, *Chemical Communications*, 50(2014) 6818.
- [16] Elsa Garrido, Fonctionnalisation de nanotubes de carbone pour leur incorporation dans des matrices métalliques, thèse de doctorat, Université de Bordeaux (2010).
- [17] H. Kroto, A Post-Buckminsterfullerene View of carbon chemistry, School of Chemistry and Molecular Sciences, University of Sussex, Brighton, UK, 318(1985) 162.

[18] A.Dworkin, H.Szwarc, Prix Nobel de chimie 1996 : une récompense attendue, L'Act.Chim (R)6 (1996)5.

<https://www.lactualitechimique.org/Prix-Nobel-de-chimie-1996-une-recompense-attendue>

[19] E.A.Rohlfing, D.M. Cox, A. Kaldor, production and characterization of supersonic carbon cluster beams, J. Phys. Chem. 81(1984)3322.

[20] A. D. J. Haymet, Footballene: a theoretical prediction for the stable, truncated icosahedral molecule  $C_{60}$ , J. Am. Chem. Soc. 108(1986) 319.

[21] J. R. Heath, S. C. O'Brien, Q. Zhang, Y. Liu, R. F. Curl, H. W. Kroto, F. K. Tittel, R. E. Smalley, J. Am. Lanthanum complexes of spheroidal carbon shells. Chem. Soc. 107(1985)7780.

[22] W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, D. R. HuffmanSolid  $C_{60}$ : a new form of carbon . Nature, 347(1990) 354.

[23] A. F. Hebard, M. J. Rosseinsky, R. C. Haddon, D. W. Murphy, S. H. Glarum, T. T. M. Palstra, A. P. Ramirez, A. R. Kortan, Superconductivity at 18 K in potassium-doped  $C_{60}$ , Nature, 350(1992) 600.

[24] M. N. Regueiro, P. Monceau, J.-L. Hodeau, Crushing  $C_{60}$  to diamond at room temperature. Nature, 355(1992)237.

[25] S. Iijima, Helical microtubules graphitic carbon. Nature, 354(1991) 56.

[26] T. W. Ebbesen, P. M. Ajayan. Large-scale synthesis of carbon nanotubes. Nature, 358(1992).220.

[27] P. M. Ajayan, S. Iijima., Capillarity-induced filling of carbon nanotubes, Nature 361 (1993) 333.

[28] S. Iijima, T. Ichihashi. Single-shell carbon nanotubes of 1 nm diameter, Nature, 363(1993) 603.

[29] D. S. Bethune, C. H. Kiang, M. S. de Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez, R. Beyers. Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer wall. Nature, 363(1993) 605.

[30] S. Iijima, Direct observation of the tetrahedral bonding in graphitized carbon black by high resolution electron microscopy. J. Cryst, Growth, 5(1980) 675.

[31] H. W. Kroto. Carbon onions introduce new flavour to fullerene studies. Nature, 363(1992) 603.

[32] D. Ugarte, Curling and closure of graphitic networks under electron beams. Nature, 359 (1992) 707.



- [33] A.G. Rinzler, J.H. Hafner, P. Nikolaev, L. Lou, S.G. Kim, D. Tománek, P. Nordlander, D.T. Colbert, R.E. Smalley, Unraveling Nanotubes: Field Emission from an Atomic Wire, *Science*, 269(1995) 1550 .
- [34] A. Thess, R. Lee, P. Nikolaev, H. Dai, P. Petit, J. Robert, C. Xu, Y. Hee Lee, S. Gon Kim, A. G. Rinzler, D. T. Colbert, G. E. Scuseria, D. Tománek, J. E. Fischer, R. E. Smalley, Crystalline ropes of metallic carbon nanotubes, *Science*, 273(1996) 483.
- [35] S.J.Tans, M.H.Devoret H.Dai A.Thess R.E.Smalley L.J.Geerligs C.Dekker Individual Single- wall carbon nanotubes as quantum wires, *Nature*, 386(1997) 474.
- [36] Z. F. Ren, Z. P. Huang, J. W. Xu, J. H. Wang, P. Bush, M. P. Siegal, P. N. Provencio, Synthesis of large arrays of well-aligned carbon nanotubes on glass, *Science*, 282(1998) 1105.
- [37] B.W. Smith, M. Monthieux, D.E. Luzzi, *Nature*, 396(1998) 323.
- [38] J. Liu, A. G. Rinzler, H. Dai, J. H. Hafner, R. Kelley Bradley, P. J. Boul, A. Lu, T. Iverson, K. Shelimov, C. B. Huffman, F. Rodriguez-Macias, Y.-S. Shon, T. Randall Lee, D. T. Colbert, R. E. Smalley, Fullerene pipes, *Science*, 280(1998) 1253.
- [39] C. Liu, Y. Y. Fan, M. Liu, H. M. Cheng, M. S. Dresselhaus, Hydrogen storage in single-walled carbon nanotubes at room temperature, *Science*, 286(1999) 1127.
- [40] S. Berber, Y.-K. Kwon, D. Tománek, Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes, *Phys. Rev. Lett.*, 84(2000) 4613.
- [41] B. Vigolo, A. Pénicaud, C. Coulon, C. Sauder, R. Pailler, C. Journet, P. Bernier, P. Poulin, Macroscopic fibers and ribbons of oriented carbon nanotubes, *Science*, 290(2000) 1331.
- [42] P. C. Collins, M. S. Arnold, P. Avouris, Engineering Carbon Nanotubes and Nanotube Circuits Using Electrical Breakdown, *Science*, 292(2001) 706
- [43] M. Kociak, A. Y. Kasumov, S. Guéron, B. Reulet, I. I. Khodos, Y. B. Gorbatov, V. T. Volkov, L. Vaccarini, H. Bouchiat, *Phys. Rev. Lett.*, 86(2001) 2416.
- [44] S. Rols, J. Cambedouzou, M. Chorro, H. Schober, V. Agafonov, P. Launois, V. Davydov, A.V. Rakhmanina, H. Kataura, J.L. Sauvajol, *Phys. Rev. Lett.* 101(2008) 065507 .
- [45] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. Adda Bedia, Sound wave propagation in single-walled carbon nanotubes using nonlocal elasticity, *Physica E* 40 (2008) 2791.

- [46] A. Benzair, A. Tounsi, A. Besseghier, H. Heireche, N. Moulay, L. Boumia, The thermal effect on vibration of single-walled carbon nanotubes using nonlocal Timoshenko beam theory, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 41 (2008) 225404
- [47] K.Amara,A,Tounsi,I.Mechab.E.A Adda Bedia,Nonlocal elasticity effect on column buckling of multiwalled carbon nanotubes under temperature field, *Applied Mathemaique Modelling*, 34(2010)3933.
- [48] A. G. Arani, M. Mohammadimehr, A. R. Saidi, S. Shogaei and A. Arefmanesh, Thermal buckling analysis of double-walled carbon nanotubes considering the small-scale length effect, *Mechanical Engineering Science* 225(2011) 248.
- [49] M. Maachou, M. Zidour, H. Baghdadi, N. Ziane, A. Tounsi A nonlocal Levinson beam model for free vibration analysis of zigzag single-walled carbon nanotubes including thermal effects, *Solid State Communications*, 151 (2011) 1467.
- [50] M. Zidour, K. Benrahou, A. Semmah, M. Naceri, H. Belhadj, K. Bakhti, A. Tounsi, The thermal effect on vibration of zigzag single walled carbon nanotubes using nonlocal Timoshenko beam theory, *Computational Materials Science* 51 (2012) 252.
- [51] M.Naceri, M. Zidour, A. Semmah, M. Houari, A. Benzair, A. Tounsi, Sound wave propagation in armchair single walled carbon nanotubes under thermal environment, *Journal of Applied Physics* 110(2011) 124322 .
- [52] Habib Baghdadi , Abdelouahed Tounsi , Mohamed Zidour & Abdelnour Benzair ,Thermal Effect on Vibration Characteristics of Armchair and Zigzag Single-Walled Carbon Nanotubes Using Nonlocal Parabolic Beam Theory, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures* 23(2014) 266.
- [53] Lakhdar Boumia , Mohamed Zidour , Abdelnour Benzair , Abdelouahed Tounsi, A Timoshenko beam model for vibration analysis of chiral single-walled carbon nanotubes, *Physica E* 59 (2014) 186.
- [54] H. Askari, D. Younesian , E. Esmailzadeh and L. Cveticanin, Nonlocal effect in carbon resonators: A comprehensive review , *Advances in Mechanical Engineering* 9(2) (2017) 1.
- [55] Wu. Jian, X. Yao, Y. Sun, Z. Xie, Size-dependent vibration analysis of carbon nanotubes, *Journal of Materials Research*, 34(2019)2148.
- [56] D. S. Bethune, C. H. Kiang, M. S. de Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez, R. Beyers, Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer wall, *Nature*, 363(1993) 605.

- [57] J. W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, C. Dekker, *Nature* 391(1998) 59 .
- [58] J.M. Bonard, T. Stora, J.P. Salvetat, C. Maier, T. Stöckli, C. Duschl, L. Corro, W.A. Heer, Châtelain, *Advanced Materials*, 9 (1997) 827 .
- [59] C. Journet, W. K. Maser, P. Bernier, A. Loiseau, M. Lamy de la Chapelle, S. Lefrant, P. Deniard, R. Lee, J. E. Fischer, Large-scale production of single-walled carbon nanotubes by the electric-arc technique, *Nature*, 388 (1997) 756.
- [60] A. J. Stones, D. J. Wales, *Chem. Phys. Lett.*, 128 (1986) 501.
- [61] P. Marcoux, Réactivité et manipulation de nanotubes de carbone monocouches : fonctionnalisation de surface par greffage covalent et mise en oeuvre comme agent structurant, thèse de doctorat, Université d'Angers, (2002).
- [62] N. Izard, nanotubes de carbone : Systèmes pour la limitation optique, thèse de doctorat, l'Université Montpellier II, (2004).
- [63] Zhi Chen, Nanotubes for nanoelectronics , *Encyclopedia of nanoscience and nanotechnology*, Edited by H.S.Nalwa, 7 (2004) 919
- [64] Julien Beausoleil, Synthèse de nanotubes de carbone multi-parois sur supports pulvérulents et étude des mécanismes de croissance catalytique, thèse doctorat. Université De Toulouse. (2010).
- [65] Jean.Malo Chehab and G Uilaume, les nanotubes de carbone dans le domaine medical, 1<sup>ère</sup> S , Lycée d'Hulst, Paris 2007-2008.
- [66] Mahroug rabiaa, Modélisation et simulation des propriétés physique et électronique des nanotubes de carbone :Application au CNTFET, Mémoire de magister en électronique,Université Hassiba Benbouali,Chlef (2008-2009).
- [67] Sébastien Pacchini, Etude des potentialités des nanotubes de carbone dans le domaine hyperfréquence : Application à l'élaboration de matériaux nanocomposites et contribution à la miniaturisation de composants électromécaniques(NEMS), thèse de doctorat , Université Toulouse III – Paul Sabatier (2008).
- [68] Charlotte Bernard, Propriétés mécaniques des nanotubes de carbone en tant que nanosondes et leur fonctionnalisation par bio-nanoparticules, thèse de doctorat, Université Bordeaux1 (2007).
- [69] Ali Jawad Mansour, Caractérisation expérimentale d'un plasma d'arc électrique en vue du contrôle de la synthèse des nanotubes de carbone monoparois, thèse de doctorat ,Université Toulouse III- Paul Sabatier(2007).
- [70] N. Hamada, S. I. Sawada, A. Oshiyama, *Phys. Rev. Lett.*, 68 (1992) 1579.

- [71] B. I. Dunlap, Phys. Rev., 46 (1992) 3.
- [72] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito, Carbon, 33 (1995) 883.
- [73] J. Wildoer, L. Venema, A. Rinzler, R. Smalley, C. Dekker, Nature 391 (1998) 59
- [74] Hashimoto A., Suenaga K., Gloter A., Urita K. et Iijima S., Direct evidence for atomic defects in graphene layers , Nature 430 (2004) 870873
- [75] Mouatsi abdelmalek, Composants a hétérostructure : Application en nano-électronique et nanophotonique, thèse de doctorat en electronique, Université de constantine 1 (2013).
- [76] O.L. Blakslee, D.G. Proctor, E.J. Seldin, G.B. Spence et T. Weng , Elastic constants of compression-annealed pyrolytic graphite. Journal of Applied Physics, 41(1970) 3373.
- [77] J.P. Lu, Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes., Physical Review Letters, 79(1997)1297.
- [78] A. Sears et R.C. Batra, Macroscopic properties of carbon nanotubes from molecular mechanics simulations, Physical Review B, 69(2004)235406.
- [79] M.M.J. Treacy, T.W. Ebbesen et J.M. Gibson, Exceptionally high young's modulus observed for individual carbon nanotubes, Nature, 381(1996)678.
- [80] A. Krishnan, E. Dujardin, T.W. Ebbesen, P.N. Yianilos et M.M.J. Treacy, Young's modulus of single-walled nanotubes, Physical Review B, 58(1998)14013.
- [81] J-P. Salvetat, G.A.D. Briggs, J-M. Bonard, R.R. Bacsá, A.J. Kulik, T. Stöckli, N.A. Burnham et L. Forró , Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes, Physical Review Letters, 82(1999)944
- [82] J-P. Salvetat, A.J. Kulik, J-M. Bonard, G.A.D. Briggs, T. Stöckli, K. Méténier, S. Bonnamy, F. Béguin, N.A. Burnham et L. Forró, Elastic modulus of ordered and disordered multiwalled carbon nanotubes, Advanced Materials, 11(1999)161.
- [83] B. Lukić, J.W. Seo, R.R. Bacsá, S. Delpeux, F. Béguin, G. Bister, A. Fonseca, J.B. Nagy, A. Kis, S. Jeney, A.J. Kulik et L. Forró, Catalytically grown carbon nanotubes of small diameter have a high young's modulus, Nano Letters, 5(2005) 2074.
- [84]
- [85] Fabien Macq, Elaboration, caractérisation et vieillissement d'adhésifs conducteurs hybrides epoxy/microparticules d'argent/nanotubes de carbone, these de doctorat, Université de Toulouse III-paul Sabatier (2012).
- [86] Sumio Iijima, Charles Brabec, Amitesh Maiti, and Jerzy Bernholc, flexibility of carbon nanotubes, the Journal of chemical physics, 104(5) (1996)2089.

- [87] M.R. Falvo, G.J. Clary, R.M. Taylor, V. Chi, F.P. Brooks, S. Washburn, R. Superfine, *Nature*, 389(1997) 582.
- [88] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus et R. Saito, *Physics of carbon nanotubes*. Carbon, 33(1995)883.
- [89] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus et P. Avouris : *Carbon Nanotubes : Synthesis, Structure, Properties and Applications*, 80 Topics in Applied physics, book springer 2001.
- [90] B.V. Derjaguin, V.M. Muller, Y.P. Toporov, *J. Colloid Interface*, 53(1975) 314.
- [91] L.D. Landau, E.M. Lifchitz, *Theory of Elasticity*. Ouvrage, Editions MIR, Moscou, Vol.7, (1967).
- [92] Z. Yao, H. W. C. Postma, L. Balents, C. Dekker, *Carbon nanotube intramolecular junctions*, *Nature* 402(1999)273.
- [93] C.T. White et T.N. Todorov, *Carbon nanotubes as long ballistic conductors*. *Nature*, 393(1998)240.
- [94] C. Dekker, *Carbon nanotubes as molecular quantum wires*. *Physics Today*, 52(1999)22.
- [95] J-C. Charlier, X. Blase et S. Roche, *Electronic and transport properties of nanotubes*. *Reviews of Modern Physics*, 79(2007)677.
- [96] J. Kong, E. Yenilmez, T. W. Tomblor, W. Kim, H. Dai, R.B. Laughlin, L. Liu, C. S. Jayanthi et S. Y. Wu, *Quantum interference and ballistic transmission in nanotube electron waveguides*. *Physical Review Letters*, 87(2001)106801.
- [97] P. Poncharal, S. Frank, Z.L. Wang et W.A. De Heer, *Conductance quantization in multiwalled carbon nanotubes*. *European Physical Journal D*, 9(1999)77.
- [98] Z. Yao, C.L. Kane et C. Dekker, *High-field electrical transport in single-wall carbon nanotubes*. *Physical Review Letters*, 84(2000)2941.
- [99] E. Pop, D. Mann, J. Cao, Q. Wang, K. Goodson et H. Dai, *Negative differential conductance and hot phonons in suspended nanotube molecular wires*, *Physical Review Letters*, 95(2005)155505.
- [100] W. Steinhogel, G. Schindler, G. Steinlesberger, M. Traving, M. Engelhardt, *J. Appl. Phys.*, 97 (2005) 023706
- [101] A. Naemi, G. Huang, J.D. Meindl, *Performance Modeling for Carbon Nanotube Interconnects in On-Chip Power Distribution*, 2007 performance 57<sup>th</sup> Electronic Components and Technology Conference. IEEEXplore, (2007) 420-428.

- [102] Dai HJ, Wong EW, Lieber CM. *Science*, 272 (1996)523.
- [103] T.W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. Hiura, J.W.Bennett, H.F.Ghaemi, T.Thio, *Nature*, 382(1996) 54 .
- [104]Y. Sun,L. Zhu,H Jiang,J. Lu,W. Wang,C.P. Wong, *journal of Electronic Materials* 37 (2008) 1691.
- [105] D.R.Lide, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 85th edition (2004-2005).
- [106] M.A. Osman et D. Srivastava, Temperature dependence of the thermal conductivity of single-wall carbon nanotubes, *Nanotechnology*, 12(2001)21.
- [107] J. Che, T. Çağın et W.A. Goddard III, Thermal conductivity of carbon nanotubes. *Nanotechnology*, 11 (2000) 65.
- [108] P. Kim, L. Shi, A. Majumdar et P.L. McEuen , Thermal transport measurements of individual multiwalled nanotubes, *Physical Review Letters*, 87(2001)215502.
- [109] M. Fujii, X. Zhang, H. Xie, H. Ago, K. Takahashi, T. Ikuta, H. Abe et T. Shimizu Measuring the thermal conductivity of a single carbon nanotube, *Physical Review Letters*, 95(2005)065502.
- [110] J. Hone, M.C. Llaguno, N.M. Nemes, A.T. Johnson, J.E. Fischer, D.A. Walters, M.J. Casavant, J. Schmidt et R.E. Smalley , Electrical and thermal transport properties of magnetically aligned single wall carbon nanotube films, *Applied Physics Letters*, 77(2000)666.
- [111] W. Yi, L. Lu, Z. Dian-lin, Z.W. Pan et S.S. Xi, Linear specific heat of carbon nanotubes, *Phys. Rev.B*, 59(1999) R9015.
- [112] D.J. Yang, Q. Zhang, G. Chen, S.F. Yoon, J. Ahn, S.G. Wang, Q. Zhou, Q. Wang et J.Q. Li, Thermal conductivity of multiwalled carbon nanotubes, *Phys.Rev.B* 66(2002)165440.
- [113] J. Hone, M. Whitney, C. Piskoti et A. Zettl, Thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes, *Phys. Rev.B* 59(1999) R2514.
- [114] H. Zhong et J.R. Lukes, Interfacial thermal resistance between carbon nanotubes ,Molecular dynamics simulations and analytical thermal modeling, *Phys.Rev.B* 74(2006)125403.
- [115] M. Endo, Sumio Ijima, M.S. Dresselhaus. *Carbon nanotubes*, Carbon, 1996.
- [116] A. Jorio, C. Fantini, M. A. Pimenta, R. B. Capaz, Ge. G. Samsonidze, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, J. Jiang, N. Kobayashi, A. Grüneis, and R. Saito, Resonance Raman spectroscopy (n, m) dependent effects in small-diameter single-wall carbon nanotubes, *Phys. Rev. B* 71(2005) 075401.

[117] D.C.Maxime, Identification des parois des nanotubes de carbone a double-parois par spectroscopie Raman, Mémoire des Maitrisées sciences appliquées, Université Montréal (2011).

[118] Mathieu Chorro, Système unidimensionnel de fullerène  $C_{60}$  connés dans les nanotubes de carbone. Thèse de doctoaat, Université de Paris 6, Orsay, (2008).

[119] N. Grobert, W.K. Hsu, Y.Q. Zhu, J.P. Hare, H.W. Kroto, D.R.M. Walton, M. Terrones, H. Terrones, Ph. Redlich, M. Rühle, R. Escudero, F. Morales, Enhanced magnetic coercivities in Fe nanowires, Applied Physics Letters,75 (1999) 3363.

[120] K. Suenaga<sup>1</sup>, M. Tencé, C. Mory, C. Colliex, H. Kato, T. Okazaki, H. Shinohara, K.Hirahara, S. Bandow, S. Iijima, Element-Selective Single Atom Imaging, Science, 290 (2000) 2280.

[121] H.Kataura, Y.Maniwa, T.Kodama, K.Kikuchi, H.Hirahara, K.Suenaga, S.Iijima, S.Suzuki, Y.Achiba and W.Kraetschmer., Synth. Met, 121(2001) 1195.

[122] K. Hirahara, S. Bandow, K. Suenaga, H. Kato, T. Okazaki, H. Shinohara, and S. Iijima., Phys. Rev.B 64(2001) 115420 .

[123] Shimada T, Ohno Y, Okazaki T, Sugai T, Suenaga K, Kishimoto S, Mizutani T, Inoue T, Taniguchi R, Fukui N, Okubo H and Shinohara H, Physica E 21(2004) 1089 .

[124] Fröhlich.T, Scharff. P, Schlieffe.W, Romanus.H, Gupta.V, Siegmund.C, Ambacher. O. and Spiess. L, Carbon, 42(2004) 2759.

[125] B. W. Smith, D. E. Luzzi, Y. Achiba, Chem. Phys. Lett, 331(2000) 137.

[126] K. Suenaga,M. Tencé,C. Mory, C. Colliex, H. Kato, T. Okazaki, H. Shinohara, K. Hirahara, S. Bandow and S. Iijima, Science, 290(2000) 2280.

[127] A. Gohier, Cinétique de Croissance de Nanotube de Carbone MonoParois et MultiParois Orientes par Procède Plasma, thèse de Doctorat, l'Université de Nantes (Sciences des Matériaux), (2007).

[128] E.G. Rakov, Russ.Chem.Rev.70 (2001) 827.

[129] Matthieu Chorro, Systèmes unidimensionnels de fullerènes  $C_{60}$  et  $C_{70}$  confinés dans les nanotubes de carbone : transformations structurales et dynamique. thèse de doctorat, Université Paris XI,(2008).

[130] Radhoua Haddad, Fonctionnalisation de nanotubes de carbone pour le développement de bio-architectures affines: Application aux biocapteurs, thèse doctorat Université de Monastir, Université de Grenoble,(2010).

[131] N. A. Monteiro-Rivière, R. J. Nemanich, A. O. Inman, Y. Y. Wang, J. E. Rivière, Toxicol. Lett.,155(2005)377.



- [132] G. Jia, H. Wang, L. Yan, X. Wang, R. Pei, T. Yan, Y. Zhao, X. Guo, *Environ. Sci. Technol.*, 39 (2005)1378.
- [133] H. Wang, J. Wang, X. Deng, H. Sun, Z. Shi, Z. Gu, Y. Liu, Y. Zhaoc, *J. Nanosci. Nanotech.*, 4 (2004)1019.
- [134] C. W. Lam, J. T. James, R. McCluskey, R. L. Hunter, *Toxicol. Sci.*, 77(2004) 126.
- [135] J.Müller, F.Huaux, N.Moreau, P.Misson, J. F.Heillier, M.Delos, M.Arras, A. Fonseca, J. B.Nagy, D.Lison, *Toxicol. Appl. Pharmacol.*, 207(2005) 221.
- [136] A. Huczko, H. Lange, *Full. Sci. Technol.*, 9(2001) 247.
- [137] K.Donaldson, R.Aitken, L.Tran, V.Stone, R.Duffin, G.Forrest, A.Alexander, *Toxicol. Sci.*, 92(2006) 5.

# Chapitre II

## *Les méthodes de synthèse et de caractérisation des CNTs et applications*

## II.1 Méthodes de synthèse des nanotubes de carbone

### II.1.1 Introduction

Pour entamer ce chapitre, nous allons parler des méthodes de production des nanotubes de carbone, On distingue dans la synthèse de *CNTs* quatre grands défis à relever :

1. Le contrôle du nombre de parois des *CNTs* synthétisés
2. Le contrôle de la chiralité (et donc du diamètre dans le cas de *SWCNT*)
3. La baisse de la température de synthèse
4. La compréhension des mécanismes de croissance.

Globalement, les méthodes de synthèse des nanotubes ont été classées en deux catégories :

- La première catégorie dite les techniques à hautes températures dont le principe consiste à sublimer une cible de graphite placée sous atmosphère inerte. Le graphite sublimé peut mener à la formation de nanotubes, dans certaines conditions. Parmi ces méthodes, on peut citer l'arc électrique [1], l'ablation laser [2], le four solaire [3]. Les méthodes à hautes températures permettent généralement de produire des nanotubes de structure assez parfaite mais leur mise en œuvre à grande échelle demeure difficile.

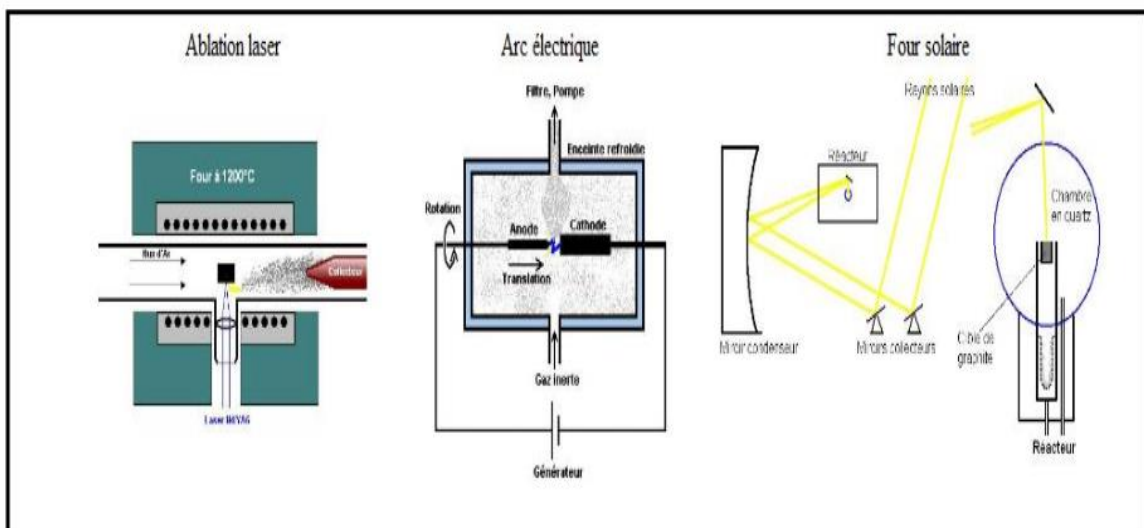


Figure.II.1: Différentes techniques de synthèse à hautes températures.

- La deuxième catégorie dite les techniques à basses températures qui consistent généralement à décomposer un hydrocarbure sur un catalyseur afin de reformer des liaisons carbone-carbone conduisant à la formation de nanotubes. Parmi ces

méthodes, nous pouvons citer la décomposition catalytique d'hydrocarbure en phase vapeur (CVD) soit : sur lit fixe [4], sur lit fluidisé [5], ou par un catalyseur spécifique pour augmenter ce rendement [6]. Les méthodes à basses températures permettent généralement d'obtenir des nanotubes de structure comportant des défauts, mais la mise en œuvre à grande échelle est envisageable.

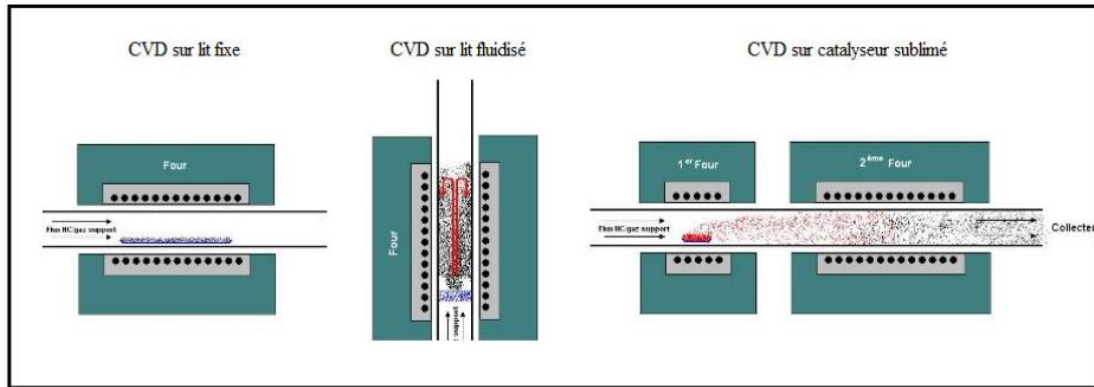


Figure.II.2: Différentes méthodes de synthèse à basses températures.

## II.1.2 Procédés de synthèse à haute température

### II.1.2.a) Méthode de l'arc électrique

Cette méthode a été initialement développée par Kraschmer et al. [7] pour la synthèse en grande quantité de fullerènes  $C_{60}$ . En 1991, Iijima a rapporté la préparation d'un nouveau type de structures de carbone fini [8] se composant de tubes aciculaire [9]. Les tubes ont été produits suivant une méthode d'évaporation à l'arc électrique semblable à celle utilisée pour la synthèse de fullerène. Les premières expériences sur la synthèse des nanotubes de carbone par cette technique en utilisant des électrodes de graphite pur permettaient d'avoir essentiellement des *MWCNT* en très faible quantité. Les aiguilles de carbone, s'étendant de 4 à 30 nm de diamètre et jusqu'à 1 mm de longueur, ont été développées sur l'extrémité négative de l'électrode de carbone en utilisant un courant continu pour évaporer du carbone dans un bac rempli d'argon (100 torr) (fig. 16). En 1992, Ebbesen et Ajayan du même laboratoire que Iijima, ont optimisé cette technique pour une production à grande échelle de *MWCNT* en mettant en avant le rôle de certains paramètres comme la pression du gaz inerte et de l'intensité du courant électrique dans l'amélioration du rendement [10]. Cette technique consiste à faire passer un fort courant électrique (80-100A) à travers deux électrodes de graphite

espacées de quelques millimètres plongées dans une atmosphère inerte (*He*, *Ar*). Durant le passage du courant, un arc électrique s'établit entre l'anode et la cathode permettant aux particules de carbone évaporées de l'anode de se condenser au niveau de la cathode. La suie ainsi obtenue est formée de fines particules métalliques, du carbone amorphe et des nanotubes de carbone sous forme d'amas (voir Figure.II.3). Lijima a employé une chambre d'arc décharge remplie de mélange de gaz de 10 torr de méthane et de 40 torr d'argon. Deux électrodes minces verticales ont été installées au centre de la chambre. L'électrode inférieure, la cathode, a eu une immersion peu profonde pour tenir un petit morceau de fer pendant l'évaporation. Une décharge électrique d'une intensité de 200 A à 20 V entre les électrodes a été nécessaire. L'utilisation des trois composants-argon, fer et méthane, était critique pour la synthèse de SWCNT. Les nanotubes ont eu des diamètres de 1 nanomètre avec un large diamètre distribution entre 0.7 et 1.65 nanomètre. En 1993, Bethune et al. [11] du laboratoire américain IBM travaillant sur l'encapsulation des nanoparticules ferromagnétiques par des fullerènes, pour des applications dans la mémorisation des données, ont observé que l'utilisation des électrodes de graphite imprégnées par des métaux de transitions en poudre purs (*Fe*, *Ni* ou *Co*) permettent d'obtenir un nouveau type de nanotube de carbone avec un seul feuillet SWCNT. Les électrodes ont été vaporisées avec un courant de 95-105A sous 100-500 torrs *He* (d'hélium). De grandes quantités de SWCNT étaient produites par cette technique, En 1997, C. Journet et al [12] ont amélioré cette technique par en employant un mélange de catalyseur a permis d'obtenir des rendements de synthèse élevés, ce qui a ouvert la voie à la production de masse des nanotubes monofeuillets. [13]

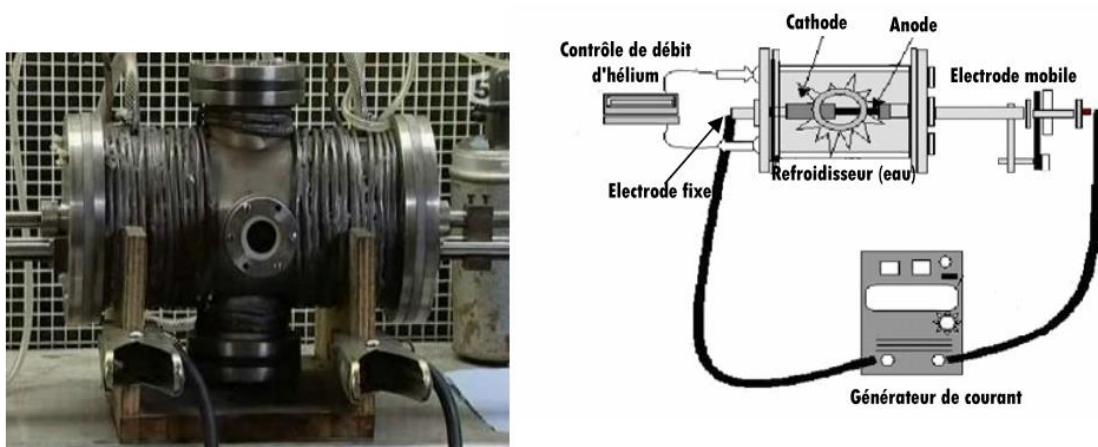


Figure.II.3.: Schéma d'un réacteur de synthèse de nanotubes de carbone par la méthode de l'arc électrique [14].

L'arc électrique reste la technique la plus adaptée pour la synthèse des NTC de haute qualité structurale à cause de la température mise en jeu ( $> 3000\text{ }^{\circ}\text{C}$  température de fusion du graphite). En revanche elle a plusieurs inconvénients, un faible rendement car une partie du carbone évaporé de l'anode se trouve aussi condensé sur les parois de l'appareil ajoutant à cela la discontinuité de la production et la nécessité d'une grande maîtrise des conditions expérimentales de synthèse.

En 1992, Ebbesen et Ajayan réalisent la production et la purification d'environ 1 gramme de MWCNT [10]. Depuis la technique a été améliorée et permet maintenant d'obtenir plusieurs grammes de CNT par jour. Cependant, cette méthode ne permet pas le développement d'une production à l'échelle industrielle.

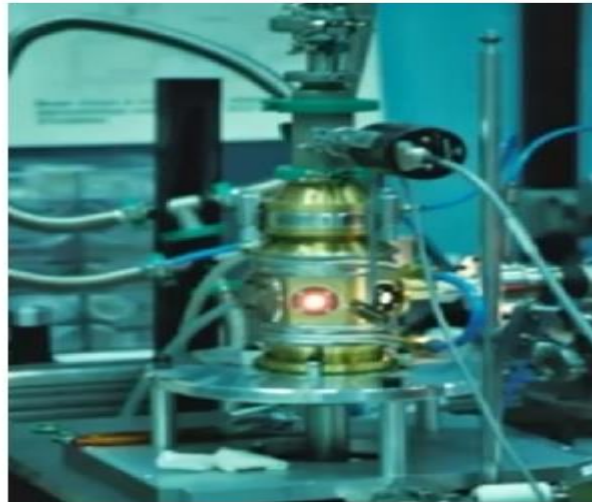
Les paramètres généralement utilisés pour réaliser la croissance de CNTs sont les suivants [15]:

- Une pression de gaz inerte (tels l'Ar ou l'He) entre 50 et 600 Torr.
- Une température de synthèse de l'ordre de 2000 à 3000  $^{\circ}\text{C}$  au niveau de la décharge.
- Un courant appliqué de 100 A à 200 A pour une tension de 20 V.

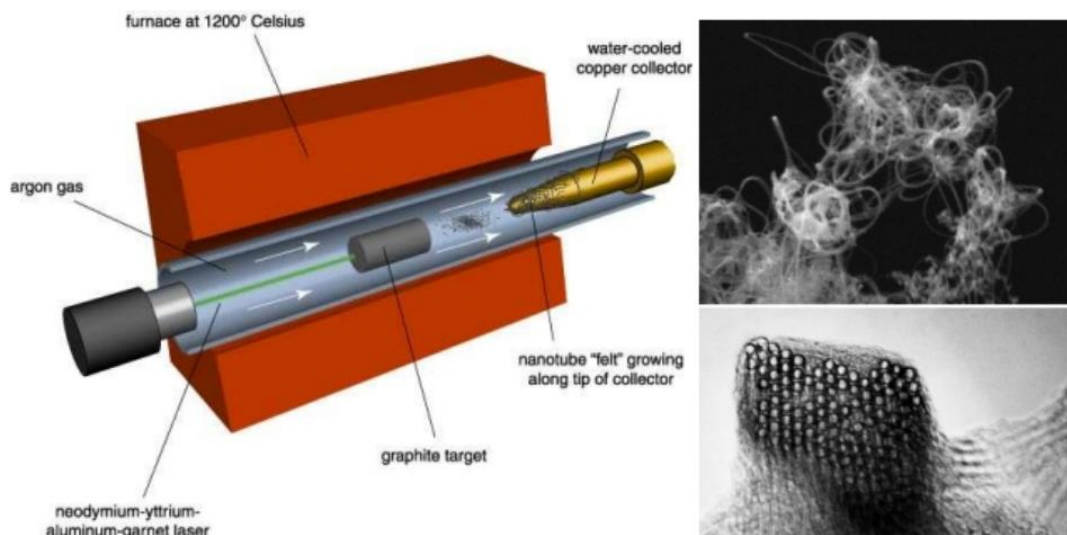
### II.1.2.b) Méthode d'ablation laser

La technique de synthèse par ablation laser est la méthode qui a permis à Kroto et Smalley de découvrir les fullerènes  $C_{60}$  en 1985 [1]. Cette technique repose sur l'évaporation d'un disque de graphite par irradiation laser, la cible étant placée dans un four à ( $1200\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) [16]. Le laser employé est un laser Nd-YAG impulsif nanoseconde. Sous l'effet de l'irradiation, la température de la cible atteint localement ( $4000\text{ K}$ ). Pour assurer une sublimation homogène, la cible est en rotation à l'intérieur de l'enceinte, afin que le faisceau laser balaye sa surface. Deux impulsions lasers successives sont employées pour améliorer le rendement de synthèse. La première impulsion utilise l'harmonique du Nd-YAG ( $532\text{ nm}$ ), tandis que la seconde utilise le fondamental ( $1064\text{ nm}$ ). La seconde impulsion permet d'augmenter la dissociation des agrégats de carbone formés par la première impulsion. Un flux de gaz inerte (Ar) permet d'évacuer les produits formés, qui sont récoltés sur un collecteur en cuivre refroidi à l'eau (voir Figure.II.5). Comme la technique de l'arc électrique, l'utilisation des cibles en graphite pur permet la synthèse des MWCNTs alors que les cibles imprégnées par des nanoparticules métalliques favorisent la synthèse des SWCNTs,

majoritairement de type métallique (par exemple : Co/Ni, Co, Ni, Co/Pt, Ni/Pt, Co/Cu) [17]. Cette technique a été reprise par Guo et al. [2], qui sont les premiers à réussir la synthèse des SWNT par cette méthode en 1995. En 1996, Smalley et collègues ont produits des SWCNTs de haut rendement (>70%) par l'ablation laser (vaporisation) des tiges de graphite avec des petites quantités de Ni et Co à 1200 °C [16].



*Figure.II.4.: Schéma de l'appareillage d'ablation laser.*



*Figure.II.5: A gauche : Schéma du système de production de nanotubes de carbone par ablation laser utilisé par l'équipe de R. Smalley à Rice [16]. A droite : Cordes de nanotubes monoparois.*



Un des avantages de la méthode de synthèse par ablation laser est qu'elle permet de produire d'assez grandes quantités de *SWCNT*. Les rendements sont très élevés, (70% à 90%) de la masse de graphite de départ est convertie en nanotubes (presque plus de 50% du carbone se transforme en *SWCNT* [2]), et une production en continu jusqu'à  $1,5 \text{ g h}^{-1}$  [18]. En revanche elle est très coûteuse car elle nécessite des sources laser de grande puissance (environ  $1 \text{ kW}$ ). Un autre avantage est qu'elle permet aujourd'hui un contrôle de la distribution en diamètre avec une précision de l'ordre de (5%) [19]. L'un des gros inconvénients de cette méthode est qu'elle nécessite, pour l'instant, une purification du produit brut afin de disposer d'échantillons ne contenant que des nanotubes de carbone. En effet, la suie issue de la synthèse ne contient pas seulement de nanotubes de carbone mono-paroi, mais aussi du carbone amorphe, des restes de catalyseurs et éventuellement des fullerènes. Les méthodes de purification les plus utilisées sont toutes à base de traitements acides et engendrent des défauts dans les nanotubes. Le travail actuel est encore et toujours d'améliorer le contrôle de la distribution en diamètre et d'obtenir un produit brut plus "propre"

Les principaux paramètres à maîtriser dans ce cas pour la croissance de *CNTs* sont :

La quantité de catalyseur la puissance et la longueur d'onde d'émission laser, la température, la pression, le type de gaz inerte, la dynamique des fluides qui balayent la cible en carbone.

### II.1.3 Procédés de synthèse à basses température

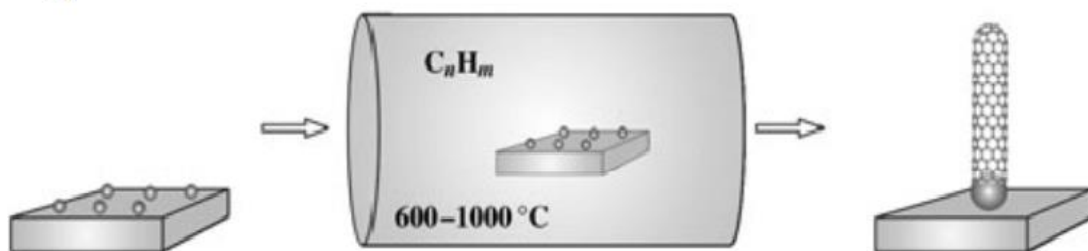
#### II.1.3.1 Méthode de dépôt chimique en phase vapeur (CVD):

La synthèse des *CNTs* par voie chimique en phase vapeur ou CVD (« Chemical Vapor Deposition » en anglais) est basée sur la décomposition d'un composé carboné gazeux ou volatile (monoxyde de carbone, méthane, acétylène, ... [20]) catalysée par des nanoparticules métalliques (Fe [21], Ni [22], Co [23]) qui servent aussi de sites de nucléation pour la formation des *CNT*. Le carbone libéré par la décomposition du gaz précipite à la surface des nanoparticules. Cette condensation aboutit à la croissance de structures tubulaires graphitisées (Figure.II.6).

Aussi bien des *MWCNTs* que des *SWCNTs* peuvent être synthétisés par CVD. Plusieurs méthodes ont été développées. Elles diffèrent par le moyen dont les réactions chimiques sont initiées et par les conditions du procédé. On en distingue 3 principales : la CVD thermique, la CVD assistée par plasma (*PECVD*) et la CVD assistée par laser (*LCVD*).



a)



b)

Figure.II.6: a) schéma d'un réacteur CVD pour la croissance des CNTs b) Synthèse de nanotubes de carbone par voie CVD en utilisant des particules métalliques déposées sur un substrat comme catalyseur [24]

### II.1.3.1.a) La CVD thermique

C'est la voie la plus utilisée. Elle est basée sur la décomposition thermique d'hydrocarbures, de monoxyde de carbone (procède *HiPCO*, *High-Pressure CO Conversion*) ou d'alcools (*méthanol*, *éthanol*,... [25]). La décomposition de monoxyde de carbone à haute température a été la première à être utilisée pour former des CNTs. Dès 1992, Dai et al. réussissent à obtenir des *SWCNTs* sur des nanoparticules de *Mo* par décomposition du *CO* à  $1200^\circ C$ . Cette méthode fut par la suite améliorée par Smalley et al. pour aboutir au développement du procédé *HiPCO* [26]. Celui-ci consiste en la décomposition du monoxyde de carbone mélangé à de l'hydrogène à haute température et haute pression. Le catalyseur est un composé organométallique ( $Fe(CO)_5$ ) qui se décompose à haute température, formant ainsi des nanoparticules métalliques de *Fe* sur lesquelles les *SWCNT* croissent. C'est le seul procédé qui permet actuellement de synthétiser plusieurs kilogrammes de *SWCNT* par jour.

La décomposition thermique d'hydrocarbures a été développée par Dai et al. De cette manière, ils sont parvenus à synthétiser des *SWCNTs* par décomposition du méthane à  $900^\circ C$  [27]. Su et al. ont réussi à améliorer le rendement en utilisant un support d'alumine imprégné de nanoparticules de *Fe* et de *Mo* comme catalyseurs [28]. Cette

méthode est particulièrement utilisée avec du méthane. Cependant il est possible d'utiliser d'autres gaz comme l'éthane dilué dans de l'argon qui se décompose entre 700 et 750 °C [29]. Que ce soit à partir de monoxyde de carbone ou d'hydrocarbures, à l'échelle du laboratoire, la CVD thermique permet de produire des CNTs bien alignés [30]. En utilisant une silice méso poreuse comme substrat, dont les pores sont enduits de nanoparticules de fer (catalyseur), les CNTs croissent à l'intérieur de manière alignés [31]. Il est aussi possible d'utiliser des substrats sur lesquels du fer est déposé en forme de carré. Les CNTs croissent bien alignés sous forme de tours perpendiculaires au substrat. Les CNTs sont maintenus entre eux par des forces de Van der Waals permettant ainsi une croissance orientée [32].

#### **II.1.3.1.b) La CVD assistée par plasma (PECVD)**

La CVD assistée par plasma ou PECVD (« Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition » en anglais) offre l'avantage de pouvoir produire des CNTs à faible température. En effet, il est possible de produire des CNTs à 120 °C [33] et même à température ambiante [34]. Les sources de chaleur utilisées sont le courant continu, les ondes radioélectriques ou les micro-ondes. Ces sources sont capables d'ioniser des gaz réactifs et ainsi générer un plasma d'électrons, d'ions et de radicaux. En général, par PECVD, il est possible d'obtenir des CNTs alignés verticalement sur une large surface ( $> 10 \text{ cm}^2$ ) [35].

#### **II.1.3.1.c) La CVD assistée par laser (LCVD)**

La CVD assistée par laser ou LCVD (« Laser Enhanced Chemical Vapor Deposition, en anglais) est un procédé permettant de déposer toutes sortes de matériaux [36]. Un laser est utilisé pour chauffer localement une petite zone du substrat à la température requise pour le dépôt. Le dépôt chimique en phase vapeur se fait alors à l'interface gaz-substrat. Lorsque la température augmente et que la réaction se produit, une fibre germe au point d'impact du laser et croit dans la direction du rayon laser. La LCVD a généralement un rendement de dépôt plus élevé qu'une CVD conventionnelle, offrant ainsi la possibilité de produire des CNTs en grande quantité. Cependant, l'utilisation de la LCVD pour la production de CNT n'en est encore qu'aux premières étapes de développement. Comparé à la PECVD et la CVD thermique, peu d'études ont été faites sur la croissance des CNTs par LCVD [37].

Comparée aux méthodes de synthèse par arc électrique et ablation laser, la synthèse de CNT par voie chimique en phase vapeur permet d'avoir un meilleur contrôle de la croissance des CNTs puisque qu'en plus de la morphologie, il est possible de maîtriser

leur orientation. Cependant, les techniques de *PECVD* et *LCVD* bien que prometteuses en sont encore au stade de développement par rapport à la *CVD* thermique, qui permet, en plus, une production de *CNTs* de plusieurs *kilogrammes par jour*. Elle est donc la plus apte à être transposée à l'échelle industrielle. Le Tableau.II.1 reprend les principes et capacités de production de ces trois méthodes de synthèse et montre que la méthode de dépôt chimique en phase vapeur *CVD* présente l'avantage de permettre une production de *CNT* en quantité suffisante pour pouvoir procéder à l'étude de leurs propriétés et envisager leur utilisation.

Tableau.II.1 : Les trois méthodes de synthèse des *CNTs*, données 2005 [38]

Méthode	Principe	Diamètre	Production
Arc électrique	Nanotubes générés par arc électrique entre deux électrodes de graphite à $T > 300$ °C. Catalyseurs Fe, Ni, Co	1,3 - 1,4 nm	120 g/jour
Ablation laser	Ablation laser d'une source de graphite à $T > 300$ °C. Catalyseurs : Fe, Ni, Co	1,4 nm	50 g/jour
CVD	Décomposition de monoxyde de carbone ou d'un hydrocarbure catalysée par Fe ou Co	1 nm	50 kg/jour

## II.2 Méthodes de caractérisation

### II.2.1 Introduction

La caractérisation des nanotubes de carbone est compliquée en raison de leur taille nanométrique. Il existait avant la synthèse des matériaux à l'échelle nanométrique de nombreuses techniques de caractérisation qu'il a fallu donc adapter à cette échelle ultime en profitant des propriétés optiques des *CNTs* et leur structure électronique. Cependant, les techniques les plus courantes de caractérisation des *CNTs*, sont divisées en 2 catégories : les méthodes qualitatives et quantitatives. Les premières regroupent les spectroscopies Raman, et infrarouge (*IR*), *UV-visible*. La résonance magnétique nucléaire (*RMN*), les microscopies électroniques à transmission (*TEM*) à balayage (*MEB*) et à force atomique (*AFM*). La deuxième catégorie concerne l'utilisation de l'analyse gravimétrique, la spectroscopie de photoélectron (*XPS*), thermogravimétrique (*ATG*) etc. Cette partie du manuscrit sera donc consacrée aux différentes techniques de caractérisation des *CNTs*

## II.2.2 Microscopies :

Généralement les microscopies électroniques occupent une place de choix dans les techniques de caractérisation des nanotubes. On note que la microscopie électronique à balayage ne permet pas d'atteindre des grossissements suffisants pour observer des *SWCNTs* individuels. On ne peut voir que les fagots. Elle permet, par exemple d'évaluer la pureté d'un échantillon (Figure.II.7) ou encore de déterminer dans un composite si les nanotubes sont alignés. Lorsque les nanotubes sont déposés sur un support épais, la microscopie à transmission n'est plus possible. La microscopie à balayage se révèle alors essentielle pour caractériser la densité de surface [39] d'un dépôt de nanotubes ou l'orientation [40]. Prenons l'exemple d'un dépôt de *MWCNTs* réalisé par filtration : [40] sur la Figure.II.8 (A), les tubes sont observés après filtration, donc perpendiculaires au filtre ; sur la Figure.II.8(B), ils ont été couchés sur le support suite à un traitement mécanique. La microscopie électronique à transmission offre beaucoup plus de ressources, à cause de sa large palette de grossissements (de quelques milliers à 300 000), permettant une caractérisation d'un échantillon à des échelles très variées (du micron jusqu'à l'angström). Par exemple, on peut compter le nombre de feuillets graphitiques d'un *MWCNT*, observer l'état des parois de nanotubes monocouches après une purification par oxydation ou encore compter le nombre de tubes dans un fagot. La diffraction électronique peut se révéler un outil puissant pour étudier la distribution de chiralités dans un fagot de *SWCNTs*. Des études ont permis, par exemple, de déterminer qu'aucune chiralité spécifique ne domine dans les fagots des nanotubes produits par arc électrique au *GDPC* [41].

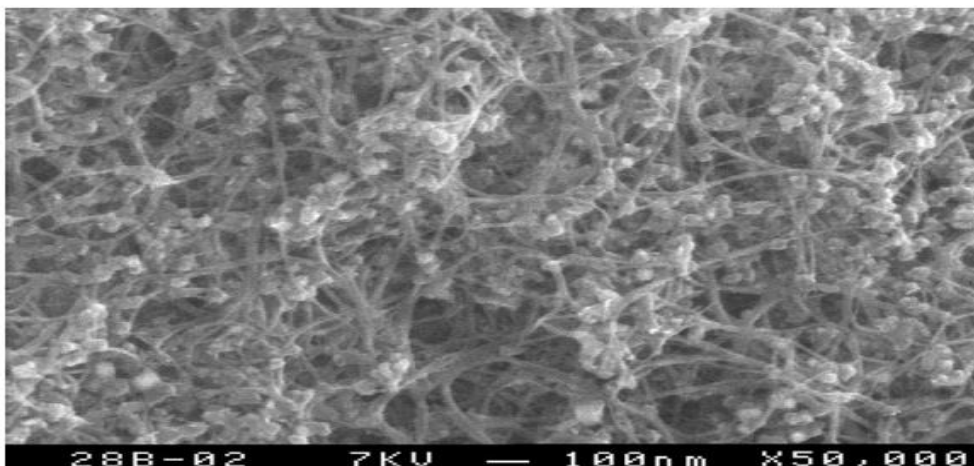


Figure.II.7 : Image MEB d'un échantillon de nanotubes produits par arc électrique (GDPC). Chacun des tubes observés sur cette image correspond à un fagot, les « boules » quant à elles sont des nanoparticules de catalyseur. [39]



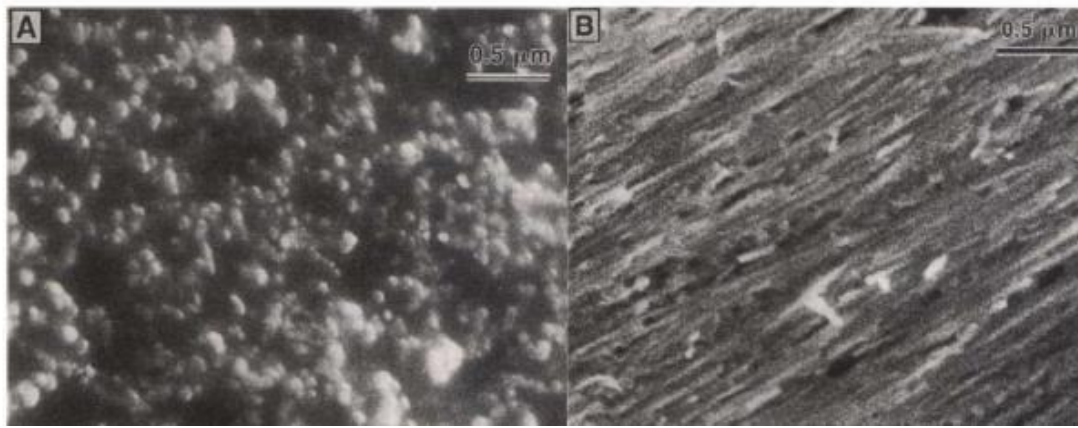


Figure.II.8 : Images MEB de films de nanotubes multicouches alignés. (A) Les tubes ont leurs axes perpendiculaires à la surface observée, de telle sorte que l'on aperçoit leurs pointes. (B) Après un traitement mécanique, les nanotubes sont couchés parallèlement à la surface. On peut distinguer une direction préférentielle. [42]

La microscopie à effet tunnel (*STM* : Scanning Tunneling Microscopy), combinée à la spectroscopie à effet tunnel (*STS* : Scanning Tunneling Spectroscopy), ont pu fournir simultanément des informations à la fois sur la structure atomique (*STM*, Figure.II.9) et les propriétés électroniques (*STS*) de nanotubes monocouches. Il a été ainsi vérifié que les propriétés électriques d'un nanotube dépendent de son diamètre et de sa chiralité. [43]

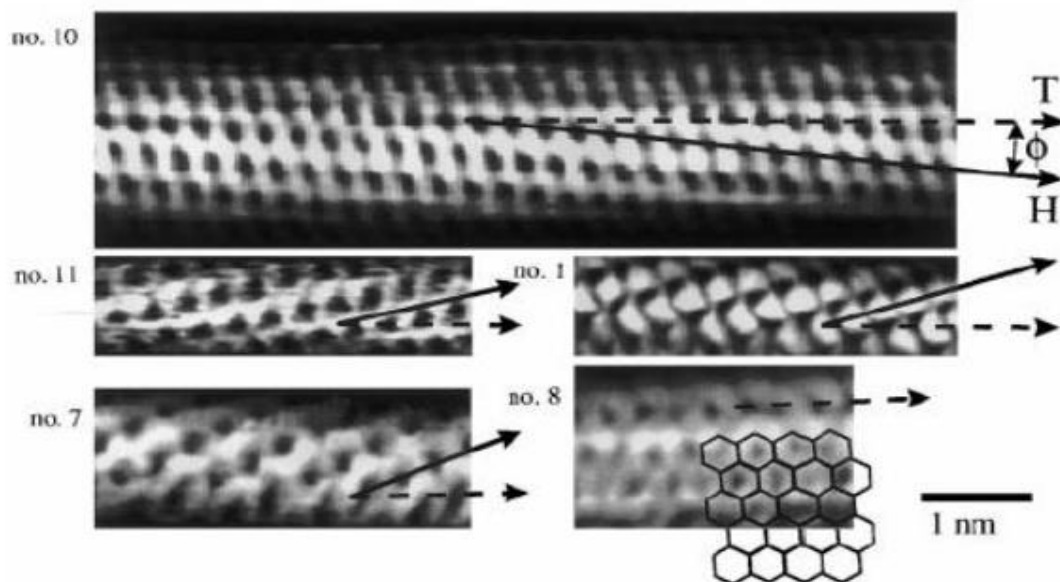


Figure.II.9 : Images STM à résolution atomique de nanotubes monocouches individuels. Le réseau graphène observé en surface des nanotubes permet une identification de la chiralité. T correspond à l'axe du tube et H à la direction d'enroulement des hexagones. Les tubes 10, 11 et 1 sont chiraux, tandis que le tube 7 est zigzag et le 8 est armchair. Un réseau graphène est schématisé en surimpression de l'image STM du tube n°8, de manière à mettre en évidence sa structure armchair. [45]



La microscopie à force atomique (*AFM* : Atomic Force Microscopy) apporte des renseignements structurels sur les nanotubes, comme la détermination de la distribution des longueurs des différentes fractions d'une chromatographie d'exclusion stérique [46, 47]. Une mesure précise des diamètres peut être réalisée, ce qui permet de déterminer si les objets imagés sont des fagots ou des nanotubes individuels. Cette dernière question est essentielle quand il s'agit de trouver les conditions optimales pour disperser, voire solubiliser, des nanotubes en milieu liquide [47]. On peut enfin citer l'*AFM* comme méthode de choix pour caractériser des dépôts contrôlés de nanotubes sur des surfaces lithographiées : il s'agit alors de déposer des *SWCNTs* à des endroits spécifiques et avec une orientation particulière [48].

### II.2.3 Spectroscopies :

La diffraction des rayons *X* peut apporter des renseignements très utiles sur l'arrangement des nanotubes. Lorsqu'il s'agit de *SWCNTs*, l'arrangement des tubes au sein des fagots donne un pic vers  $Q = 0,44 \text{ \AA}^{-1}$  ( $2\theta \approx 6^\circ$ ) ainsi que quatre autres pics (jusqu'à  $Q = 1,8 \text{ \AA}^{-1}$ ) inhérents à un réseau triangulaire, [49] dont le paramètre de maille permet de remonter au diamètre des nanotubes. La largeur de ce pic est d'autant plus importante que la distribution des diamètres des nanotubes est large. Elle sera d'autant plus faible que le nombre de tubes par fagots sera élevé. A des angles plus élevés, des pics relatifs aux impuretés apparaissent, tels que les oignons de carbone, des particules de graphite et de catalyseur. Le dopage de *SWCNTs* par des alcalins influencent le réseau cristallin des fagots, en introduisant un désordre dans ce réseau *2D* et en entraînant son expansion, observée par diffraction des *RX*. Cette expansion dépend de la taille des cations intercalés entre les tubes au sein des faisceaux [50]. L'alignement macroscopique de nanotubes peut également être étudié par diffraction des *RX*. Le degré d'orientation de *SWCNTs* arrangés en fibres a pu être déterminé quantitativement [51].

Les modes de vibration (phonons) dans les nanotubes de carbone sont extrêmement intéressants étant donné que le spectre varie en fonction de la symétrie (*n,m*), du fait de changements dans la maille élémentaire [52]. Certains des modes vibrationnels des nanotubes (comme pour le graphite) peuvent être excités en spectroscopie de diffusion Raman. En utilisant la longueur d'onde d'excitation convenable, des nanotubes d'un diamètre spécifique peuvent être excités préférentiellement par rapport à d'autres [53].

La position du mode de respiration radiale varie avec le diamètre des tubes, cela peut être utilisé pour déterminer quel diamètre est en résonance avec la fréquence du laser

excitateur. Cette technique de diffusion Raman résonante est devenue un outil puissant pour cartographier la distribution des diamètres dans un échantillon brut issu du réacteur de synthèse [54], tâches presque impossibles avec les techniques de microscopies beaucoup plus locales. La diffusion Raman peut aussi constituer un outil de caractérisation de la pureté d'un échantillon, à cause de la présence d'une bande caractéristique du carbone amorphe. La diffusion Raman permet de mettre en évidence le greffage covalent de groupements divers sur les parois des *SWCNTs* : un tel greffage s'accompagne en effet d'une diminution de l'intensité du mode radial et d'une augmentation de la bande *D* [55]. La spectroscopie d'absorption *UV-visible* peut être un outil intéressant pour mettre en évidence les modifications dans la structure électronique des nanotubes, suite à un greffage des parois, ou à un dopage avec un accepteur d'électrons [56]. L'énergie absorbée lors d'une transition dans *l'UV-visible* dépend du gap dans la densité d'états électronique. Or la largeur de ce gap dépend pour un *SWCNT* du diamètre : elle varie en  $1/D$ . C'est pourquoi l'étude du spectre *UV-visible* peut aussi fournir des renseignements sur la distribution de diamètres d'un échantillon [57]. L'analyse thermogravimétrique (*ATG*) possède l'atout essentiel d'être quantitative, à la différence d'autres techniques telles que la diffusion Raman ou la diffraction des *RX*. En représentant la dérivée du signal d'*ATG*, nommée *DTG*, on obtient une série de pics que l'on peut ajuster avec une série de Lorentziennes, chacune attribuée à un composé. Dans le cas donné en exemple sur la Figure 24 [58]: le *pic 1* ( $351^{\circ}\text{C}$ ) est associé au carbone amorphe, le *pic 2* ( $471^{\circ}\text{C}$ ) aux nanotubes, le *pic 3* ( $568^{\circ}\text{C}$ ) aux fullerènes et le *pic 4* ( $635^{\circ}\text{C}$ ) aux oignons de carbone. L'aire de chaque pic est proportionnelle à la masse du composé qui lui correspond. Le *pic 2* attribué aux *SWNTs* constitue  $37.0\%$  de la perte de masse totale (Figure.II.10).

L'*ATG* peut également apporter des renseignements plus qualitatifs sur la qualité du réseau graphène et des parois des nanotubes. La réaction d'oxydation des parois des carbones se fera à des températures d'autant plus basses que le réseau graphène comporte des défauts. En effet, la réaction d'oxydation s'initie préférentiellement au niveau de ces défauts. Ce phénomène peut s'illustrer très bien sur un échantillon de nanotubes purifiés à l'acide [55]. Ces *SWCNTs* comportent des défauts du fait du traitement acide, leur combustion démarre à  $\approx 400^{\circ}\text{C}$ . Après une phase de recuit sous vide, améliorant la cristallinité du réseau graphène, ces mêmes *SWCNTs* voient leur combustion s'initier à  $\approx 600^{\circ}\text{C}$ .

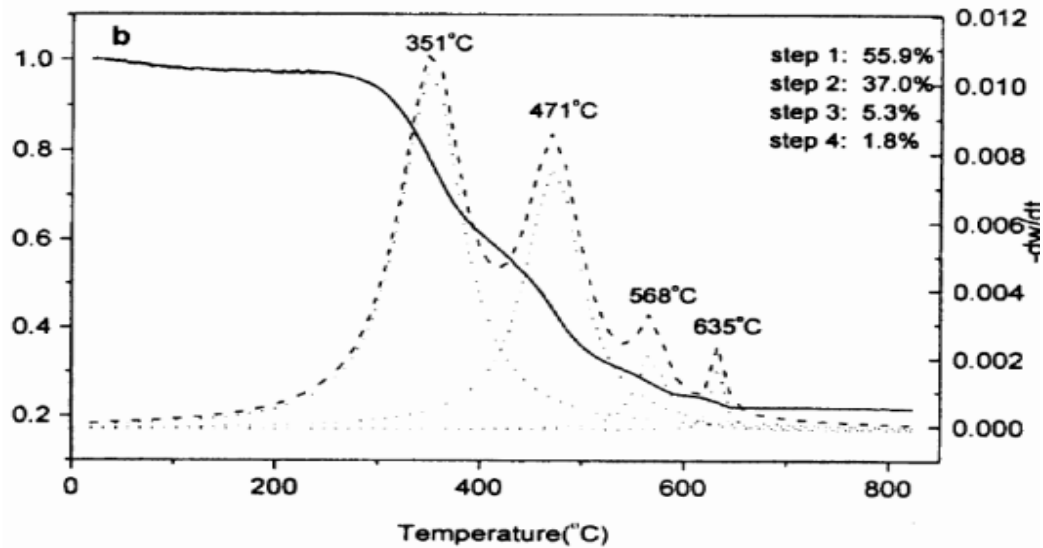


Figure.II.10 . Analyse thermogravimétrique d'un échantillon brut de nanotubes produits par arc électrique. Le signal ATG (masse  $w$  en % en fonction de la température  $t$ ) est représenté en trait continu. La courbe dérivée  $-dw/dt$  est représentée en pointillés longs. La décomposition de cette courbe de DTG en Lorentziennes est représentée en pointillés courts [58].

## II.3 Applications

De par leurs propriétés intrinsèques remarquables, de nombreuses applications ont été envisagées dans différents domaines. En électronique, voir les livres de Javey et Kong [59], Bharat Bhushan [60] pour un aperçu récent des circuits et systèmes intégrés. Rivas et al. [61] ont utilisé des nanotubes de carbone dans des capteurs électrochimiques, Stefano Bianco [62], Saito et Zettl [63], l'application du nanotube de carbone à la science des matériaux condensés. Les dispositifs d'application nanoélectroniques ont été largement explorés depuis la démonstration des premiers transistors à nanotubes de carbone [64]. Dans cette partie, nous présentons les principaux domaines d'applications des nanotubes de carbone.

### II.3.1 Mécaniques

Les excellentes propriétés mécaniques des nanotubes ainsi que leur faible densité font de ces matériaux, aussi bien les *SWCNTs* [65] que les *MWCNTs* [66], d'excellents candidats pour des fibres de renfort dans des composites de hautes performances. Cependant, tant qu'on ne maîtrisera pas la dispersion des nanotubes dans la matrice, il sera difficile d'envisager d'obtenir des performances optimales avec de tels matériaux. En effet, des matériaux inhomogènes et aux performances faibles sont obtenus quand les nanotubes sont mal dispersés [67], tandis que pour des dispersions plus homogènes

[68], de très bonnes améliorations des propriétés mécaniques (élasticité, résistance à la traction, à la fracture et à l'indentation) sont déjà observées, même pour de faibles chargements (de l'ordre de 0,5% à 3%). A l'heure actuelle, les nanotubes de carbone sont ajoutés par exemple dans des composites époxy et trouvent des applications dans les raquettes de tennis, les battes de base-ball, les clubs de golf, les crosses de hockey, les skis, les cadres et accessoires de vélo (Figure.II.11) ou les mâts de bateaux à voiles. Ils permettent d'améliorer significativement les propriétés mécaniques et la durabilité des matériaux tout en autorisant un allègement des structures.



Figure.II.11 : a) Cadre de vélo BMC en résine renforcée par des nanotubes et b) Tête de club de golf Wilson Staff renforcé par les nanotubes

### II.3.2 L'électronique

Parmi les domaines d'applications potentielles des nanotubes de carbone, la micro-électronique est en très grand développement en raison de la course perpétuelle vers la miniaturisation. Ainsi, des diodes de dimensions nanométriques ont pu être fabriquées en utilisant la propriété remarquable de semiconductivité des CNTs. En dopant la moitié d'un SWCNT semiconducteur de type p par du potassium, Zhou et al. [69] ont réussi la création d'une jonction  $p-n$  sur un seul nanotube. La propriété remarquable des CNTs de supporter de forts courants a été exploitée par Seidel et al. [70], qui à leur tour ont réussi à l'aide des SWCNT alignés la fabrication d'un transistor à effet de champ capable de délivrer un courant de l'ordre du  $mA$  qui peut commander des électromoteurs ou des LED. La fabrication des circuits logiques et des oscillateurs à base de transistors à effet de champ fabriqués par des CNTs a été aussi rapportée par plusieurs auteurs [7,1]. Une propriété aussi intéressante a retenu l'attention de la

communauté scientifique, elle concerne l'utilisation des CNTs comme sources émettrices par effet de champ [72]. À cause de leur structure nanométrique, leur forte conductivité électrique, leur stabilité chimique, les CNTs sont de bons candidats pour remplacer les matériaux actuels dans la fabrication de canons à électrons dans différentes applications, source de lumière pour écrans plat, source de rayons X, les microscopes électroniques, etc. (Figure.II.12).

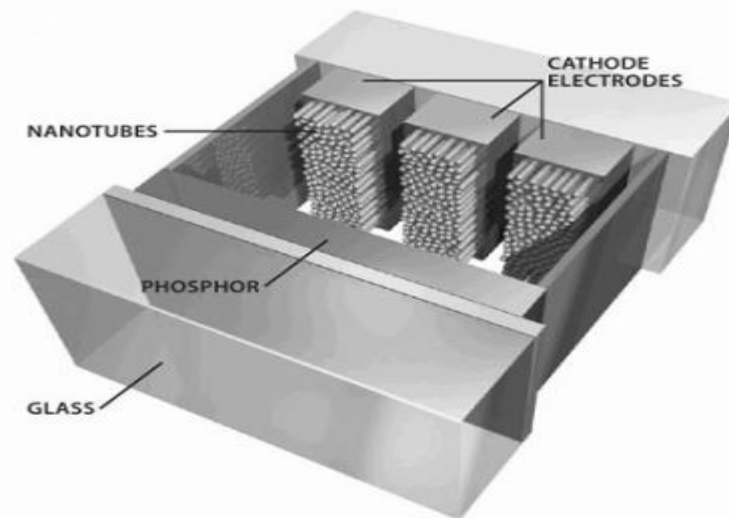


Figure.II.12 : Schéma d'un dispositif d'affichage à l'aide de nanotube de carbone [73].

Actuellement, ces nombreuses applications prometteuses se heurtent à un grand défi technologique concernant la maîtrise de fabrication de structures bien définies des CNTs ainsi que leur manipulation pour la création des circuits complexes.

### II.3 .3 Le stockage d'énergie

À cause d'une géométrie creuse, un grand rapport d'aspect et de bonnes propriétés mécaniques, beaucoup d'études se sont intéressées à l'utilisation de ces nanotubes de carbone dans le stockage des gaz et en particulier l'hydrogène, surtout après l'annonce du laboratoire national des énergies renouvelables américain (NREL) que les CNTs pour raient stocker jusqu'à 8% de leur masse en hydrogène [74], sachant que la limite fixée par le département d'énergie américain pour une éventuelle utilisation dans le domaine automobile est de 6,5%. Le stockage d'hydrogène présente un grand enjeu économique car il reste le problème majeur qui entrave le développement des nouveaux véhicules utilisant les piles à combustible. L'utilisation des CNTs permettrait donc de fabriquer des conteneurs de petites dimensions (faible poids) avec de bonnes propriétés mécaniques. Cependant, les études actuelles sont très divergentes concernant la

capacité réelle du stockage d'hydrogène avec les CNTs, ainsi des pourcentages massiques entre 1,5 et 67% ont été rapportés [74]. Toujours dans le domaine du stockage d'énergie, les batteries à base d'ions de lithium présentent actuellement les meilleures performances (légereté, capacité de stockage) et les recherches se poursuivent pour leur amélioration. Parmi ces recherches, plusieurs d'entre elles ont rapporté la possibilité de l'amélioration de la capacité de ces batteries en utilisant des anodes à base de nanotubes de carbone [75].

### II.3 .4 Les capteurs

Leurs propriétés des nanotubes étant très sensibles à leur environnement chimique, des molécules adsorbées peuvent créer des variations importantes de la conductivité électrique. Les premiers résultats obtenus sont très encourageants et montrent que les nanotubes possèdent une sensibilité accrue, ainsi que des temps de réponse très courts. Le MIT a par exemple réussi à développer un capteur ultrasensible pour le gaz Sarin [76]. Beaucoup de travaux sont menés pour le développement de capteurs de gaz à base de nanotubes de carbone [77]. Un détecteur de NO pour le contrôle d'asthme, fabriqué à base d'un transistor à effet de champ utilisant un canal à base de SWCNT a été rapporté par Kuzmych et al. [78]. Ce détecteur est sensible à des concentrations entre 2 et 5 ppb<sup>3</sup>(3 est partie par milliard). Des applications semblables dans le domaine biologique ont été rapportées. Ainsi, sur le même principe de changement de conductivité électrique, Besteman et al. [79], ont fabriqué à l'aide d'un SWCNT semiconducteur fonctionnalisé placé entre deux électrodes un détecteur de glucose

### II.3 .5 Medical

Le nanotube permet d'être utilisée pour une variété de tâches. La structure du fullerène et des nanotubes de carbone présente un espace interne pouvant contenir de très nombreuses molécules de taille relativement importantes. Ainsi il a été imaginé d'utiliser les nanotubes comme des "boîtes" permettant d'assurer le transport de médicaments. Par ailleurs, sur sa structure externe peuvent être accroché différentes molécules ou corps physiques qui interagiraient avec d'autres cellules comme, par exemple, des cellules malades [80]. Ceci permet alors de transporter sur un lieu précis les produits contenus dans le nanotube, à la manière d'un « cheval de Troie ».[80]



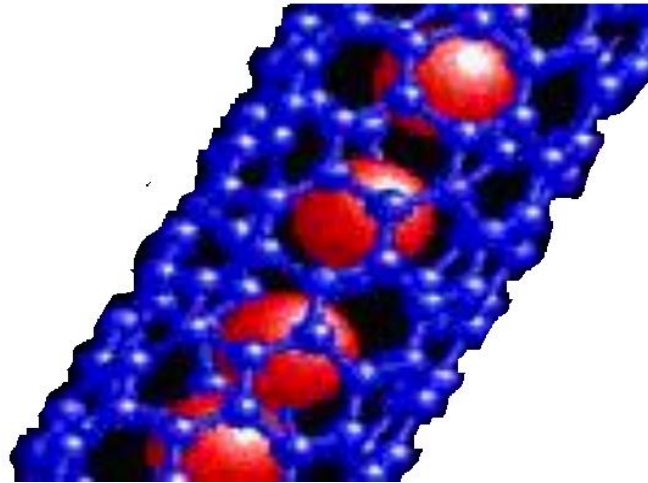


Figure.II.13 : Inclusions moléculaires dans un nanotube : un « cheval de Troie »[80]

## II. 4 Conclusion

Dans ce chapitre, Nous avons détaillé quelques exemples de méthodes de synthèse des nanotubes de carbone tel que la méthode d'ablation laser, l'arc électrique, dépôt chimique en phase vapeur *CVD*, en nous attachant à faire ressortir les avantages et les inconvénients de chacune d'entre elles. On notera également que la voie de synthèse par la méthode de dépôt chimique en phase vapeur *CVD* est plus prometteuse connaît un grand succès. Il permet de réaliser la croissance des *CNTs* de manière localisée et orientée perpendiculaire au substrat et production de *CNTs* de plusieurs kilogrammes par jour. D'outre part, nous avons parlé des différents techniques de caractérisation des nanotubes de carbone par les microscopies est les spectroscopies. Enfin, nous avons énoncé quelques domaines de leurs applications des *CNTs*.

## Références

- [1] Kroto HW, Heath JR, O'Brien SC, Curl RF, Smalley RE, *Nature* 318 (1985) 162.
- [2] Guo T, Nikolaev P, Thess A, Colbert DT, Smalley RE, *Chem.Phys.Lett* 243 (1995) 49.
- [3] Laplaze D, Bernier P, Barbette L, Lambert JM, Flamant G, Lebrun M, Brunelle A, *318(1994)* 733.
- [4] Mauron P, Emmenegger C, Sudan P, Wenger P, Rentsch S, Züttel A, *Diam. Rel. Mat* 12 (2003) 780.
- [5] Liu J, Casavant MJ, Cox M, Walters DA, Boul P, Lu W, Rimberg AJ, Smith KA, Colbert DT, Smalley RE, *Chem. Phys. Lett* 303 (1999) 125.
- [6] Satishkumar BC, Govindaraj A, Rao CNR, *Chem.Phys.Lett* 307 (1999) 158.
- [7] W. Kratschmer, L.D. Lamb, K. Fostiropoulos et D.R. Huffman, *Nature* 347(1990) 354.
- [8] N. Valentin, Popov, *Mat Sci and Eng. R* 43(2004) 61.
- [9] S. Iijima, *Nature* 354(1991)56.
- [10] T.W. Ebbesen et P.M. Ajayan, *Nature* 358(1992) 220.
- [11] D.S. Bethune, C.H. Kiang, M.S. De Vries, G. Gorman, R. Savoy, J. Vazquez et R. Beyers, *Nature* 363(1993) 605.
- [12] C. Journet, W. K. Maser, P. Bernier, A. Loiseau, M. Lamy de la Chapelle, S. Lefrant, P. Deniard, R. Lee, J. E. Fischer, *Nature* 388 (1997) 756.
- [13] N. Izard, nanotubes de carbone : Systèmes pour la limitation optique, thèse de doctorat, l'Université Montpellier II, (2004).
- [14] P. Marcoux, Réactivité et manipulation de nanotubes de carbone monocouches : fonctionnalisation de surface par greffage covalent et mise en oeuvre comme agent structurant, thèse de doctorat, Université d'Angers, (2002).
- [15] Loïck-Alexandre Gautier, Synthèse de nanotubes de carbone alignés verticalement par PECVD et étude de leurs propriétés d'émission à effet de champ en configuration de structures hiérarchiques, thèse de doctorat, Université du Québec, (2016).
- [16] A. Thess, R. Lee, P. Nikolaev, H. Dai, P. Petit, J. Robert, C. Xu, Y. Hee Lee, S. Gon Kim, A. G. Rinzler, D. T. Colbert, G. E. Scuseria, D. Tománek, J. E. Fischer, R. E. Smalley, *Science* 273(1996) 483.
- [17] Yiming. Li, D. Mann, M. Rolandi, W. Kim, A. Ural, S. Hung, A. Javey, J. Cao, D. Wang, E. Yenilmez, Q. Wang, J.F. Gibbons, Y. Nishi et H. Dai, *Nano Letters* 4 (2004) 317.
- [18] P.C. Eklund, B.K. Pradhan, U.J. Kim, Q. Xiong, J.E. Fischer, A.D. Friedman, B.C. Holloway, K. Jordan et M.W. Smith, *Nano Letters* 2 (2002)561.

- [19] O. Jost et al. Appl. Phys. Lett., 75 (1999) 2217.
- [20] Tan, S.-M , Chai, S.-P , Liu, W.-W. Mohamed, A. R., Journal of Alloys and Compounds 477(2009)785.
- [21] Hernadi. K , Fonseca. A.,Nagy. J. B. , Bernaerts. D, Lucas. A. A., Carbon 34 (1996) 1249.
- [22] Sengupta. J, Jacob. C, Journal of Nanoparticle Research 12 (2010)457.
- [23] Varadan. V. K, Xie. J, Smart Materials and Structures 11(2002) 610.
- [24] Balasubramanian. K , Burghard. M, Small 1(2005) 180.
- [25] Wang. G, Wang. H., Tang. Z., Li. W. , Bai. J , Applied Catalysis B: Environmental 88 (2009) 142.
- [26] Nikolaev. P, Smith. K. A, Smalley. R. E, Chemical Physics Letters 313 (1999)91
- [27] Cassell. A. M, Raymakers. J. A, Kong. J.; Dai. H , The Journal of Physical Chemistry B 103(1999) 6484.
- [28] Su, M; Zheng, B , Liu, J , Chemical Physics Letters 322 (2000) 321.
- [29] Hafner. J. H , Bronikowski, M. J, Azamian, B. R , Nikolaev, P , Rinzler. A. G, Colbert. D. T, Smith. K. A, Smalley. R. E, Chemical Physics Letters 296(1998)195.
- [30] Dai. H, Surface Science 500 (2002) 218.
- [31] Pan. Z. W, Xie. S. S, Chang, B. H, Wang. C. Y, Lu. L, Liu. W, Zhou. W. Y, Li. W. Z, Qian. L. X, Nature 394(1998) 631.
- [32] Fan. S, Chapline, M. G, Franklin. N, Tomblor. T. W, Cassell. A. M, Dai. H, Science 283(1999) 512.
- [33] Hofmann. S, Ducati. C, Robertson, J, Kleinsorge. B, Applied Physics Letters 83 (2003) 135.
- [34] Minea. T, Point. S, Granier. A, Touzeau. M, Applied Physics Letters 85(2004) 1244.
- [35] Jang. I, Uh. H. S, Cho. H. J, Lee. W; Hong. J. P, Lee. N, Carbon 45(2007) 3015.
- [36] Duty. C, Jean. D, Lackey. W, International Materials Reviews 46(2001) 271.
- [37] Bondi. S, Lackey. W , Johnson. R , Wang. X, Wang. Z, Carbon 44 (2006) 1393.
- [38] Balasubramanian. K, Burghard. M, Small 1(2005) 180.
- [39] W. Z. Li, S. S. Xie, L. X. Qian, B. H. Chang, B. S. Zou, W. Y. Zhou, R. A. Zhao, G. Wang., Science 274 ( 1996) 1701.
- [40] T. W. Ebbesen, P. M. Ajayan, H. Hiura, H. Tanigaki, Nature, 367(1994) 519.
- [41] Tohji, K. Goto, T. Takahashi, H. Shinoda, Y. Shimizu, N. Jeyadevan, B. Matsuoka, I. Saito, Y. Kasuya, A. Ohsuna, T. Hiraga, K. Nishina, (1996), Nature 383(1996) 679.

- [42] W. A. de Heer, W. S. Bacsá, A. Châtelain, T. Gerfin, R. Humphrey-Baker, L. Forró, D. Ugarte, *Science*, 268(1995)845.
- [43] T.W. Odom, J.L. Huang, P. Kim, C.M. Lieber., *Nature*, 391(1998) 62.
- [44] A. Hassanien, M. Tokumoto, Y. Kumazawa, H. Kataura, Y. Maniwa, S. Suzuki, Y. Achiba, *App. Phys. Lett.* 73(1998)3839.
- [45] J.W.G. Wildöer, L.C. Venema, A.G. Rinzler, R.E. Smalley, C. Dekker., *Nature*, 391(1998) 59.
- [46] G. S. Duesberg, J. Muster, V. Krstic, M Burghard, S. Roth., *Applied Physics A: Materials Science & Processing A* 67(1998) 117..
- [47] G. S. Duesberg, W. Blau, H. J. Byrne, J. Muster, M. Burghard, S. Roth, *Synth. Met.* 103(1999) 2484..
- [48] J. Liu, M. J. Casavant, M. Cox, D. A. Walters, P. Boul, W. Lu, A. J. Rimberg, K. A. Smith, D. T. Colbert, R. E. Smalley., *Chem. Phys. Lett.* 303(1999) 125.
- [49] C. Journet, W. K. Maser, P. Bernier, A. Loiseau, M. Lamy de la Chapelle, S. Lefrant, P. Deniard, R. Lee, J. E. Fischer., *Nature*, 388(1997)756..
- [50] L. Duclaux, K. Méténier, J. P. Salvetat, P. Lauginie, S. Bonnamy, F. Béguin., *Mol. Cryst. and Liq. Cryst.* 340(2000) 769.
- [51] P. Launois, A. Marucci, B. Vigolo, P. Bernier, A. Derré, P. Poulin, J. *Nanosci. Structural characterization of nanotube fibers by X-Ray scattering*, *Nanotech.* 1: 125. 2000.
- [52] M. Lamy de la Chapelle. *Etude des nanotubes de carbone par spectroscopie Raman*, thèse de doctorat de l'Université de Nantes.(1998).
- [53] A. M. Rao, E. Richter, S. Bandow, B. Chase, P. C. Eklund, K. A. Williams, S. Fang, K. R. Subbaswamy, M. Menon, A. Thess, R. E. Smalley, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus., *Science* 275(1997)187.
- [54] M. Takizawa, S. Bandow, M. Yudasaka, Y. Ando, H. Shimoyama, S. Iijima., *Chem. Phys. Lett.* 326(2000)351..
- [55] J. L. Bahr, J. Yang, D. V. Kosynkin, M. J. Bronikowski, R. E. Smalley, J. M. Tour, J. *Am., Chem. Soc.* 123(2001) 6536..
- [56] P. J. Boul, E. T. Mickelson, C. B. Huffman, L. M. Ericson, I. W. Chiang, K. A. Smith, D. T. Colbert, R. H. Hauge, J. L. Margrave, R. E. Smalley, *Chem. Phys. Lett.* 310(1999)367.
- [57] I. W. Chiang, B. E. Brinson, A. Y. Huang, P. A. Willis, M. J. Bronikowski, J. L. Margrave, R. E. Smalley, R. H. Hauge., *J. Phys. Chem.* 105(2001) 8297.

- [58] Z. Shi, Y. Lian, F. Liao, X. Zhou, Z. Gu, Y. Zhang, S. Iijima., *Solid State Communications* 112 (1999)35.
- [59] A. Javey and J. Kong, *Carbon Nanotube Electronics, LLC*, 233 Spring Street, New York, NY 10013, USA. 2009
- [60] B. Bhushan, *Springer handbook of nanotechnology*, 2 end edition, Springer Berlin Heidelberg New York, Springer Science Business Media, Inc. 2007
- [61] G. A. Rivas, M. D. Rubianes, M. L. Pedano, N. F. Ferreyra, G. Luque and S. A. Miscoria, *Carbon nanotubes: A new alternative for electrochemical sensors*, *Nanotechnology science and technology series*, Nova Science Publishers, Inc. 2009
- [62] S. Bianco, *Carbon nanotubes-from research to applications*, Published by InTech Janeza Trdine 9, 51000 Rijeka, Croatian, 2011
- [63] S. Saito and A. Zettl, *Carbon Nanotubes; Quantum Cylinders of Graphene*, Elsevier Radarweg 29, PO Box 211, 1000 AE Amsterdam, The Netherlands Linacre House, Jordan Hill, Oxford OX2 8DP, UK, 2008
- [64] Cees Dekker, Sander J. Tans, and Alwin R. M. Verschueren. Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube. *Nature*, 393 (1998) 49, 5.
- [65] H. Zhang, T. Liu, T. Sreekumar, S. Kumar, V. Moore, R. Hauge, R. E. Smalley, *Nano Lett.*, 3(2003) 285.
- [66] J. N. Coleman, M. Cadek, R. Blake, K. P. Ryan, V. Nicolosi, A. Fonseca, J. B. Nagy, C. Belton, W. J. Blau, *Adv. Funct. Mater.*, 14(2004) 791.
- [67] E. T. Thostenson, Z. Ren, T. W. Chow, *Compos. Sci. Technol.*, 61 (2001),1899.
- [68] D. Qian, E. Dickey, R. Andrews, T. Rantell, *Appl. Phys. Lett.*, 76(2000) 2868.
- [69] C. Zhou, J. Kong, E. Yenilmez et H. Dai : Modulated chemical doping of individual carbon nanotubes. *Science*, 290(2000)1552.
- [70] R. Seidel, A.P. Graham, E. Unger, G.S. Duesberg, M. Liebau, W. Steinhoegl, F. Kreupl, W. Hoenlein et W. Pompe : High-current nanotube transistors. *Nano Letters*, 4 (2004)831.
- [71] A. Bachtold, P. Hadley, T. Nakanishi et C. Dekker : Logic circuits based on carbon nanotubes. *Physica E*, 16(2003)42.
- [72] E. Minoux, O. Groening, K.B.K. Teo, S.H. Dalal, L. Gangloff, J-P. Schnell, L. Hudanski, I.Y.Y. Bu, P. Vincent, P. Legagneux, G.A.J. Amaratunga et W.I. Milne : Achieving high-current carbon nanotube emitters. *Nano Letters*, 5(2005)2135.

[73] M. Terrones : Science and technology of the twenty-first century : Synthesis, properties, and applications of carbon nanotubes. Annual Review of Materials Research, 33(2003)419.

[74] U.S. DOE Hydrogen Program Review. Hydrogen storage in carbon single-wall nanotube. A.C. Dillon, K.E.H. Gilbert, P.A. Parilla, J.L. Alleman, 2002.

[75] R.A. DiLeo, A. Castiglia, M.J. Ganter, R.E. Rogers, C.D. Cress, R.P. Raffaele et B.J. Landi : Enhanced capacity and rate capability of carbon nanotube based anodes with titanium contacts for lithium ion batteries. ACS Nano, 4(2010) 612.

[76] A. Trafton, <http://web.mit.edu/newsoffice/2008/nanotube-0605.html>, 2008.

[77] J. Suehiro, G. Zhou, H. Imakiire, W. Ding, M. Hara, Sensors and Actuators B: Chemicals, (2005) 398.

[78] O. Kuzmych, B.L. Allen et A. Star : Carbon nanotube sensors for exhaled breath components. Nanotechnology, 18 (2007)375.

[79] K. Besteman, J.O. Lee, F.G.M. Wiertz, H.A. Heering et C. Dekker : Enzyme-coated carbon nanotubes as single-molecule biosensors. Nano Letters, 3(2003)727.

[80] Jean.Malo Chehab and G Uilaume, les nanotubes de carbone dans le domaine medical, 1<sup>ère</sup> S , Lycée d'Hulst, Paris 2007-2008.



# Chapitre III

## *Modèles des milieux continus (MMC) et formulations*

### Chapitre III. Modèles des milieux continus(MMC) et formulations

#### III.1 Introduction

Dans ce Chapitre, basé sur la théorie nonlocal d'élasticité, un modèle élastique est développé pour la propagation de vibration dans les nanotubes de carbone à monoparois (SWCNTs). On note aussi que des expressions explicites sont dérivées pour des fréquences normales, des rapports associés d'amplitude de nanotubes et la petite échelle de longueur sur eux sont étudiées.

#### III.2 Les conditions de calcul

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



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

#### III.3 Le modèle continu nonlocal dans un nanotube de carbone:

Dans la théorie d'élasticité nonlocal (Eringen) [1,2], la contrainte au niveau d'un point de référence  $x$  est considérée comme une fonction du champ de déformation estimée à chaque point dans le corps. Cette observation est conforme au modèle atomique et aux observations expérimentales sur la dispersion des photons. En outre, quand l'effet des contraintes aux autres points que  $x$  est négligé, la théorie nonlocal d'élasticité se conforme à la théorie (locale) classique d'élasticité ceci en mettant  $e_0 a$ . Par conséquent, la théorie nonlocal fournit une description plus précise du comportement matériel comparée à la théorie (locale) classique d'élasticité. Les équations de base pour un solide élastique nonlocal, linéaire, homogène et isotrope, n'a pas soumis par une force extérieure sont données par [2]:

$$\sigma_{ij,j} = 0$$

$$\sigma_{ij}(x) = \int T(|x-x'|, h) C_{ijkl}(x') dV(x'), \quad \forall x \in V \quad (\text{III.1})$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji})$$

Où  $C_{ijkl}$  est le tenseur de module d'élasticité de l'élasticité isotrope classique,  $\sigma_{ij}$  et  $\varepsilon_{ij}$  sont les tenseurs des contraintes et déformations respectivement, et  $u_i$  est le vecteur de déplacement.

$T(|x-x'|, h)$  est le module nonlocal ou la fonction d'atténuation incorporant aux équations constitutives qui caractérisent l'effet nonlocal au point de référence  $x$  produit par la déformation locale de la source.  $x', |x-x'|$  est la distance entre le point de référence  $x$  et le point  $x'$ , et  $h = e_0 a / L$  (Eringen, [2]), où  $e_0$  est une constante appropriée à chaque matériel,  $a$  est la longueur interne qui caractérise le matériel (par exemple longueur de lien C—C, de distance granulaire), et  $L$  est une longueur externe qui caractérise le matériel (par exemple longueur, longueur d'onde).

Non local relations constitutives pour les nanotubes/nanobeams peuvent être écrites comme [3,4] :

$$\sigma_x - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} = E \varepsilon_x \quad \Rightarrow \quad (1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \sigma_x = E \varepsilon_x \quad (\text{III.2})$$

$$\tau_{xz} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \tau_{xz}}{\partial x^2} = G \gamma_{xz} \quad \Rightarrow \quad (1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \tau_{xz} = G \gamma_{xz} \quad (\text{III.3})$$

Où  $E$  est le module de Young du matériau,  $G$  et le module de cisaillement du matériau,  $\nabla^2$  est l'opérateur de Laplace.  $\gamma$  est la contrainte de cisaillement  $\sigma_x$  et la contrainte axiale est le paramètre  $e_0 a$  est le paramètre conduisant à un effet à petite échelle sur la réponse des structures de taille nanométrique.

### III.3.1 Modèle Euler- Bernoulli

Les expressions de la contrainte axiale  $\varepsilon_x$  et du moment  $M$  de flexion pour le modèle de poutre d'Euler- Bernoulli sont [5]:

$$\varepsilon_x = -y \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad (\text{III.4})$$

$$M = \int_A y \sigma_x dA \quad (\text{III.5})$$

Où  $w$  est déplacement transversal et  $y$  est la coordonnée mesurée à partir du plan médian dans le sens de la hauteur de la poutre.

Multiplier Eq.(III.2) par  $\int_A y dA$  En intégrant le résultat à la surface de  $A$ , on obtient :

$$\int_A y \sigma_x dA - (e_0 a)^2 \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA = E \int_A y \varepsilon_x dA \quad (\text{III.6})$$

En substituant l'équation (III.4) à la relation constitutive nonlocal, l'équation (III.6) conduit à

$$\begin{aligned} \int_A y \sigma_x dA - (e_0 a)^2 \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA &= -E \int_A y^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} dA \\ \Rightarrow M - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} &= -EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \\ \Rightarrow M &= (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} - EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

Où  $M = \int_A y \sigma_x dA$  et  $\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA$

et  $I = \int_A y^2 dA$  est le moment d'inertie

En utilisant la modèle de poutre d'Euler-Bernoulli, l'équation générale des vibrations transversales d'une poutre élastique sous l'effet thermique est exprimée par [5,6]

$$\frac{\partial P}{\partial x} - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0 \Rightarrow \frac{\partial P}{\partial x} = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad (\text{III.8})$$

Ou

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} \implies P = \frac{\partial M}{\partial x}$$

Où  $x$  la coordonnée axiale,  $\rho$  est la masse volumique du matériau,  $A$  et l'aire de la section transversale de la poutre.  $N_t$  désigne une force axiale supplémentaire et dépend de la température  $\theta$  et du coefficient thermique  $\alpha$  du nanotube; la force peut être exprimée par [7,8]

$$N_t = -\alpha EA \theta \quad (\text{III.9})$$

En introduisant l'équation (III.8) dans l'équation (III.7), on obtient :

$$M = (e_0 a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) - EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad (\text{III.10})$$

La dérivation de la 2<sup>ème</sup> seconde de cette équation nous donne :

$$\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = (e_0 a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial t^2 \partial x^2} - N_t \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right) - EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \quad (\text{III.11})$$

Substituant l'équation (III.11) dans l'équation (III.8) pour obtenir l'équation différentielle générale de la vibration transversale d'un nanotube carbone monocouche basse sue la théorie d'Euler- Bernoulli :

$$\begin{aligned}
& (e_0a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial t^2 \partial x^2} - N_t \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right) - EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \\
& \Rightarrow -EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + (e_0a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial t^2 \partial x^2} - N_t \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right) - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0 \\
& \Rightarrow -EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + (e_0a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial t^2 \partial x^2} - N_t \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right) - \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) = 0 \\
& \Rightarrow EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} - (e_0a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial t^2 \partial x^2} - N_t \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right) + \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) = 0 \\
& \Rightarrow EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} - (e_0a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) = 0 \\
& \Rightarrow EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} - \left( (e_0a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 1 \right) \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) = 0 \\
& \Rightarrow EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \left( 1 - (e_0a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) = 0 \\
& \Rightarrow EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \left( 1 - (e_0a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) = 0 \tag{III.12}
\end{aligned}$$

Considèrent un nonotube de carbone monocouche simplement appuyer de la longueur ( $L$ ), ainsi le mode de vibratoire du nanotube est la forme [9,10]:

$$w(x,t) = \bar{W} e^{i\omega t} \sin(\lambda x) \quad \lambda = \frac{k\pi}{L} \quad k(1,2,\dots) \tag{III.13}$$

Ou  $\bar{W}$  est l'amplitude de déflexion du nanotube.

Substituant l'équation (III.13) dans l'équation (III.12) nous donne :

$$\begin{aligned}
& EI \lambda^4 \bar{W} e^{i\omega t} \sin \lambda x - \rho A \omega^2 \bar{W} e^{i\omega t} \sin \lambda x + N \lambda^2 \bar{W} e^{i\omega t} \sin \lambda x - (e_0a)^2 \rho A \omega^2 \lambda^2 \bar{W} e^{i\omega t} \sin \lambda x + \\
& (e_0a)^2 N \lambda^4 \bar{W} e^{i\omega t} \sin \lambda x \\
& EI \lambda^4 - \rho A \omega^2 + N \lambda^2 - (e_0a)^2 \rho A \omega^2 \lambda^2 + (e_0a)^2 N \lambda^4 = 0 \\
& \Rightarrow EI \lambda^4 - \rho A \omega^2 + N \lambda^2 - (e_0a)^2 (\rho A \omega^2 \lambda^2 - N \lambda^4) = 0 \\
& \Rightarrow EI \lambda^4 - (\rho A \omega^2 - N \lambda^2) - (e_0a)^2 \lambda^2 (\rho A \omega^2 - N \lambda^2) = 0 \\
& \Rightarrow EI \lambda^4 - ((e_0a)^2 \lambda^2 + 1) (\rho A \omega^2 - N \lambda^2) = 0 \\
& \Rightarrow EI \lambda^4 + ((e_0a)^2 \lambda^2 + 1) N \lambda^2 - ((e_0a)^2 \lambda^2 + 1) \rho A \omega^2 = 0
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{EI\lambda^4 + ((e0a)^2 \lambda^2 + 1)N\lambda^2}{((e0a)^2 \lambda^2 + 1)\rho A}$$

$$\omega_{NE} = \sqrt{\frac{EI\lambda^4 + ((e0a)^2 \lambda^2 + 1)N\lambda^2}{((e0a)^2 \lambda^2 + 1)\rho A}} \quad (\text{III.14})$$

Les rapports des résultats avec le changement de la température et le paramètre non locale sont respectivement données par :

$$\chi_N = \frac{\omega_{NE}}{\omega_{LE}}, \quad \chi_{th} = \frac{\omega_{NE}}{\omega_{NE}^0} \quad (\text{III.15})$$

Ou  $(\omega_{NE}, \omega_{LE})$  sont les fréquences d'un nanotube de carbone monocouche basées sur le modèle non local et local d'Euler- Bernoulli respectivement incluent l'effet thermique, et la fréquence  $\omega_{NE}^0$  est basée sur modèle non local d'Euler- Bernoulli sans effet thermique.

### III.3.2 Modèle Timoshenko

Cette théorie est une amélioration du modèle d'Euler-Bernoulli puisqu'elle tient compte également de l'inertie de rotation et de la déformation de cisaillement qui se produit dans un nanotube pendant qu'il vibre. Le modèle implique deux équations d'ondes couplées. La théorie de Timoshenko (ou la théorie de modèle épais) explique tous les deux l'effet de la déformation rotatoire d'inertie et de cisaillement, qui est négligée une fois appliqué à la théorie d'Euler-Bernoulli appelée aussi la théorie mince modèle. Dans le paragraphe précédent les dimensions en coupe du modèle ont été considérées comme très petites en comparaison de la longueur du nanotube de l'équation de la courbe de déflexion. Des corrections seront maintenant données, tenant compte de l'effet des dimensions en coupe sur la fréquence. Ces corrections peuvent être d'importance considérable en étudiant les modes de la vibration des fréquences plus élevées quand un nanotube vibrant est subdivisé par les coupes nodales en parties comparativement courtes.

La théorie de Timoshenko tient compte de l'inertie de rotation et de la déformation de cisaillement dus aux vibrations dans une poutre, ce qui est considéré comme étant un modèle plus proche de la réalité que d'Euler-Bernoulli.



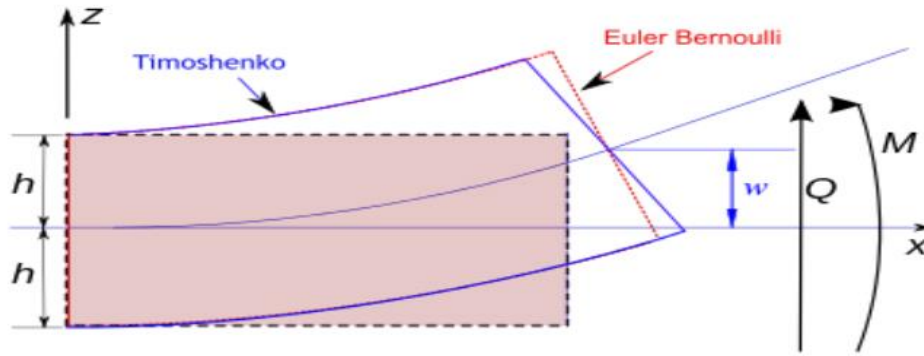


Figure.III.2 - Différence entre la déformation d'une poutre Timochenko et d'Euler Bernoulli

Les expressions de la contrainte axiale  $\varepsilon_x$  et du moment  $M$  de flexion pour le modèle de poutre de Timoshenko sont [11,12] :

$$\varepsilon_x = y \frac{\partial \psi}{\partial x} \tag{III.16}$$

$$M = \int_A y \sigma_x dA \tag{III.17}$$

Où  $\psi$  est l'angle de rotation de la section transversale et où  $y$  est la coordonnée mesurée à partir du plan médian dans le sens de la hauteur de la poutre.

Multiplier Eq. (III.2) par  $\int_A y dA$  En intégrant le résultat à la surface de  $A$  , on obtient :

$$\int_A y \sigma_x dA - (e_0 a)^2 \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA = E \int_A y \varepsilon_x dA \tag{III.18}$$

En substituant l'équation (III.16) et l'équation (III.17) à la relation constitutive non locale, l'équation (III.18) conduit à

$$\int_A y \sigma_x dA - (e_0 a)^2 \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA = E \int_A y^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} dA$$

$$\Rightarrow M - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = EI \frac{\partial \psi}{\partial x} \Rightarrow M = (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} + EI \frac{\partial \psi}{\partial x} \tag{III.19}$$

Où  $M = \int_A y \sigma_x dA$  et  $\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA$  et  $I = \int_A y^2 dA$  est le moment d'inertie

La force de cisaillement résultante sur la section transversale  $P$  et la déformation de cisaillement  $\gamma_{xz}$  sont définies par

$$\gamma_{xz} = \frac{\partial w}{\partial x} + \psi \quad (\text{III.20})$$

$$P = \int_A \tau_{xz} dA = G \int_A \gamma_{xy} dA = \beta G \gamma A \quad (\text{III.21})$$

Où  $w$  est le déplacement transversal du *SWCNT* et  $A$  est l'aire de la section transversale de la poutre. Où  $\beta$  est le facteur de forme du cisaillement dépendant de la forme de la section transversale. La valeur recommandée de  $\beta$ , le coefficient d'ajustement, est  $\frac{9}{10}$  pour une forme circulaire de la zone transversale [5].

Multiplier Eq. (III.3) par  $\int_A dA$  et en intégrant le résultat à la surface de  $A$ , on obtient:

$$\int_A \tau_{xz} dA - (e_0 a)^2 \int_A \frac{\partial^2 \tau_{xz}}{\partial x^2} dA = G \int_A \gamma_{xz} dA \Rightarrow \int_A \tau_{xz} dA - (e_0 a)^2 \int_A \frac{\partial^2 \tau_{xz}}{\partial x^2} dA = \beta G A \gamma_{xz} \quad (\text{III.22})$$

$$\text{Où } A = \int_A dA$$

En substituant l'équation (III.20) et l'équation (III.21) dans la relation constitutive non locale, l'équation (III.22) conduit à

$$\int_A \tau_{xz} dA - (e_0 a)^2 \int_A \frac{\partial^2 \tau_{xz}}{\partial x^2} dA = \beta G A \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right)$$

$$\Rightarrow P - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = \beta G A \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) \Rightarrow P = (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \beta G A \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) \quad (\text{III.23})$$

$$\text{Où } P = \int_A \tau_{xz} dA \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = \int_A \frac{\partial^2 \tau_{xz}}{\partial x^2} dA$$

Dans le cas du modèle de Timoshenko, le mouvement de vibration transverse d'une poutre élastique sous effet thermique est décrit par les équations suivantes :

$$\frac{\partial P}{\partial x} - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0 \quad \Rightarrow \frac{\partial P}{\partial x} = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad (\text{III.24})$$

$$\frac{\partial M}{\partial x} + P = \rho I \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad \Rightarrow \frac{\partial M}{\partial x} = \rho I \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - P \quad (\text{III.25})$$

Où  $\rho$  est la masse volumique du matériau,  $I$  et  $A$  sont le moment d'inertie et l'aire de la section transversale de la poutre, et  $N_t = -\alpha EA \theta$  est la force thermique.

Substitution de l'équation (III.25) dans l'équation (III.19) conduit à

$$M = (e_0 a)^2 \left[ \rho I \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - P \right) \right] + EI \frac{\partial \psi}{\partial x} \Rightarrow M = (e_0 a)^2 \left( \rho I \frac{\partial^3 \psi}{\partial x \partial t^2} - \frac{\partial P}{\partial x} \right) + EI \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

La substitution de l'équation (III.24) à l'équation (III.19) conduit à

$$M = (e_0 a)^2 \left( \rho I \frac{\partial^3 \psi}{\partial x \partial t^2} - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + EI \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (\text{III.26})$$

En substituant Eq. (III.24) dans Eq. (III.23), on peut obtenir

$$\begin{aligned} P &= (e_0 a)^2 \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) \\ \Rightarrow P &= (e_0 a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} - N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) \end{aligned} \quad (\text{III.27})$$

En substituant Eq. (III.27) dans Eq. (III.24), on peut obtenir

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[ (e_0 a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} - N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) \right] - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} &= 0 \\ \Rightarrow (e_0 a)^2 \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} - (e_0 a)^2 N_t \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \beta GA \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} &= 0 \\ \Rightarrow \beta GA \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) + \rho A \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left( (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - w \right) + N_t \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( w - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{III.28})$$

En introduisant les équations (III.26) et (III.27) dans l'équation (III.25), respectivement, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[ (e_0 a)^2 \left( \rho I \frac{\partial^3 \psi}{\partial x \partial t^2} - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + EI \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] + (e_0 a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} - N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) &= \rho I \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} (e_0 a)^2 \left( \rho I \frac{\partial^3 \psi}{\partial x \partial t^2} - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + EI \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + (e_0 a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} - N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) - \rho I \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= 0 \\ \Rightarrow (e_0 a)^2 \left( \rho I \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^2 \partial t^2} - \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} + N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) + EI \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (e_0 a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} - N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) - \rho I \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= 0 \\ \Rightarrow (e_0 a)^2 \rho I \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^2 \partial t^2} + (e_0 a)^2 \left( -\rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} + N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) + EI \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (e_0 a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial t^2} - N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right) + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) - \rho I \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= 0 \\ \Rightarrow (e_0 a)^2 \rho I \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^2 \partial t^2} + EI \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) - \rho I \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= 0 \\ \Rightarrow \rho I \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left( (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \right) + EI \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \psi \right) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{III.29})$$

Comme les extrémités du tube sont simplement supportées, la déflexion et la rotation de SWCNT par rapport à la solution périodique peuvent être écrites de manière [13]:

$$w(x, t) = \bar{W} e^{i\omega t} \sin(\lambda x) \quad \text{et} \quad \psi(x, t) = \bar{\psi} e^{i\omega t} \cos(\lambda x) \quad (\text{III.30})$$

Où  $i$  est l'unité imaginaire,  $\lambda$  le nombre d'onde  $\lambda = \frac{N\pi}{L}$ ,  $\bar{W}$  l'amplitude de la déviation de la poutre,  $\bar{\psi}$  l'amplitude de la pente de la poutre due à la déformation en flexion et  $\omega$  la fréquence du mouvement des ondes.

La substitution de l'équation (III.30) dans les équations (III.28) et (III.29) nous donne:

$$\begin{cases} \left[ -\beta AG\lambda^2 - (1 + (e_0a)^2 \lambda^2)(-\rho A\omega^2 + N\lambda^2) \right] \bar{W} + [-\beta AG\lambda] \bar{\psi} = 0 \\ [-\beta AG\lambda] \bar{W} + \left[ -\beta AG\lambda^2 - EI\lambda^2 + (1 + (e_0a)^2 \lambda^2)(\rho I\omega^2) \right] \bar{\psi} = 0 \end{cases} \quad (\text{III.31})$$

L'équation (III.31) sous forme matricielle nous donne :

$$\begin{bmatrix} \left[ -\beta AG\lambda^2 - (1 + (e_0a)^2 \lambda^2)(-\rho A\omega^2 + N\lambda^2) \right] & [-\beta AG\lambda] \\ [-\beta AG\lambda] & \left[ -\beta AG\lambda^2 - EI\lambda^2 + (1 + (e_0a)^2 \lambda^2)(\rho I\omega^2) \right] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{W} \\ \bar{\psi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III.32})$$

Le déterminant de cette matrice nous donne :

$$\begin{aligned} & \rho^2 AI(1 + e_0a^2 \lambda^2)\omega^4 - \rho(1 + e_0a^2 \lambda^2)(NI\lambda^2(1 + e_0a^2 \lambda^2) + \beta A^2G + EIA\lambda^2 + \beta AGI\lambda^2)\omega^2 + \\ & NI\lambda^2(1 + e_0a^2 \lambda^2)(\beta AG + EI\lambda^2) + \beta AGEI\lambda^4 = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.33})$$

La solution de l'équation (4.43) nous donne:

$$\omega_{NT} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( a \pm \sqrt{a^2 - 4\beta} \right)} \quad (\text{III.34})$$

Où

$$a = \frac{N_i \lambda^2}{\rho A} + \frac{(\beta G + E) I \lambda^2 + \beta AG}{\rho I (1 + (e_0a)^2 \lambda^2)}$$

et

$$\beta = \frac{E\beta G\lambda^4}{\rho^2 (1 + (e_0a)^2 \lambda^2)^2} + N_i \lambda^2 \frac{(EI\lambda^2 + \beta AG)}{\rho^2 IA (1 + (e_0a)^2 \lambda^2)}$$

### III.4 La Structure atomique de nanotube de carbone monoparoi (SWCNT) :

Les nanotubes de carbone monoparoi (SWCNT) sont générés en enroulant une feuille de graphène dans un cylindre sans soudure. La structure fondamentale des nanotubes

de carbone peut être classée sous trois catégories comme zigzag, armchair et chiral en terme du vecteur chiral  $\vec{C}_h$  et l'angle chirale  $\theta$  donnée dans (Figure.III.3).

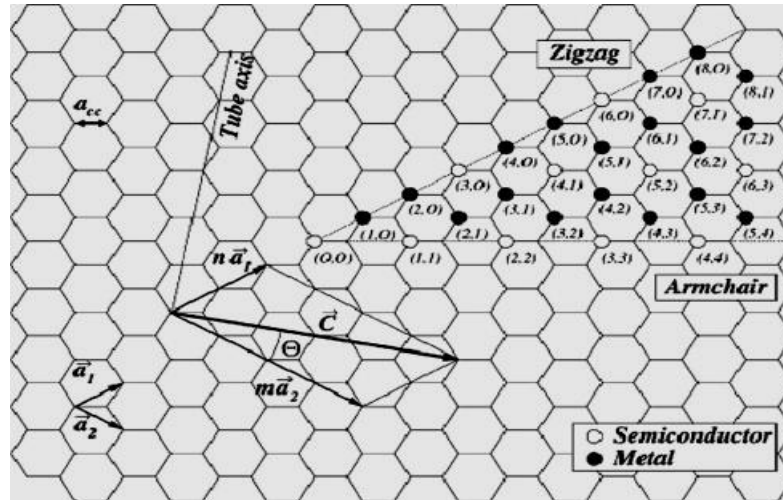


Figure.III.3 Le diagramme 2D en feuille de graphène montrant une classification de structure vectorielle utilisée pour définir la structure de CNT [19].

Le vecteur chiral est défini comme indiqué dans l'équation ci-dessous [14,15]

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \tag{III.35}$$

Où:  $\vec{a}_1$  et  $\vec{a}_2$  sont les vecteurs de cellules unitaires du réseau bidimensionnel formé par les feuilles de graphène, la paire d'entiers  $n$  et  $m$  représente les indices de translation, qui décident de la structure du nanotube de carbone autour de sa circonférence. La direction de l'axe des CNTs est perpendiculaire à ce vecteur chiral. Par exemple; pour produire un CNT avec les indices (6,3), disons, la feuille est enroulée de sorte que l'atome marqué (0,0) se superpose à celui marqué (6,3). L'angle entre le vecteur chiral et le zig-zag des nanotubes est l'angle chirale.

La relation entre les nombres entiers ( $n, m$ ) et l'angle chirale est donnée par [16]

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}}\right) \quad \theta = \sin^{-1}\left(\frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}}\right) \tag{III.36}$$

$$\theta = \tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{3}m}{2n+m}\right)$$

En fonction de l'indice de chiralité et la l'angle chirale, les CNTs peuvent être classés en structures en zigzag et en armchair, comme indiqué sur la Figure.III.3 et la Figure III.4 Pour les CNTs de type armchair, les indices chiraux  $n$  et  $m$  sont égaux

( $n = m$ ) et  $\theta = 30^\circ$ , tandis que pour les CNTs de type zigzag,  $m = 0$  et  $\theta = 0^\circ$ . Pour les autres valeurs d'indices ( $n \neq m$ ), les CNTs sont connus sous le nom de chiral et  $0^\circ < \theta < 30^\circ$ . La longueur du vecteur unitaire  $a$  est définie comme  $a = \sqrt{3}a_{C-C}$  avec la longueur de la liaison covalente carbone - carbone (C-C) à l'équilibre habituellement et qui est égale à  $0.1421 \text{ nm}$  [17].

La relation entre les entiers ( $n, m$ ) et le rayon du nanotube est donnée comme suit :

$$r = a \frac{\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{2\pi} \quad (\text{III.37})$$

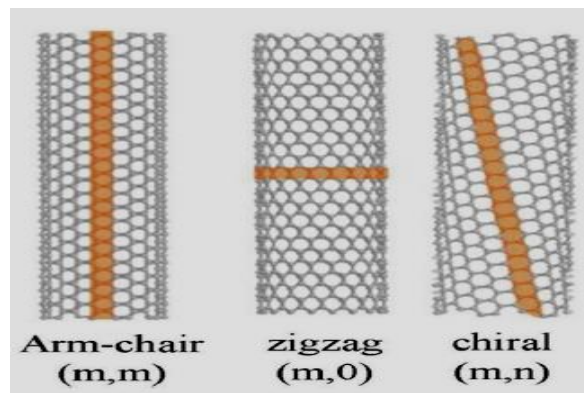
La circonférence ( $P$ ) du nanotube a été définie par:

$$P = |C_h| = a\sqrt{n^2 + nm + m^2} \quad (\text{III.38})$$

A partir d'une géométrie simple, il est possible d'obtenir le diamètre ( $d$ ) de nanotube de la manière suivante:

$$d = \frac{P}{\pi} = a \frac{\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{\pi} \quad (\text{III.39})$$

Selon leurs différentes structures, les CNTs peuvent présenter des propriétés métalliques ou semi-conductrices. En satisfaisant la condition  $n - m = 3i$  (où  $i$  est un entier), les CNTs de type armchair sont toujours métalliques, alors que les CNTs en zigzag sont de nature métallique ou semi-conductrice [18]. Statistiquement le type chiral des CNTs son mélange naturel aura  $1/3$  métalliques et  $2/3$  semi-conductrices [18].



**Figure.III.4** Structure des CNTs avec différentes chiralités: armchair, zigzag et chiral. [20]



### **III.5 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons vu les différentes théories et modèles des milieux continus basé sur la théorie nonlocal délasticité à savoir la théorie non locale d'Euler-Bernoulli et la théorie non locale de Timoshenko. Après que nous avons formulé les équations utilisées dans les différents calculs des nanotubes de carbones que nous avons choisi avec détails et précisions, ainsi que les données des dimensions théoriques et expérimentales, nous allons enfin passer au dernier chapitre pour exposer nos résultats et essayer de les expliquer en détail.

**Références**

- [1] A.C. Eringen, *Int. J.Eng. Sci.* 10 (1972) 1.
- [2] A.C. Eringen, *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 4703.
- [3] H. Dai, J.H. Hafner, A.G. Rinzler, D.T. Colbert, R.E. Smalley, *Nature* 384 (1996) 147.
- [4] P. Dharap, *Nanotechnology* 15 (2004) 379.
- [5] S.P. Timoshenko, *Philos. Mag.* 41(1921) 744.
- [6] J.F. Doyle, *Wave Propagation in Structures*, 2nd ed. (Springer, New York, 1997).
- [7] A.Benzair, A.Tounsi, A.Besseghier, H.Heireche, N. Moulay , L. Boumia, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 41 (2008) 225404.
- [8] J.C. Hsu ,P.C.Chang ,W.J.Chang. *Phys. Lett .A* 372 (2008) 2757.
- [9] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. Adda Bedia, *Sound wave propagation in single-walled carbon nanotubes using nonlocal elasticity*, *Physica E* 40 (2008) 2791–2799.
- [10] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, *Nanotechnology* 19 (2008) 185703.
- [11] Y. Tokio, *Synth. Met.* 70 (1995) 1511.
- [12] C. M. Wang, J. N. Reddy ,K.H.Lee ,*Shear Deformable Beams and Plates: Relationships with Classical Solutions*;2000 (Oxford: Elsevier).
- [13] Y.Zhao ,C.C. Ma ,G. Chen,Q. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 175.
- [14] R.Vajtai,*Springer Handbook of Nanomaterials* (2013).
- [15] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito, *Carbon*, 33 (1995) 883.
- [16] M. S. Dresselhaus, Y. M. Lin, O. Rabin, A. Jorio, A. G. Souza Filho, M. A. Pimenta, R.Saito, G. Samsonidze, and G. Dresselhaus. *Mat. Sci. Eng. C*23 (2003) 129.
- [17] J. Wildoer, L. Venema, A. Rinzler, R. Smalley, C. Dekker, *Nature* 391 (1998) 59
- [18] B.K. Kaushik and M.K. Majumder, *Carbon Nanotube Based VLSI Interconnects*, *SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology*,2015.
- [19] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund,*Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, New York, USA (1996).
- [20] ] L. Boumia, M.Zidour, A.Benzair, A.Tounsi, *Physica E* 59(2014)186.

# Chapitre V

## *Resultats et discussion*

## Chapitre V : Résultats et discussion

### V.1) Introduction :

Les propriétés vibratoires des nanotubes mono parois *SWCNTs* sont discutées dans cette section. En se basant sur les formulations développées dans le chapitre *III* avec le modèle non locale de Timoshenko, les effet du paramètre d'échelle, du nombre de mode de vibration, l'effet de la chiralité des *SWCNTs*, le rapport de dimension des *SWCNTs* et les changement de la température sur les propriétés des vibration des *SWCNTs* sont discutés ici.

### V.2) Données :

En se basant sur la simulation de dynamique moléculaire (*MD*), les modules de Yong utilisés dans ce travail pour les trois types de nanotubes monocouche *SWCNTs* (armchair, zigzag, chiral) sont calculés par Bea et al [1].

Bea et al [1] indiquent que les valeurs moyennes du module de Young étaient respectivement de  $935,805 \pm 0,618 \text{ GPa}$ , de  $935,287 \pm 2,87 \text{ GPa}$  et de  $918,309 \pm 10,392 \text{ GPa}$  pour les *SWCNTs* Armchair, Zigzag et Chiral (Table V.1). Ces résultat montrent que les modules de Yong de *SWCNT* sont faiblement affectés par le rayon et la chiralité du tube. la raison de phénomène est attribuée aux faibles forces de van der waals entre les tubes interne et externe. Les résultats numériques donnés par l'approche de *MD* sont en bon accord avec les résultats expérimentaux [2,3].

Comme indiqué par jiang et al [4], les coefficients de dilatation thermique pour les nanotubes de carbone *CNTs* sont négatifs a basse température ou a la température ambiante et devenir positifs a haute température par conséquent, les valeurs du rapport  $\chi_{th}$  été calculée pour les deux cas de basse température et haute température. Pour le cas de basse température, On suppose  $\alpha = -1.6 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  et pour le cas de haute température, on prend  $\alpha = 1.1 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  [5, 6, 7].

Sous l'effet de la température les coefficients de dilatation thermique des nanotubes de carbone sont considérées comme une fonction de changement de la température [8]  $a = a^0 (1 + 0.002\theta)$  Ou  $a^0$  est le coefficient de dilatation thermique du nanotube de carbone dans le cas de la température de référence d'environnement.

Table V. 1: listes des valeurs des modules d' Young pour différentes rayons de tube et différentes chiralités en utilisant la simulation de la MD (Bao et al, 2004) [1].

(n,m)	Radius(nm)	Young's modulus E(GPa)
<b>Armchair</b>		
(8, 8)	0.542	934.960
(10, 10)	0.678	935.470
(12, 12)	0.814	935.462
(14, 14)	0.949	935.454
(16, 16)	1.085	939.515
(18, 18)	1.220	934.727
(20, 20)	1.356	935.048
<b>Zigzag</b>		
(14, 0)	0.548	939.032
(17, 0)	0.665	938.553
(21, 0)	0.822	936.936
(24, 0)	0.939	934.201
(28, 0)	1.096	932.626
(31, 0)	1.213	932.598
(35, 0)	1.370	933.061
<b>Chiral</b>		
(12, 6)	0.525	927.671
(14, 6)	0.696	921.616
(16, 8)	0.828	928.013
(18, 9)	0.932	927.113
(20, 12)	1.096	904.353
(24, 11)	1.213	910.605
(30, 8)	1.358	908.792

Comme définie par Eringen,  $e_0$  est une constante appuyée à chaque matériau. Le paramètre  $e_0$  a été donné comme 0.39 par Eringen [9].

Une estimation conservatrice du paramètre non local  $0nm \leq e_0a \leq 2nm$  pour SWCNTs est proposée par Wang et al [10] par les modèles non locaux continus.

Le produit  $e_0a$  et  $e_0$  seul on été évalués par Wang [11,12], en utilisant la valeur asymptotique de la fréquence du *DWCNTs*  $\omega = \frac{1}{e_0a} \sqrt{\frac{E}{\rho}}$  Dérivées de l'analyse de propagation des ondes par le modèle non local Timoshenko avec  $\rho$  est la masse volumique des nanotubes de carbone. Sur la base de l'équation de fréquence, Wang a trouvé le paramètre non local  $e_0a < 2.1nm$  pour *CNTs* en substituant la fréquence de vibration expérimentale disponible  $0.1 THz$  [13] ou  $e_0a > 2.1nm$  en supposant que la valeur de fréquence mesurée par *CNT* est supérieure à  $10 THz$ , d'après l'observation de Yoon et al [14].

En utilisant le modèle Euler-Bernoulli, Tonsi et al [15] ont étudié l'effet de paramètre non local sur la propagation des ondes dans les nanotubes a double paroi (*DWCNTs*) sous le champ de la température et utilisé les valeurs du paramètre non local sont  $0nm \leq e_0a \leq 2nm$  pour leur analyse.

Il est clair que' une large gamme de valeur pour le paramètre non local  $e_0a$  est possible en raison de différentes fréquences de vibrations. Par conséquent, dans cette étude, les paramètres non locaux sont des valeurs à l'intervalle  $0nm \leq e_0a \leq 5nm$  pour étudier les effets non locaux sur les réponses des *SWCNTs*.

Les paramètres utilisés dans le calcul des *SWCNTs* sont donnés comme suit :

- l'épaisseur effective des *CNTs* est prise égale à  $0.34 nm$  [1].
- la masse volumique  $\rho=2.3g/cm$  [16]
- le coefficient de poisson  $\nu=0.25$  [16].
- le module de cisaillement peut être déterminé à partir de la relation  $G = \frac{0.5E}{(1+\nu)}$  [17]

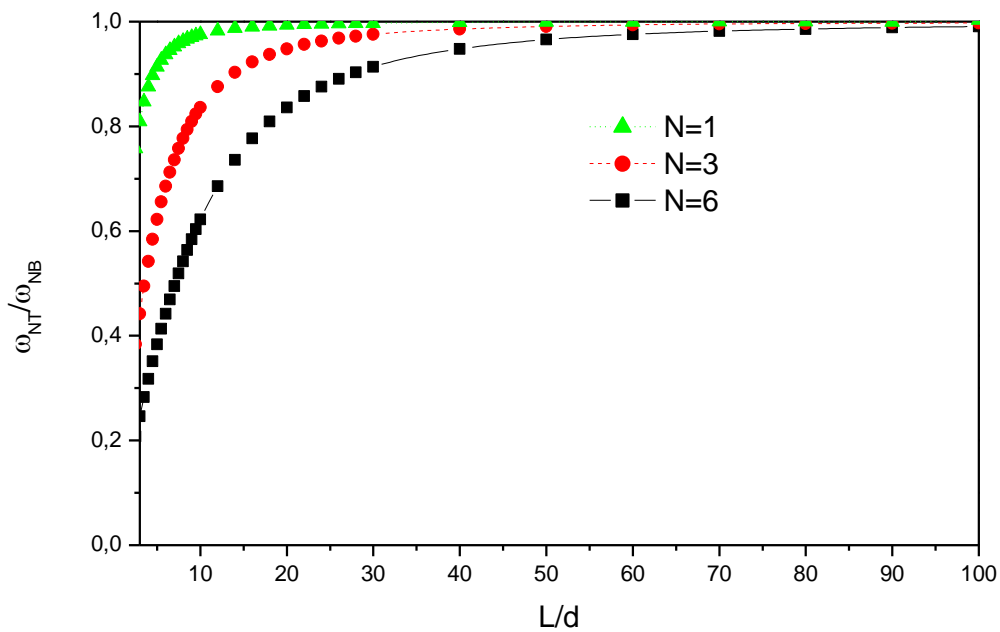
Les rapports des résultats avec le changement de la température et le paramètre non local à ceux qui n'ont pas de changement de température ou d'un paramètre non locale sont respectivement données par:

$$\chi_N = \frac{\omega_{NT}}{\omega_{LT}}, \chi_{th} = \frac{\omega_{NT}}{\omega_{NT}^0} \tag{V.1}$$

Ou  $(\omega_{NT}, \omega_{LT})$  sont les fréquences d'un nanotube de carbone monocouche basées sur le modèle non local (*NT*) et local Timoshenko (*LT*) respectivement incluent l'effet thermique, et la fréquence  $\omega_{NT}^0$  est basée sur modèle non local Timoshenko sans effet thermique.



Dans la présente étude, figure V.1 Les valeurs des rapports de fréquence ( $\omega_{NT}/\omega_{NE}$ ) du nanotube de carbone de type zigzag (14,0) en utilisant le modèle nonlocal de Timoshenko (NT) et le modèle nonlocal d'Euler (NB) en fonction du rapport longueur/diamètre pour différents nombre de mode (N) obtenue avec un coefficient de petite échelle ( $e_0a=2nm$ ). Il peut être conclu à partir de cette figure V.1 que la différence entre les résultats prédits par le modèles précédent est négligeable pour  $L/d > 20$  est pour un nombre de mode fondamental ( $N=1$ ). Cela est du au fait que l'effet de cisaillement est négligeable pour de long nanotubes.



**Figure V.1 :** Les valeurs du rapport de fréquence ( $\omega_{NT}/\omega_{NE}$ ) du nanotube de carbone de zigzag (14,0), en fonction du rapport longueur/diamètre pour différents nombre de mode(N) obtenue en utilisant le modèle nonlocal de Timoshenko (NT) et le modèle nonlocal d'Euler, le paramètre d'échelle est égale à ( $e_0a=2nm$ ). [16]

Figure V.2 présente les valeurs des rapports des fréquences  $\chi_N$  du nanotube de carbone de type amchair (8,8) obtenue en utilisant le modèle non local de Timoshenko en fonction du rapport (*longueur/diamètre*) pour différentes des modes (N) avec un coefficient de petite échelle ( $e_0a=1$ ). Il peut être vu à partir de cette figure V.2 que l'effet non local est négligeable pour le mode fondamental ( $N=1$ ). Cependant, cet effet non local devient plus important pour les modes vibration élevés ( $N=48$ ). Cette importance dans les modes supérieures est attribuée à l'influence de la petite longueur d'onde. Si le nombre de mode

augmente la longueur d'onde démunie et les interactions entre les atomes augmentent et cela conduit a une augmentation de l'effet non local.

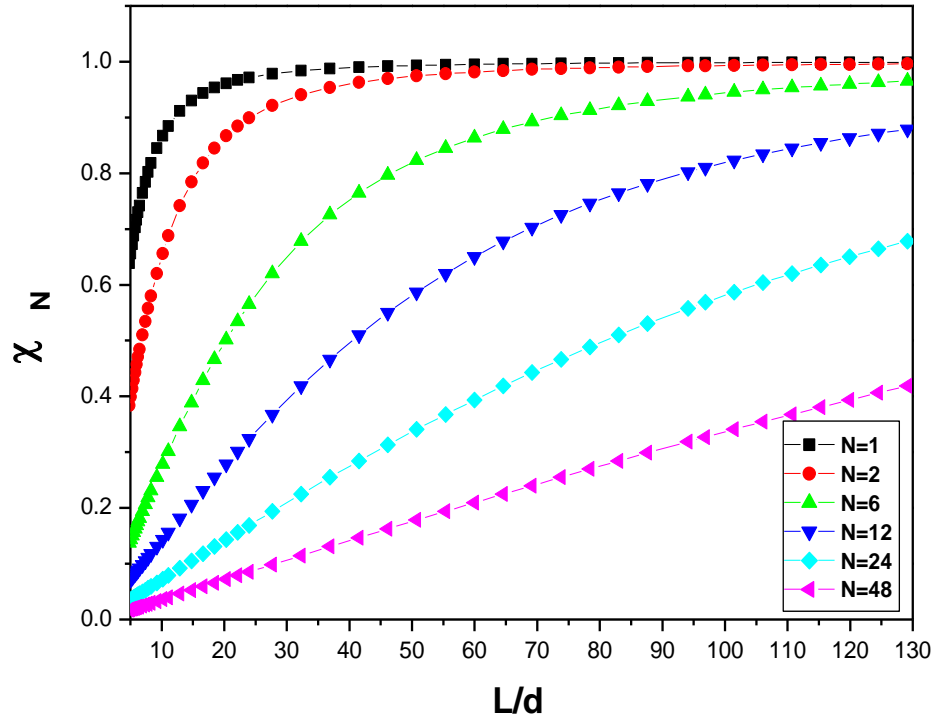
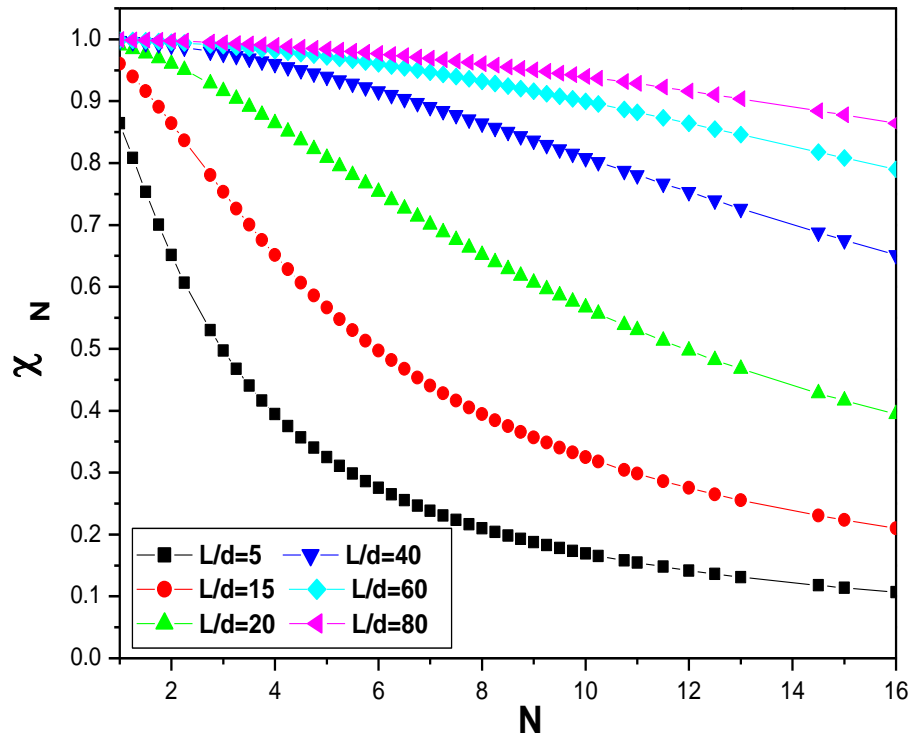


Figure V.2 : Les valeurs du rapport de fréquence  $\chi_N = \omega_{NT} / \omega_{LT}$  de nanotube de carbone de type armchair (8,8), en fonction du rapport longueur/diamètre pour différents nombre de mode(N) obtenue en utilisant le modèle non local de Timoshenko, le paramètre d'échelle est égale à ( $e_0 a = 1nm$ ).

La figure V.3 illustre la relation entre les rapportes des fréquences  $\chi_N$  est nombre des modes de vibration (N) de nanotube de carbone de type armchair (8,8) pour différents valeurs du rapport ( $L/d$ ).

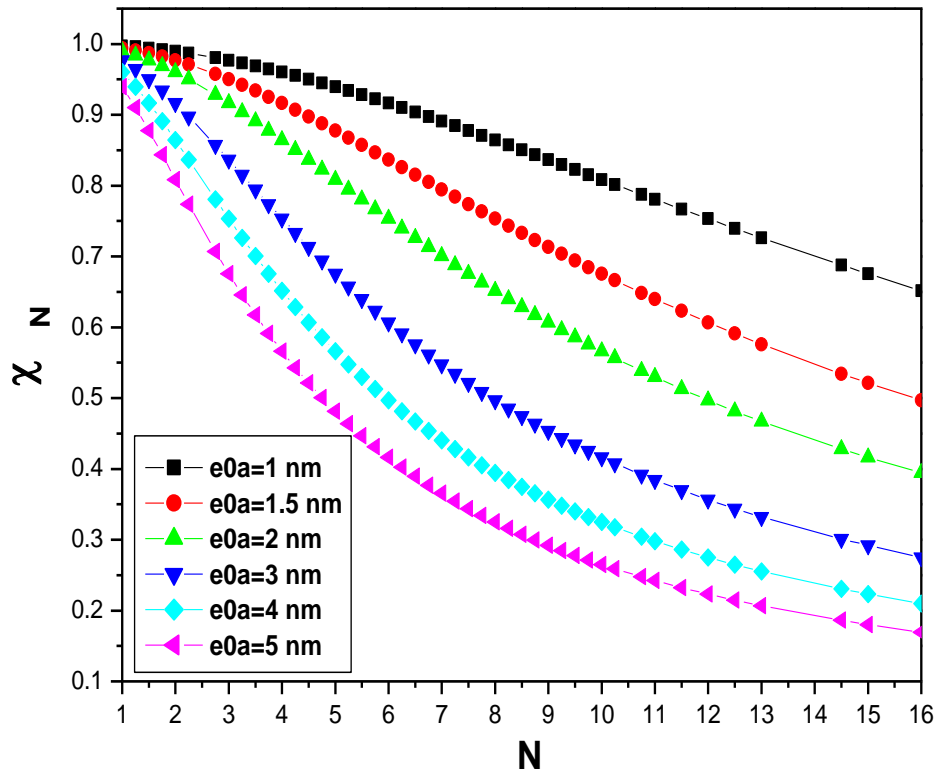
On voit clairement dans la figure V.3 que l'effet non local augmente si le nombre du mode augmente (N). Dans d'autres, il peut être vu a partir de cette figure V.3 que le rapporte de fréquence  $\chi_N$  se rapproche pratiquement unité pour les longs tubes ( $L/d > 80$ ).

Contrairement pour les court CNTs ( $L/d = 5$ ), les rapportes des fréquences sont inférieurs a l'unité et en particulier pour les modes de vibration plus élevés.



**Figure V.3 :** Relation entre les valeurs du rapport  $\chi_N$  et les nombres de mode ( $N$ ) pour différents valeur du rapport  $L/d$  du nanotube de carbone armchair (8,8). La valeur de  $e_0a$  est égale à  $1nm$ .

La figure V.4 montrent la dépendance des rapports de fréquence  $\chi_N$  avec le mode de vibration  $N$  de nanotube de carbone armchair (8,8) pour différentes valeurs du paramètre d'échelle avec le rapport  $L/d=40$  et le paramètre d'échelle  $e_0a = 1 ; 2 ; 3 ; 4$  et  $5 nm$ . Il est clairement constaté à partir de cette figure que les rapports des fréquences  $\chi_N$  sont inférieurs à l'unité pour différents du paramètre d'échelle. Cela signifie que l'application du modèle local du Timochenko pour l'analyse CNT conduira une surestimation de la fréquence si l'effet d'échelle entre les atomes de carbone individuels dans les CNT est négligé. On voit également dans la figure V.4 que le rapport de fréquences  $\chi_N$  diminue si la valeur de paramètre d'échelle  $e_0a$  augmente. Cette réduction est spécialement significative pour les modes élevés de vibration.



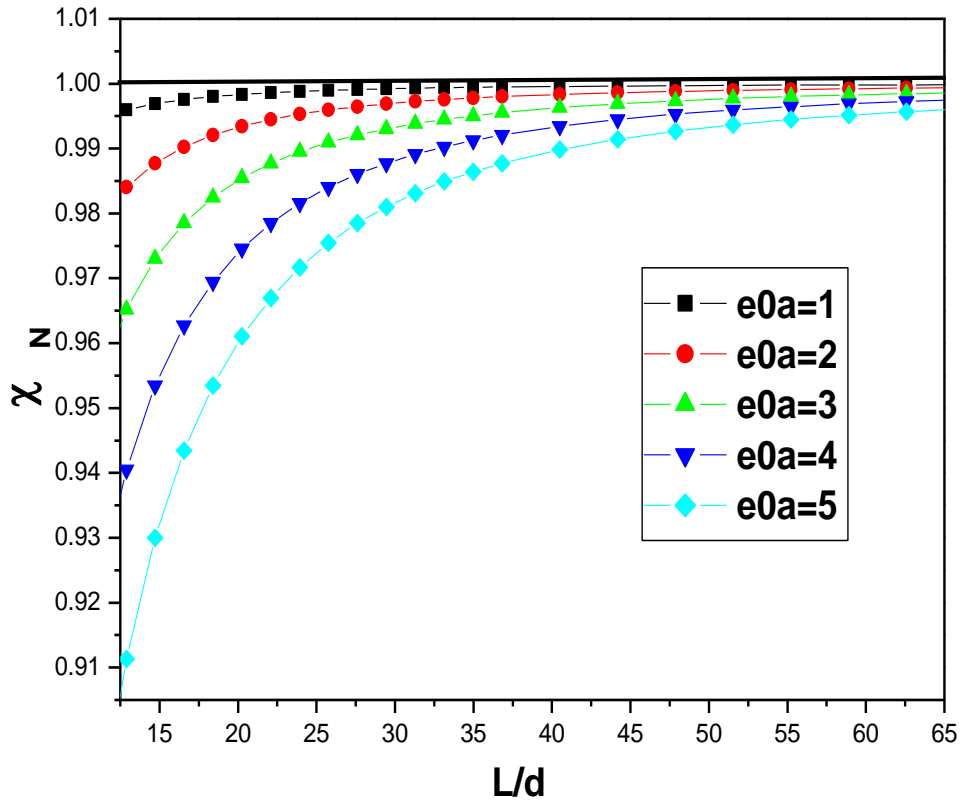
**Figure V.4:** Relation entre les valeurs du rapport  $\chi_N$  et les nombres de mode ( $N$ ) pour différents valeur de la petite échelle  $e_0a$  du nanotube de carbone armchair (8,8). La valeur de  $L/d$  est égale à 40.

Les valeurs du rapport  $\chi_N$  de SWCNT type armchair (8,8) avec différentes valeurs des modes de vibration et du paramètre d'échelle pour  $L/d = 20$  et  $L/d = 40$  basés sur le modèle de Timochenko non local sont répertoriées dans le table V.2.

**Table V. 2:** listes des valeurs des rapports de fréquence  $\chi_N$  pour différentes nombre de mode de vibration ( $N$ ), paramètre non local  $e_0a$  et les rapports  $L/d$  du nanotube de carbone type armchair (8,8) en utilisant le modèle nonlocal de Timoshenko.

N	$L/d = 20$			$L/d = 40$		
	$e_0a = 1nm$	$e_0a = 1.5nm$	$e_0a = 2nm$	$e_0a = 1nm$	$e_0a = 1.5nm$	$e_0a = 2nm$
1	0,98957	0,97698	0,96014	0,99736	0,99409	0,98957
2	0,96014	0,91643	0,86418	0,98957	0,97698	0,96014
3	0,91643	0,83651	0,75318	0,97698	0,95033	0,91643
4	0,86418	0,75318	0,65148	0,96014	0,91643	0,86418
5	0,80853	0,67545	0,56624	0,93971	0,87774	0,80853
6	0,75318	0,60675	0,49683	0,91643	0,83651	0,75318
7	0,70044	0,5475	0,44052	0,89102	0,79455	0,70044
8	0,65148	0,49683	0,39453	0,86418	0,75318	0,65148
9	0,60675	0,45353	0,35657	0,83651	0,7133	0,60675
10	0,56624	0,4164	0,32486	0,80853	0,67545	0,56624
11	0,52971	0,38437	0,29807	0,78064	0,6399	0,52971
12	0,49683	0,35657	0,27519	0,75318	0,60675	0,49683
13	0,46722	0,33228	0,25546	0,72639	0,57598	0,46722
15	0,4164	0,29202	0,22322	0,67545	0,52116	0,4164
16	0,39453	0,27519	0,2099	0,65148	0,49683	0,39453

La figure V.5 illustrent la dépendance du rapport de fréquences  $\chi_N$  avec le rapport  $L/d$  pour différentes valeurs du paramètre d'échelle avec  $N = 1$ . Les rapports de fréquences  $\chi_N$  diminue avec l'augmentation du paramètre d'échelle et devient moins important avec l'augmentation du rapport  $L/d$  cela est montre dans la figure V.5. Par conséquent, il est clair que l'effet à petit échelle est important pour les nanotubes courts.



**Figure V.5:** Relation entre les valeurs du rapport  $\chi_N$  et les rapports  $L/d$  pour différentes valeur de la petite échelle  $e_0a$  du nanotube de carbone chiral (30,8). La valeur de  $N$  est 1.

La figure V.6 illustre la dépendance de rapports de fréquence  $\chi_N$  avec les valeurs de paramètre non local des SWNTs type zigzag (21,0). Le nombre de mode de vibration  $N$  et égale de 2. On Voit clairement dans la figure V.6 que le rapport des fréquences  $\chi_N$  obtenues par le modèle non local de Timochenko deviennent inferieure a celle des fréquences du modèle local, Si le paramètre d'échelle  $e_0a$  augmente .Cette réduction est spécialement significative pour les



nanotubes *CNTs* courts ( $L/d = 5$ ). Tandis que l'effet de paramètre d'échelle est négligeable et devient moins importante pour les nanotubes *CNTs* longs ( $L/d = 90$ ).

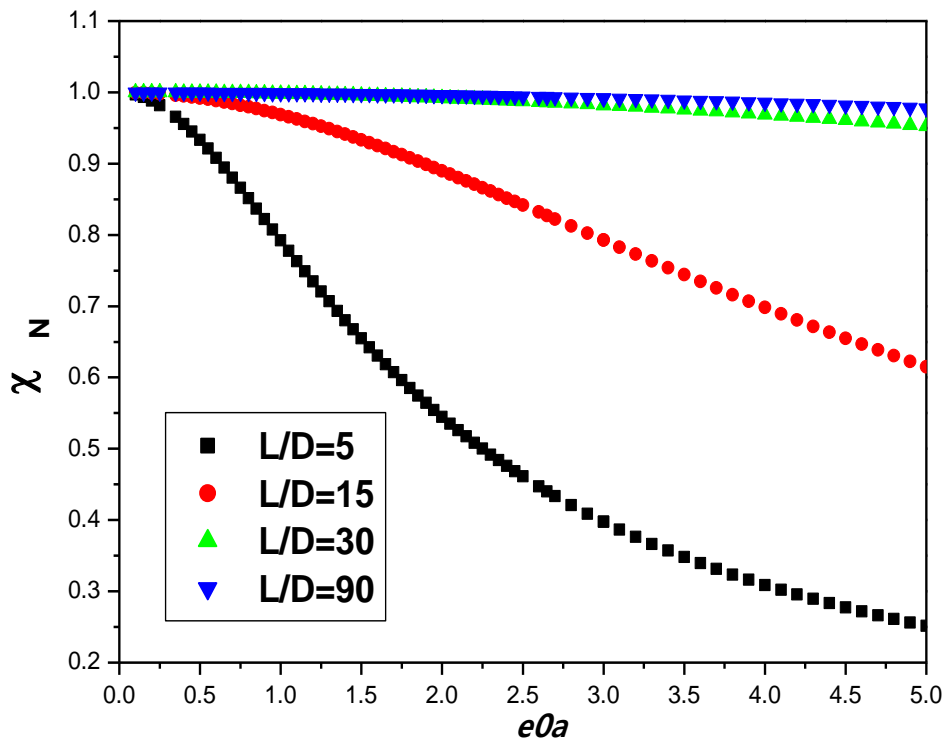


Figure V.6: Relation entre les valeurs du rapport  $\chi_N$  et les petites échelles  $e_0a$  pour différents valeur du rapport  $L/d$  du nanotube de carbone zigzag (21,0). La valeur de  $N$  est 2.

La figure V.7 montre la variation du rapport de fréquences  $\chi_N$  avec les valeurs du rapport ( $L/d$ ) pour diverses chiralités de *SWCNT* (Armchair, Zigzag et Chiral) avec le nombre de mode ( $N = 2$ ) et le paramètre d'échelle ( $e_0a = 2\text{ nm}$ ). D'après cette figure V.7 on observe qu'il ya une influence significative de la chiralité ou le diamètre de *SWCNT* sur le rapport de fréquences  $\chi_N$  et sur l'effet non locale.

L'effet échelle augmente en passant de chiral (30,8) au zigzag (28,0) puis en armchair (10,10) lorsque le diamètre du nanotube diminue. Comme toujours, pour les nanotubes de carbone avec les plus petites valeurs de diamètre, Cette dépendance devient très élevée. La raison de ce phénomène est que le *CNT* avec un diamètre plus petit, la longueur d'onde diminue et les interactions entre les atomes augmentent donc l'effet non locale augmente.

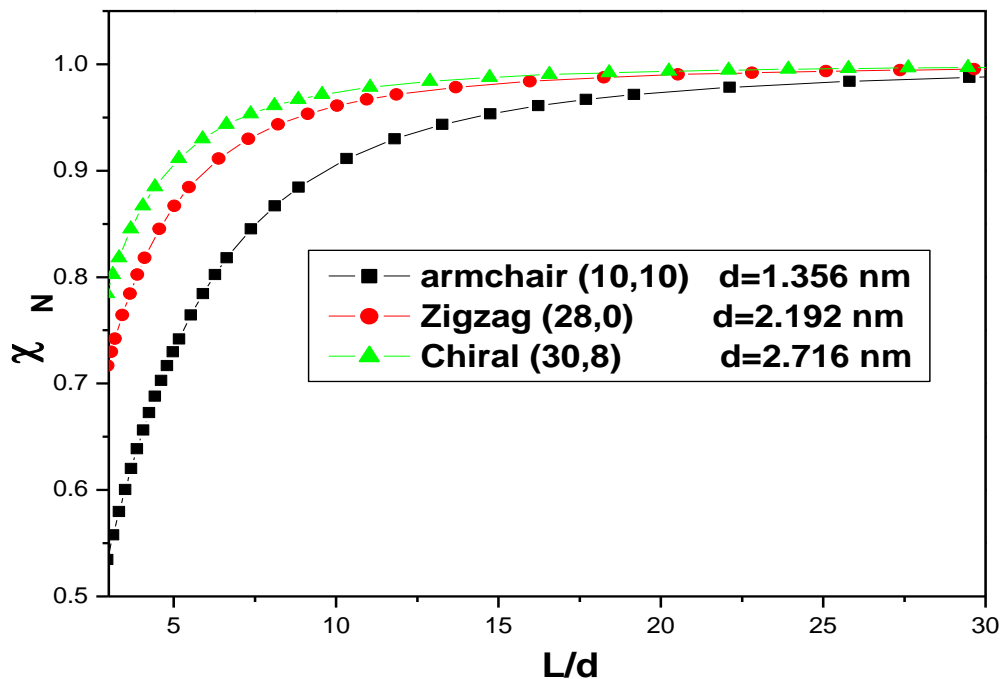


Figure V.7: l'effet du rapport de dimension  $L/d$  et la chiralité sur les valeurs du rapport  $\chi_N$  du SWCNT avec  $N=2$  et  $e_0a = 1nm$ .

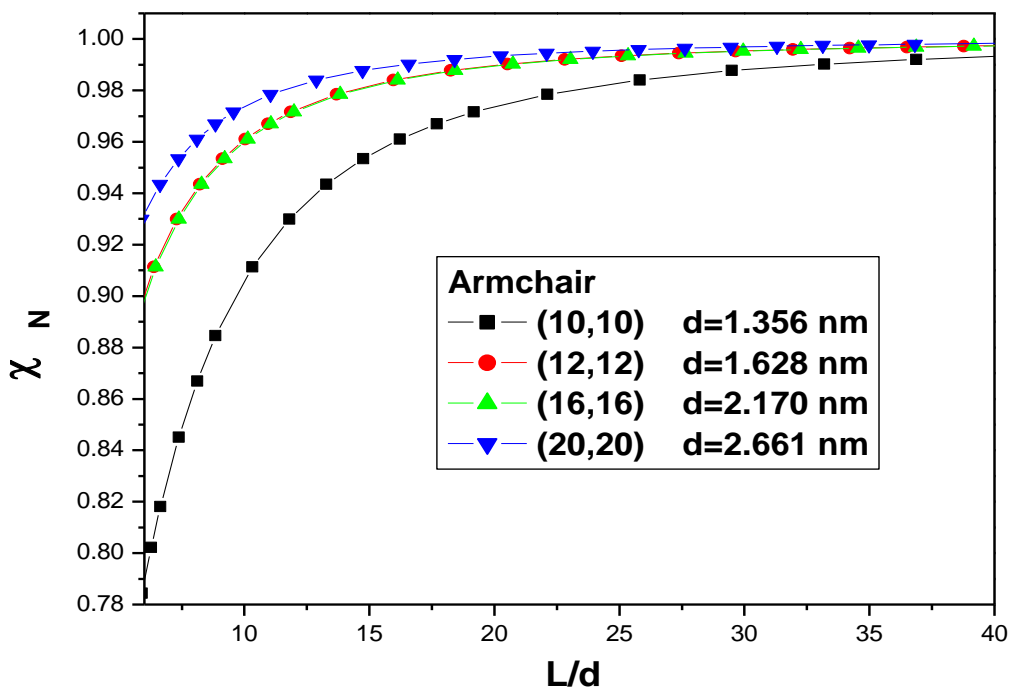
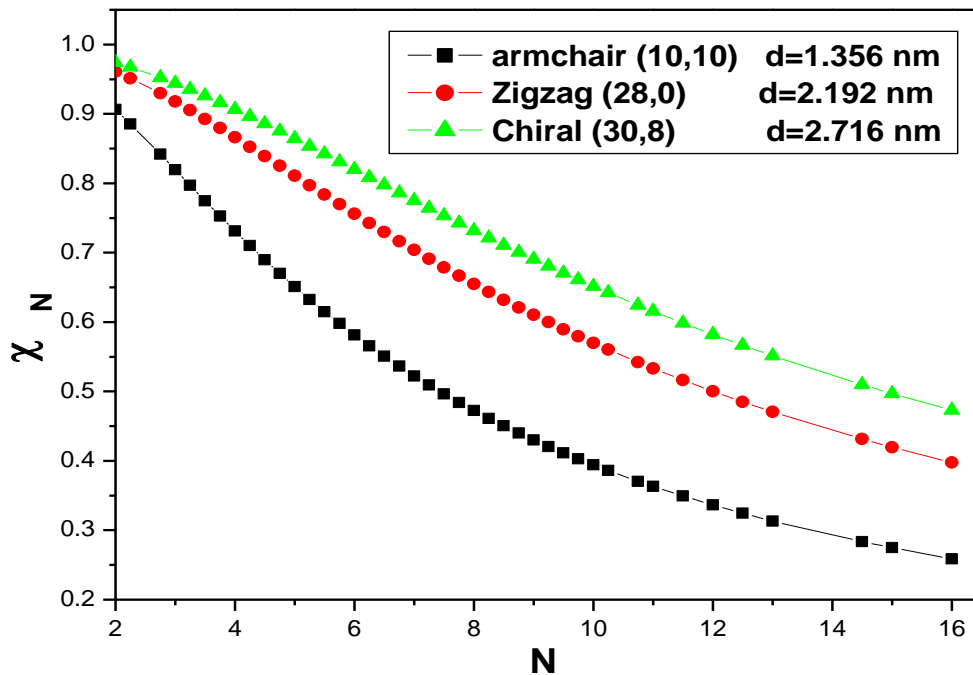


Figure V.8: l'effet du rapport  $L/d$  sur les valeurs du rapport  $\chi_N$  pour différente chiralité  $(n, m)$  du SWCNT type armchair avec  $N=2$  et  $e_0a = 1nm$ .

La figure V.8 montre la dépendance du rapport de fréquences  $\chi_N$  avec les valeurs du rapport  $L/d$  pour SWCNT de type armchair avec une différente chiralité  $(n, m)$ . Il va clairement sur ce figure que, pour un nanotube de type armchair avec une chiralité  $(n, m)$  et un diamètre plus petit, la dépendance devient très fort. Comme toujours, pour les nanotubes de carbone avec un diamètre plus petit présente une courbure plus grande, ce qui entraine une déformation plus importante de la liaison C-C .

La figure V.9 présente l'effet de nombre de mode (N) sur les valeurs du rapport de fréquences  $\chi_N$  du SWCNTs pour différente chiralité avec un diamètre (d) différente. Le paramètre d'échelle  $(e_0a = 1nm)$  et  $N = 2$ . On voit clairement dans la figure V.9 que le rapport de fréquence  $\chi_N$  diminue et l'effet non local augmente. Cette importance de l'effet non local dans les modes les plus élevés est attribuée à l'influence de petite longueur d'onde. Si le nombre de mode augmente la longueur d'onde diminue et les interactions entre les atomes augmentent et cela conduit a une augmentation de l'effet non local.



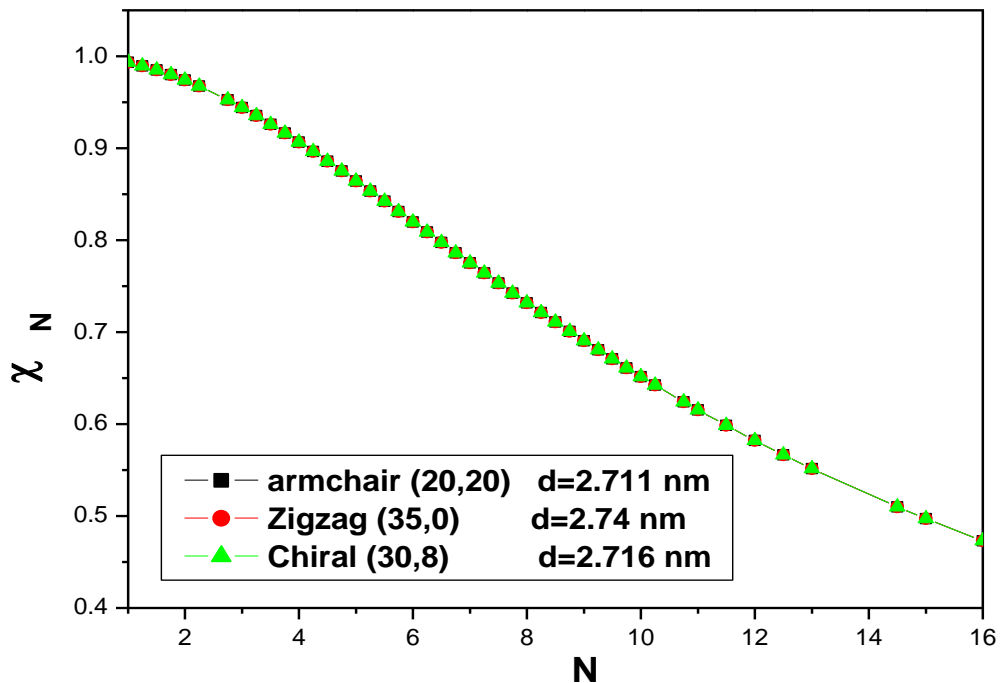
**Figure V.9:** l'effet de nombre de mode(N) sur les valeurs du rapport  $\chi_N$  pour différente chiralité  $(n, m)$  du SWCNTs avec un diamètre (d) différente. Le paramètre d'échelle  $(e_0a = 1nm)$  et  $N = 2$

La figure V.10 montre les valeurs du rapport de fréquences  $\chi_N$  pour différents nombres de mode ( $N$ ) et différentes chiralités des SWCNTs avec un diamètre identique, le paramètre d'échelle ( $e_0a = 1nm$ ) et  $N = 2$ .

Il est clairement vu depuis la figure V.10 qu' comme le nombre de mode de vibration augmente l'effet non local sur les rapports de fréquence  $\chi_N$  augmente.

D'une autre partie, il est clair selon la figure V.10 que les valeurs du rapport  $\chi_N$  pour différentes chiralité de nanotube de carbone avec le même rayon son identique.

En comparant Figure V.9 et figure V.10, les valeurs de rapport  $\chi_N$  sont indépendantes des indices de chiralité ( $n,m$ ) de CNT mais dépendent des diamètres de CNT.



**Figure V.10:** l'effet de nombre de mode( $N$ ) sur les valeurs du rapport  $\chi_N$  pour différente chiralité ( $n, m$ ) du SWCNTs avec un diamètre ( $d$ ) identique.  $N=2$  et  $e_0a = 1nm$ .

L'effet des paramètres d'échelle sur les valeurs des rapports  $\chi_N$  pour différentes chiralités de nanotubes de carbone SWCNT est démontré dans la figure V.11 avec un rapport  $L/d = 10$  et le nombre de mode  $N = 2$ .

On voit clairement dans figure V.11 que les valeurs de rapportes des fréquences  $\chi_N$  pour ces chiralités des SWCNTs sont tout à fait différente, la gamme est la plus petit pour armchair

(10,10), mais la gamme est la plus grande pour chiral (30,8). La raison de cette différence et peut être attribuée de l'augmentation ou de la diminution du diamètre des nanotubes de carbone. On outre, lorsque les effets de paramètre d'échelle ne sont pas en compte, le rapport de fréquences se rapproche pratiquement l'unité. par conséquent, il est clair que les valeurs des rapports de fréquence  $\chi_N$  diminuent pour des valeurs croissantes de paramètre d'échelle. Cette variation démontre la précision de la théorie de modèle non local.

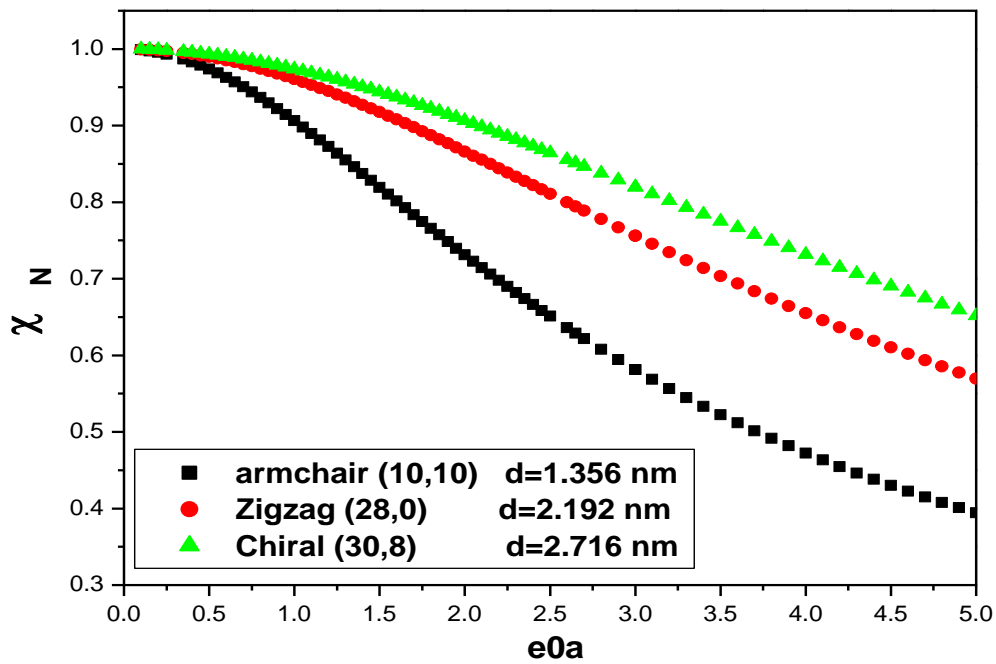


Figure V.11: l'effet du paramètre d'échelles  $e_0a$  sur les valeurs du rapport  $\chi_N$  pour différente chiralité  $(n, m)$  du SWCNT avec  $L/d = 10$  et  $N=2$ .

La relation entre le rapport de fréquence  $\chi_N$  et le rapport de  $L/d$  pour différentes valeurs du nombre de mode de vibration du nanotube de carbone de type chiral (30,8) avec  $e_0a = 3nm$  et  $\theta = 70K$  est illustrée dans les figures V.12 et V.13. Il est vu clairement sur ces figures que, pour les deux cas de basse et haute température, les rapports de fréquence sont inférieurs à l'unité. Il peut être vu à partir de la figure V.12 et V.13 que le rapport de fréquence  $\chi_N$  diminue avec l'augmentation de nombre du mode  $N$  et devient plus important avec l'augmentation du rapport  $L/d$  pour les deux cas de basse et haute température.

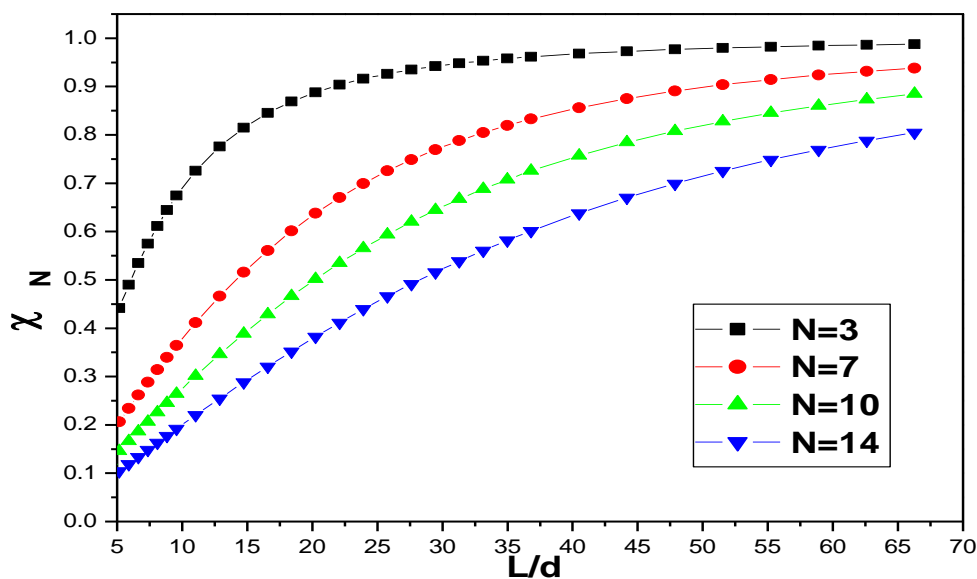


Figure V.12: la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_N$  et les valeurs du rapport  $L/d$  pour différents nombre de mode de vibration ( $N$ ) du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de basse température et ( $\theta = 70K, e_0a = 3nm$ ).

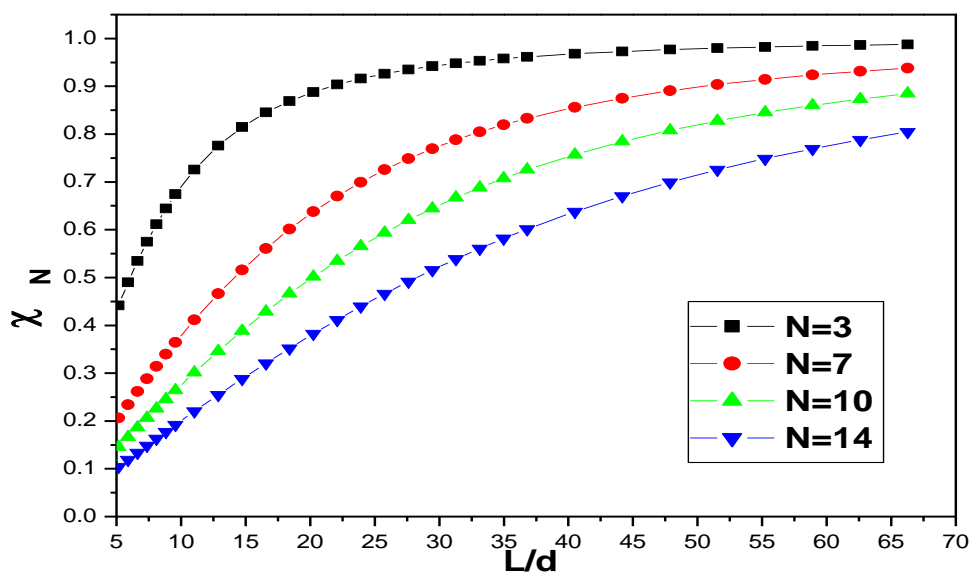


Figure V.13: la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_N$  et les valeurs du rapport  $L/d$  pour différents nombre de mode de vibration ( $N$ ) du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de haute température et ( $\theta = 70K, e_0a = 3nm$ ).

La relation entre les valeurs des fréquences  $\chi_{th}$  et les valeurs des rapports ( $L/d$ ) de SWCNTs de type chiral (30,8) pour différentes valeurs de changement de la température et pour les deux cas de basse et haute température sont présentés dans les figures V.14 et V.15 avec le mode de vibration ( $N=3$ ) et le paramètre non local ( $e_0a=3nm$ ).

Les figures V.16 et V.17 montrent la relation entre les rapports des fréquences  $\chi_{th}$  et le mode de vibration  $N$  et les valeurs de changement de la température  $\theta$  avec le rapport ( $L/d=20$ ) et  $e_0a=3nm$ .

Dans le cas de la basse température, il est clairement vu depuis les figures V.14 et V.16 que les rapports de fréquences  $\chi_{th}$  sont supérieures à l'unité. Cela signifie que les fréquences obtenues par le modèle non local incluent l'effet thermique deviennent supérieures à celle des fréquences du modèle non local sans l'effet thermique. De plus, nous observons que dans le cas de la basse température (Figures V.14 et V.16), l'effet thermique sur les fréquences de vibration diminue avec l'augmentation de la rapport ( $L/d$ ) et devient plus significatif avec l'augmentation de nombre de mode de vibration  $N$  et le changement de la température  $\theta$ , par contre à haute température (Figures V.15 et V.17) l'effet thermique sur les fréquences de vibration devient moins important avec l'augmentation de mode de vibration  $N$  et augmente avec l'augmentation du rapport ( $L/d$ ).

Nous avons obtenu à l'aide de modèle de Timochenko non local incluant l'effet thermique et sans l'effet thermique des résultats similaires à ceux obtenus par Tonsi et al [15] et Zhang et al [19].



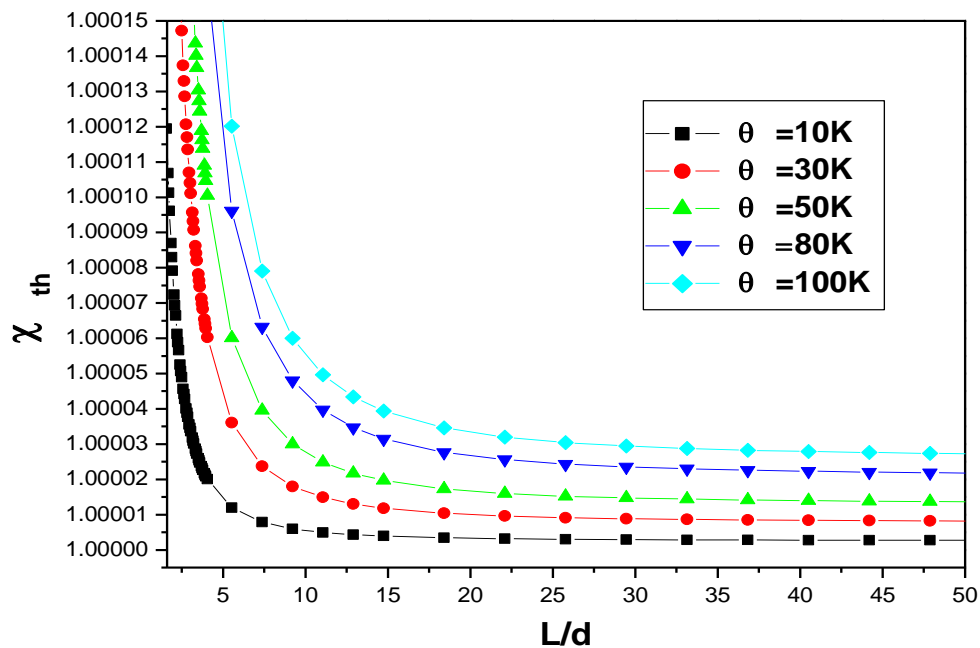


Figure V.14: la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_{th}$  et les valeurs du rapport  $L/d$  pour différents températures  $\theta$  du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $N = 3$ .

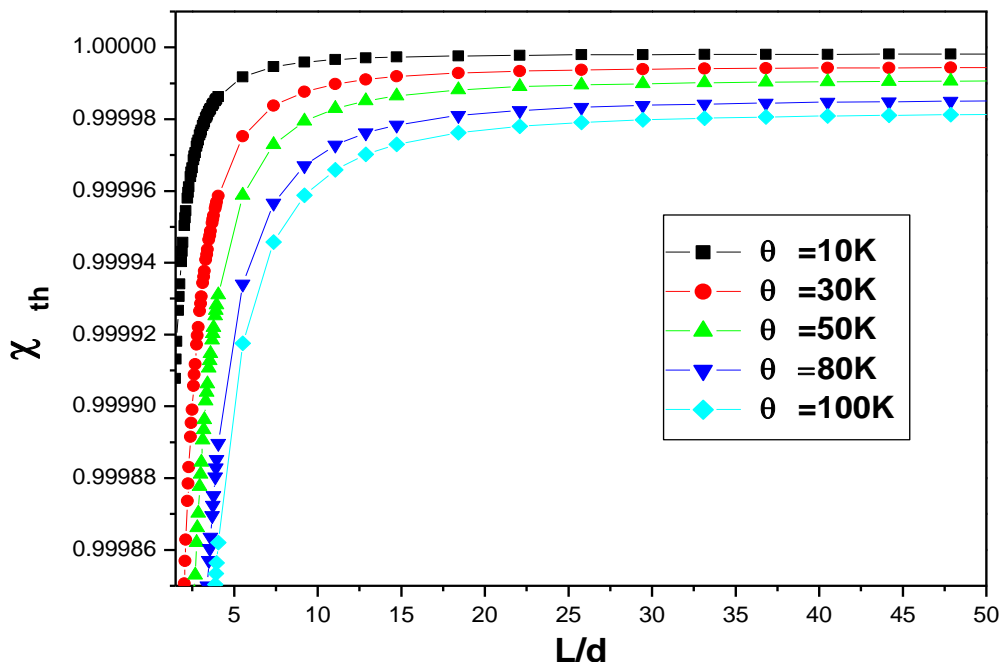


Figure V.15: la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_{th}$  et les valeurs du rapport  $L/d$  pour différents températures  $\theta$  du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de haute température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $N = 3$ .

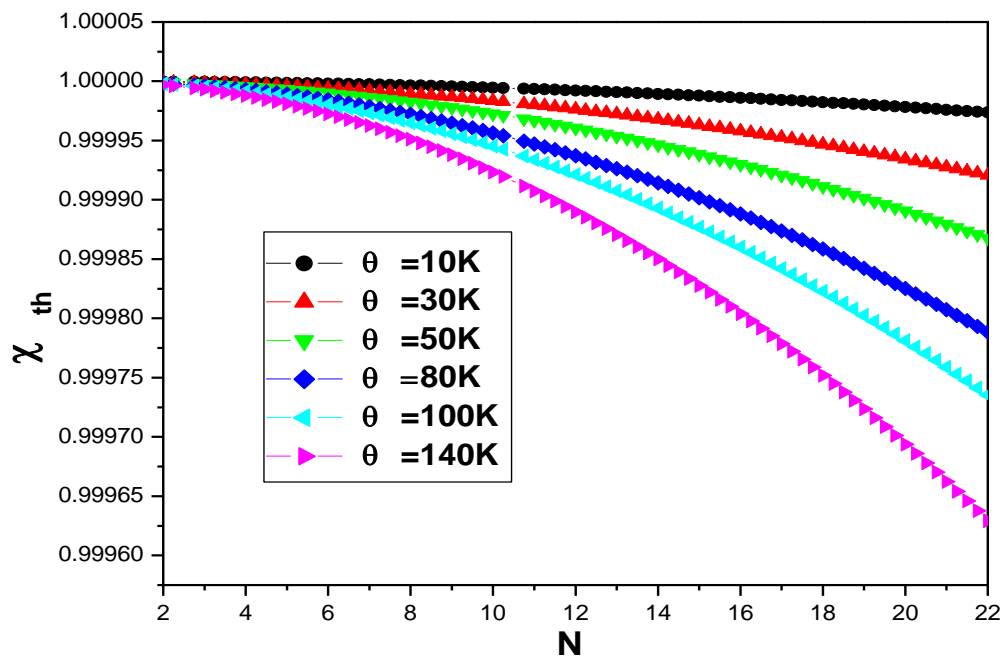


Figure V.16: la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_{th}$  et le nombre de mode(N) pour différents températures  $\theta$  du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $L/d = 20$ .

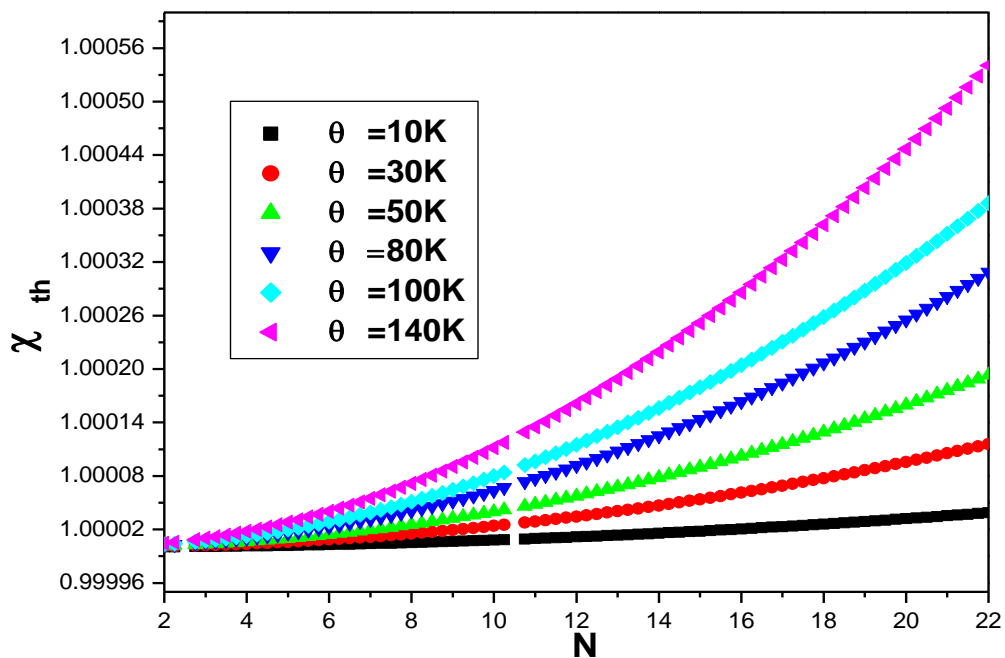


Figure V.17: la relation entre les valeurs du rapport  $\chi_{th}$  et le nombre de mode(N) pour différents températures  $\theta$  du nanotube de carbone chiral (30,8) dans le cas de haute température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $L/d = 20$ .

Dans le cas de la basse température, l'effet de changement de la température  $\theta$  sur les rapports des fréquences  $\chi_{th}$  du SWCNTs type chiral (30,8) pour différentes valeurs des rapports ( $L/d$ ) avec  $e_0a = 3nm$  et  $N = 3$  est indiqué a la figure V.18, pour différents de mode de vibration  $N$  avec  $e_0a = 3nm$  et  $L/d = 5$  est montré a la figure V.19, pour différents des paramètres non local ( $e_0a$ ) avec  $N = 3$  et  $L/d = 5$  est présenté a la figure V.20. il peut vu a partir des ces figures (V.18 , V.19 et V.20) , que les rapports de fréquences  $\chi_{th}$  augmente de façon monotone avec l'augmentation de la température  $\theta$ , ce qui indique que l'effet du changement de température conduit a une augmentation de fréquences fondamentale et en particulier pour long nanotube ( $L/d = 5$ ) et le paramètre non local et mode de vibration plus élevé. ( $e_0a = 5 nm$  ,  $N = 14$ ) . D'une autre partie, il est clairement constate a partir des figure (V.18 , V.19 et V.20) que les rapports de fréquences  $\chi_{th}$  sont supérieures a l'unité. Cela signifie que les rapports de fréquences  $\chi_{th}$  deviennent plus importants avec la diminution du rapport ( $L/d$ ) et augmente avec l'augmentation de mode de vibration  $N$  et le paramètre non local ( $e_0a$ ).

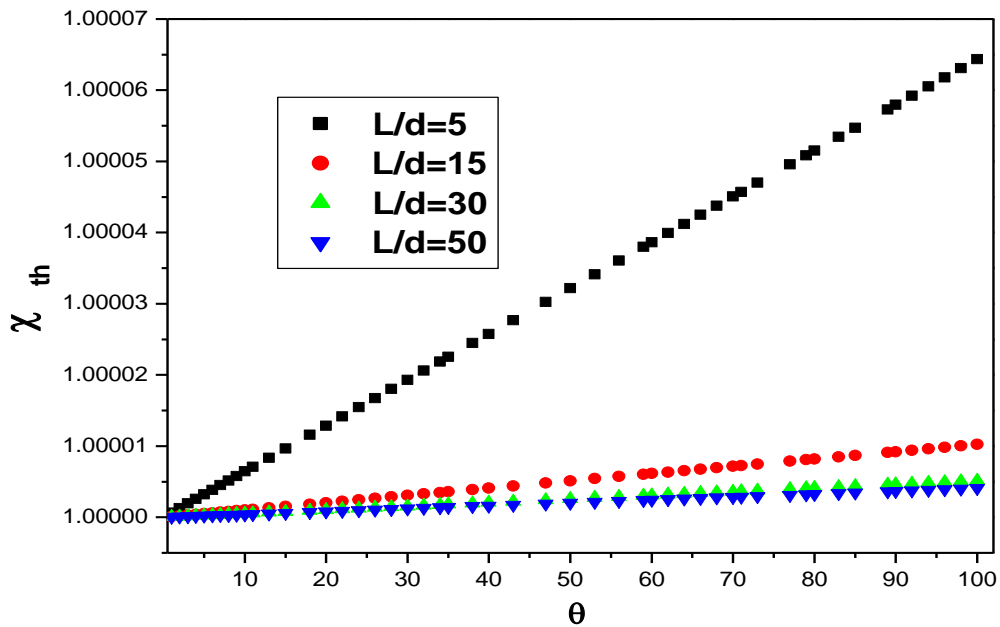


Figure V.18: L'effet thermique sur la fréquence de vibration pour différents valeur du rapport  $L/d$  du nanotube de carbone type chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $N = 3$ .

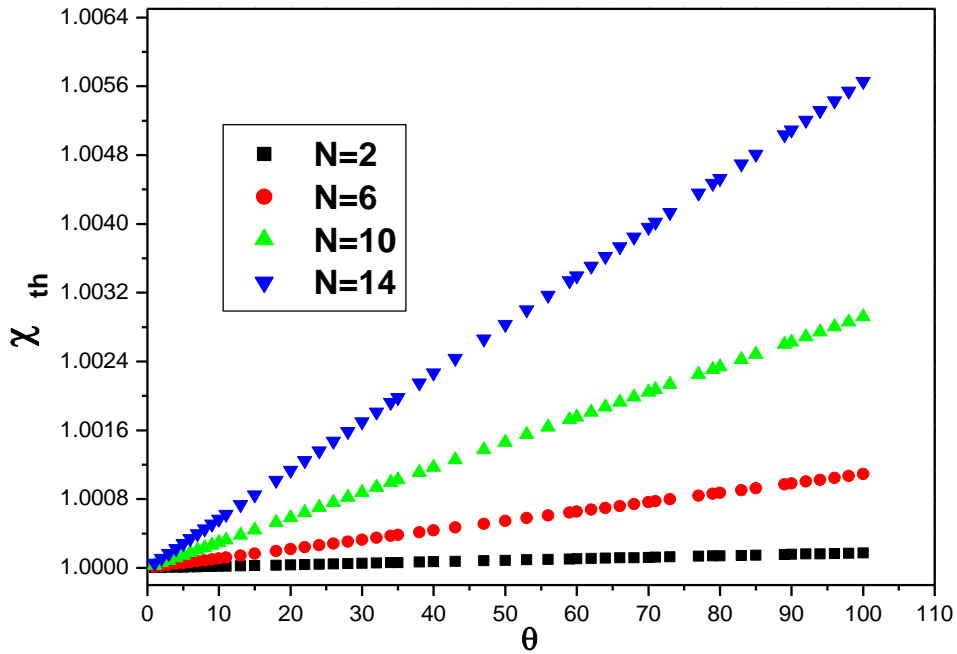


Figure V.19: L'effet thermique sur la fréquence de vibration pour différents valeur du nombre de mode(N) du nanotube de carbone type chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $e_0a = 3nm$  et  $L/d = 5$ .

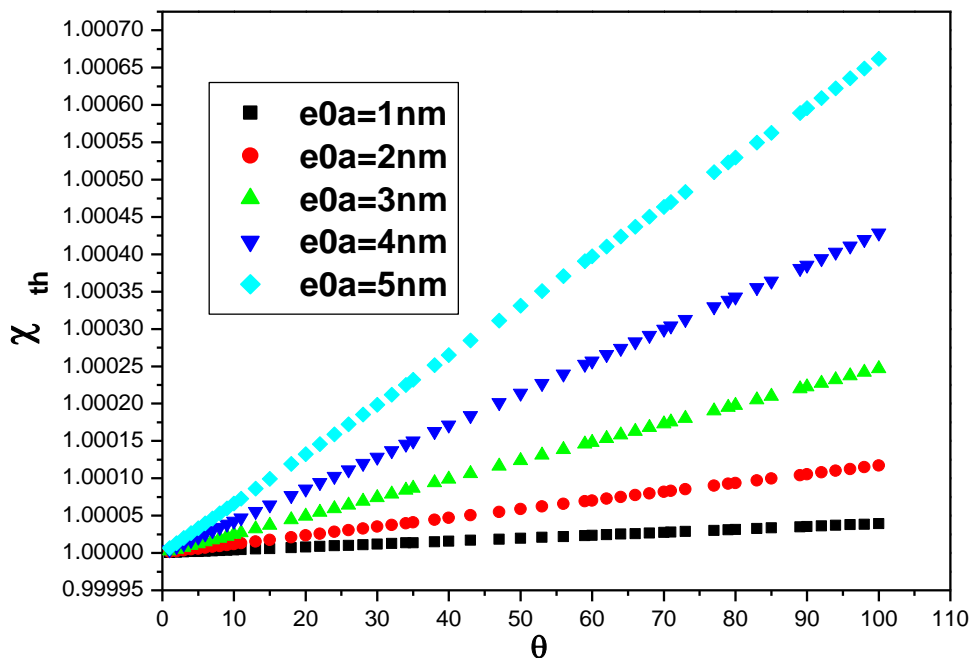


Figure V.20: L'effet thermique sur la fréquence de vibration pour différents valeur du paramètre des petites d'échelles  $e_0a$  du nanotube de carbone type chiral (30,8) dans le cas de basse température. La valeur de  $N = 3$  et  $L/d = 5$ .

### **V.3 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons présenté et analyse les résultats obtenues de la vibration libre des nanotubes de carbone monoparoi (*SWCNT*) sous l'effet thermique avec des conditions aux limites basée sur la théorie de l'élasticité non locale d'Eringen et la théorie du modèle de Timoshenko nonlocal. Cette théorie a été développée dans le chapitre précédent. Tous les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux de la littérature et dans des revues internationales.

### **Références**

- [1] W.X. Bao, C.C. Zhu, W.Z. Cui, *Physica B* 352 (2004) 156.
- [2] T.W. Tombler, C.W. Zhou, L. Alexseyev, J.Kong,H. Dai,L. Liu,C.S. Jayanthi,M. Tang,S.Y. Wu, *Nature* 405 (2000) 769.
- [3] M.F. Yu, O. Lourie, M.J. Dyer, K. Moloni, T.F. Kelly, R.S. Ruoff, *Science* 287 (2000) 637.
- [4] H. Jiang, R. Liu, Y. Huang, K.C. Hwang, *J. Eng. Mater. Technol.* 126 (2004) 265.
- [5] X. H. Yao , Q Han, *J. Eng. Mater. Technol.* 128 (2006) 419
- [6] X. H. Yao,Q. Han, *Compos. Sci. Technol.* 67(2007 )125
- [7] A. Benzair, A. Tounsi, A. Besseghier, H. Heireche, N. Moulay, L. Boumia, The thermal effect on vibration of single-walled carbon nanotubes using nonlocal Timoshenko beam theory, *J. Phys. D:Appl. Phys.* 41 (2008) 225404 (10pp)
- [8] H.S. Shen, *Int. J. Solids Struct.* 43 (2001) 1259.
- [9] A.C. Eringen, *J. Appl. Phys.* 54 (1983) 4703.
- [10] Q. Wang , V.K. Varadan, S.T. Quek, *Phys. Lett .A* 357 (2006) 130.
- [11] Q .Wang , *J. Appl. Phys .98* (2005) 124301.
- [12] C.M. Wang, Y.Y. Zhang, X.Q. He, *Nanotechnology* 18 (2007) 105401.
- [13] A. Krishnan, E. Dujardin, T. Ebbesen, P.N. Yianilos, M.M.J. Treacy, *Phys. Rev. B: Condens.Matter* 58 (1998) 14043.
- [14] J. Yoon, C.Q. Ru, A. Mioduchowski, *Composites B* 35 (2004) 87-93.
- [15] A. Tounsi, H. Heireche, H. M. Berrabah, A. Benzair, L. Boumia, *J. Appl. Phys .104* (2008) 104301.
- [16] L. Boumia, M.Zidour, A.Benzair, A.Tounsi, *Physica E* 59(2014)186.
- [17] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. Adda Bedia, *Physica E* 40 (2008) 2791
- [18]Y. Q. Zhang, X. Liu, G. R. Liu, *Nanotechnology* 18 (2007) 445701.

# *Conclusion générale*



Ce travail de thèse étudie l'analyse des vibrations thermique des SWCNTs basé sur la théorie de l'élasticité non locale d'Eringen et du modèle de Timoshenko. Les formulations théoriques incluent l'effet du paramètre non local de la petite échelle, le changement de température, le nombre de modes de vibration, le rapport de dimension et les chiralités de différents nanotubes de carbone mono paroi (SWCNT), zigzag, chiral et armchair.

Les équations du mouvement avec des conditions aux limites appropriées pour les SWCNT sont dérivées et résolues via la procédure de Navier. Selon notre étude, les résultats montrent la dépendance des rapports de fréquence sur la chiralité des nanotubes de carbone, le nombre de modes de vibration, le rapport de dimension, l'effet de paramètre non local, le changement de la température et l'effet thermique. D'après les résultats présentés ici, on peut clairement voir que l'effet à petite échelle réduit la caractéristique vibratoire et cette réduction est amplifiée à des valeurs plus élevées de modes de vibration et pour des petits rapports de *longueur /diamètre*. L'étude de l'effet thermique sur la fréquence de vibration du nanotube de carbone mono paroi (SWCNT) dans les deux cas basse et haute température est également discutée. On constate que l'application du modèle nonlocal est important pour les nombres de mode et la température élevés et les nanotubes courts. D'après la validation de notre modèle il y a un très bon accord a été observé d'après les comparaisons qui ont été faites avec les études en littérature. Ce travail devrait être utile dans la conception et l'analyse des vibrations thermiques propriétés des dispositifs physiques à l'échelle nanométrique.

## A nonlocal integral Timoshenko beam model for free vibration analysis of SWCNTs under thermal environment

Mohamed Liani<sup>1</sup>, Nouredine Moulay<sup>1</sup>, Fouad Bourada<sup>2,3</sup>, Farouk Yahia Addou<sup>2</sup>,  
Mohamed Bourada<sup>\*2</sup>, Abdelouahed Tounsi<sup>2,4</sup> and Muzamal Hussain<sup>5</sup>

<sup>1</sup> *Département de physique, Faculté des Sciences Exactes, Université Djilali Liabès de Sidi Bel Abbès 22000, Algérie*

<sup>2</sup> *Material and Hydrology Laboratory, University of Sidi Bel Abbès, Faculty of Technology, Civil Engineering Department, Algeria*

<sup>3</sup> *Département des Sciences et de la Technologie, Université de Tissemsilt, BP 38004 Ben Hamouda, Algérie*

<sup>4</sup> *YFL (Yonsei Frontier Lab), Yonsei University, Seoul, Korea*

<sup>5</sup> *Department of Mathematics, Govt. College University Faisalabad, 38000, Faisalabad, Pakistan*

(Received February 3, 2021, Revised July 19, 2021, Accepted August 15, 2021)

**Abstract.** In this paper, the nonlocal integral Timoshenko beam model is employed to study the free vibration characteristics of singled walled carbon nanotubes (*SWCNTs*) including the thermal effect. Based on the nonlocal continuum theory, the governing equations of motion are formulated by considering thermal effect. The influences of small scale parameter, the chirality of *SWCNTs*, the vibrational mode number, the aspect ratio of *SWCNTs* and temperature changes on the thermal vibration properties of single-walled nanotubes are examined and discussed. Results indicate significant dependence of natural frequencies on the nonlocal parameter, the temperature change, the aspect ratio and the chirality of *SWCNTs*. This work should be useful reference for the application and the design of nanoelectronics and nanoelectromechanical devices that make use of the thermal vibration properties of *SWCNTs*.

**Keywords:** nonlocal continuum theory; nonlocal integral Timoshenko beam model; singled walled carbon nanotubes (*SWCNTs*); small-scale effect; thermal effect; vibration characteristics

### 1. Introduction

The discovery of carbon nanotubes “*CNTs*” was by Iijima (1991), since this time, they have attracted worldwide attention. Recently, the analysis of *CNTs* has been of large interest to several scientific researchers because of their exceptional mechanical, electronic, electrochemical, physical and thermal properties (Robertson 2004). These properties support *CNTs* to be the suitable element for nanoelectronics, nanodevices, nanosensors and nanocomposites (Dai *et al.* 1996, Dharap *et al.* 2004). There are certain experimental investigations of the effective properties and behaviors of “*CNTs*” as the Young’s modulus “*E*”, shear modulus “*G*”, buckling behavior and vibration responses. For examples, experimental investigations by Treacy *et al.* (1996), who used the technique of transmission electron microscopy (TEM) to measure the Young’s modulus of *MWCNTs*, reported a mean value of 1.8 Tpa with a variation from 0.40 to

---

\*Corresponding author, Professor, E-mail: med\_bourada@yahoo.fr

4.15 Tpa. Tombler *et al.* (2000) and Salvétat *et al.* (1999) have used the technique of atomic force microscope (AFM) and they found the average Young's modulus of MWCNTs to be 1.2 TPa and 0.81 TPa.

In the experiment, however, it is very difficult to measure the mechanical properties of CNTs, directly due to their very small size. Computer simulation has been regarded as a powerful tool for modeling the properties of CNTs. Generally, two major types of computational approaches to the simulation of mechanical properties of CNTs modelling. These are (a) atomistic approach such as Ab-initio (Ye *et al.* 2001), molecular dynamics "MD" (Frankland 2003) and tight binding "TBMD" (Hernandez *et al.* 1998) and (b) continuum mechanics approaches (Wang 2005). Among the available modeling techniques, molecular dynamics simulation numerically solves Newton's equations of motion, thus allowing structural fluctuations to be remarked with respect to time (Tersoff and Ruoff 1994). However, MD simulation is limited to systems with a maximum atom number of about  $10^9$  by the scale and cost of computation (Tadmor *et al.* 1999). So only single-walled nanotubes with small deflection can be simulated using the MD method. Hernandez *et al.* (1998) studies of the mechanical properties of SWCNTs using MD method which tight-binding approach (TBMD). SWCNTs have the highest Young's modulus and the Poisson's ratio, which were found to be 1.24 TPa and 0.262, respectively. Bao *et al.* (2004) used MD approach and reported the Young's modulus average values were reported  $935.805 \pm 0.618$  GPa,  $935.287 \pm 2.887$  GPa and  $918.309 \pm 10.392$  GPa for Armchair, Zigzag and Chiral SWCNTs, respectively.

It is well known that classical continuum mechanics theory is size-independent, because it cannot incorporate the small-scale effect in nano-scale structure. The local continuum mechanics theory assumes that the stress at a point depends only on the strain at the same point, whereas in the nonlocal continuum mechanics theory originated by Eringen (1972 and 1983), the stress state at a given point as a function of the strain states of all points in the continuum mechanics. There are many works in the literature that have used this theory. Wang *et al.* (2006) investigated the small-scale effect on elastic buckling of CNTs with nonlocal continuum models. The Dynamic instability on CNTs is investigated by Sedighi and Yaghootian (2016) based on nonlocal continuum elasticity. Timesli (2020) presented an explicit analytical formula to examine the stability of DWCNTs using Donnell shells continuum approach. The small-scale and thermal effect on dynamic response of an embedded Armchair SWCNTs is investigated by Hamidi *et al.* (2018) by employing the non-local Timoshenko beam model. Bensattalah *et al.* (2018) investigated on mechanical stability of CNT reposed on foundation type Kerr by employing the nonlocal continuum theory and EBT formulations. Based on Energy equivalent model, Eltaher *et al.* (2018) have analyzed the vibrational behaviors of Material Size-Dependent CNTs. Bensattalah *et al.* (2019a) proposed a novel nonlocal Timoshenko beam theory to examine the free vibrational response of the chiral single-walled CNTs. Ahmed *et al.* (2019) examined the post-buckling response of imperfect FG nanobeams based on higher order nonlinear refined beam theory. Based on Eringen's differential law and Timoshenko beam theory, Jalaei and Civalek (2019) studied the dynamic instability of imperfect (FG) nanobeam subjected to axially oscillating loads. Also, Gafour *et al.* (2020) investigated the dynamic behavior of porous FG nanobeam by employing non-local higher order shear deformation theory. Abdulrazzaq *et al.* (2020) analyzed the thermal stability of clamped E-FG nano-size plate rested on an elastic substrate using a nonlocal refined theory. In similar works, the non-classical theory was used by several researchers to examine the static and dynamic response of the CNTs and others materials and structures (Attia and Rahman 2018, Karami *et al.* 2018a, b, Al-Maliki *et al.* 2019, Karami and Janghorban 2019a, b, Belmahi *et al.* 2019, Hamad *et al.* 2019, Eltaher *et al.* 2019a, b, c, Ebrahimi and Barati 2019, Attia *et al.* 2019,

Shanab *et al.* 2020, Bensattalah *et al.* 2019b, 2020, Fenjan *et al.* 2020, Ghandourah and Abdraboh 2020, Tahouneh *et al.* 2020, Arefi and Žur 2020, Yuan *et al.* 2020, Mirjavadi *et al.* 2020a, Asrari *et al.* 2020, Ahmed *et al.* 2020a, Eltaher *et al.* 2020, Thanh *et al.* 2020, Civalek *et al.* 2021).

Therefore, the aim of this study is to analyze the free vibration of single-walled carbon nanotubes SWCNTs using a nonlocal integral Timoshenko elastic beam theory. Young’s modulus of SWCNTs is predicted using MD simulation carried out by Bao *et al.* (2004). The effects of both small scale parameter, the chirality of SWCNTs, the vibrational mode number, the aspect ratio of SWCNTs and temperature changes on the frequency of SWCNTs are studied and discussed. This work should be useful guidance for the study and design of the next generation of nanodevices that make use of the thermal vibration properties of SWCNTs.

## 2. Structure of carbon nanotube

The SWCNTs are generated by rolling up a graphene sheet into a seamless cylinder. This structures may be described by the tube chirality, defined or represented through a pair of indices (n, m) referred to as the chiral vector  $\vec{C}_h$ , and the chiral angle  $\theta$  (see Fig. 1(a)). The chiral vector  $\vec{C}_h$  is defined as shown in the equation below

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

Where:  $\vec{a}_1$  and  $\vec{a}_2$  are the unit cell vectors of the two-dimensional lattice formed by the grapheme sheets,  $n$  and  $m$  are two integers. The direction of the CNT axis is perpendicular to this chiral vector. The chiral angle “ $\theta_c$ ” expression is given in the function of the integers “n, m” as (Dresselhaus *et al.* 2003)

$$\theta_c = \cos^{-1}\left(\frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}\right); \theta_c = \sin^{-1}\left(\frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}\right); \theta_c = \tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{3}m}{2n + m}\right) \quad (2)$$

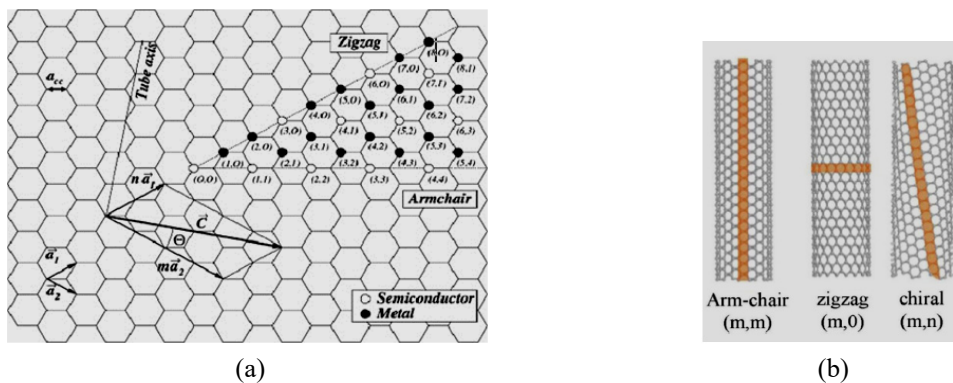


Fig. 1 (a) The 2D graphene sheet diagram showing a vector structure classification used to define CNT structure (Dresselhaus *et al.* 1996); (b) CNTs structure with different chiralities: armchair, zigzag and chiral

Depending on the chiral indices ( $n, m$ ) and the chiral angles, CNTs can be classified to zigzag and armchair structures as shown in Fig. 1(b). For armchair CNTs, the chiral indices  $n$  and  $m$  are equal ( $n = m$ ) and  $\theta_c = 30^\circ$  while for zigzag CNTs,  $m = 0$  and  $\theta_c = 0^\circ$ . For other values of indices ( $n \neq m$ ), CNTs are known as chiral and  $0^\circ < \theta_c < 30^\circ$ . The length of the unit vector  $a$  is defined as  $a = \sqrt{3}a_{C-C}$  with the equilibrium carbon–carbon (C–C) covalent bond length  $a_{C-C}$  usually taken to be 0.1421 nm (Wilder *et al.* 1998). The nanotube radius “ $r$ ” expression is given as

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

### 3. Nonlocal Timoshenko elastic beam models of SWCNTs

In this article the Eringen model of nonlocal elasticity is adopted. In the theory of nonlocal elasticity (Eringen 1972 and 1983), the stress “ $\sigma$ ” at a reference point “ $x$ ” is supposed to be a functional of the strain accordance with atomic theory of lattice dynamics and experimental observations on phonon dispersion. In the limit when the effects of strains at points other than  $x$  are neglected, one obtains classical or local theory of elasticity. The basic equations for linear, homogeneous, isotropic, nonlocal elastic solid with zero body force are given by Eringen (1983)

$$\begin{aligned} \sigma_{ij,j} &= 0 \\ \sigma_{ij}(x) &= \int T(|x - x'|, h) C_{ijkl}(x') dV(x'), \quad \forall x \in V \\ \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji}) \end{aligned} \quad (4)$$

where  $C_{ijkl}$  is the elastic modulus tensor of classical isotropic elasticity;  $\sigma_{ij}$  and  $\varepsilon_{ij}$  are stress and strain tensors respectively, and  $u_i$  is displacement vector.  $T(|x - x'|, h)$  is the nonlocal modulus or attenuation function incorporating into the constitutive equations to characterize the nonlocal effects at the reference point  $x$  produced by local strain at the source  $x'$ .  $|x - x'|$  is the Euclidean distance, and  $h = \frac{e_0 a}{L}$  is a material constant that depends on internal and external characteristic length (such as the lattice spacing and wavelength), where  $e_0$  is a constant appropriate to each material,  $a$  is an internal characteristic length, e.g. length of C–C bond, lattice parameter, granular distance, and  $L$  is an external characteristic length. Nonlocal constitutive relations for present nanotubes /nanobeams can be written as

$$\sigma_x - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} = E \varepsilon_x \quad \Rightarrow \quad (1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \sigma_x = E \varepsilon_x \quad (5a)$$

$$\tau_{xz} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \tau_{xz}}{\partial x^2} = G \gamma_{xz} \quad \Rightarrow \quad (1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \tau_{xz} = G \gamma_{xz} \quad (5b)$$

where  $E$  is the Young’s modulus and  $G$  is the shear modulus of the material,  $\nabla^2$  is Laplace operator.  $\gamma$  is the shear strain and  $\sigma_x$  is the axial stress. The parameter  $e_0 a$  is the parameter leading to small scale effect on the response of structures in nanosize.

Based on the integral Timoshenko beam theory, the displacement field is given as

$$\begin{aligned} u(x, z, t) &= -zk \int \theta(x, t) dx \\ w(x, z, t) &= w_0(x, t) \end{aligned} \quad (6)$$

Where  $\theta$  and  $w_0$  are the two unknowns' variables. The indeterminate integral appears in the above displacement field shall be resolved by the type of solutions used.  $k$  is the coefficient depends of the geometry.

The expressions of the axial and shear strains  $\varepsilon_x$  and  $\gamma_{xz}$  associated with the displacement field of Eq. (6) is obtained as

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= -zk\theta \\ \gamma_{xz} &= -kA' \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial w_0}{\partial x} \end{aligned} \quad (7)$$

Where  $A'$  is coefficient defined via adopted solutions type. In this case  $A' = -1/\lambda^2$   
The expressions of the shear force and bending moment  $M$  are given as

$$\begin{aligned} M &= \int z\sigma dA \\ V &= \int \tau dA \end{aligned} \quad (8)$$

Using Eqs. (5), (7) and (8). The nonlocal shear force and bending moment are obtained as

$$M = (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} - EIk\theta, \quad (9a)$$

$$V = (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - kA' \frac{\partial \theta}{\partial x} \right), \quad (9b)$$

Where  $A$  is the cross-section area of the beam.  $\beta$  is the form factor of shear depending on the shape of the cross section and  $I = \int_A z^2 dA$  is the inertia moment. The recommended value of  $\beta$ , the adjustment coefficient, is 0,9 for a circular shape of the cross area (Timoshenko 1921).

Based on the Hamilton's principle (Ebrahimi and Barati 2017, Fenjan *et al.* 2019a, b, Dehghan *et al.* 2019, Hamed *et al.* 2020, Attia and Mohamed 2020, Barati and Shahverdi 2020, Dehsaraji *et al.* 2020, She *et al.* 2020, Shariati *et al.* 2020, Mirjavadi *et al.* 2020b, Kachapi 2020, Khazaei and Mohammadimehr 2020, Bahaadini *et al.* 2020, Mohamed *et al.* 2020, Karami *et al.* 2021). The equations of motion of an integral Timoshenko beam theory under thermal effect are obtained as follow

$$-\frac{\partial V}{\partial x} + N_t \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = -\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \rho A \quad (10a)$$

$$-Mk + \frac{\partial V}{\partial x} kA' = \rho I k^2 A'^2 \frac{\partial^4 \theta}{\partial x^2 \partial t^2} \quad (10b)$$

Where  $\rho$  is the mass density of the material,  $N_t$  denotes an additional axial force and is dependent on temperature  $\theta_T$  and thermal coefficient  $\alpha$  of the nanotube; the force can be expressed as

$$N_t = -\alpha EA\theta_T \quad (11)$$

Substituting Eq. (10) into Eq. (9) leads to

$$M = -EI k \theta + (e_0 a)^2 \left[ \rho I k^2 A'^2 \frac{\partial^6 \theta}{\partial x^4 \partial t^2} - \rho A k A' \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} - N_t k A' \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right] \quad (12a)$$

$$V = \beta GA \left( \frac{\partial w}{\partial x} - k A' \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + (e_0 a)^2 \left[ \rho A \frac{\partial^3 w}{\partial x^2 \partial t} + N_t \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} \right] \quad (12b)$$

Replacing Eq. (12) into Eq. (10), the nonlocal equations of motion in function of displacement terms  $\theta$  and  $w_0$  is obtained as

$$EI k^2 \theta + \beta GA k A' \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - k A' \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) = \rho I k^2 A'^2 \left[ \frac{\partial^4 \theta}{\partial x^2 \partial t^2} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^6 \theta}{\partial x^4 \partial t^2} \right] \quad (13a)$$

$$\beta GA \left( -k A' \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + N_t \left[ \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right] = \rho A \left[ -(e_0 a)^2 \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \right] \quad (13b)$$

In the present work, the SWCNT is supposed to be simply supported in the end edges; the solutions of the above equation of motion (Eq. (13)) are resolved via Navier method (Zouatnia and Hadji 2019, Safa *et al.* 2019, Mohammadimehr *et al.* 2020, Yaghoobi and Taheri 2020). The displacement coefficient is expressed as

$$w(x, t) = \bar{W} e^{i\omega t} \sin(\lambda_n x) \quad (14a)$$

$$\theta(x, t) = \bar{\theta} e^{i\omega t} \sin(\lambda_n x), \quad (14b)$$

Where  $\bar{W}$  and  $\bar{\theta}$  arbitrary parameters to be determined,  $\omega$  are is the eigenfrequency associated with  $N^{\text{th}}$  eigenmode.  $i$  is the imaginary unit and  $\lambda_n$  is the wave number with  $\lambda_n = \frac{N\pi}{L}$ .

Substituting the Navier Solutions of Eq. (14) into nonlocal equations of motion of Eq. (13), the correspondent frequency relation can be obtained as

$$(\omega_{NT})^2 = \frac{1}{2} \left( \alpha_n \pm \sqrt{\alpha_n^2 - 4\beta_n} \right) \quad (15)$$

Where

$$\alpha_n = \frac{N_x \lambda_n^2}{\rho A} + \frac{\beta I G \lambda_n^4 A'^2 + \beta A G \lambda_n^2 A'^2 + EI}{\rho I A'^2 \lambda_n^2 [1 + (e_0 a)^2 \lambda_n^2]} \quad (16a)$$



$$\beta_n = \frac{E\beta G}{\rho^2 A^2 [1 + (e_0 a)^2 \lambda_n^2]^2} + N_t \frac{(EI + \beta A G A^2 \lambda_n^2)}{\rho^2 I A^2 \lambda_n^2 [1 + \lambda_n^2 (e_0 a)^2]} \quad (16b)$$

The Timoshenko beam model can be reduced to Euler – beam model by eliminating the effect of rotary inertia and the shear force. to get the local model just put  $e_0 = 0$ .

#### 4. Results and discussions

Based on the formulations obtained above with the nonlocal integral Timoshenko beam model, the effect of small scale parameter, the chirality of SWCNTs, the vibrational mode number, the aspect ratio of SWCNTs and temperature changes on the thermal vibration properties of single-walled nanotubes are discussed here. The ratios of the results with nonlocal parameter and temperature change to those without nonlocal parameter or temperature change are, respectively, given by

$$\chi_N = \frac{\omega_{NT}}{\omega_{LT}}; \quad \chi_{th} = \frac{\omega_{NT}}{\omega_{NT}^0} \quad (17)$$

where  $\omega_{LT}$  and  $\omega_{NT}$  are the frequency based on the local and nonlocal integral Timoshenko beam model including thermal effect and  $\omega_{NT}^0$  is the frequency based on the nonlocal integral Timoshenko beam model without thermal effect ( $\theta_T = 0$ ). As previously mentioned Jiang *et al.* (2004) found that the coefficients of thermal expansion for CNTs are negative at low or room temperature and become positive at high temperature. Consequently, the value of the ratio  $\chi$  was herein calculated for both cases of low and high temperatures. For the case of room or low temperature, we suppose  $\alpha = -1.6 \times 10^{-6} K^{-1}$  (Yao and Han 2006) and for the case of high temperature, we suppose  $\alpha = 1.1 \times 10^{-6} K^{-1}$  (Yao and Han 2006). The parameters used in calculations for the SWCNT are given as follows: the effective thickness of CNTs taken to be  $0.34 \text{ nm}$  (Bao *et al.* 2004), the mass density  $\rho = 2.3 \text{ gcm}^{-3}$ , Poisson ratio is  $\nu = 0.25$  and the shear module can be determined from the relation  $G = \frac{0.5E}{(1+\nu)}$ .

The Young's moduli used in this study of Armchair, Zigzag and Chiral SWCNTs are calculated by Bao *et al.* (2004) using MD approach. It was reported that the Young's modulus average values were  $935.805 \pm 0.618 \text{ GPa}$ ,  $935.287 \pm 2.887 \text{ GPa}$  and  $918.309 \pm 10.392 \text{ GPa}$  for Armchair, Zigzag and Chiral SWCNTs, respectively (see Table 1) and weakly affected by the tube chirality and radius. The results given by MD approach are in good agreement with the available experimental results (Salvetat *et al.* 1999, Frankland 2003).

On the other hand, parameter  $e_0$  was given as 0.39 by Eringen (1983). A conservative estimate of the scaling effect parameter  $0 \text{ nm} \leq e_0 a \leq 2 \text{ nm}$  for SWCNTs is proposed by Wang *et al.* (2006) with nonlocal continuum models. The product  $e_0 a$  instead of  $e_0$  alone was evaluated by Wang *et al.* (2007) by using the asymptotic value of frequency of the DWCNTs  $\omega = \frac{1}{e_0 a} \sqrt{\frac{E}{\rho}}$  derived in the analysis of wave propagation via a nonlocal Timoshenko beam model, where  $\rho$  is the mass density of carbon nanotubes. On the basis of the frequency equation, Wang found the scale coefficient  $e_0 a < 2.1 \text{ nm}$  for a CNT by substituting the available experimental vibration frequency  $0.1 \text{ THz}$  (Krishnan *et al.* 1998) or  $e_0 a > 2.1 \text{ nm}$  supposing that the measured

Table 1 Values of Young's modulus for different tube radius and different chiralities using MD simulation by Bao *et al.* (2004)

(n, m)	Radius (nm)	Young's modulus E (GPa)
<b>Armchair</b>		
(8, 8)	0.542	934.960
(10, 10)	0.678	935.470
(12, 12)	0.814	935.462
(14, 14)	0.949	935.454
(16, 16)	1.085	939.515
(18, 18)	1.220	934.727
(20, 20)	1.356	935.048
<b>Zigzag</b>		
(14, 0)	0.548	939.032
(17, 0)	0.665	938.553
(21, 0)	0.822	936.936
(24, 0)	0.939	934.201
(28, 0)	1.096	932.626
(31, 0)	1.213	932.598
(35, 0)	1.370	933.061
<b>Chiral</b>		
(12, 6)	0.525	927.671
(14, 6)	0.696	921.616
(16, 8)	0.828	928.013
(18, 9)	0.932	927.113
(20, 12)	1.096	904.353
(24, 11)	1.213	910.605
(30, 8)	1.358	908.792

frequency value for the CNT was greater than 10 THz according to the observation of Yoon *et al.* (2004). It is clear that a large range of values for the scale coefficient  $e_0a$  is possible due to different vibration frequencies. Therefore, in this study, the nonlocal parameters are values  $0 \text{ nm} \leq e_0a \leq 5 \text{ nm}$  to investigate nonlocal effects on the responses of SWCNTs.

Fig. 2 shows the variation of the frequency ratio  $\chi_N$  (i.e., ratio of the frequency  $\omega_{NT}$  of the nonlocal integral Timoshenko beam to the corresponding local integral Timoshenko beam  $\omega_{LT}$ ) versus the length-to-diameter ratio  $\frac{L}{d}$  for six vibration mode numbers (N) with scale parameter  $e_0a$  is 1 nm without consideration of thermal effect ( $\theta_T = 0$ ). It can be seen from Fig. 2 that the frequency ratios  $\chi_N$  of armchair (8,8) carbon nanotube are smaller than unity for all modes at different length-to-diameter ratios. This means that the frequencies obtained by the nonlocal integral Timoshenko beam are smaller than those given by local integral Timoshenko beam, indicating that the inclusion of effects of small scale lead to a reduction in the vibration frequencies. This under prediction of frequency values is amplified for higher vibration modes and

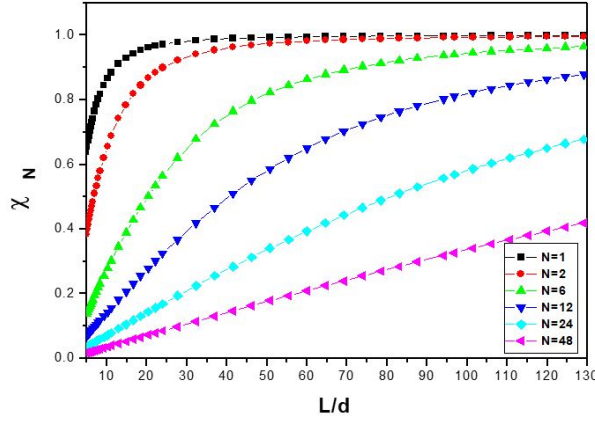


Fig. 2 The values of ratio  $\chi_N$  of armchair (8,8) carbon nanotube with respect to length-to-diameter ratio  $\frac{L}{d}$  for different mode numbers (N) in the case of without thermal effect ( $\theta_T = 0$ ) with  $e_0 a = 1 \text{ nm}$

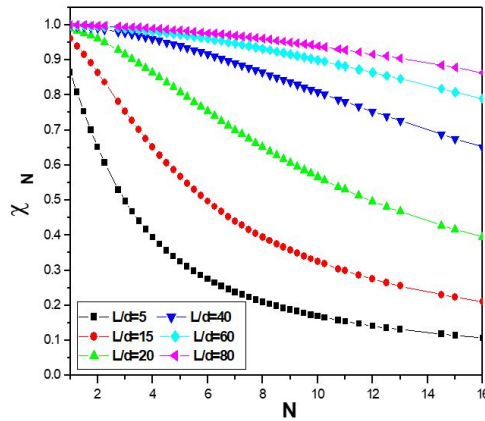


Fig. 3 Relation between the values of ratio  $\chi_N$  and the mode numbers (N) for different aspect ratios  $\frac{L}{d}$  of armchair (8,8) carbon nanotube in the case of without thermal effect ( $\theta = 0$ ) With  $e_0 a = 1 \text{ nm}$

for small length-to-diameter ratios. This fact is clearly shown in Fig. 2. For the fundamental mode  $N = 1$ , the frequency ratio approaches unity (i.e., the nonlocal integral Timoshenko and local integral Timoshenko results become close to each other) for long tubes. For frequencies corresponding to higher modes, say  $N = 48$ , the frequency ratios are significantly smaller than unity, especially at small values of  $\frac{L}{d}$ .

For example, the frequency ratios at  $\frac{L}{d} = 5$  are 0.6521, 0.1434 and 0.0362 for the  $N = 2$ ,  $N = 12$  and  $N = 48$ , respectively. With the increase of  $\frac{L}{d}$  (i.e.,  $\frac{L}{d} > 80$ ), the effects of the small scale on the vibration frequencies become negligible as can be observed from the curves associated with the  $N = 1$ ,  $N = 2$  and  $N = 6$  in Fig. 2. However, it is worth noting that even for slender CNTs with  $\frac{L}{d}$  as large as 130, the small scale still have an appreciable effect on the frequency associated with high vibration modes (see results for the  $N = 24$  and  $N = 48$  in Fig. 2).

Fig. 3 illustrate relationship between the frequency ratios  $\chi_N$  and vibration mode numbers (N) of armchair (8,8) carbon nanotube at different values length-to-diameter ratio  $\frac{L}{d}$  in the case of without thermal effect ( $\theta_T = 0$ ). It can be seen in Fig. 3 that the frequency ratios  $\chi_N$  decreases with increasing the value N. In addition, we observe that increasing the ratio  $\frac{L}{d}$  results in increasing in the ratio  $\chi_N$ . It is also observed from Fig. 3 that the frequency ratios  $\chi_N$  are less than unity. However, for the length-to-diameter ratios  $L/d > 80$ , the frequency ratio is seen to virtually approach unity. For short CNTs, say  $L/d = 5$ , the frequency ratios are smaller than unity especially at higher modes N. This result indicates that the effects of small scale lead to a reduction of the vibration frequencies and the reduction is amplified at higher vibration modes and for small length-to-diameter ratios. So, when the length-to-diameter ratios are small and when considering high vibration modes, nonlocal integral Timoshenko beam should be employed for a better prediction of the frequencies instead of local integral Timoshenko beam model which neglects the effects of small scale.

The relation between the values of ratio  $\chi_N$  and the small-scale effect  $e_0a$  for different values of  $\frac{L}{d}$  of zigzag (21,0) carbon nanotube with  $N = 2$  and  $\theta_T = 0$  is shown in Fig. 4. It is clear that the small scale effect is significant for short CNTs ( $\frac{L}{d} \leq 15$ ). Conversely, for a slender CNT of  $L/d = 90$ , the frequency for the nonlocal integral Timoshenko beam is close to that furnished by the local beam model, indicating the negligible effect of small scale in long CNTs.

The variation in the ratios  $\chi_N$  with the nonlocal parameter  $e_0a$  for various aspect ratios  $\frac{L}{d}$  is shown in Fig. 5. The obtained results show that the frequency ratios  $\chi_N$  exhibit a dependence on the nonlocal parameter. For example, the frequency ratios at  $\frac{L}{d} = 4$  are 0,9610; 0,8669; 0,6562 and 0,5710 for the  $e_0a = 1$ ,  $e_0a = 2$ ,  $e_0a = 4$  and  $e_0a = 5$ , respectively. It is found from Fig. 5 that the vibrational characteristics for the SWCNT are related to the nonlocal parameter  $e_0a$ . On the other hand, the effect of small scale parameter on the frequency ratio is seen to be very small and is negligible for  $\frac{L}{d} > 50$ . In addition, it is clearly seen from Figure that the frequency ratios  $\chi_N$  are less than unity for different small-scale parameter. This means that the application of the

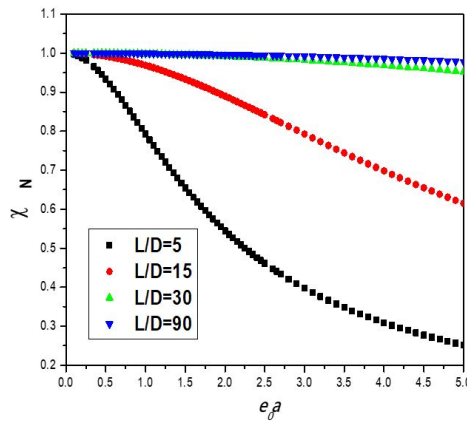


Fig. 4 The values of ratio  $\chi_N$  of armchair (8,8) carbon nanotube with respect to length-to-diameter ratio  $\frac{L}{d}$  for different mode numbers(N) in the case of without thermal effect ( $\theta = 0$ ); with  $e_0a = 1 \text{ nm}$

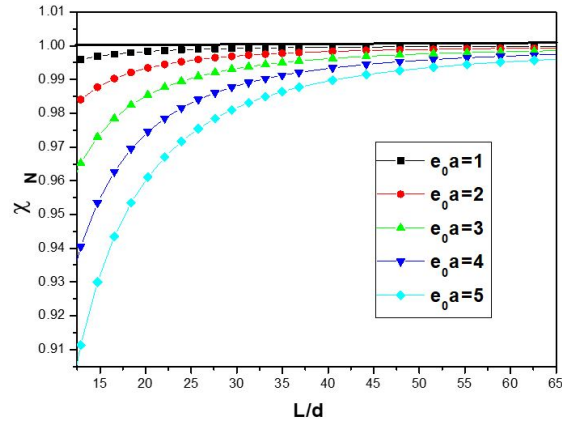


Fig. 5 Relation between the values of ratio  $\chi_N$  and the aspect ratios  $\frac{L}{d}$  for different small-scale effect  $e_0 a$  of chiral (30,8) carbon nanotube in the case of without thermal effect ( $\theta_T = 0$ ) with  $N = 1$

local integral Timoshenko beam model for CNT analysis would lead to an overprediction of the frequency if the small length scale effect between the individual carbon atoms in CNTs is neglected.

The values of ratio  $\chi_N$  of armchair (8,8) SWCNTs with different mode numbers  $N$  for  $\frac{L}{d} = 20$  based on the non-local integral Timoshenko beam model are listed in Table 2. From the table, it can be noted that the ratio  $\chi_N$  is in inverse relation with the mode numbers  $N$  and scale

Table 2 Values of frequency ratios  $\chi_N$  for different mode numbers  $N$ , nonlocal parameter  $e_0 a$  and aspect ratio  $\frac{L}{d}$  of armchair (8,8) SWCNT

N	$\frac{L}{d} = 20$			$\frac{L}{d} = 40$		
	$e_0 a = 1 \text{ nm}$	$e_0 a = 1.5 \text{ nm}$	$e_0 a = 2 \text{ nm}$	$e_0 a = 1 \text{ nm}$	$e_0 a = 1.5 \text{ nm}$	$e_0 a = 2 \text{ nm}$
1	0,98957	0,97698	0,96014	0,99736	0,99409	0,98957
2	0,96014	0,91643	0,86418	0,98957	0,97698	0,96014
3	0,91643	0,83651	0,75318	0,97698	0,95033	0,91643
4	0,86418	0,75318	0,65148	0,96014	0,91643	0,86418
5	0,80853	0,67545	0,56624	0,93971	0,87774	0,80853
6	0,75318	0,60675	0,49683	0,91643	0,83651	0,75318
7	0,70044	0,5475	0,44052	0,89102	0,79455	0,70044
8	0,65148	0,49683	0,39453	0,86418	0,75318	0,65148
9	0,60675	0,45353	0,35657	0,83651	0,7133	0,60675
10	0,56624	0,4164	0,32486	0,80853	0,67545	0,56624
11	0,52971	0,38437	0,29807	0,78064	0,6399	0,52971
12	0,49683	0,35657	0,27519	0,75318	0,60675	0,49683
16	0,39453	0,27519	0,2099	0,65148	0,49683	0,39453

parameters  $e_0a$ . It can be concluded also that the biggest values of the ratio  $\chi_N$  are obtained for slender armchair (8,8) SWCNT.

Figs. 6 and 7 are presented to show variations of the frequency ratio  $\chi_N$  against the ratio  $\frac{L}{d}$  at different chirality and different armchair of SWCNTs in the case ( $\theta_T = 0$ ) with the nonlocal parameter  $e_0a = 1\text{nm}$  and  $N = 2$ . However, for CNTs with larger values of diameter, this dependence becomes very weak. The reason for this phenomenon is that a carbon nanotube with smaller diameter  $d$  has a larger curvature, which results in a more significant distortion of  $C - C$  bonds.

The relationship between the frequency ratios  $\chi_N$  and the vibrational mode number  $N$  for different chirality of SWCNTs with  $\frac{L}{d} = 10$ ,  $e_0a = 1\text{nm}$  and  $\theta_T = 0\text{K}$  are shown in Figs. 8 and 9. it is clearly seen in Fig. 9 that the distributions of ratio  $\chi_N$  for different chiralities of

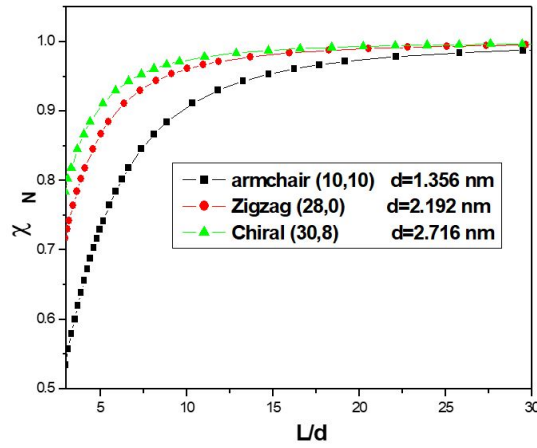


Fig. 6 The effect of aspect ratios  $\frac{L}{d}$  on the frequency ratio  $\chi_N$  for different chirality of SWCNTs with  $N = 2$  and  $e_0a = 1\text{nm}$  in the case ( $\theta_T = 0$ )

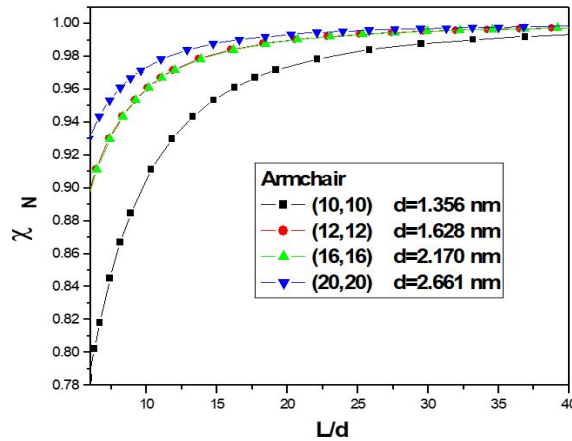


Fig. 7 The effect of aspect ratios  $\frac{L}{d}$  on the frequency ratio  $\chi_N$  for different armchair of SWCNTs with  $N = 2$  and  $e_0a = 1\text{nm}$  in the case ( $\theta_T = 0$ )

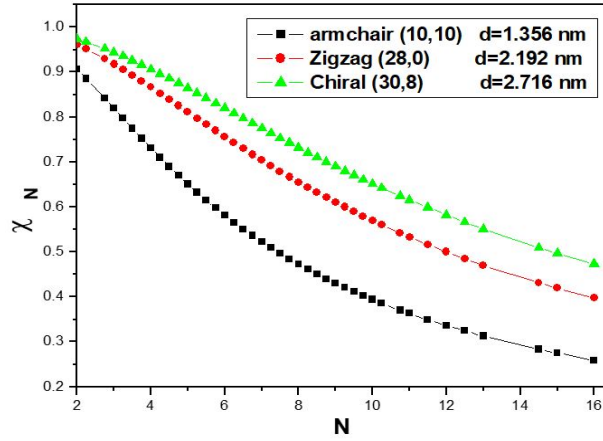


Fig. 8 The effect of vibrational mode number  $N$  on the frequency ratio  $\chi_N$  for different chirality of SWCNTs with  $N = 2$  and  $e_0a = 1 \text{ nm}$  in the case ( $\theta_T = 0$ )

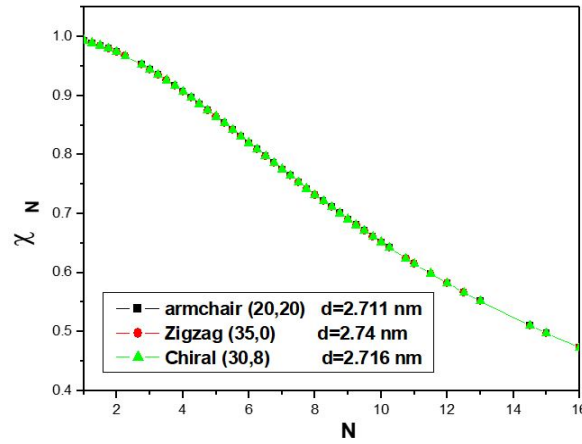


Fig. 9 The effect of vibrational mode number  $N$  on the frequency ratio  $\chi_N$  for different chirality of SWCNTs with the same radius are identical,  $N = 2$  and  $e_0a = 1 \text{ nm}$  in the case ( $\theta_T = 0$ )

SWCNT with the same radius are identical. Comparing Figs. 8 and 9, the distributions of ratio  $\chi_N$  are independent of the chirality vector of CNTs, but are dependent on the radius of CNTs.

The relationship among the ratios  $\chi_{th}$  (i.e., ratio of the frequency  $\omega_{th}$  of the nonlocal integral Timoshenko beam including thermal effect to the corresponding nonlocal integral Timoshenko beam without thermal effect  $\omega_{th}^0$ ), the vibrational mode number  $N$ , and the temperature change  $\theta_T$  on the vibration frequencies of chiral (30,8) carbon nanotube for both cases of low and high temperatures are shown in Figs. 10 and 11. The relationship among the ratio  $\chi_{th}$ , the aspect ratio  $\frac{L}{d}$ , and the temperature change  $\theta$  are shown in Figs. 12 and 13.

In the case of room or low temperature, it is clearly seen from Figs. 10 and 12 that the frequency ratios  $\chi_{th}$  are more than unity. This means that the values of frequencies  $\omega_{NT}$  obtained by the nonlocal integral Timoshenko beam considering the thermal effect are larger than



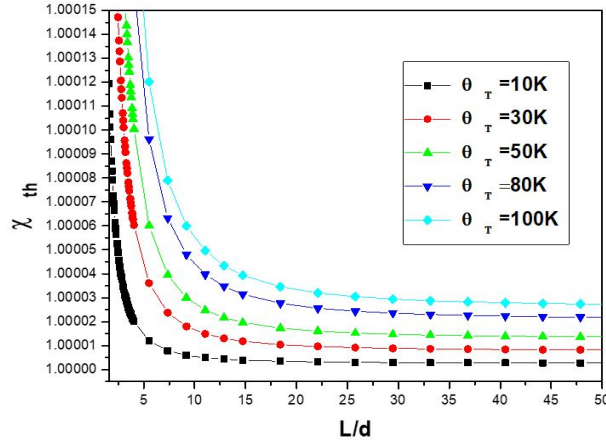


Fig. 10 Relation between the values of ratio  $\chi_{th}$  and the with the aspect ratio  $\frac{L}{d}$  for different various temperature  $\theta_T$  of chiral (30.8) carbon nanotube in the case of low or room temperature. The value of  $e_0a = 3 \text{ nm}$  and  $N = 3$

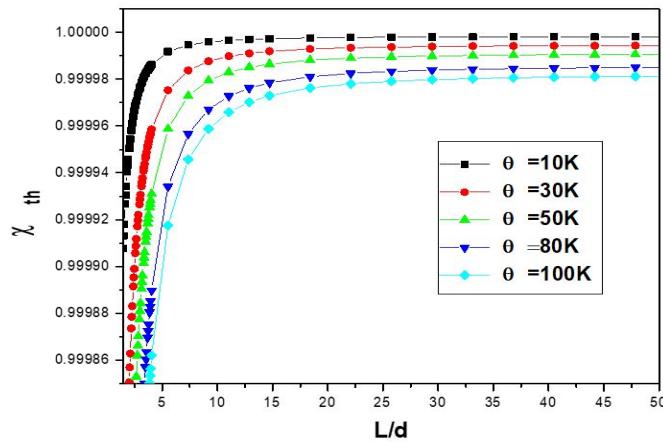


Fig. 11 Relation between the values of ratio  $\chi_{th}$  and the with the aspect ratio  $\frac{L}{d}$  for different various temperature  $\theta_T$  of chiral (30.8) carbon nanotube in the case of high temperature. The value of  $e_0a = 3 \text{ nm}$  and  $N = 3$

those given by local integral Timoshenko beam ignoring the influence of temperature change. Conversely in the case of high temperature, it can be seen from Figs. 11 and 13 that the frequency ratios  $\chi_{th}$  are less than unity. This means that the values of frequencies  $\omega_{NT}$  obtained by thenonlocal integral Timoshenko beam considering the thermal effect are smaller than those excluding the influence of temperature change. In addition, we observe that in the case of room or low temperature, the thermal effect on the frequency diminishes with increasing the aspect ratio  $\frac{L}{d}$  and becomes more significant with the increase of the number  $N$  and temperature change  $\theta_T$ . Conversely to the case of high temperature, the thermal effect on the frequency becomes less significant with the increase of the vibrational mode number  $N$  and increases with increasing the

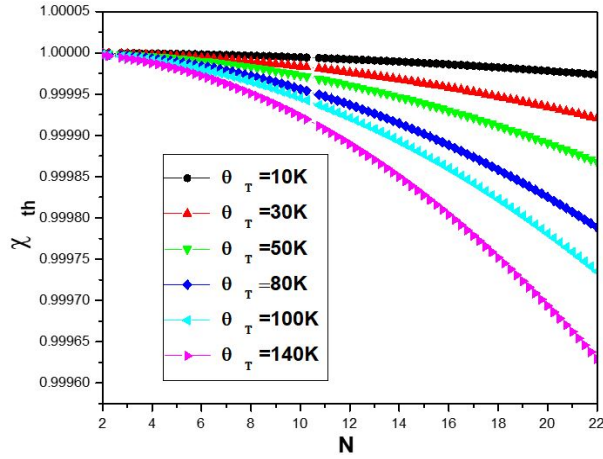


Fig. 12 Relation between the values of ratio  $\chi_{th}$  and the with the aspect ratio  $N$  for different various temperature  $\theta_T$  of chiral (30.8) carbon nanotube in the case of low or room temperature. With  $e_0a = 3 \text{ nm}$  and  $\frac{L}{d} = 20$

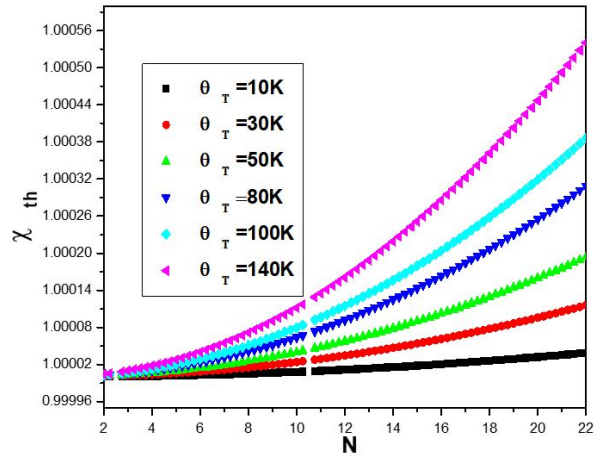


Fig. 13 Relation between the values of ratio  $\chi_{th}$  and the with the aspect ratio  $N$  for different various temperature  $\theta_T$  of chiral (30.8) carbon nanotube in the case of high temperature. With  $e_0a = 3 \text{ nm}$  and  $\frac{L}{d} = 20$

aspect ratio  $\frac{L}{d}$  and temperature change  $\theta_T$ .

In the case of room or low temperature, the relationship between the values of ratio  $\chi_{th}$  and the temperature  $\theta_T$  of chiral (30.8) carbon nanotube for different mode numbers ( $N$ ) with  $e_0a = 3 \text{ nm}$  and  $\frac{L}{d} = 5$  is shown in Fig. 14, for different small-scale effect  $e_0a$  with  $N = 3$  and  $\frac{L}{d} = 5$  is presented in Fig. 15. From these figures, it can be clearly observed that frequency ratios  $\chi_{th}$  vary linearly with the temperature change. It can be seen that the ratio  $\chi_{th}$  increases monotonically as the temperature  $\theta_T$  increases, indicating that the effect of temperature change leads to an increase of the fundamental frequency. It is clearly seen from these figures that the

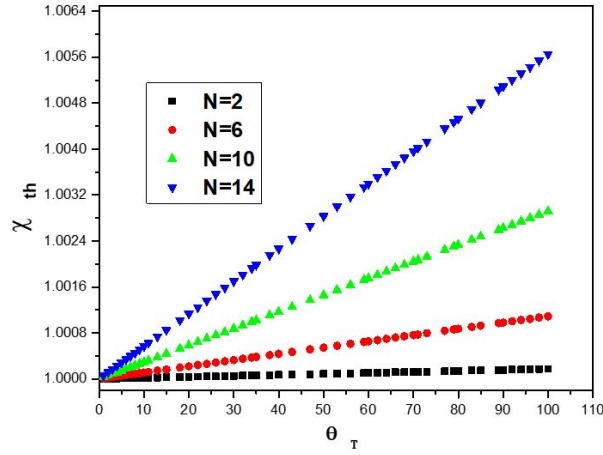


Fig. 14 Relationship between the values of ratio  $\chi_{th}$  and the temperature  $\theta_T$  for different mode numbers (N) of chiral (30.8) carbon nanotube in the case of low or room temperature. The value of  $e_0 a = 3 \text{ nm}$  and  $\frac{L}{d} = 5$

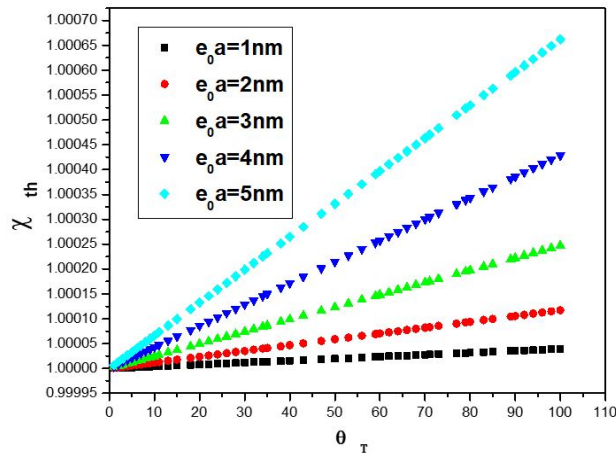


Fig. 15 Relationship between the values of ratio  $\chi_{th}$  and the temperature  $\theta_T$  for different small-scale effect  $e_0 a$  of chiral (30.8) carbon nanotube in the case of low or room temperature. The value of  $N = 3$  and  $\frac{L}{d} = 5$

frequency ratios  $\chi_{th}$  are greater than unity. Therefore, we observe that the frequency ratios  $\chi_{th}$  becomes more significant with increasing the vibrational mode number  $N$  and the nonlocal parameter  $e_0 a$ .

## 5. Conclusions

This work investigates the thermal vibration response of SWCNTs based on Eringen's nonlocal elasticity theory and the integral Timoshenko beam theory. Theoretical formulations include the shear deformation and nonlocal parameter effects. The nonlocal governing equations with

appropriate boundary conditions for SWCNTs were derived and solved via Hamilton's principle and Navier's procedure. According to the study, the results showed the dependence of the frequency ratios on the chirality of carbon nanotube, the vibrational mode number, the aspect ratio, nonlocal parameter effect and the temperature change. From the results presented herein, it can be clearly seen that the small scale effect reduces of the vibrational characteristic and the reduction is amplified at higher values of vibration modes and for small length-to-diameter ratios. The influence of temperature change on the vibration frequencies of the single walled carbon nanotubes for both cases of low and high temperatures is also discussed. It was concluded that at low or room temperature the frequency ratios  $\chi_{th}$  are more than unity, whereas the frequency ratios  $\chi_{th}$  are less than unity for the case of high temperature. It can be detected that at low or room temperature, the frequency ratios for the SWCNT increase as the temperature change increases. Conversely to the case of high temperature, it can be noted that the thermal effect on the frequency becomes less significant with the increase temperature change. It is also shown that the values of frequency accounting for the thermal effect are larger than those ignoring the influence of temperature change for the case of room or low temperature, whereas the values of frequency with the thermal effect are smaller than those excluding the thermal effect for the case of high temperature. This work is expected to be useful in the design and analyze the thermal vibration properties of nano scale physical devices. The developed formulations can be extend to examine the response of the others type of materials (Kar *et al.* 2016, Katariya *et al.* 2017, Al-Maliki *et al.* 2020, Benferhat *et al.* 2020, Tayeb and Daouadji 2020, Ahmed *et al.* 2020b, Hadji and Bernard 2020, Rostami and Mohammadimehr 2020, Mahesh and Harursampath 2020, Civalek and Avcar 2020, Tayeb *et al.* 2020, Abed and Majeed 2020, Benferhat *et al.* 2021, Hashim and Sadiq 2021, Pourmoayed *et al.* 2021).

## References

- Abed, Z.A.K. and Majeed, W.I. (2020), "Effect of boundary conditions on harmonic response of laminated plates", *Compos. Mater. Eng., Int. J.*, **2**(2), 125-140. <http://doi.org/10.12989/cme.2020.2.2.125>
- Abdulrazzaq, M.A., Fenjan, R.M., Ahmed, R.A. and Faleh, N.M. (2020), "Thermal buckling of nonlocal clamped exponentially graded plate according to a secant function based refined theory", *Steel Compos. Struct., Int. J.*, **35**(1), 147-157. <https://doi.org/10.12989/scs.2020.35.1.147>
- Ahmed, R.A., Fenjan, R.M. and Faleh, N.M. (2019), "Analyzing post-buckling behavior of continuously graded FG nanobeams with geometrical imperfections", *Geomech. Eng., Int. J.*, **17**(2), 175-180. <https://doi.org/10.12989/gae.2019.17.2.175>
- Ahmed, R.A., Moustafa, N.M., Faleh, N.M. and Fenjan, R.M. (2020a), "Nonlocal nonlinear stability of higher-order porous beams via Chebyshev-Ritz method", *Struct. Eng. Mech., Int. J.*, **76**(3), 413-420. <https://doi.org/10.12989/sem.2020.76.3.413>
- Ahmed, R.A., Fenjan, R.M., Hamad, L.B. and Faleh, N.M. (2020b), "A review of effects of partial dynamic loading on dynamic response of nonlocal functionally graded material beams", *Adv. Mater. Res., Int. J.*, **9**(1), 33-48. <https://doi.org/10.12989/amr.2020.9.1.033>
- Al-Maliki, A.F., Faleh, N.M. and Alasadi, A.A. (2019), "Finite element formulation and vibration of nonlocal refined metal foam beams with symmetric and non-symmetric porosities", *Struct. Monit. Maint., Int. J.*, **6**(2), 147-159. <https://doi.org/10.12989/smm.2019.6.2.147>
- Al-Maliki, A.F.H., Ahmed, R.A., Moustafa, N.M. and Faleh, N.M. (2020), "Finite element based modeling and thermal dynamic analysis of functionally graded graphene reinforced beams", *Adv. Computat. Des., Int. J.*, **5**(2), 177-193. <https://doi.org/10.12989/acd.2020.5.2.177>
- Arefi, M. and Żur, K.K. (2020), "Free vibration analysis of functionally graded cylindrical nanoshells

- resting on Pasternak foundation based on two-dimensional analysis”, *Steel Compos. Struct., Int. J.*, **34**(4), 615-623. <https://doi.org/10.12989/scs.2020.34.4.615>
- Asrari, R., Ebrahimi, F. and Kheirikhah, M.M. (2020), “On post-buckling characteristics of functionally graded smart magneto-electro-elastic nanoscale shells”, *Adv. Nano Res., Int. J.*, **9**(1), 33-45. <https://doi.org/10.12989/anr.2020.9.1.033>
- Attia, M.A. and Rahman, A.A.A. (2018), “On vibrations of functionally graded viscoelastic nanobeams with surface effects”, *Int. J. Eng. Sci.*, **127**, 1-32. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2018.02.005>
- Attia, M.A. and Mohamed, S.A. (2020), “Nonlinear thermal buckling and postbuckling analysis of bidirectional functionally graded tapered nanobeams based on Reddy beam theory”, *Eng. Comput.* <https://doi.org/10.1007/s00366-020-01080-1>
- Attia, M.A., Shanab, R.A., Mohamed, S.A. and Mohamed, N.A. (2019), “Surface energy effects on the nonlinear free vibration of functionally graded Timoshenko nanobeams based on modified couple stress theory”, *Int. J. Struct. Stabil. Dyn.*, **19**(11), 1950127. <https://doi.org/10.1142/s021945541950127x>
- Bahaadini, R., Hosseini, M. and Amiri, M. (2020), “Dynamic stability of viscoelastic nanotubes conveying pulsating magnetic nanoflow under magnetic field”, *Eng. Comput.*, **37**(4), 2877-2889. <https://doi.org/10.1007/s00366-020-00980-6>
- Bao, W.X., Zhu, C.C. and Cui, W.Z. (2004), “Simulation of Young’s modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics”, *Physica B: Condensed Matter*, **352**(1-4), 156-163. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2004.07.005>
- Barati, M.R. and Shahverdi, H. (2020), “Finite element forced vibration analysis of refined shear deformable nanocomposite graphene platelet-reinforced beams”, *J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng.*, **42**, 33. <https://doi.org/10.1007/s40430-019-2118-8>
- Belmahi, S., Zidour, M. and Meradjah, M. (2019), “Small-scale effect on the forced vibration of a nano beam embedded an elastic medium using nonlocal elasticity theory”, *Adv. Aircr. Spacecr. Sci., Int. J.*, **6**(1), 1-18. <https://doi.org/10.12989/aas.2019.6.1.001>
- Benferhat, R., Daouadji, T.H. and Rabahi, A. (2020), “Predictions of the maximum plate end stresses of imperfect FRP strengthened RC beams: study and analysis”, *Adv. Mater. Res., Int. J.*, **9**(4), 265-287. <https://doi.org/10.12989/amr.2020.9.4.265>
- Benferhat, R., Daouadji, T.H. and Rabahi, A. (2021), “Effect of air bubbles in concrete on the mechanical behavior of RC beams strengthened in flexion by externally bonded FRP plates under uniformly distributed loading”, *Compos. Mater. Eng.*, **3**(1), 41-55. <https://doi.org/10.12989/cme.2021.3.1.041>
- Bensattalah, T., Bouakkaz, K., Zidour, M. and Daouadji, T.H. (2018), “Critical buckling loads of carbon nanotube embedded in Kerr’s medium”, *Adv. Nano Res., Int. J.*, **6**(4), 339-356. <https://doi.org/10.12989/anr.2018.6.4.339>
- Bensattalah, T., Zidour, M. and Daouadji, T.H. (2019a), “A new nonlocal beam model for free vibration analysis of chiral single-walled carbon nanotubes”, *Compos. Mater. Eng., Int. J.*, **1**(1), 21-31. <https://doi.org/10.12989/cme.2019.1.1.021>
- Bensattalah, T., Zidour, M., Daouadji, T.H. and Bouakkaz, K. (2019b), “Theoretical analysis of chirality and scale effects on critical buckling load of zigzag triple walled carbon nanotubes under axial compression embedded in polymeric matrix”, *Struct. Eng. Mech., Int. J.*, **70**(3), 269-277. <https://doi.org/10.12989/sem.2019.70.3.269>
- Bensattalah, T., Hamidi, A., Bouakkaz, K., Zidour, M. and Daouadji, T.H. (2020), “Critical Buckling Load of Triple-Walled Carbon Nanotube Based on Nonlocal Elasticity Theory”, *J. Nano Res.*, **62**, 108-119. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/jnanor.62.108>
- Civalek, Ö. and Avcar, M. (2020), “Free vibration and buckling analyses of CNT reinforced laminated non-rectangular plates by discrete singular convolution method”, *Eng. Comput.* <https://doi.org/10.1007/s00366-020-01168-8>
- Civalek, Ö., Dastjerdi, S., Akbaş, S.D. and Akgöz, B. (2021), “Vibration analysis of carbon nanotube-reinforced composite microbeams”, *Mathe. Methods Appl. Sci.* <https://doi.org/10.1002/mma.7069>
- Dai, H., Hafner, J.H., Rinzler, A.G., Colbert, D.T. and Smalley, R.E. (1996), “Nanotubes as nanoprobe in scanning probe microscopy”, *Nature*, **384**(6605), 147-150. <https://doi.org/10.1038/384147a0>

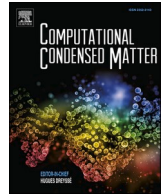
- Dehghan, M., Ebrahimi, F. and Vinyas, M. (2019), "Wave dispersion characteristics of fluid-conveying magneto-electro-elastic nanotubes", *Eng. Comput.*, **36**, 1687-1703.  
<https://doi.org/10.1007/s00366-019-00790-5>
- Dehsaraji, M.L., Arefi, M. and Loghman, A. (2020), "Three dimensional free vibration analysis of functionally graded nano cylindrical shell considering thickness stretching effect", *Steel Compos. Struct., Int. J.*, **34**(5), 657-670. <https://doi.org/10.12989/SCS.2020.34.5.657>
- Dharap, P., Li, Z., Nagarajaiah, S. and Barrera, E.V. (2004), "Nanotube film based on single-wall carbon nanotubes for strain sensing", *Nanotechnology*, **15**(3), 379-382.  
<https://doi.org/10.1088/0957-4484/15/3/026>
- Dresselhaus, M.S., Dresselhaus, G. and Eklund, P.C. (1996), *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, New York, USA.
- Dresselhaus, M.S., Lin, Y.M., Rabin, O., Jorio, A., Souza Filho, A.G., Pimenta, M.A., Saito, R., Samsonidze, G. and Dresselhaus, G. (2003), "Nanowires and nanotubes", *Mater. Sci. Eng.: C*, **23**(1-2), 129-140.  
[https://doi.org/10.1016/s0928-4931\(02\)00240-0](https://doi.org/10.1016/s0928-4931(02)00240-0)
- Ebrahimi, F. and Barati, M.R. (2017), "Buckling analysis of nonlocal strain gradient axially functionally graded nanobeams resting on variable elastic medium", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: J. Mech. Eng. Sci.*, **232**(11), 2067-2078. <https://doi.org/10.1177/0954406217713518>
- Ebrahimi, F. and Barati, M.R. (2019), "A nonlocal strain gradient mass sensor based on vibrating hygro-thermally affected graphene nanosheets", *Iran J. Sci. Technol. Trans. Mech. Eng.*, **43**, 205-220.  
<https://doi.org/10.1007/s40997-017-0131-z>
- Eltaher, M.A., Agwa, M. and Kabeel, A. (2018), "Vibration analysis of material size-dependent CNTs using energy equivalent model", *J. Appl. Computat. Mech.*, **4**(2), 75-86.  
<https://doi.org/10.22055/JACM.2017.22579.1136>
- Eltaher, M.A., Mohamed, N., Mohamed, S. and Seddek, L.F. (2019a), "Postbuckling of Curved Carbon Nanotubes Using Energy Equivalent Model", *J. Nano Res.*, **57**, 136-157.  
<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/jnanor.57.136>
- Eltaher, M.A., Almalki, T.A., Almitani, K.H., Ahmed, K.I.E. and Abdraboh, A.M. (2019b), "Modal participation of fixed-fixed single-walled carbon nanotube with vacancies", *Int. J. Adv. Struct. Eng.*, **11**(2), 151-163. <https://doi.org/10.1007/s40091-019-0222-8>
- Eltaher, M.A., Almalki, T.A., Almitani, K. and Ahmed, K.I. (2019c), "Participation Factor and Vibration of Carbon Nanotube with Vacancies", *J. Nano Res.*, **57**, 158-174.  
<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/jnanor.57.158>
- Eltaher, M.A., Omar, F.-A., Abdalla, W.S., Kabeel, A.M. and Alshorbagy, A.E. (2020), "Mechanical analysis of cutout piezoelectric nonlocal nanobeam including surface energy effects", *Struct. Eng. Mech., Int. J.*, **76**(1), 141-151. <https://doi.org/10.12989/sem.2020.76.1.141>
- Eringen, A.C. (1972), "Nonlocal polar elastic continua", *Int. J. Eng. Sci.*, **10**(1), 1-16.  
[https://doi.org/10.1016/0020-7225\(72\)90070-5](https://doi.org/10.1016/0020-7225(72)90070-5)
- Eringen, A.C. (1983), "On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves", *J. Appl. Phys.*, **54**(9), 4703-4710. <https://doi.org/10.1063/1.332803>
- Fenjan, R.M., Ahmed, R.A., Alasadi, A.A. and Faleh, N.M. (2019a), "Nonlocal strain gradient thermal vibration analysis of double-coupled metal foam plate system with uniform and non-uniform porosities", *Coupl. Syst. Mech., Int. J.*, **8**(3), 247-257. <https://doi.org/10.12989/csm.2019.8.3.247>
- Fenjan, R.M., Ahmed, R.A. and Faleh, N.M. (2019b), "Investigating dynamic stability of metal foam nanoplates under periodic in-plane loads via a three-unknown plate theory", *Adv. Aircr. Spacecr. Sci., Int. J.*, **6**(4), 297-314. <https://doi.org/10.12989/aas.2019.6.4.297>
- Fenjan, R.M., Moustafa, N.M. and Faleh, N.M. (2020), "Scale-dependent thermal vibration analysis of FG beams having porosities based on DQM", *Adv. Nano Res., Int. J.*, **8**(4), 283-292.  
<https://doi.org/10.12989/anr.2020.8.4.283>
- Frankland, S. (2003), "The stress-strain behavior of polymer-nanotube composites from molecular dynamics simulation", *Compos. Sci. Technol.*, **63**(11), 1655-1661.  
[https://doi.org/10.1016/s0266-3538\(03\)00059-9](https://doi.org/10.1016/s0266-3538(03)00059-9)

- Gafour, Y., Hamidi, A., Benahmed, A., Zidour, M. and Bensattalah, T. (2020), "Porosity-dependent free vibration analysis of FG nanobeam using non-local shear deformation and energy principle", *Adv. Nano Res., Int. J.*, **8**(1), 37-47. <https://doi.org/10.12989/anr.2020.8.1.037>
- Ghandourh, E.E. and Abdraboh, A.M. (2020), "Dynamic analysis of functionally graded nonlocal nanobeam with different porosity models", *Steel Compos. Struct., Int. J.*, **36**(3), 293-305. <https://doi.org/10.12989/scs.2020.36.3.293>
- Hadji, L. and Bernard, F. (2020), "Bending and free vibration analysis of functionally graded beams on elastic foundations with analytical validation", *Adv. Mater. Res., Int. J.*, **9**(1), 63-98. <https://doi.org/10.12989/amr.2020.9.1.063>
- Hamad, L.B., Khalaf, B.S. and Faleh, N.M. (2019), "Analysis of static and dynamic characteristics of strain gradient shell structures made of porous nano-crystalline materials", *Adv. Mater. Res., Int. J.*, **8**(3), 179-196. <https://doi.org/10.12989/amr.2019.8.3.179>
- Hamed, M.A., Mohamed, S.A. and Eltaher, M.A. (2020), "Buckling analysis of sandwich beam rested on elastic foundation and subjected to varying axial in-plane loads", *Steel Compos. Struct., Int. J.*, **34**(1), 75-89. <https://doi.org/10.12989/scs.2020.34.1.075>
- Hamidi, A., Zidour, M., Bouakkaz, K. and Bensattalah, T. (2018), "Thermal and Small-Scale Effects on Vibration of Embedded Armchair Single-Walled Carbon Nanotubes", *J. Nano Res.*, **51**, 24-38. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/JNanoR.51.24>
- Hashim, H.A. and Sadiq, I.A. (2021), "A five-variable refined plate theory for thermal buckling analysis of composite plates", *Compos. Mater. Eng., Int. J.*, **3**(2), 135-155. <https://doi.org/10.12989/cme.2021.3.2.135>
- Hernandez, E., Goze, C., Bernier, P. and Rubio, A. (1998), "Elastic Properties of C and B<sub>x</sub>C<sub>y</sub>N<sub>z</sub> Composite Nanotubes", *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 4502. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.4502>
- Iijima, S. (1991), "Helical microtubules of graphitic carbon", *Nature*, **354**(6348), 56-58. <https://doi.org/10.1038/354056a0>
- Jalaei, M.H. and Civalek, Ö. (2019), "On dynamic instability of magnetically embedded viscoelastic porous FG nanobeam", *Int. J. Eng. Sci.*, **143**, 14-32. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2019.06.013>
- Jiang, H., Liu, B., Huang, Y. and Hwang, K.C. (2004), "Thermal expansion of single wall carbon nanotubes", *J. Eng. Mater. Technol.*, **126**(3), 265. <https://doi.org/10.1115/1.1752925>
- Kachapi, S.H.H. (2020), "Nonlinear and nonclassical vibration analysis of double walled piezoelectric cylindrical nanoshell", *Adv. Nano Res., Int. J.*, **9**(4), 277-294. <https://doi.org/10.12989/anr.2020.9.4.277>
- Kar, V.R., Panda, S.K. and Mahapatra, T.R. (2016), "Thermal buckling behaviour of shear deformable functionally graded single/doubly curved shell panel with TD and TID properties", *Adv. Mater. Res., Int. J.*, **5**(4), 205-221. <https://doi.org/10.12989/amr.2016.5.4.205>
- Karami, B. and Janghorban, M. (2019b), "A new size-dependent shear deformation theory for free vibration analysis of functionally graded/anisotropic nanobeams", *Thin-Wall. Struct.*, **143**, 106227. <https://doi.org/10.1016/j.tws.2019.106227>
- Karami, B. and Janghorban, M. (2019a), "On the dynamics of porous nanotubes with variable material properties and variable thickness", *Int. J. Eng. Sci.*, **136**, 53-66. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2019.01.002>
- Karami, B., Shahsavari, D., Nazemosadat, S.M.R., Li, L. and Ebrahimi, A. (2018a), "Thermal buckling of smart porous functionally graded nanobeam rested on Kerr foundation", *Steel Compos. Struct., Int. J.*, **29**(3), 349-362. <https://doi.org/10.12989/scs.2018.29.3.349>
- Karami, B., Shahsavari, D., Li, L., Karami, M. and Janghorban, M. (2018b), "Thermal buckling of embedded sandwich piezoelectric nanoplates with functionally graded core by a nonlocal second-order shear deformation theory", *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: J. Mech. Eng. Sci.*, **233**(1), 287-301. <https://doi.org/10.1177/0954406218756451>
- Karami, B., Shahsavari, D., Janghorban, M. and Li, L. (2021), "Free vibration analysis of FG nanoplate with poriferous imperfection in hygrothermal environment", *Struct. Eng. Mech., Int. J.*, **73**(2), 191-207. <https://doi.org/10.12989/sem.2020.73.2.191>
- Katariya, P.V., Panda, S.K. and Mahapatra, T.R. (2017), "Nonlinear thermal buckling behaviour of laminated composite panel structure including the stretching effect and higher-order finite element", *Adv.*



- Mater. Res.*, **6**(4), 349-361. <https://doi.org/10.12989/amr.2017.6.4.349>
- Khazaei, P. and Mohammadimehr, M. (2020), "Vibration analysis of porous nanocomposite viscoelastic plate reinforced by FG-SWCNTs based on a nonlocal strain gradient theory", *Comput. Concrete, Int. J.*, **26**(1), 31-52. <https://doi.org/10.12989/cac.2020.26.1.031>
- Krishnan, A., Dujardin, E., Ebbesen, T.W., Yianilos, P.N. and Treacy, M.M.J. (1998), "Young's modulus of single-walled nanotubes", *Phys. Rev. B*, **58**(20), 14013-14019. <https://doi.org/10.1103/physrevb.58.14013>
- Mahesh, V. and Harursampath, D. (2020), "Nonlinear vibration of functionally graded magneto-electro-elastic higher order plates reinforced by CNTs using FEM", *Eng. Comput.* <https://doi.org/10.1007/s00366-020-01098-5>
- Mirjavadi, S.S., Forsat, M., Nia, A.F., Badnava, S. and Hamouda, A.M.S. (2020a), "Nonlocal strain gradient effects on forced vibrations of porous FG cylindrical nanoshells", *Adv. Nano Res., Int. J.*, **8**(2), 149-156. <https://doi.org/10.12989/anr.2020.8.2.149>
- Mirjavadi, S.S., Nikookar, M., Mollaee, S., Forsat, M., Barati, M.R. and Hamouda, A.M.S. (2020b), "Analyzing exact nonlinear forced vibrations of two-phase magneto-electro-elastic nanobeams under an elliptic-type force", *Adv. Nano Res., Int. J.*, **9**(1), 47-58. <https://doi.org/10.12989/anr.2020.9.1.047>
- Mohamed, N., Mohamed, S.A. and Eltahir, M.A. (2020), "Buckling and post-buckling behaviors of higher order carbon nanotubes using energy-equivalent model", *Eng. Comput.*, **37**(4), 2823-2836. <https://doi.org/10.1007/s00366-020-00976-2>
- Mohammadimehr, M., Firouzeh, S., Pahlavanzadeh, M., Heidari, Y. and Irani-Rahaghi, M. (2020), "Free vibration of sandwich micro-beam with porous foam core, GPL layers and piezo-magneto-electric facesheets via NSGT", *Comput. Concrete, Int. J.*, **26**(1), 75-94. <https://doi.org/10.12989/cac.2020.26.1.075>
- Pourmoayed, A., Fard, K.M. and Rousta, B. (2021), "Free vibration analysis of sandwich structures reinforced by functionally graded carbon nanotubes", *Compos. Mater. Eng., Int. J.*, **3**(1), 1-23. <https://doi.org/10.12989/cme.2021.3.1.001>
- Robertson, J. (2004), "Realistic applications of CNTs", *Materials Today*, **7**(10), 46-52. [https://doi.org/10.1016/s1369-7021\(04\)00448-1](https://doi.org/10.1016/s1369-7021(04)00448-1)
- Rostami, R. and Mohammadimehr, M. (2020), "Vibration control of rotating sandwich cylindrical shell-reinforced nanocomposite face sheet and porous core integrated with functionally graded magneto-electro-elastic layers", *Eng. Comput.* <https://doi.org/10.1007/s00366-020-01052-5>
- Safa, A., Hadji, L., Bourada, M. and Zouatnia, N. (2019), "Thermal vibration analysis of FGM beams using an efficient shear deformation beam theory", *Earthq. Struct., Int. J.*, **17**(3), 329-336. <https://doi.org/10.12989/eas.2019.17.3.329>
- Salvetat, J.-P., Bonard, J.-M., Thomson, N.H., Kulik, A.J., Forró, L., Benoit, W. and Zuppiroli, L. (1999), "Mechanical properties of carbon nanotubes", *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.*, **69**(3), 255-260. <https://doi.org/10.1007/s003390050999>
- Sedighi, H.M. and Yaghootian, A. (2016), "Dynamic instability of vibrating carbon nanotubes near small layers of graphite sheets based on nonlocal continuum elasticity", *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, **57**(1), 90-100. <https://doi.org/10.1134/s0021894416010107>
- Shanab, R.A., Attia, M.A., Mohamed, S.A. and Mohamed, N.A. (2020), "Effect of microstructure and surface energy on the static and dynamic characteristics of FG Timoshenko nanobeam embedded in an elastic medium", *J. Nano Res.*, **61**, 97-117. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/jnanor.61.97>
- Shariati, A., Barati, M. R., Ebrahimi, F., Singhal, A. and Toghroli, A. (2020), "Investigating vibrational behavior of graphene sheets under linearly varying in-plane bending load based on the nonlocal strain gradient theory", *Adv. Nano Res., Int. J.*, **8**(4), 265-276. <https://doi.org/10.12989/anr.2020.8.4.265>
- She, G.-L., Liu, H.-B. and Karami, B. (2020), "On resonance behavior of porous FG curved nanobeams", *Steel Compos. Struct., Int. J.*, **36**(2), 179-186. <https://doi.org/10.12989/scs.2020.36.2.179>
- Tadmor, E.B., Smith, G.S., Bernstein, N. and Kaxiras, E. (1999), "Mixed finite element and atomistic formulation for complex crystals", *Phys. Rev. B*, **59**(1), 235-245. <https://doi.org/10.1103/physrevb.59.235>
- Tahounch, V., Naei, M.H. and Mashhadi, M.M. (2020), "Influence of vacancy defects on vibration analysis of graphene sheets applying isogeometric method: Molecular and continuum approaches", *Steel Compos.*

- Struct., Int. J.*, **34**(2), 261-277. <https://doi.org/10.12989/scs.2020.34.2.261>
- Tayeb, B. and Daouadji, T.H. (2020), "Improved analytical solution for slip and interfacial stress in composite steel-concrete beam bonded with an adhesive", *Adv. Mater. Res., Int. J.*, **9**(2), 133-153. <https://doi.org/10.12989/amr.2020.9.2.133>
- Tayeb, T.S., Zidour, M., Bensattalah, T., Heireche, H., Benahmed, A. and Bedia, E.A. (2020), "Mechanical buckling of FG-CNTs reinforced composite plate with parabolic distribution using Hamilton's energy principle", *Adv. Nano Res., Int. J.*, **8**(2), 135-148. <https://doi.org/10.12989/anr.2020.8.2.135>
- Tersoff, J. and Ruoff, R.S. (1994), "Structural properties of a carbon-nanotube crystal", *Phys. Rev. Lett.*, **73**(5), 676-679. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.73.676>
- Thanh, C.L., Nguyen, T.N., Vu, T.H., Khatir, S. and Abdel Wahab, M. (2020), "A geometrically nonlinear size-dependent hypothesis for porous functionally graded micro-plate", *Eng. Comput.* <https://doi.org/10.1007/s00366-020-01154-0>
- Timesli, A. (2020), "Buckling analysis of double walled carbon nanotubes embedded in Kerr elastic medium under axial compression using the nonlocal Donnell shell theory", *Adv. Nano Res., Int. J.*, **9**(2), 69-82. <https://doi.org/10.12989/anr.2020.9.2.069>
- Timoshenko, S.P. (1921), "LXVI. On the correction for shear of the differential equation for transverse vibrations of prismatic bars", *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **41**(245), 744-746. <https://doi.org/10.1080/14786442108636264>
- Tombler, T.W., Zhou, C., Alexseyev, L., Kong, J., Dai, H., Liu, L. and Wu, S.-Y. (2000), "Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local-probe manipulation", *Nature*, **405**(6788), 769-772. <https://doi.org/10.1038/35015519>
- Treacy, M.M.J., Ebbesen, T.W. and Gibson, J.M. (1996), "Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes", *Nature*, **381**(6584), 678-680. <https://doi.org/10.1038/381678a0>
- Wang, Q. (2005), "Wave propagation in carbon nanotubes via nonlocal continuum mechanics", *J. Appl. Phys.*, **98**(12), 124301. <https://doi.org/10.1063/1.2141648>
- Wang, Q., Varadan, V.K. and Quek, S.T. (2006), "Small scale effect on elastic buckling of carbon nanotubes with nonlocal continuum models", *Phys. Lett. A*, **357**(2), 130-135. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2006.04.026>
- Wang, C.M., Zhang, Y.Y. and He, X.Q. (2007), "Vibration of nonlocal Timoshenko beams", *Nanotechnology*, **18**(10), 105401. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/18/10/105401>
- Wilder, J.W.G., Venema, L.C., Rinzler, A.G., Smalley, R.E. and Dekker, C. (1998), "Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes", *Nature*, **391**(6662), 59-62. <https://doi.org/10.1038/34139>
- Yaghoobi, H. and Taheri, F. (2020), "Analytical solution and statistical analysis of buckling capacity of sandwich plates with uniform and non-uniform porous-cellular core reinforced with graphene nanoplatelets", *Compos. Struct.*, **252**, 112700. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112700>
- Yao, X. and Han, Q. (2006), "Buckling analysis of multiwalled carbon nanotubes under torsional load coupling with temperature change", *J. Eng. Mater. Technol.*, **128**(3), 419. <https://doi.org/10.1115/1.2203102>
- Ye, L.H., Liu, B.G. and Wang, D.S. (2001), "Ab initio molecular dynamics study on small carbon nanotubes", *Chinese Phys. Lett.*, **18**(11), 1496-1499. <https://doi.org/10.1088/0256-307x/18/11/323>
- Yoon, J., Ru, C.Q. and Mioduchowski, A. (2004), "Timoshenko-beam effects on transverse wave propagation in carbon nanotubes", *Compos. Part B: Eng.*, **35**(2), 87-93. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2003.09.002>
- Yuan, Y., Zhao, K., Zhao, Y. and Kiani, K. (2020), "Nonlocal-integro-vibro analysis of vertically aligned monolayered nonuniform FGM nanorods", *Steel Compos. Struct., Int. J.*, **37**(5), 551-569. <https://doi.org/10.12989/scs.2020.37.5.551>
- Zouatnia, N. and Hadji, L. (2019), "Effect of the micromechanical models on the bending of FGM beam using a new hyperbolic shear deformation theory", *Earthq. Struct., Int. J.*, **16**(2), 177-183. <https://doi.org/10.12989/eas.2019.16.2.177>



# Effect of chiral angle and chiral index on the vibration of single-walled carbon nanotubes using nonlocal Euler-Bernoulli beam model

Moulay Nouredine<sup>a</sup>, Liani Mohamed<sup>a</sup>, Y. Al-Douri<sup>b,c,\*</sup>, Bensaid Djillali<sup>d</sup>, Berrahal Mokhtar<sup>e</sup>

<sup>a</sup> Department of Physic, Faculty of Exact Sciences, Université Djilali Liabès of Sidi Bel Abbès, 22000, Algeria

<sup>b</sup> Engineering Department, American University of Iraq-Sulaimani, P.O.Box 46001, Sulaimani, Kurdistan, Iraq

<sup>c</sup> Department of Mechatronics Engineering, Faculty of Engineering and Natural Sciences, Bahcesehir University, 34349, Besiktas, Istanbul, Turkey

<sup>d</sup> Department of Material Sciences, University of Ain Temouchent Belhadj BOUCHAIB, 46000, Algeria

<sup>e</sup> Higher Normal School of Oran, Department of Exact Sciences, Algeria

## ARTICLE INFO

### Keywords:

CNTs  
Chiral index  
Chiral angle  
SWCNTs  
Nonlocal continuum theory  
Nonlocal Euler-Bernoulli beam model

## ABSTRACT

The effect of various physical phenomena on the vibration characteristics of CNTs has attracted much interest. In this work, the effect of chiral index and chiral angle dependent from diameter on vibration of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) is investigated. The model of nonlocal Euler-Bernoulli beam is used to study the free vibration characteristics of SWCNT. Based on the nonlocal continuum theory, the governing equation of motion is formulated and derived. The influences of small-scale parameter, chirality of SWCNTs, vibrational mode number, aspect ratio (i.e. length-to-diameter ratio) of SWCNTs, chiral index and chiral angle on the vibration characteristics of SWCNTs are examined and discussed. The results indicate significant dependence of natural frequencies on the nonlocal parameter, chiral angle, chiral index, aspect ratio and chirality of SWCNTs. From numerical results, it is concluded that the vibration characteristics of SWCNT have been influenced by the chiral angle and chiral index. This work is supposed to be useful reference to researchers who are designing nanodevices.

## 1. Introduction

Carbon nanotubes (CNTs) [1] have attracted a great attention from scientists and engineers in most fields of science and engineering due to their extraordinary physical, chemical and mechanical properties. These properties allow them to be applied for a wide range of applications [2, 3] such as nano-electronics, nano-switch, solar cell, medical tools and nano-devices. Therefore, the mechanical properties and behaviors of CNTs including the Young's modulus, shear modulus, buckling behavior and vibration responses are the topic of many experimental studies. The first experimental measurement of Young's modulus in MWCNTs has given a value, 1.8 TPa obtained by Treacy et al. [4] using transmission electron microscopy (TEM). Demczyk et al. [5] have used TEM to measure Young's modulus of MWCNTs, reported the Young's modulus range from 0.8 to 0.9 TPa and tensile strength as estimated to be 150 GPa. Lourie and Wagner [6] have measured the elastic properties of CNTs using micro-Raman spectroscopy and reported a Young's modulus, 2.825–3.577 TPa for single-walled carbon nanotubes (SWCNT) with an average radius, 0.7 nm, 1.718 and 2.437 TPa for multi-walled carbon

nanotubes (MWCNT) with an average radius of 5–10 nm. Xiao et al. [7] have investigated for SWCNT the tensile modulus ranged from 0.27 to 3.6 TPa, while the ultimate strength varies from 11 to 200 GPa. As dealing with experiments at nanoscales, it is difficult to be performed due to weak control of parameters and theoretical modeling of nanomaterials became very important. In the literature, typically two types of modeling methods are discussed; (i) atomistic modelling (molecular mechanics/dynamics and *ab initio*) [8,9] and (ii) classical continuum mechanics [10]. By using *ab initio* simulations based on pseudo-potential density function theory, Sanchez-Portalet et al. [11] have studied the structural, vibrational and mechanical properties of SWCNTs with different radii and chiralities. By using MD approach, Bao et al. [12] reported Young's modulus average values to be  $935.805 \pm 0.618$  GPa,  $935.287 \pm 2.887$  GPa and  $918.309 \pm 10.392$  GPa for Armchair, Zigzag and Chiral SWCNTs, respectively. The MD simulations have been employed by Tahreen and Masud [13] to investigate the variations in the elastic properties of SWCNTs with tube radius, length and chirality. Kalamkarov et al. [14] have researched the asymptotic homogenization (analytical) approach and reported that the Young's modulus is 1.71 TPa,

\* Corresponding author. Engineering Department, American University of Iraq-Sulaimani, P.O.Box 46001, Sulaimani, Kurdistan, Iraq.  
E-mail address: [yaldouri@yahoo.com](mailto:yaldouri@yahoo.com) (Y. Al-Douri).

<https://doi.org/10.1016/j.cocom.2022.e00655>

Received 29 December 2021; Received in revised form 27 January 2022; Accepted 27 January 2022

Available online 30 January 2022

2352-2143/© 2022 Published by Elsevier B.V.

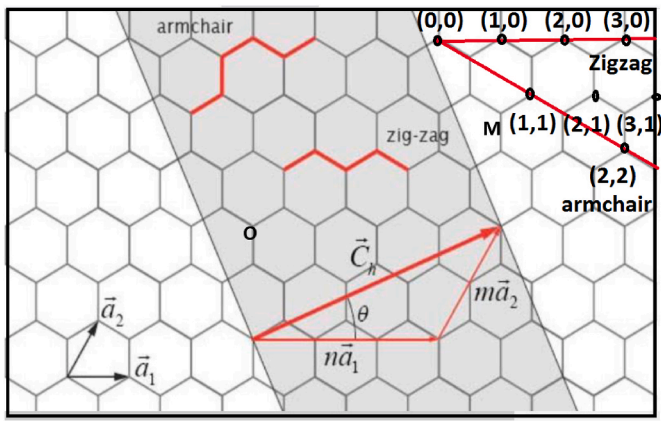


Fig. 1. Schematic of the 2D graphene sheet, Zigzag and Armchair directions, and chiral angle of SWCNTs.

and shear modulus is 0.32 TPa. Since molecular dynamics (MD) simulation is limited to systems of computation and often expensive to compute especially for large-scale MWCNTs [15]. Hence, the continuum mechanics methods are increasingly being considered as an efficient way to study the materials at nanoscale and can be used to investigate some physical problems in nanoscale [16]. Other literature shows that the continuum mechanics theory has been widely and successfully used to study the mechanical behavior of CNTs; like thermo-mechanical analysis of CNTs [17], static deflection [18], buckling [19], wave propagation [20] and vibration analysis [21] of CNTs. It is well known that classical continuum mechanics theories size-independent, because it cannot incorporate the small-scale effect in nano-scale structure.

It is well known that the results are size independent in classical continuum mechanics theories, because it cannot incorporate the small-scale effect in nanostructure. The local continuum mechanics theory assumes that the stress at a point depends only on the strain at the same point, whereas in the nonlocal continuum mechanics theory initiated by Eringen [22], the stress state at a given point as a function of strain states of all points in the continuum mechanics. Among the works in the literature that have used this theory. Using the non-local elasticity theory and Timoshenko beam, Bensattalah et al. [23] have studied the non-local buckling of zigzag TWCNTs embedded in an elastic medium (polymeric

Table 1

List for all chiral indices of nanotubes with different chiral angles and different diameters.

CNT type	Chiral index	Chiral angle (°)	Diametre (nm)
Armchair	(5,5)	30	0.68755
Chiral	(6,5)	26.9955	0.75735
	(7,5)	24.5036	0.82887
	(8,5)	22.4109	0.90171
	(9,5)	20.633	0.97558
	(10,5)	19.1066	1.05025
	(11,5)	17.7837	1.12557
	(12,5)	16.6272	1.20141
	(13,5)	15.6084	1.27768
	(14,5)	14.7047	1.35432
	(15,5)	13.8979	1.43125
	(16,5)	13.1736	1.50844
	(17,5)	12.5198	1.58584
	(18,5)	11.927	1.66343
	(19,5)	11.3871	1.74119

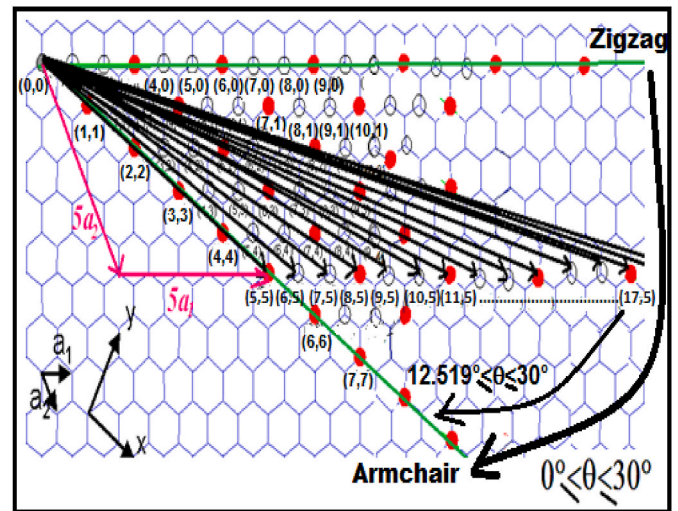


Fig. 3. Chiral vector of built SWCNTs with diverse chiral angle.

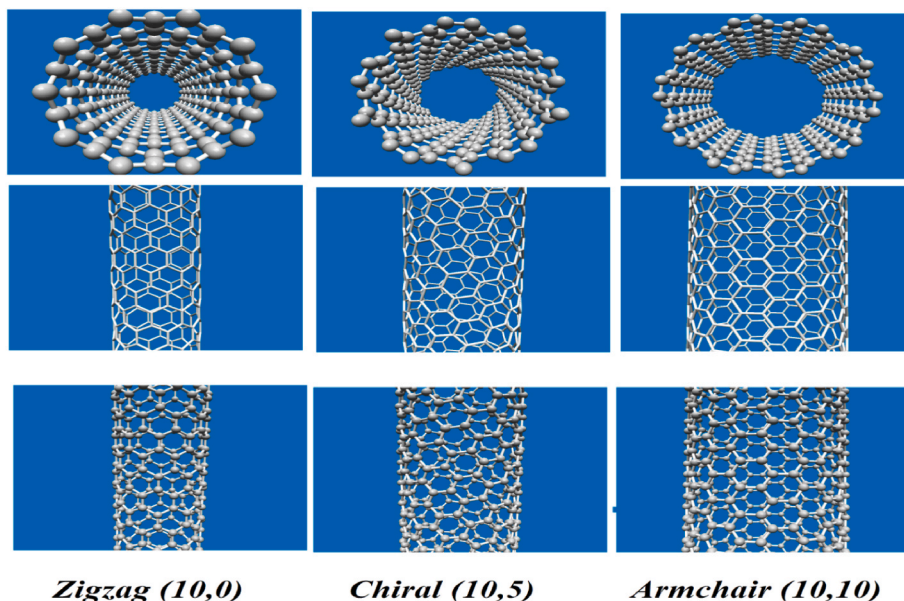


Fig. 2. Modeled 3D of SWCNTs structure with different chiralities, armchair(10,5), zigzag(10,0) and chiral(10,10).



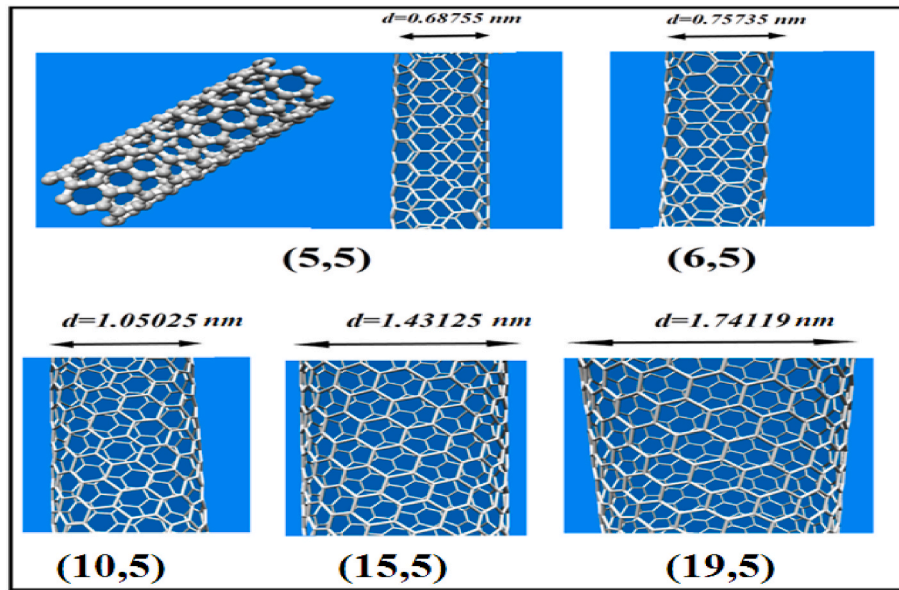


Fig. 4. Modeled 3D of SWCNTs for (5,5) (6,5) (10,5) (15,5) and (19,5) with different diameters.

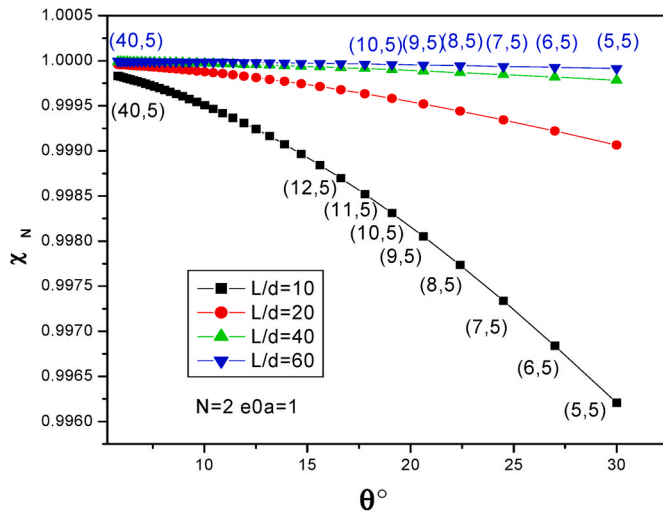


Fig. 5. The effect of chiral angle  $\theta$  on the frequency ratio  $\chi_N$  of SWCNTs at different values of vibration mode numbers  $N$  for all chiral indices  $(n,5)$  with  $n \in [5, 6, 7, 8, \dots, 40]$ . The value of  $e_0a = 2nm$  and  $\frac{L}{d} = 40$ .

matrix) under axial compression. Heireche et al. [24] have researched the initial stress and small-scale effect on wave propagation of double-walled carbon nanotubes (DWNTs) using a nonlocal Euler–Bernoulli beam model. While, Torabi et al. [25] have investigated the free transverse vibration of cracked nanobeams using nonlocal elasticity theory and Timoshenko beam theory. Ponnusamy and Amuthalakshmi [26] have studied the influence of thermal and magnetic field on transverse vibration of DWNTs using nonlocal Timoshenko beam theory (TBT). And, Bensattalah et al. [27] have researched the Critical Buckling Load of SWCNTs with Non-Local Timoshenko Beam Using the Differential Transform Method (DTM). Based on nonlocal Levinson beam theory LBT, the vibration analysis of nanotubes considering surface effects is studied by Lee [28]. Vibration analysis of armchair SWCNTs considering thermal effects is researched by Naceri et al. [29] using Levinson beam model. And, Wang et al. [30] have investigated the free vibration of embedded single-walled fluid-conveying carbon nanotubes (SWCNTs) in magnetic and temperature fields that are modeled by the nonlocal Timoshenko beam theory. Besseghier et al. [31] have reported the forced vibration of

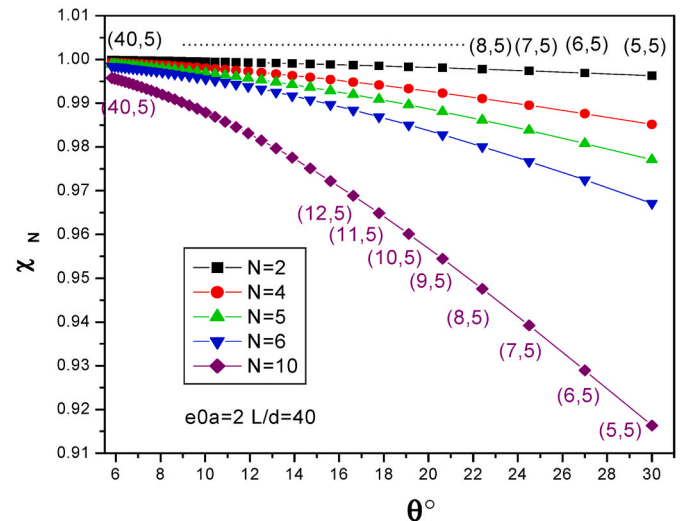


Fig. 6. The relationship between the values of ratio  $\chi_N$ , the chiral angle and aspect ratio  $\frac{L}{d}$  of SWCNTs for all chiral indices  $(n,5)$  with  $n \in [5, 6, 7, 8, \dots, 40]$ . The value of  $e_0a = 1nm$  and  $N = 2$ .

carbon nanotubes (CNTs) using the local and non-local Euler-Bernoulli beam theory. Şimşek [32] has investigated the nonlocal effects in the forced vibration of an elastically connected double-carbon nanotube system (DCNTS) carrying a moving nanoparticle based on the nonlocal elasticity theory. Belmahi et al. [33] have investigated the vibration of single-walled carbon nanotubes embedded in a polymeric matrix using nonlocal elasticity theories with account arbitrary boundary conditions effects. By using theory of nonlocal Timoshenko beam, Chemi et al. [34] have showed the Critical Buckling Load of DWCNTs embedded in Elastic Medium. Yang et al. [35] have reported the effect of small scale on wave propagation of fluid-filled carbon nanotubes using a nonlocal fluid theory. Maachou et al. [36] have analyzed the free vibrations of zigzag single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) by nonlocal Levinson beam model including thermal effects. Hussain et al. [37] have studied the effect of bending rigidity on the vibration of armchair and zigzag SWCNTs using a nonlocal elasticity theory under boundary conditions clamped-clamped (C–C) and clamped-free (C–F). Hussain and Naeem

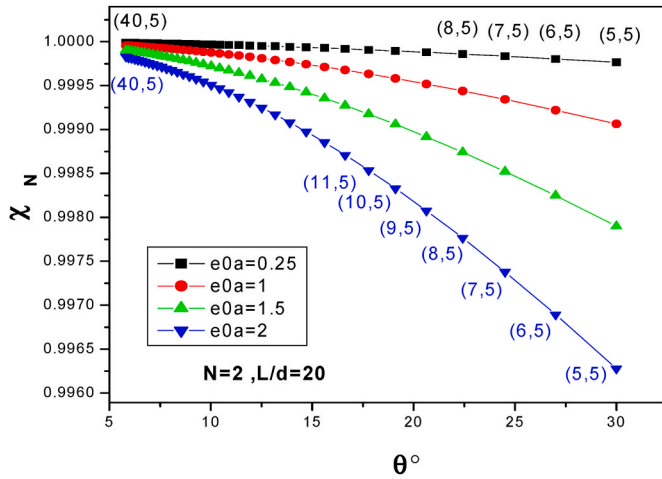


Fig. 7. The dependence of the frequency ratio  $\chi_N$  with on the chiral angle of SWCNTs at different values of small-scale effect  $e_0a$  for all chiral indices  $(n,5)$  with  $n \in [5, 6, 7, 8, \dots, 40]$ . The value of  $N = 2$  and  $\frac{L}{d} = 20$ .

[38] have analyzed the vibration characteristics of SWCNTs based on nonlocal elasticity theory using Wave propagation approach (WPA) including chirality. Although several studies on the effect of various parameters on the frequency of SWCNTs using a nonlocal Euler–Bernoulli and Timoshenko beam theories, there are no studies can be found for the effect of chiral index and chiral angle on vibration of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) based on the nonlocal Euler–Bernoulli beam theory. The aim of this study is to analyze the free vibration of single-walled carbon nanotubes SWCNTs using the nonlocal Euler–Bernoulli beam theory. Young’s modulus of SWCNTs is predicted using MD simulation. The effect of chiral index, chiral angle, small-scale parameter, chirality of SWCNTs, vibrational mode number, aspect ratio (length-to-diameter) on the frequency of SWCNTs is studied and discussed. This work can help for the study of nanodevices research that make use of free vibration properties of SWCNTs.

## 2. Theoretical approach

### 2.1. Geometrical structural of SWCNTs

The SWCNTs are generated by rolling up a graphene sheet into a seamless cylinder. These structures can be described by the tube chirality, defined or represented through a pair of indices  $(n,m)$  referred

to the chiral vector  $\vec{C}_h$ , and chiral angle  $\theta$  (see Fig. 1). The chiral vector  $\vec{C}_h$  is defined as shown in the equation below [39,40].

$$\vec{C}_h = n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2 \tag{1}$$

where  $\vec{a}_1$  and  $\vec{a}_2$  are the unit cell vectors of two-dimensional lattice formed by graphene sheets,  $n$  and  $m$  are two integers used to specify structure orientation of CNTs. The direction of CNT axis is perpendicular to this chiral vector. For example, to produce a CNT with the indices  $(8,5)$ , the sheet is rolled up so that the atom labelled  $(0,0)$  is superimposed on the one labelled  $(8,5)$ . The length of unit vector  $a$  is defined as  $a = \sqrt{3}a_{C-C}$  with the equilibrium carbon–carbon (C–C) covalent bond length  $a_{C-C}$  usually taken to be  $0.1421 \text{ nm}$  [41].

The relationship between the integers  $(n,m)$  and the nanotube diameter  $d$  is given by Equation (2),

$$d = a \frac{\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{\pi} \tag{2}$$

The angle between the chiral vector and zigzag nanotube axis is the chiral angle  $\theta$ . The relationship between the integers  $(n,m)$  and chiral angle,  $\theta$  is given by [41].

$$\theta = \cos^{-1} \left( \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}} \right); \theta = \sin^{-1} \left( \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}} \right); \theta = \tan^{-1} \left( \frac{\sqrt{3}m}{2n+m} \right) \tag{3}$$

Depending on the chiral indices  $(n,m)$  and chiral angles, CNTs can be classified to zigzag and armchair structures. For example, the modeled 3D of SWCNTs structure for armchair  $(10,5)$ , zigzag  $(10,0)$  and chiral  $(10,10)$  as shown in Fig. 2. For zigzag CNTs, the chiral indices  $m = 0$  and  $\theta = 0^\circ$  while for armchair CNTs, the chiral indices  $n$  and  $m$  are equal ( $n = m$ ) and  $\theta = 30^\circ$ . This is the maximum angle, after which the nanotube structure begins to repeat its orientation. For other values of indices ( $n \neq m$ ), CNTs are known as chiral and  $0^\circ < \theta < 30^\circ$ . In case of zigzag and armchair orientations, the diameter of nanotube can be calculated by  $d = a \frac{n}{\pi}$  and  $d = a \frac{\sqrt{3}n}{\pi}$ , respectively. Note the chiral angle in zigzag =  $0$ , while the chiral angle in armchair =  $30$ . This is the maximum angle, after which the nanotube structure begins to repeat its orientation.

To investigate this significant effect, fifteen types of nanotubes with different chiral angles and different tube diameter are listed in Table 1, it is shown that the chiral angle of these CNTs differs from  $11.3871$  to  $30$  and the chiral vector’s lengths that define the diameter of CNTs are variable from  $1.74119$  to  $0.68755 \text{ nm}$ . The chiral vectors of all these nanotubes are depicted in Fig. 3 and the modeled 3D SWCNTs for  $(5,5)$ ,  $(5,6)$ ,  $(5,10)$ ,  $(5,15)$  and  $(5,19)$  with different diameters are illustrated in Fig. 4.

Table 2

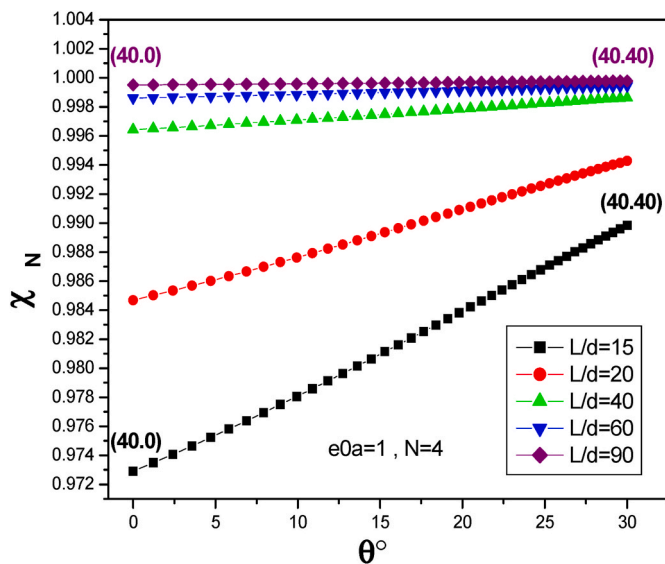
Values of frequency ratios  $\chi_N$  for all chiral indices  $(n,23)$  with  $n \in [23, 24, 25, 26, \dots, 40]$  and nonlocal parameter  $e_0a$ . The value of  $N = 4$  and  $\frac{L}{d} = 5$ .

Chiral index of nanotube	Diameter $d$ (nm)	Chiral angle $\theta$ ( $^\circ$ )	Young’s modulus average values (GPa)	Frequency ratios ( $\chi_N$ )		
				$(N = 4 \text{ and } \frac{L}{d} = 5)$		
				$e_0a = 0.5$	$e_0a = 1$	$e_0a = 2$
(23,23)	3.16273	30	935.805	0.94067	0.81108	0.57035
(24,23)	3.23173	29.2962	$\pm 0.618$	0.94275	0.81643	0.5778
(25,23)	3.30119	28.6219	(Armchair)	0.94473	0.82161	0.58516
(26,23)	3.3711	27.9756		0.94663	0.82662	0.59243
(27,23)	3.44141	27.3555		0.94844	0.83148	0.59959
(28,23)	3.51211	26.7603		0.95018	0.83617	0.60666
(29,23)	3.58318	26.1887	918.309	0.95184	0.84071	0.61362
(30,23)	3.65459	25.6394	$\pm 10.392$	0.95342	0.84511	0.62047
(31,23)	3.72632	25.1112	(chiral)	0.95494	0.84935	0.62722
(32,23)	3.79836	24.603		0.9564	0.85346	0.63386
(33,23)	3.87069	24.1137		0.95779	0.85742	0.64039
(34,23)	3.94328	23.6424		0.95912	0.86126	0.6468
(38,23)	4.23611	21.9196		0.96391	0.87535	0.67135
(39,23)	4.30986	21.5256		0.96498	0.87859	0.67721
(40,23)	4.38381	21.1449		0.96601	0.88171	0.68296

**Table 3**

Values of frequency ratios  $\chi_N$  for all chiral indices (n,5) with  $n \in [5, 6, 7, 8, \dots, 40]$  and vibration mode numbers  $N$ . The value of  $e_0a = 2$  and  $\frac{L}{d} = 40$ .

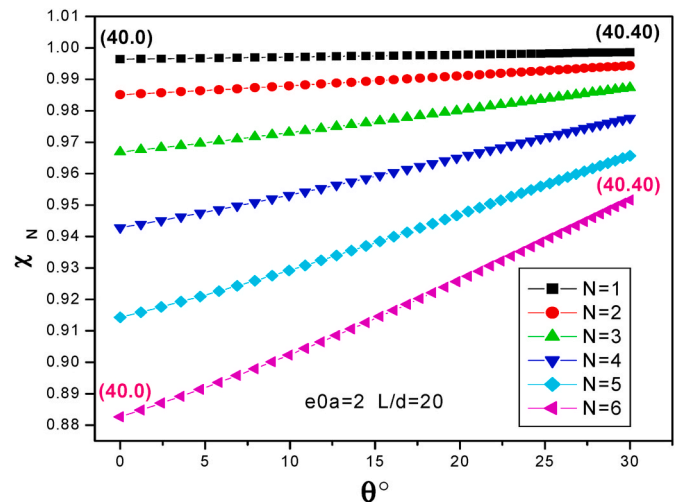
Chiral index of nanotube	Diameter $d$ (nm)	Chiral angle $\theta$ ( $^\circ$ )	Young's modulus average values (GPa)	Frequency ratios ( $\chi_N$ )		
				$(e_0a = 2 \text{ and } \frac{L}{d} = 40)$		
				$N = 2$	$N = 5$	$N = 10$
(5,5)	0.68755	30	935.805	0.99628	0.97706	0.91636
(6,5)	0.75735	26.9955	$\pm 0.618$	0.99689	0.9808	0.92895
(7,5)	0.82887	24.5036	(Armchair)	0.99738	0.98376	0.9392
(8,5)	0.90171	22.4109		0.99777	0.98613	0.94757
(9,5)	0.97558	20.633		0.99808	0.98804	0.95445
(10,5)	1.05025	19.1066		0.99833	0.9896	0.96014
(11,5)	1.12557	17.7837		0.99854	0.99089	0.96488
(12,5)	1.20141	16.6272		0.99871	0.99196	0.96886
(13,5)	1.27768	15.6084		0.99886	0.99285	0.97222
(14,5)	1.35432	14.7047		0.99898	0.99361	0.97509
(15,5)	1.43125	13.8979		0.99908	0.99426	0.97755
(16,5)	1.50844	13.1736		0.99917	0.99481	0.97967
(17,5)	1.58584	12.5198		0.99925	0.99529	0.98151
(18,5)	1.66343	11.927		0.99931	0.99571	0.98312
(19,5)	1.74119	11.3871		0.99937	0.99607	0.98453
(20,5)	1.81908	10.8934		0.99942	0.99639	0.98578
(21,5)	1.8971	10.4403		0.99947	0.99668	0.98688
(22,5)	1.97523	10.0229	918.309	0.99951	0.99693	0.98786
(23,5)	2.05346	9.6374	$\pm 10.392$	0.99955	0.99715	0.98874
(24,5)	2.13177	9.28018	(chiral)	0.99958	0.99735	0.98952
(25,5)	2.21016	8.94828		0.99961	0.99753	0.99023
(26,5)	2.28862	8.63912		0.99963	0.9977	0.99087
(27,5)	2.36714	8.35047		0.99966	0.99785	0.99145
(28,5)	2.44572	8.08036		0.99968	0.99798	0.99198
(29,5)	2.52435	7.82707		0.9997	0.9981	0.99246
(30,5)	2.60302	7.58909		0.99971	0.99821	0.9929
(31,5)	2.68174	7.36507		0.99973	0.99831	0.9933
(32,5)	2.76049	7.15384		0.99975	0.99841	0.99367
(33,5)	2.83928	6.95432		0.99976	0.99849	0.99401
(34,5)	2.91811	6.76558		0.99977	0.99857	0.99432
(35,5)	2.99696	6.58678		0.99978	0.99865	0.99461
(36,5)	3.07584	6.41714		0.99979	0.99871	0.99488
(37,5)	3.15475	6.25598		0.9998	0.99878	0.99512
(38,5)	3.23368	6.10269		0.99981	0.99883	0.99535
(39,5)	3.31263	5.95671		0.99982	0.99889	0.99557
(40,5)	3.3916	5.81753		0.99983	0.99894	0.99577



**Fig. 8.** The relationship between the values of ratio  $\chi_N$ , the chiral angle and aspect ratio  $\frac{L}{d}$  of SWCNTs for all chiral indices (40,m) with  $m \in [0, 1, 2, 3, \dots, 40]$ . The value of  $e_0a = 1nm$  and  $N = 4$ .

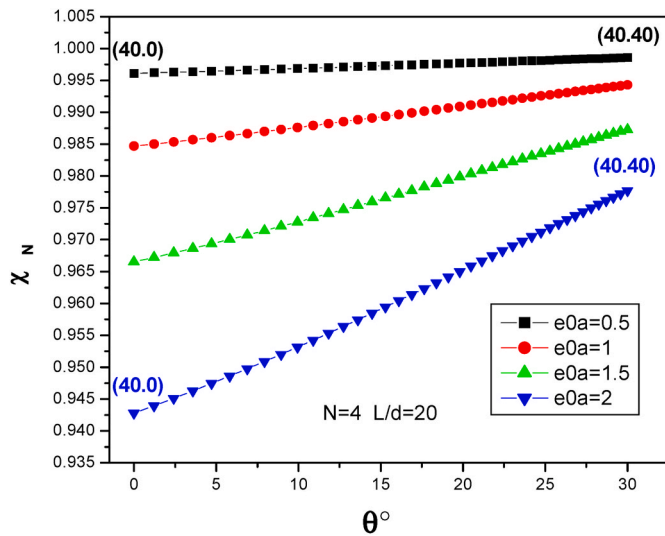
**2.2. Nonlocal Euler Bernoulli elastic beam models of SWCNTs**

The Eringen model of nonlocal elasticity is adopted. In the theory of



**Fig. 9.** The relationship between the values of ratio  $\chi_N$ , the chiral angle and vibration mode  $N$  of SWCNTs for all chiral indices (40,m) with  $m \in [0, 1, 2, 3, \dots, 40]$ . The value of  $e_0a = 2nm$  and  $\frac{L}{d} = 20$ .

nonlocal elasticity [22], the stress at a reference point  $x$  is considered to be a functional of strain accordance with atomic theory of lattice dynamics and experimental observations on phonon dispersion. When the effects of strains at points other than  $x$  are neglected, one obtains



**Fig. 10.** The relationship between the values of ratio  $\chi_N$ , the chiral angle and small-scale of SWCNTs for all chiral indices  $(40, m)$  with  $m \in [0, 1, 2, 3, \dots, 40]$ . The value of  $\frac{L}{d} = 20$  and  $N = 4$ .

classical or local theory of elasticity. The basic equations for linear, homogeneous, isotropic, nonlocal elastic solid with zero body force are given by [22].

**Table 4**

Values of frequency ratios  $\chi_N$  for all chiral indices  $(30, m)$  with  $m \in [0, 1, 2, 3, \dots, 30]$ , and aspect ratio  $\frac{L}{d}$ . The value of  $N = 2$  and  $e_0a = 1$ .

Chiral index of nanotube	Diameter $d$ (nm)	Chiral angle $\theta$ ( $^\circ$ )	Young's modulus average values (GPa)	Frequency ratios ( $\chi_N$ ) ( $N = 2$ and $e_0a = 1$ )		
				$\frac{L}{d} = 5$	$\frac{L}{d} = 10$	$\frac{L}{d} = 20$
(30,0)	2.38174	0	935.287 $\pm 2.887$ (Zigzag)	0.90739	0.97462	0.99387
(30,1)	2.42241	1.62644		0.90973	0.97533	0.99404
(30,2)	2.46497	3.19794		0.91209	0.97603	0.9942
(30,3)	2.50932	4.715		0.91445	0.97673	0.99437
(30,4)	2.55537	6.17839		0.91681	0.97743	0.99454
(30,5)	2.60302	7.58909		0.91916	0.97812	0.9947
(30,6)	2.65219	8.94828		0.92148	0.9788	0.99487
(30,7)	2.70281	10.2573		0.92377	0.97947	0.99502
(30,8)	2.75478	11.5175		0.92603	0.98013	0.99518
(30,9)	2.80803	12.7305		0.92824	0.98076	0.99533
(30,10)	2.8625	13.8979		0.9304	0.98139	0.99548
(30,11)	2.91811	15.0212		0.93252	0.98199	0.99563
(30,12)	2.97479	16.1021		0.93458	0.98258	0.99577
(30,13)	3.0325	17.1422	918.309	0.93658	0.98315	0.99591
(30,14)	3.09117	18.1432	$\pm 10.392$	0.93853	0.9837	0.99604
(30,15)	3.15075	19.1066	(chiral)	0.94042	0.98423	0.99617
(30,16)	3.21118	20.034		0.94226	0.98475	0.99629
(30,17)	3.27243	20.9269		0.94403	0.98524	0.99641
(30,18)	3.33444	21.7868		0.94575	0.98572	0.99652
(30,19)	3.39717	22.6151		0.94741	0.98618	0.99664
(30,20)	3.46059	23.4132		0.94902	0.98663	0.99674
(30,21)	3.52465	24.1825		0.95057	0.98705	0.99684
(30,22)	3.58933	24.9241		0.95206	0.98746	0.99694
(30,23)	3.65459	25.6394		0.9535	0.98786	0.99704
(30,24)	3.7204	26.3295		0.9549	0.98824	0.99713
(30,25)	3.78673	26.9955		0.95624	0.98861	0.99722
(30,26)	3.85355	27.6385		0.95753	0.98896	0.9973
(30,27)	3.92084	28.2595		0.95878	0.98929	0.99739
(30,28)	3.98858	28.8595		0.95998	0.98962	0.99746
(30,29)	4.05674	29.4393	935.805 $\pm 0.618$	0.96114	0.98993	0.99754
(30,30)	4.1253	30	(Armchair)	0.96225	0.99023	0.99761

$$\sigma_{ij} = 0$$

$$\sigma_{ij}(x) = \int T(|x-x'|, h) C_{ijkl}(x') dV(x'), \forall x \in V \quad (4)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{ij} + u_{ji})$$

where  $C_{ijkl}$  is the elastic modulus tensor of classical isotropic elasticity;  $\sigma_{ij}$  and  $\varepsilon_{ij}$  are stress and strain tensors respectively, and  $u_i$  is displacement vector.  $T(|x-x'|, h)$  is the nonlocal modulus or attenuation function incorporating into the constitutive equations to characterize the nonlocal effects at the reference point  $x$  produced by local strain at the source  $x'$ .  $|x-x'|$  is the Euclidean distance, and  $h = \frac{e_0 a}{L}$  is a material constant that depends on internal and external characteristic length (such as lattice spacing and wavelength), where  $e_0$  is a constant appropriate to each material,  $a$  is an internal characteristic length, e.g. length of C-C bond, lattice parameter, granular distance and  $L$  is an external characteristic length. Nonlocal constitutive relations for present nanotubes/nanobeams can be written as

$$\sigma_x - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} = E \varepsilon_x \Rightarrow (1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \sigma_x = E \varepsilon_x \quad (5)$$

$$\tau_{xz} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \tau_{xz}}{\partial x^2} = G \gamma_{xz} \Rightarrow (1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \tau_{xz} = G \gamma_{xz} \quad (6)$$

where  $E$  is the Young's modulus,  $G$  is the shear modulus of the material,  $\nabla^2$  is Laplace operator,  $\gamma$  is the shear strain and  $\sigma_x$  is the axial stress. The parameter  $e_0 a$  is the parameter leading to small scale effect on the response of structures in nanosize. The expressions of axial strain  $\varepsilon_x$  and



**Table 5**

Comparison between the results obtained here with nonlocal Euler–Bernoulli beam and the results obtained in reference [47] by nonlocal Timoshenko.

Chiral index of nanotube	Diameter $d$ (nm)	Chiral angle $\theta$ (°)	Young's modulus average values (GPa)	Frequency ratios ( $\nu_N$ )	
				( $e_0a = 2$ and $\frac{L}{d} = 40$ )	$N = 2$ $N = 5$
(12,5)	1.20141	16.6272		0.99871	0.99196
(13,5)	1.27768	15.6084		0.99886	0.99285
(14,5)	1.35432	14.7047	918.309	0.99898	0.99361
(15,5)	1.43125	13.8979	$\pm 10.392$	0.99908	0.99426
(16,5)	1.50844	13.1736	(chiral)	0.99917	0.99481
(17,5)	1.58584	12.5198		0.99925	0.99529
(18,5)	1.66343	11.927		0.99931	0.99571
(19,5)	1.74119	11.3871		0.99937	0.99607
(20,5)	1.81908	10.8934		0.99942	0.99639
(21,5)	1.8971	10.4403		0.99947	0.99668
(22,5)	1.97523	10.0229		0.99951	0.99693
(23,5)	2.05346	9.6374		0.99955	0.99715
(24,5)	2.13177	9.28018		0.99958	0.99735
Chiral index of Nanotube [47]	Diameter $d$ (nm) [47]	Chiral angle $\theta$ (°) [47]	Young's modulus average values (GPa) [12]	Frequency ratios ( $\nu_N$ )	
				( $e_0a = 2$ and $\frac{L}{d} = 40$ )	$N = 1$ $N = 6$
				[47]	[47]
(14,0)	1,0960	0	939.032	0,98989	0,75823
(12,6)	1,2428	19,106	927.671	0,99211	0,7967
(14,6)	1,3917	16,996	921.616	0,99369	0,82800
(16,8)	1,6570	19,106	928.013	0,99554	0,86924
(18,9)	1,8642	19,106	927.113	0,99647	0,89243
(20,12)	2,1921	21,787	904.353	0,99744	0,91869
(24,11)	2,4269	17,896	910.605	0,99791	0,93218
(20,20)	2,7120	30	935.048	0,99833	0,94459

bending moment  $M$  for the Euler-Bernoulli beam model are [41].

$$\epsilon_x = -y \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \tag{7}$$

$$M = \int_A y \sigma_x dA \tag{8}$$

where  $w$  is transverse displacement and  $y$  is the coordinate measured from the median plane in the height direction of the beam. Multiplying Equation (5) by  $\int y dA$  and integrating the result on the surface of  $A$ , we obtain:

$$\int_A y \sigma_x dA - (e_0a)^2 \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA = E \int_A y \epsilon_x dA \tag{9}$$

Substituting Equation (7) into nonlocal constitutive relation, Equation (9) leads to

$$\begin{aligned} \int_A y \sigma_x dA - (e_0a)^2 \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA &= -E \int_A y^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} dA \Rightarrow M - (e_0a)^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = -EI \frac{\partial w^2}{\partial x^2} \\ \Rightarrow M &= (e_0a)^2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} - EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \end{aligned} \tag{10}$$

where  $M = \int_A y \sigma_x dA$  and  $\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = \int_A y \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} dA$  and  $I = \int_A y^2 dA$  is the moment of inertia. Using the Euler-Bernoulli beam model, the general equation for transverse vibrations of an elastic beam under the thermal effect is expressed by

$$\frac{\partial P}{\partial x} - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0 \Rightarrow \frac{\partial P}{\partial x} = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \tag{11}$$

or

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} \Rightarrow P = \frac{\partial M}{\partial x} \text{ and } \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \tag{12}$$

where  $x$  is the axial coordinate,  $\rho$  is the mass density of the material,  $A$  is the area of the cross section of the beam.

Substitution of Equation (12) into Equation (10) leading to

$$M = (e_0a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \right) - EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \tag{13}$$

The second derivative of this equation is written

$$\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = (e_0a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial t^2 \partial x^2} \right) - EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \tag{14}$$

Substitution of Equation (12) into Equation (14) guiding to

$$(e_0a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial t^2 \partial x^2} \right) - EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \tag{15}$$

$$\Rightarrow -EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + (e_0a)^2 \left( \rho A \frac{\partial^4 w}{\partial t^2 \partial x^2} \right) - \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0$$

$$\Rightarrow EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} - (e_0a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \right) + \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \right) = 0 \tag{16}$$

$$\Rightarrow EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \left( 1 - (e_0a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left( \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \right) = 0$$

The wave propagation solution for Equation (16) can be expressed as [24,42]:

$$w(x, t) = \bar{W} e^{i\omega t} \sin(\lambda x) \tag{17}$$

Where  $i$  is the imaginary unit,  $\lambda$  is the wave number  $\lambda = \frac{N\pi}{L}, N(1, 2, \dots)$ ,  $\bar{W}$  denotes the amplitude of the deflection of the beam. Substituting Equation (17) into Equation (16), the wave dispersion relation can be obtained as:

$$\begin{aligned} EI \lambda^4 \bar{W} e^{i\omega t} \sin \lambda x - \rho A \omega^2 \bar{W} e^{i\omega t} \sin \lambda x - (e_0a)^2 \rho A \omega^2 \lambda^2 \bar{W} e^{i\omega t} \sin \lambda x &\Rightarrow EI \lambda^4 \\ - ((e_0a)^2 \lambda^2 + 1) (\rho A \omega^2) &= 0 \end{aligned} \tag{18}$$

From Equation (17), it is known that there is one mode of vibration for Euler-Bernoulli beam model in which one mode of deformation is the transverse deflection. Furthermore, unlike the Euler-Bernoulli beam, the Timoshenko beam model accounts for shear deformation and rotational inertia effects.

### 3. Results and discussions

Based on the formulations obtained above with the nonlocal Euler Bernoulli beam model, the vibration properties of single-walled carbon nanotubes (SWCNT's) are discussed. The parameters used in calculations for the SWCNT are given as follows: the effective thickness of CNTs taken to be 0.34 nm [12], the mass density  $\rho = 2.3 \text{ gcm}^{-3}$ , Poisson ratio is  $\nu = 0.25$ [43] and the shear module can be determined from the relation  $G = \frac{0.5E}{(1+\nu)}$  [24].

In our study, The Young's moduli used in this work for the three types of SWCNTs considered are calculated by Bao et al. [12] using molecular dynamics (MD) simulation. It is reported that the Young's modulus average values are  $935.805 \pm 0.618 \text{ GPa}$ ,  $935.287 \pm 2.887 \text{ GPa}$  and  $918.309 \pm 10.392 \text{ GPa}$  for Armchair, Zigzag and Chiral SWCNTs, respectively. The results given by MD approach are in good agreement with the available experimental result [44]. The value of nonlocal parameter  $e_0a$  is very important and influencing on the final results obtained. Eringen [23] has proposed an estimate of the value ( $e_0$ ) to be 0.39 for CNTs using the plane wave nonlocal theory and the born-karman model. Tounsi et al. [45] have investigated the effect of small size on the wave propagation in double-walled carbon nanotubes

(DWCNTs) under temperature field using the values of nonlocal parameter that are less than or equal to  $2\text{ nm}$  for their analysis. The same values of  $e_0a$  are used for DWCNTs by Chemi et al. [34] and by Bensattalah et al. [46] for TWCNTs. Therefore, in this work, the nonlocal parameters are values  $0\text{ nm} \leq e_0a \leq 2\text{ nm}$  to investigate nonlocal effects on the responses of SWCNTs.

To investigate the effect of nonlocal parameter on vibrations of SWCNTs, the results including the chiral angle effect, chiral indices ( $n, m$ ), small-scale coefficient, vibrational mode number, aspect ratio of SWCNTs and nonlocal parameter are compared. It follows that the ratio of results with nonlocal parameter to those without nonlocal parameter is given by:

$$\chi_N = \frac{\omega_{NE}}{w}, \quad (19)$$

where  $w$  and  $\omega_{NE}$  are the frequency based on the local and nonlocal Euler Bernoulli beam model respectively.

Fig. 5 shows the variation of frequency ratio  $\chi_N$  (i.e. ratio of the frequency  $\omega_{NE}$  of nonlocal Euler Bernoulli beam to the corresponding local Euler Bernoulli beam  $w$ ) versus the chiral angle  $\theta$  for different values length-to-diameter ratio  $\frac{L}{d}$  with scale parameter  $e_0a$  is  $1\text{ nm}$  and the vibrational mode is  $N = 2$ . It can be seen from Fig. 5 that the frequency ratios  $\chi_N$  of SWCNTs  $\chi_N$  for all chiral indices ( $n,5$ ) with  $n \in [5, 6, \dots, 40]$  from  $5.81753^\circ$  to  $30^\circ$  are smaller than unity at different length-to-diameter ratios. This means that the values of frequencies obtained by the local Euler Bernoulli beam are larger than those given by nonlocal Euler Bernoulli beam, indicating that the inclusion of effects of small-scale lead to a reduction in the vibration frequencies. This reduction of frequency ratio values is amplified for higher chiral angle  $\theta$  and for small length-to-diameter ratios. This fact is clearly shown in Fig. 5. For long tubes of CNTs, say  $L/d = 60$ , the frequency ratio approaches unity (i.e. the nonlocal Euler Bernoulli and local Euler Bernoulli results become close to each other). For short CNTs, say  $L/d = 10$ , the frequency ratios are smaller than unity especially at higher chiral angle  $\theta$  (i.e.  $\theta \approx 30^\circ$ ). In addition, it can be concluded that the difference between the results predicted by NEB and LEB are negligible when chiral angle  $\theta$  is very weak for different values  $\frac{L}{d}$ . This is due to the relationship between the chiral angle  $\theta$  and tube diameters of SWCNT. So, the dependence of frequency ratios  $\chi_N$  and chiral angle of carbon nanotube become very weak with small chiral angle and larger values of diameter. The reason for this phenomenon is that a carbon nanotube with smaller diameter  $d$  has a larger curvature, which results in a more significant distortion of  $C - C$  bonds. Fig. 6 illustrates the relationship between the frequency ratios  $\chi_N$  and chiral angle  $\theta$  of carbon nanotube at different values of vibration mode numbers  $N$ . The aspect ratio  $\frac{L}{d}$  is taken as 40 and the nonlocal parameter is  $e_0a = 2\text{ nm}$ . As can be seen in Fig. 6 that the frequency ratios  $\chi_N$  decreases with increasing the values of vibration modes  $N$  and becomes more significant with the increase of chiral angle  $\theta$ . It is also seen from Fig. 6 that the frequency ratios  $\chi_N$  are less than unity for all chiral indices of SWCNTs. However, for smaller mode (i.e.  $N \geq 2$ ), the frequency ratio is seen to virtually approach unit. For higher modes, say  $N = 10$ , the frequency ratios are smaller than unity especially at higher chiral angle  $\theta$ . In sum, the reduction of  $\chi_N$  is amplified at higher vibration modes and for larger values of chiral angle  $\theta$ . So, when the tube diameters of SWCNT are small and when considering high chiral angle  $\theta$ , a high vibration mode  $N$ , nonlocal Euler Bernoulli beam should be employed for a better prediction of the frequencies instead of local Euler Bernoulli beam model which neglects the effects of small scale. Furthermore, the significance of nonlocal effects in higher modes is attributed to the effect of small wavelength for higher modes. For smaller wavelengths, interactions between atoms are increasing and this leads to an increasing in nonlocal effects.

The relation between the values of ratio  $\chi_N$  and chiral angle  $\theta$  of carbon nanotube for different value of small-scale effect  $e_0a$  with  $N = 2$  and  $\frac{L}{d} = 20$  is shown in Fig. 7. Note that the small-scale parameter with

$e_0a = 0\text{ nm}$  corresponds to classical SWCNTs without nonlocal effect. The results from Fig. 7 show that the frequency ratios  $\chi_N$  exhibit a dependence on the nonlocal parameter. For example, the frequency ratios at  $\theta = 24.5036^\circ$  (i.e. chiral index (7,5)) are 0.99984; 0.99934; 0.99852 and 0.99738 for the  $e_0a = 0.5$ ,  $e_0a = 1$ ,  $e_0a = 1.5$  and  $e_0a = 2$ , respectively. It is found from Fig. 7 that the vibrational characteristics for the SWCNT are related to the nonlocal parameter  $e_0a$  and chiral angle  $\theta$ . On the other hand, the effect of small-scale parameter on the frequency ratio is seen to be very small and is negligible for all small chiral angle  $\theta$ . Contrarily, for a high chiral angle (i.e.  $\theta \approx 30^\circ$ ) of SWCNT, the small-scale effect is significant on the frequency ratio  $\chi_N$ . In addition, it is clearly seen from Figure that the frequency ratios  $\chi_N$  are less than unity for different small-scale parameter. This means that the application of local Euler Bernoulli beam model for SWCNT analysis would lead to an over prediction of the frequency if the small length scale effect between the individual carbon atoms in CNTs is neglected. Table 2 displays the dependence of frequency ratio  $\chi_N$  with the diameters and chiral angle of SWCNTs for all chiral indices ( $n,5$ ) with  $n \in [5, 6, 7, 8, \dots, 40]$  at different values of vibration mode numbers  $N$ . The values of ratio  $\chi_N$  of SWCNTs for all chiral indices ( $n,23$ ) with  $n \in [23, 24, \dots, 40]$  and different diameters and chiral angle for  $e_0a = 0.5$ ,  $e_0a = 1$  and  $e_0a = 2$  are listed in Table 3. It is clearly seen from Tables 2 and 3 that the frequency ratios  $\chi_N$  increases as the value of SWCNTs diameter increases and chiral angle decreases. Therefore, the scale effect on the frequency ratios ( $\chi_N$ ) decreases.

The relationship between the values of ratio  $\chi_N$  and the chiral angle of SWCNTs with all chiral indices ( $40,m$ ) with  $m \in [0, 1, 2, 3, \dots, 40]$ , for different aspect ratio  $\frac{L}{d}$  with  $e_0a = 1\text{ nm}$  and  $N = 4$  is indicated in Fig. 8, for different mode numbers ( $N$ ) with  $e_0a = 2\text{ nm}$  and  $\frac{L}{d} = 20$  is shown in Fig. 9, for different small-scale effect  $e_0a$  with  $N = 3$  and  $\frac{L}{d} = 20$  is illustrated in Fig. 10. From these figures, it can be clearly observed that frequency ratios  $\chi_N$  vary linearly with chiral angle. It can be seen that the ratio  $\chi_N$  increases monotonically as the chiral angle  $\theta$  increases, indicating that the effect of chiral angle leads to an increasing of fundamental frequency. It is clearly seen from these figures that the frequency ratios  $\chi_N$  are less than unity. Therefore, it is observed that the effect of nonlocal on the frequency ratios  $\chi_N$  becomes more significant with the decrease of the aspect ratio  $\frac{L}{d}$  and increases with increasing the vibrational mode number  $N$  and the nonlocal parameter  $e_0a$ . The values of ratio  $\chi_N$  of SWCNTs for all chiral indices ( $30,m$ ) with  $m \in [0, 1, 2, 3, \dots, 30]$  and different diameters and chiral angle for  $\frac{L}{d} = 5$ ,  $\frac{L}{d} = 10$  and  $\frac{L}{d} = 20$  based on the non-local Euler Bernoulli beam model are listed in Table 4. Our study shows that the frequency ratios increase as the value of carbon nanotubes diameter increases and chiral angle decreases (see Table 5). The results are in parallel with the studies existing by Bensattalah et al. [47]. It can be concluded that the frequencies obtained here by nonlocal Euler-Bernoulli beam are greater than those given by nonlocal Timoshenko beam theory in reference [47], indicating that the inclusion of effects of transverse shear deformation and rotary inertia has led to a reduction in the vibration frequencies.

#### 4. Conclusions

The effect of chiral angle and chiral index on the vibration characteristics of SWCNTs are investigated in this work based on Eringen's nonlocal elasticity theory and the nonlocal Euler-Bernoulli beam theory. The obtained numerical results show that:

- The results were showed the dependence of frequency ratios on the chirality of carbon nanotube, the vibrational mode number, aspect ratio, nonlocal parameter effect, chiral angle and chiral index.
- The chiral angle effect reduces of the vibration frequencies of SWCNTs for all chiral indices ( $n,5$ ) with  $n \in [5, 6, \dots, 40]$ . This

reduction was amplified at higher vibration modes for small length-to-diameter ratios and higher small-scale parameter.

- The values of frequency ratios of SWCNTs were vary linearly with chiral angle for all chiral indices (40,  $m$ ) with  $m \in [0, 1, 2, 3, \dots, 40]$ . It can be detected that the effect of nonlocal on the frequency ratios  $\chi_N$  increases monotonically as the chiral angle increases becomes more significant with the decreasing of length-to-diameter ratios and increases with increasing of vibrational mode number and the nonlocal parameter.

### Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

### Data availability

No data was used for the research described in the article.

### References

- [1] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature* 354 (1991) 56–58, <https://doi.org/10.1038/354056a0>.
- [2] J. Robertson, Realistic applications of CNTs, *Mater. Today* 7 (10) (2004) 46–52, [https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(04\)00448-1](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(04)00448-1).
- [3] K.Z. Mahdjoub, K. Boudia, I. Ameri, L.F. Lamia, Y. Al-Douri, M. Ameri, Structural, electronic and thermodynamic investigations of  $\text{Ag}_2\text{GdSi}$ ,  $\text{Ag}_2\text{GdSn}$  and  $\text{Ag}_2\text{Gd Pb}$  Heusler alloys: first-principles calculations, *Materials Testing* 63 (6) (2021) 537–542, <https://doi.org/10.1515/mt-2020-0088>.
- [4] M.M.J. Treacy, T.W. Ebbesen, J.M. Gibson, Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes, *Nature* 381 (1996) 678–680, <https://doi.org/10.1038/381678a0>.
- [5] B.G. Demczyk, Y.M. Wang, J. Cumings, M. Hetman, W. Han, A. Zettl, R.O. Ritchie, Direct mechanical measurement of the tensile strength and elastic modulus of multiwalled carbon nanotubes, *Mater. Sci. Eng. A334* (1–2) (2002) 173–178, [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(01\)01807-X](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(01)01807-X).
- [6] O. Lourie, H.D. Wagner, Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-Raman spectroscopy, *J. Mater. Res.* 13 (1998) 2418–2422, <https://doi.org/10.1557/JMR.1998.0336>.
- [7] J.R. Xiao, B.A. Gama, J.W. Gillespie, An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes, *Int. J. Solid Struct.* 42 (11–12) (2005) 3075–3092, <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2004.10.031>.
- [8] Y.E. Lin-Hui, Liu Bang-Gui, Ding-Sheng Wang, Ab initio molecular dynamics study on small carbon nanotubes, *Chin. Phys. Lett.* 18 (11) (2001) 1496–1499, <https://doi.org/10.1088/0256-307X/18/11/323>.
- [9] S. Rouhi, Y. Alizadeh, R. Ansari, Molecular dynamics simulations of the single-walled carbon nanotubes/poly (phenylacetylene) nanocomposites, *Superlattice. Microst.* 72 (2014) 204–218, <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2013.10.046>.
- [10] Q. Wang, Wave propagation in carbon nanotubes via nonlocal continuum mechanics, *J. Appl. Phys.* 98 (12) (2005), 124301, <https://doi.org/10.1063/1.2141648>.
- [11] D. Sanchez-Portal, E. Artacho, J.M. Soler, A. Rubio, P. Ordejo, Ab initio structural, elastic, and vibrational properties of carbon nanotubes, *Phys. Rev. B* 59 (19) (1999) 12678–12688, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.12678>.
- [12] W.X. Bao, C.C. Zhu, W.Z. Cui, Simulation of Young's modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics Show affiliations, *Phys. B Condens. Matter* 352 (1–4) (2004) 156–163, <https://doi.org/10.1016/j.physb.2004.07.005>.
- [13] N. Tahreen, A.K.M. Masud, A molecular dynamics study of the variations in the elastic properties of single-walled carbon nanotubes with tube radius, length and chirality, *Int. J. Nano Biomaterials (IJNB)* 4 (1) (2012) 21–32, <https://doi.org/10.1504/IJNB.2012.048214>.
- [14] A.L. Kalamkarov, A.V. Georgiades, S.K. Rokkam, V.P. Veedu, M.N. Ghasemi-Nejhad, Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties, *Int. J. Solid Struct.* 43 (22–23) (2006) 6832, <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2006.02.009>.
- [15] A. Hospital, J.R. Goñi, M. Orozco, J.L. Gelpi, Molecular dynamics simulations: advances and applications, *Comput. Biol. Chem. Adv. Appl.* 8 (2015) 37–47, <https://doi.org/10.2147/AABC.S70333>.
- [16] T. Natsuki, X.W. Lei, Q.Q. Ni, M. Endo, Free vibration characteristics of double-walled carbon nanotubes embedded in an elastic medium, *Phys. Lett.* 374 (26) (2010) 2670–2674, <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2010.04.040>.
- [17] C. Guoxin, C. Xi, W. Kysar, Thermal vibration and apparent thermal contraction of single-walled carbon nanotubes, *J. Mech. Phys. Solid.* 54 (6) (2006), <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2005.12.003>, 206–1236.
- [18] E.W. Wong, P.E. Sheehan, C.M. Lieber, Nanobeam mechanics: elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes, *Science* 277 (5334) (1997) 1971–1975, <https://doi.org/10.1126/science.277.5334.1971>.
- [19] M.R. Falvo, G.J. Clary, R.M. Taylor, V. Chi, F.P. Brooks, S. Washburn, Bending and buckling of carbon nanotubes under large strain, *Nature* 389 (1997) 582–584, <https://doi.org/10.1038/39282>.
- [20] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, I. Mechab, Sound wave propagation in single-walled carbon nanotubes with initial axial stress, *J. Appl. Phys.* 104 (1) (2008), 014301, <https://doi.org/10.1063/1.2949274>.
- [21] A. Tounsi, S. Benguediab, E.A. Adda Bedia, A. Semmah, M. Zidour, Nonlocal effects on thermal buckling properties of double-walled carbon nanotube, *Adv. Nano Res.* 1 (1) (2013) 1–11, <https://doi.org/10.12989/anr.2013.1.1.001>.
- [22] A.C. Eringen, On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves, *J. Appl. Phys.* 54 (9) (1983) 4703–4710, <https://doi.org/10.1063/1.332803>.
- [23] T. Bensattalah, M. Zidour, T.H. Daouadji, K. Bouakaz, Theoretical analysis of chirality and scale effects on critical buckling load of zigzag triple walled carbon nanotubes under axial compression embedded in polymeric matrix, *Struct. Eng. Mech.* 70 (3) (2019) 269–277, <https://doi.org/10.12989/sem.2019.70.3.269>.
- [24] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, Scale effect on wave propagation of double-walled carbon nanotubes with initial axial loading, *Nanotechnology* 19 (18) (2008), 185703, <https://doi.org/10.1088/0957-4484/19/18/185703>.
- [25] K. Torabi, J. NafarDastgerdi, An analytical method for free vibration analysis of Timoshenko beam theory applied to cracked nanobeams using a nonlocal elasticity model, *Thin Solid Films* 520 (21) (2012) 6595–6602DOI, <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2012.06.063>.
- [26] P. Ponnusamy, A. Amuthalakshmi, Influence of thermal and magnetic field on vibration of double walled carbon nanotubes using nonlocal Timoshenko beam, *Ther. Prog. Mater. Sci.* 10 (2015) 243–253, <https://doi.org/10.1016/j.mspro.2015.06.047>.
- [27] A. Besseghier, M. Zidour, M.A.A. Meziane, T.H. Daouadji, A. Tounsi, Critical buckling load of carbon nanotube with non-local Timoshenko beam using the differential Transform method, *Int. J. Civ. Environ. Eng.* 12 (6) (2018) 623–630, <https://doi.org/10.5281/zenodo.1317114>.
- [28] H.L. Lee, W.J. Chang, Surface effects on frequency analysis of nanotubes using nonlocal Timoshenko beam theory, *J. Appl. Phys.* 108 (9) (2010), 093503, <https://doi.org/10.1063/1.3503853>.
- [29] M. Naciri, M. Zidour, A. Semmah, M.S.A. Houari, A. Benzair, A. Tounsi, Sound wave propagation in armchair single walled carbon nanotubes under thermal environment, *J. Appl. Phys.* 110 (12) (2011), 124322, <https://doi.org/10.1063/1.3671636>.
- [30] B. Wang, Z. Deng, H. Ouyang, X. Xua, Free vibration of wavy single-walled fluid-conveying carbon nanotubes in multi-physics fields, *Appl. Math. Model.* 39 (22) (2015) 6780–6792, <https://doi.org/10.1016/j.apm.2015.02.033>.
- [31] A. Besseghier, M. Zidour, T.H. Daouadji, Analytical analysis for the forced vibration of CNT surrounding elastic medium including thermal effect using nonlocal Euler-Bernoulli theory, *Adv. Mater. Res.* 7 (3) (2018) 163–174, <https://doi.org/10.12989/anr.2018.7.3.163>.
- [32] Mesut Şimşek, Nonlocal effects in the forced vibration of an elastically connected double-carbon nanotube system under a moving nanoparticle, *Comput. Mater. Sci.* 50 (7) (2011) 2112–2123, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.02.017>.
- [33] S. Belmahi, M. Zidour, M. Meradjah, T. Bensattalah, A. Dihaj, Analysis of boundary conditions effects on vibration of nanobeam in a polymeric matrix, *Struct. Eng. Mech.* 67 (5) (2018) 517–525, <https://doi.org/10.1080/SEM.2018.67.5.517>.
- [34] A. Chemi, M. Zidour, H. Heireche, K. Rakrak, A.A. Bousahla, Critical buckling load of chiral double-walled carbon nanotubes embedded in an elastic medium, *Mech. Compos. Mater.* 53 (2018) 827–836, <https://doi.org/10.1007/s11029-018-9708-x>.
- [35] Y. Yang, W. Yan, J. Wang, Study on the small-scale effect on wave propagation characteristics of fluid-filled carbon nanotubes based on nonlocal fluid theory, *Adv. Mech. Eng.* 11 (1) (2019) 1–9, <https://doi.org/10.1177/1687814018823324>.
- [36] M. Maachou, M. Zidour, H. Baghdadi, N. Ziane, A. Tounsi, A nonlocal Levinson beam model for free vibration analysis of zigzag single-walled carbon nanotubes including thermal effects, *Solid State Commun.* 151 (20) (2011) 1467–1471, <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2011.06.038>.
- [37] Muzamal Hussain, AbdelouahedTounsi Muhammad Nawaz Naeem, Muhammad Taj, Nonlocal effect on the vibration of armchair and zigzag SWCNTs with bending rigidity, *Adv. Nano Res.* 7 (No. 6) (2019) 431–442, <https://doi.org/10.12989/anr.2019.7.6.431>.
- [38] M. Hussain, M.N. Naeem, M. Taj, Effect of length and thickness variations on the vibration of SWCNTs based on Flugge's shell model, *Micro & Nano Lett.* 15 (1) (2020) 1–6, <https://doi.org/10.1049/mnl.2019.0309>.
- [39] R. Vajtai, Springer Handbook of Nanomaterials, first ed., Springer, Berlin, Heidelberg, 2013 <https://doi.org/10.1007/978-3-642-20595-8>.
- [40] J. Wildoer, L. Venema, A. Rinzler, R. Smalley, C. Dekker, Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes, *Nature* 391 (1998) 59–62DOI, <https://doi.org/10.1038/34139>.
- [41] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund, Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes, Academic Press, New York (USA), 1996, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-221820-0.X5000-X>.
- [42] H. Heireche, A. Tounsi, A. Benzair, M. Maachou, E.A. Adda Bedia, Sound wave propagation in single-walled carbon nanotubes using nonlocal elasticity, *Physica E* 40 (8) (2008) 2791–2799, <https://doi.org/10.1016/j.physe.2007.12.021>.
- [43] L. Boumia, M. Zidour, A. Benzair, A. Tounsi, A Timoshenko beam model for vibration analysis of chiral single-walled carbon nanotubes, *Physica E* 59 (2014) 186–191, <https://doi.org/10.1016/j.physe.2014.01.020>.
- [44] J.P. Salvetat, J.M. Bonard, N.H. Thomson, A.J. Kulik, L. Farro, W. Bennis, L. Zuppirolti, Mechanical properties of carbon nanotubes, *Appl. Phys. A* 69 (1999) 255–260, <https://doi.org/10.1007/s003390050999>.

- [45] A. Tounsi, H. Heireche, H.M. Berrabah, A. Benzair, L. Boumia, Effect of small size on wave propagation in double-walled carbon nanotubes under temperature field, *J. Appl. Phys.* 104 (10) (2008), 104301, <https://doi.org/10.1063/1.3018330>.
- [46] T. Bensattalah, A. hamid, K. Boukkaz, M. Zidour, T.H. Daouadji, Critical buckling load of triple-walled carbon nanotube based on nonlocal elasticity theory, *J. Nano Res.* 62 (2020) 108–119. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/JNanoR.62.108>.
- [47] T. Bensattalah, M. Zidour, T.H. Daouadji, A new nonlocal beam model for free vibration analysis of chiral single-walled carbon nanotube, *Compos. Mater. Eng.* 1 (1) (2019) 21–31, <https://doi.org/10.12989/cme.2019.1.1.021>.

LIANI Mohamed was born in 1981. His first registration for a doctorate in materials physics is in 2017 in physics department at the Faculty of Exact Sciences DJILLALI Liabes University of Sidi-Bel-Abbes. He is currently writing his doctoral thesis. His research work is based on the study of the vibratory behavior at the nanometric scale of multi-layered and single-layered carbon tubes which allowed him to participate in international physics conferences. LiANI Mohamed is a temporary teacher at the university of Sidi-Bel-Abbes in ALGERIA.

MOULAY Noureddine was born in 1971. He obtained his Doctorate in Material Physics in 2013. He holds the post of lecturer He holds the post of Senior lecturer in physics at the Faculty of Exact Sciences DJILLALI Liabes University of Sidi Bel Abbes. Member of the scientific committee of the physics department of the same faculty. He worked in collaboration with the Research Center on Ions, Materials and Photonics Ensicaen (CIMAP) Caen

French between the period 2012–2014. His current PRFU university training research project is devoted to the study of thermoelectric materials with a very high merit factor. He participated in several International Conferences among them the international conference on ICT thermoelectricity in pasadéna USA in 2017.

Prof. Dr. Yarub Al-Douri was born in 1969. He has Doctorat d'Etat in Materials Science. He is working in American University of Iraq-Sulaimani, and Visiting Professor in Bahcesehir University - Turkey. He has initiated Nanotechnology Engineering MSc Program and Nano Computing Laboratory, the first in Malaysia. He has received numerous accolades. Al-Douri is Editor-in-Chief of *Experimental and Theoretical NANOTECHNOLOGY*, and *World Journal of Nano Science and Engineering* and Associate Editor of *Nano-Micro Letters* (Q1).

BENSAID Djillali was born in 1973. He obtained his Doctorate in Material Physics in 2013. He is a professor at the faculty of science and technology, University BelhadjBouchaib, Ain-Temouchent, Algeria. He has worked in collaboration with Portuguese universities in the field of materials sciences. He has published many articles in many renowned international journals.

Berrahal Mokhtar is a Senior Lecturer and currently works in the Department of Exact Sciences, Oran's Higher Teacher College AMMOUR Ahmed-Algeria. Berrahal does research in Electromagnetism, Experimental Physics and Physics of Materials. He is now working on thermoelectric compounds.