



# Institut de physique

Actualités scientifiques

## Contrôler la synthèse des nanotubes de carbone grâce à la thermodynamique

Décembre 2018

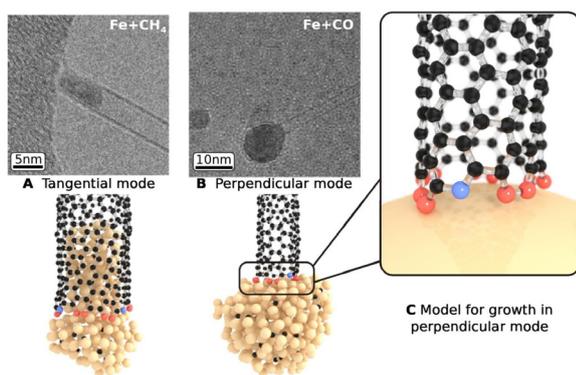
Une modélisation de l'interface entre les nanotubes de carbone monoparoi et le catalyseur dont ils sont issus révèle l'origine thermodynamique de leur chiralité. Cela ouvre la voie vers une sélection du type de nanotube que l'on souhaite produire lors de la synthèse par dépôt chimique en phase vapeur.

Les nanotubes de carbone sont des cylindres creux qui peuvent croître jusqu'à quelques centimètres de long par incorporation d'atomes de carbone au niveau de l'interface avec un catalyseur. On peut les voir comme le résultat de l'enroulement d'un feuillet d'atomes de carbone. L'angle d'enroulement, qui définit l'hélicité du tube, est une propriété capitale qui détermine les propriétés des porteurs de charge donnant au nanotube un caractère métallique ou semi-conducteur. Produire directement des tubes d'un type donné permettrait de fabriquer à l'échelle industrielle des dispositifs tirant parti de ces caractéristiques, tels que des capteurs, des transistors capables de dépasser les limites du silicium, ou des câbles électriques légers et performants. Une telle synthèse sélective se heurte encore à une compréhension limitée des mécanismes de croissance.

Dans l'approche admise jusqu'à présent, la formation du germe se fait au hasard. A partir de cette calotte initiale, la cinétique de croissance du nanotube, dépendant de son hélicité, détermine son abondance.

A contre-pied de cette approche, des chercheurs du Centre interdisciplinaire de nanoscience de Marseille (CINaM, CNRS/AMU) et du Laboratoire d'étude des microstructures (LEM, CNRS/ONERA) ont développé un modèle thermodynamique reposant notamment sur des observations en microscopie électronique à transmission. La structure du germe ne doit en fait rien au hasard. Dans ses premiers instants, elle fluctue jusqu'à atteindre un état stable, dicté par des considérations thermodynamiques que nous avons déterminées. Ainsi, en plus d'un terme d'énergie élastique qui pénalise les tubes de trop petit diamètre, et du terme d'énergie d'interface qui croît avec le diamètre, l'entropie due aux possibles arrangements des atomes de carbone de la lèvres du tube en contact avec la particule de catalyseur joue un rôle majeur pour stabiliser à température finie les différents types de tubes. En son absence, seuls seraient stables des tubes non chiraux, dits « zig-zag » ou « armchair ». Les chercheurs ont ainsi pu relier l'énergie de l'interface nanotube-catalyseur et la température de synthèse avec la distribution des hélicités des tubes produits et rendre compte de diverses situations expérimentales.

Expérimentalement, la recherche d'un système catalytique permettant une synthèse sélective des nanotubes s'oriente vers l'utilisation de nanoparticules d'alliages métalliques, éventuellement solides, mais procède souvent par essai et erreur. L'approche mise en œuvre dans ce travail permet d'expliquer les distributions d'hélicités fréquemment observées et leur évolution en température. En prenant en compte la nature chimique du catalyseur par le biais des énergies interfaciales, le modèle proposé permet d'établir des cartes structurales et des diagrammes de phase, qui serviront à guider un choix rationnel de catalyseurs et de paramètres de croissance vers une meilleure sélectivité.



A, B: Différents modes de croissance de nanotubes de carbone monoparoi sur une nanoparticule de fer, observés en microscopie électronique (haut) et modélisés à l'échelle atomique (bas). C: modèle simplifié de l'interface, à la base de notre approche thermodynamique.

### En savoir plus

#### Entropy driven stability of chiral single-walled carbon nanotubes

Y. Magnin, H. Amara, F. Ducastelle, A. Loiseau et C. Bichara

*Science* (2018), doi: 10.1126/science.aat6228

Lire l'article sur la base d'archives ouvertes [ArXiv](#)

### Contact chercheur

Christophe Bichara, directeur de recherche au CNRS

### Informations complémentaires

Centre interdisciplinaire de nanoscience de Marseille (CINaM, CNRS/Aix-Marseille Université)

cnrs

www.cnrs.fr

Institut de Physique

CNRS - Campus Gérard Mégie  
3 rue Michel-Ange, 75794 Paris Cedex 16

T 01 44 96 42 53

inp.com@cnrs.fr

www.cnrs.fr/inp