

SOS Nanotubes : Synthèse Optimisée et Sélective de Nanotubes

Programme PNANO 2009



C. Bichara, M. Diarra (CINAM); A. Loiseau, H. Amara, F. Ducastelle (LEM); V. Jourdain, E. Anglaret, H. Navas (L2C); A. Tailleux, P. Evellin, J. Dijon (CEA/LITEN); C. Journet, A. Pascale, S. Purcell (LPMCN et LMI)

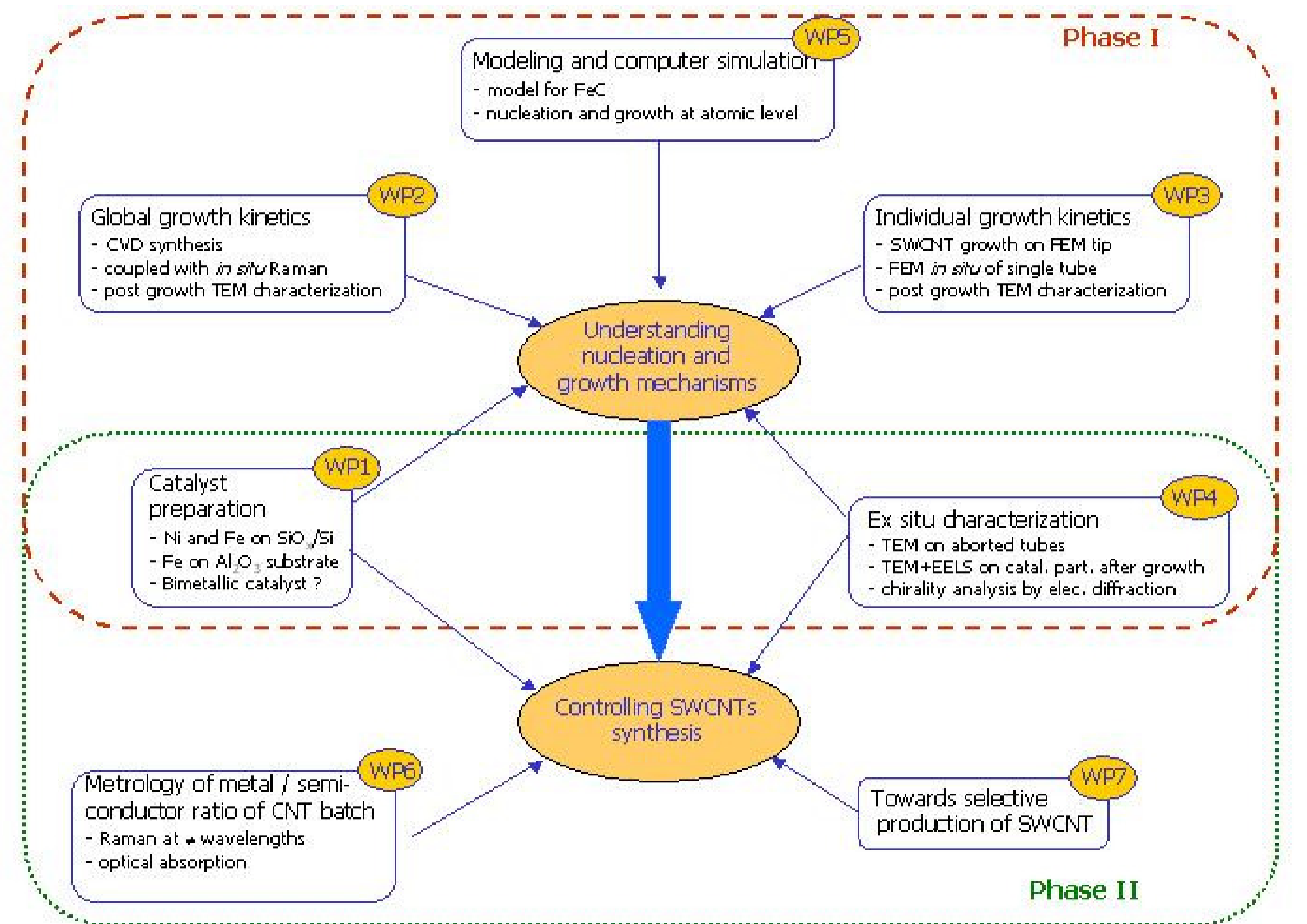
Contexte, objectifs, méthodes

La synthèse contrôlée de nanotubes monoparois (SWNT) est indispensable pour envisager des applications utilisant les propriétés exceptionnelles de ces nano-objets. Dans ce but, il reste à améliorer la qualité des tubes produits (contrôle du diamètre et de la chiralité, taux de défauts, ...). A l'heure actuelle, cet objectif n'est pas encore atteint car les mécanismes de croissance des SWNTs sont difficiles à cerner. En effet :

- la synthèse par CVD est complexe avec de nombreux paramètres : choix catalyseurs+substrat+réactifs, conditions opératoires (P, T, ...).
- les méthodes expérimentales d'investigation sont difficiles : in-situ ou post-mortem, locales (TEM, FEM) ou globales (Raman, XPS, ...)
- approche théorique impose modèle performant et simulation numérique massive

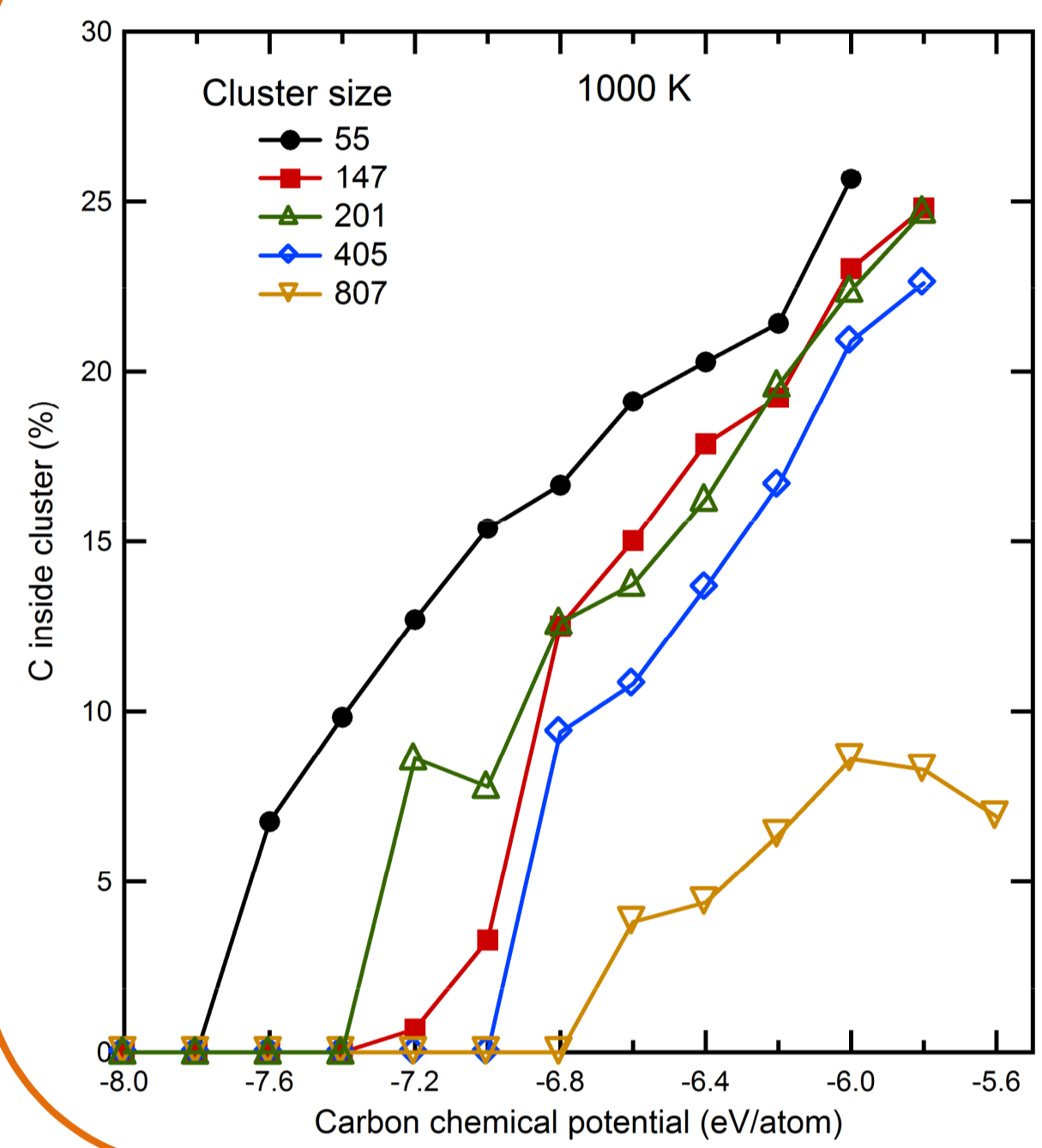
Notre approche :

- Coupler expériences et théorie/simulation numérique pour comprendre mécanismes nucléation/croissance
- Fabriquer des tapis denses de SWNT à forte proportion métallique pour connecteurs (VIA)



Résultats marquants

Solubilité du carbone dans les nanoparticules de nickel

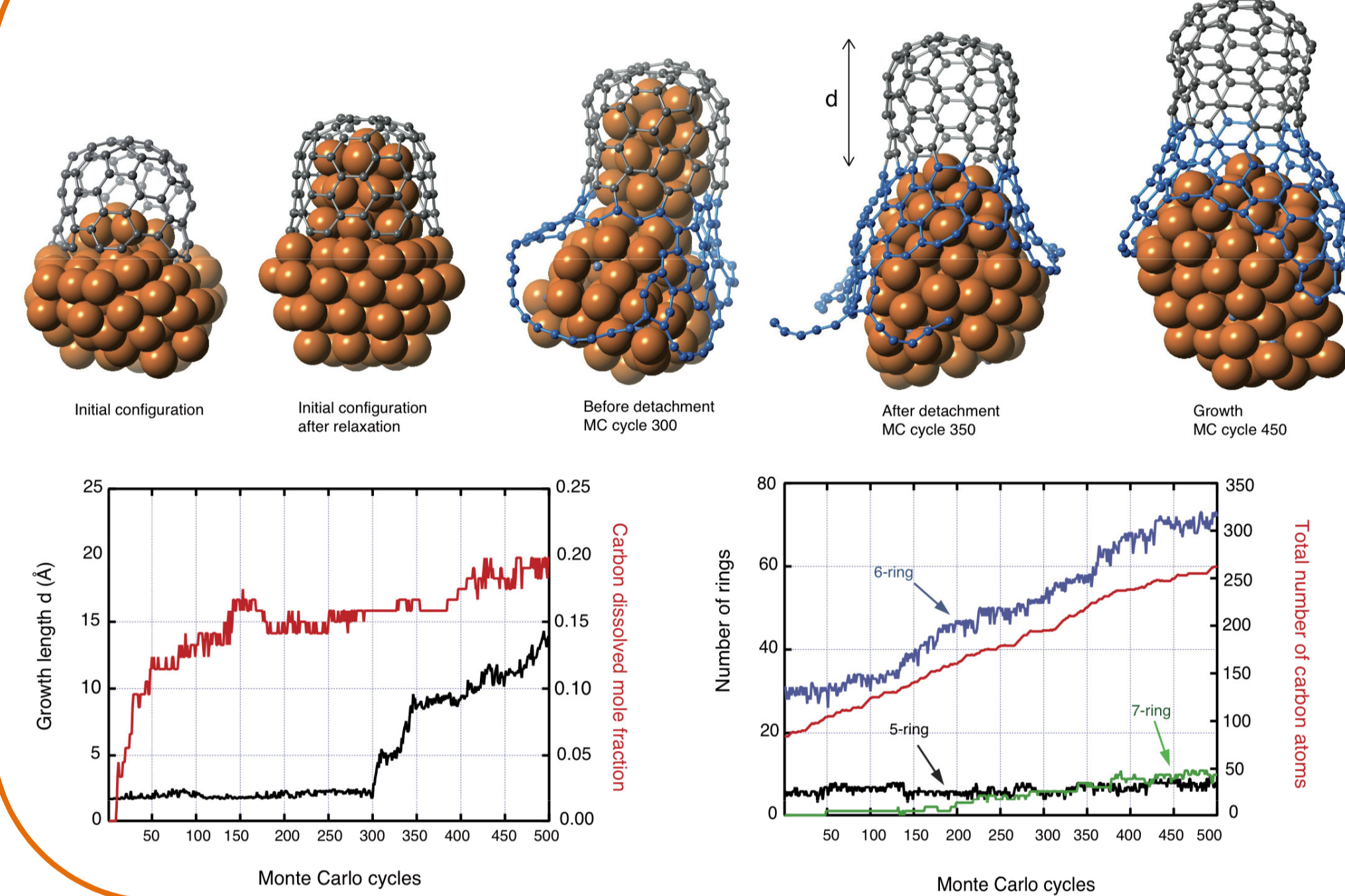


On dispose d'un modèle semi-empirique décrivant un système Ni-C implémenté dans un code Monte Carlo (MC) Grand Canonique (GC) à Température et potentiel chimique (μ_C) fixés permettant la relaxation des structures.

On calcule la solubilité du carbone dans les nanoparticules de nickel :

- Les atomes de carbone se mettent sur les sites interstitiels sous la surface des nanoparticules de nickel.
- Le rapport surface/volume est plus grand pour les petites nanoparticules, donc, à μ_C donné, elles ont une concentration de carbone plus grande.

Croissance des nanotubes de carbone

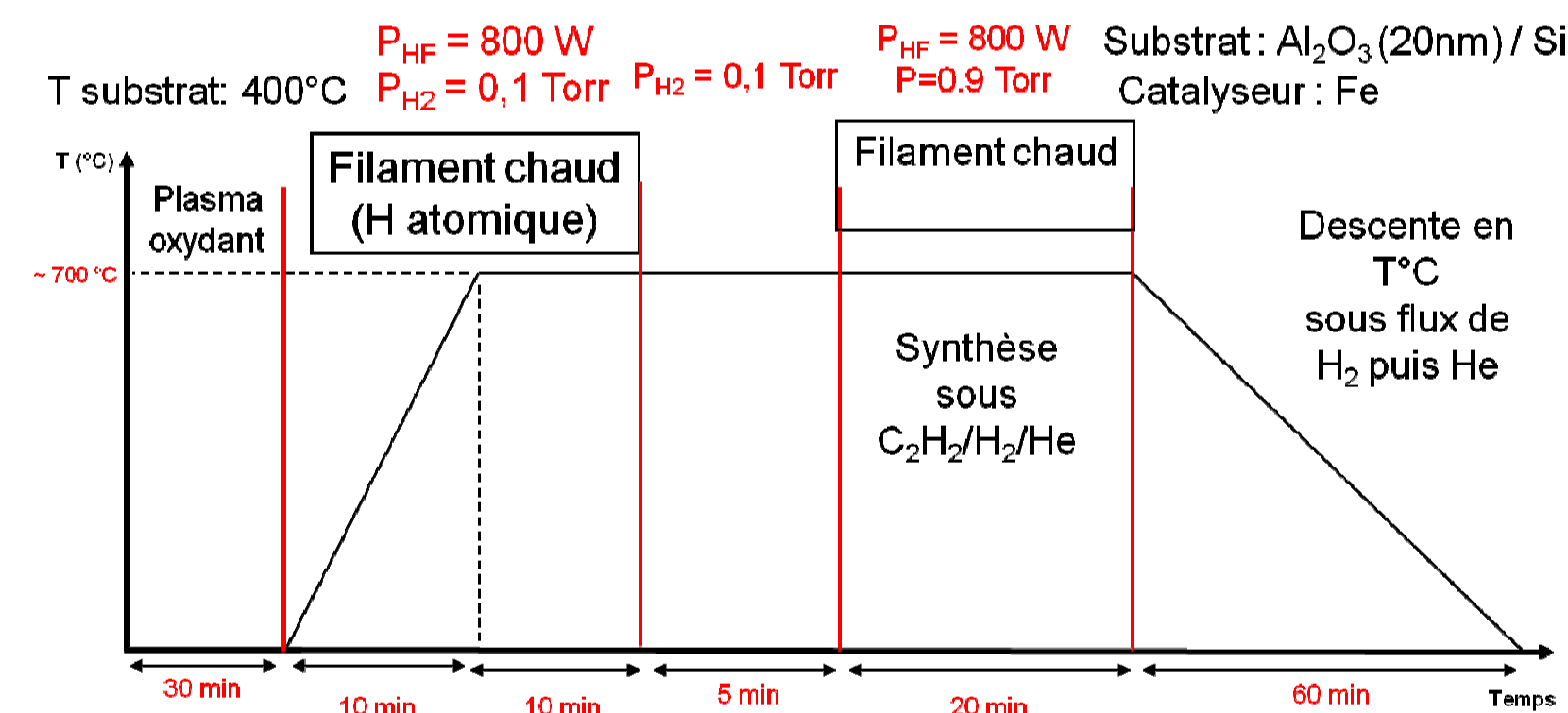


Une séquence GCMC illustrant la croissance d'un nanotube de carbone.

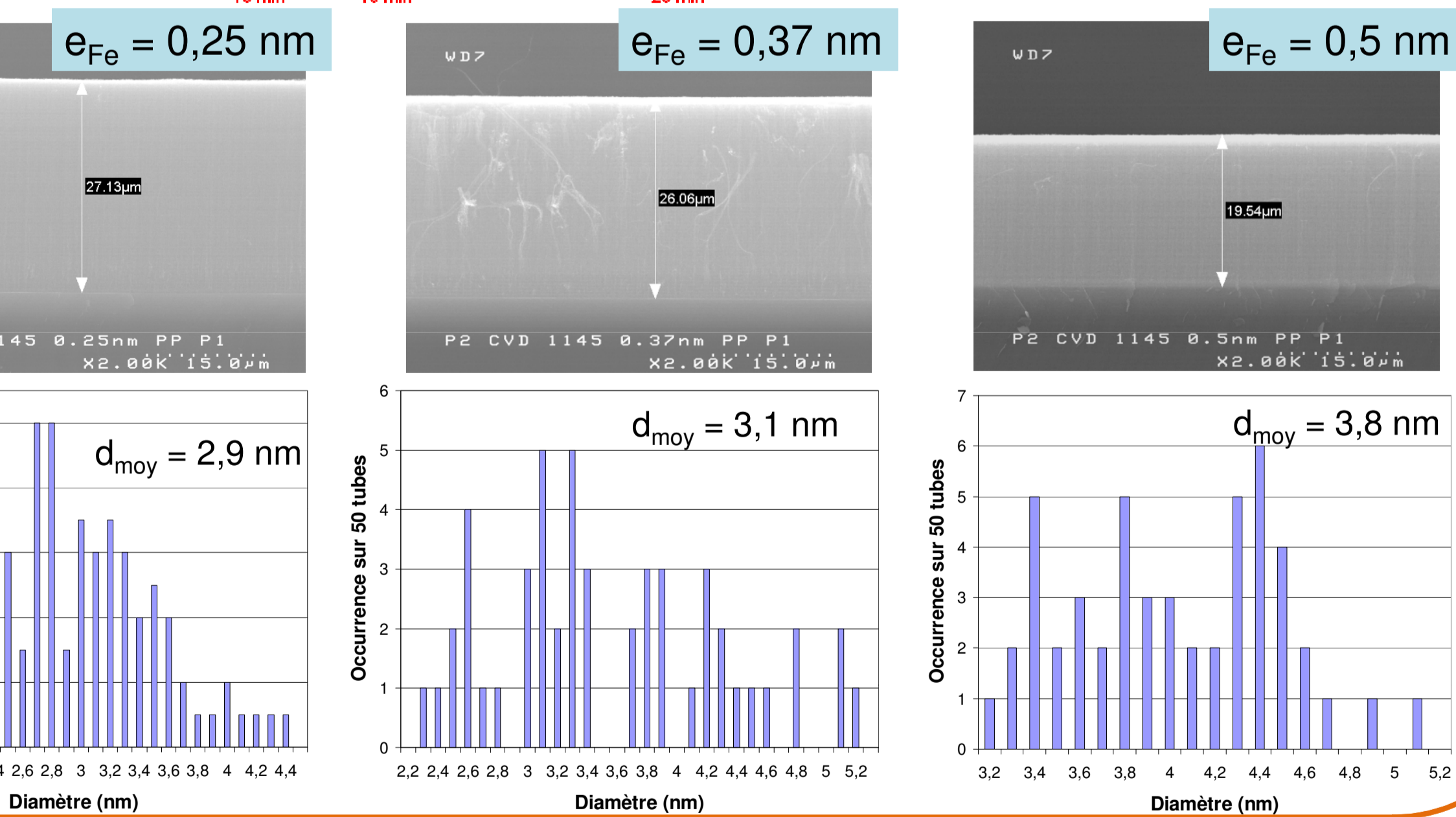
Quand la particule est saturée en C, le démouillage est possible et le décollement du tube est observé => l'effet de démouillage de la nanoparticule riche en carbone est essentiel pour entretenir la croissance du nanotube.

Croissance des tapis mono-parois

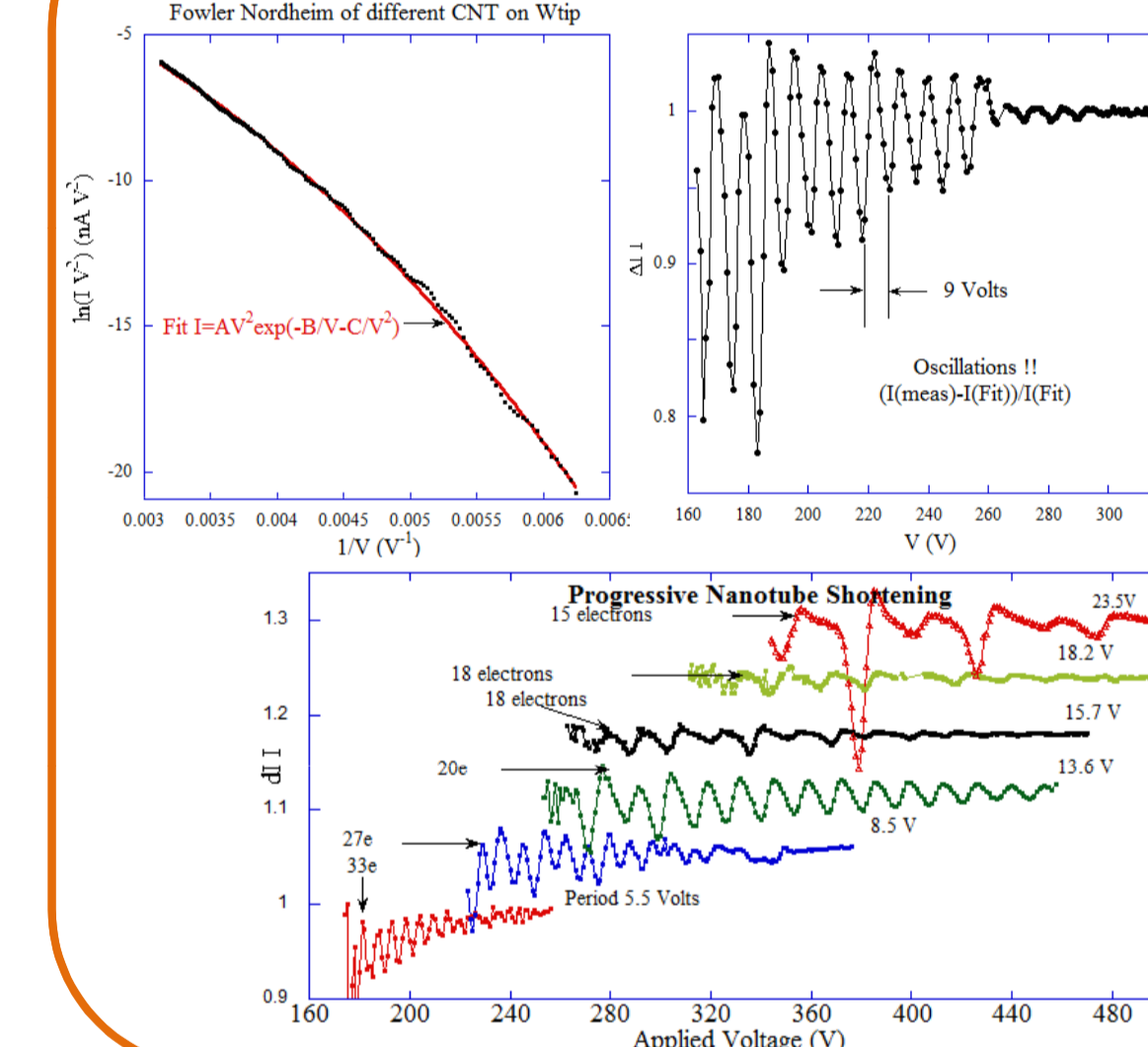
Procédé de synthèse



Influence de l'épaisseur de catalyseur

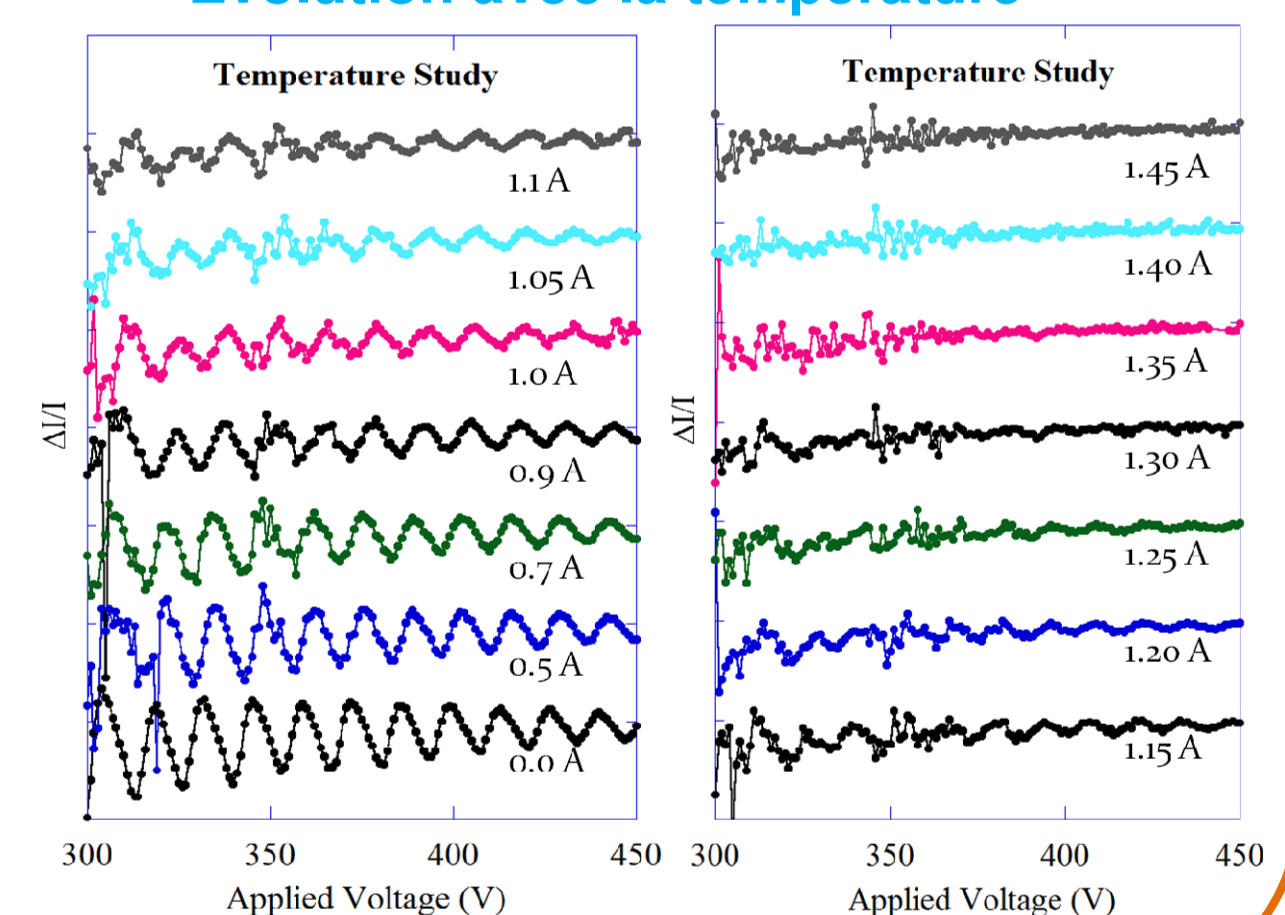


Blocage de Coulomb en émission de champ

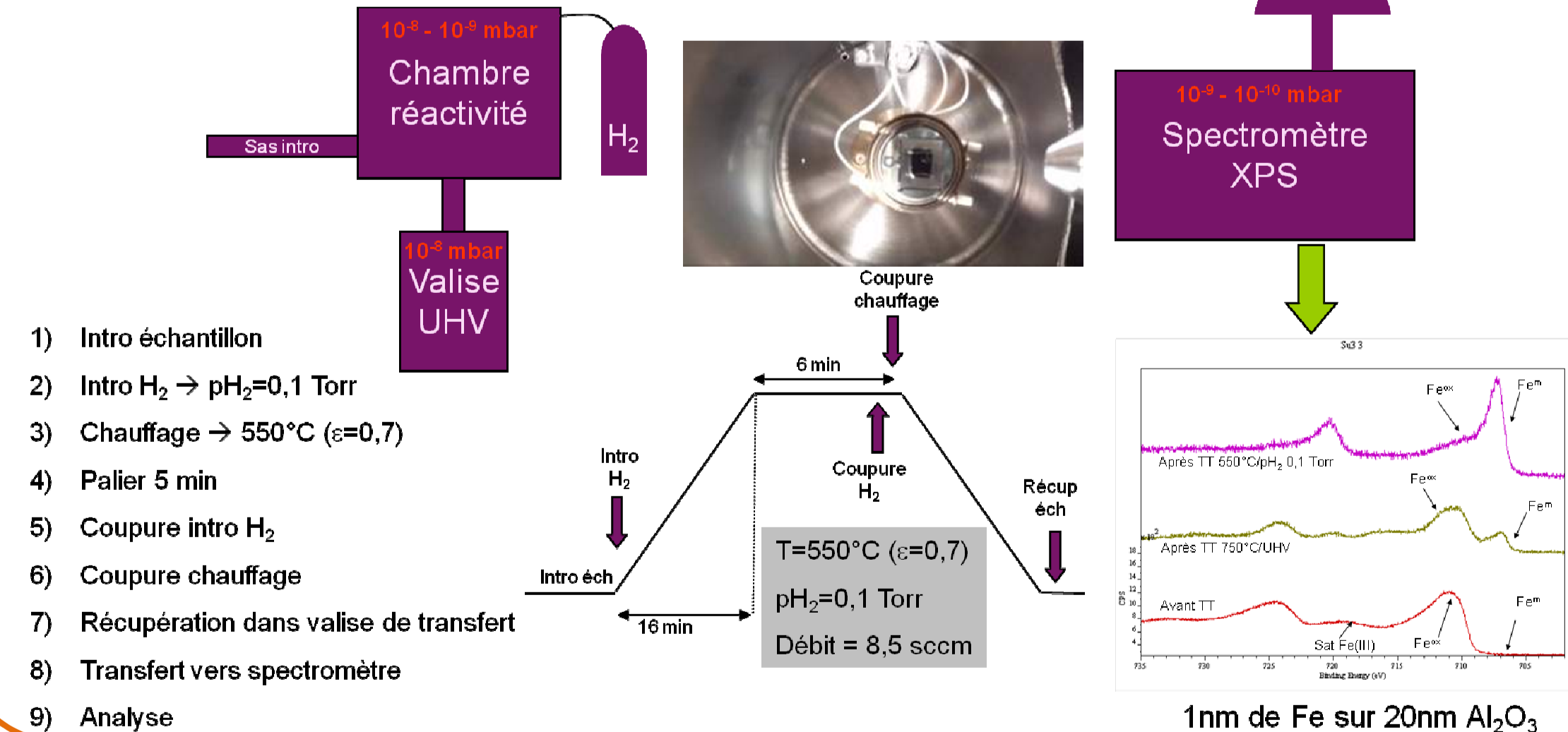


- Oscillations avec une période constante
- $L \searrow \Rightarrow C \searrow$, la période \nearrow
- Disparaissent quand $T \nearrow$

Evolution avec la température



Chambre d'analyse XPS



La réduction du Fe avec ou sans H₂ conduit à une oxydation du substrat:

transfert de l'oxygène de l'oxyde de Fe dans le substrat

Production scientifique

- "Carbon nanotube synthesis: from large-scale production to atom-by-atom growth" (Review article), C. Journet, M. Picher, V. Jourdain, *Nanotechnology* 23, 142001 (2012).
- "Evidence of Correlation between Catalyst Particles and the Single-Wall Carbon Nanotube Diameter: A First Step towards Chirality Control", M.-F. C. Fiawoo, A.-M. Bonnot, H. Amara, C. Bichara, J. Thibault-Pénisson, A. Loiseau, *Phys. Rev. Lett.* 108, 195503 (2012).
- "Influence of the growth conditions on the defect density of single-walled carbon nanotubes", M. Picher, H. Navas, R. Arenal, E. Quesnel, E. Anglaret, V. Jourdain, *Carbon* 50(7), 2407-2416, (2012).
- "Role of defect healing on the chirality of single-wall carbon nanotubes", M. Diarra, H. Amara, C. Bichara et F. Ducastelle, *Phys. Rev. B* 85, 245446 (2012).
- "Carbon Solubility in nickel nanoparticles : a grand canonical Monte Carlo study", M. Diarra, H. Amara, F. Ducastelle, C. Bichara, *Physica status solidi B* (accepted).
- "Importance of carbon solubility and wetting properties of nickel nanoparticles for single wall nanotube growth", M. Diarra, A. Zapelli, H. Amara, F. Ducastelle, C. Bichara *Phys. Rev. Lett.* (accepted).

CONTACT :

bichara@cinam.univ-mrs.fr

