

DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIERE,  
DEPARTEMENT DE RECHERCHE SUR L'ETAT CONDENSE,  
LES ATOMES ET LES MOLECULES,  
**SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES**

## SEMINAIRE \*

**Vendredi 16 Juin 2006 à 11h00**

**Bâtiment 466, salle 111 - CEA Saclay, 91191, Gif sur Yvette**

# MODELISATION DE LA CROISSANCE ET DES DEFAUTS DES NANOTUBES DE CARBONE

**H. Amara**

*Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix, Namur et Université Catholique de Louvain*

Invité par C. Barreteau

### **Résumé:**

La croissance de nanotubes monofeuillets de carbone requiert la présence d'un catalyseur métallique (Fe, Co, Ni, ...) quel que soit le mode de synthèse utilisé. Toutefois, le mécanisme de croissance de tels objets reste méconnu. Nous avons alors entrepris une étude théorique visant à comprendre le rôle du catalyseur métallique. Ce travail a abouti à la mise en place d'un modèle semi-phénoménologique reposant sur la méthode des liaisons fortes intégrant à la fois les orbitales  $s$  et  $p$  du carbone ainsi que les orbitales  $d$  du métal. L'ensemble du modèle est ensuite inséré dans un code de simulation grand canonique Monte Carlo.

La deuxième partie du séminaire sera consacrée à l'étude préliminaire des défauts dans les structures  $sp^2$  de carbone. L'identification directe (TEM) des défauts est très difficile et doit donc se faire de manière indirecte, en détectant une variation de la densité d'états locale électronique (STM) ou vibrationnelle (STS). A l'aide d'une simple, mais précise, approche théorique basée sur la méthode des liaisons fortes, il est possible de simuler les signatures spectroscopiques et topographiques de défauts présents dans une feuille de graphène et dans un nanotube de carbone. Plusieurs illustrations, dans le cas du graphène, seront présentées.

**\* SERA PRECEDE D'UNE PAUSE-CAFE A PARTIR DE 10H30**