

ÉVALUATION DES INTERACTIONS DES MOLÉCULES D'HYDROGÈNE AVEC LES NANOTUBES DE CARBONE

Abdelouahab OUAHAB¹⁺ et Mourad KORICHI²

¹ Laboratoire LENREZA et Département de Physique, Université Kasdi Merbah – Ouargla, 30000 Ouargla, Algérie

² Département du Génie des Procédés, Université Kasdi Merbah – Ouargla, 30000 Ouargla, Algérie

⁺ *E-mail* : aouahab@yahoo.fr

RÉSUMÉ

Le stockage de l'hydrogène sous pression élevée est l'une des solutions proposées. Les nanotubes de carbone; vu leurs très bonnes propriétés mécaniques; sont suggérés comme un support de stockage de cette matière énergétique prometteuse. Nous présentons dans la présente communication les résultats de calculs théoriques sur la base de la dynamique moléculaire classique et de calculs semi-empiriques, une évaluation des interactions des molécules d'hydrogène avec les nanotubes de carbone.

MOTS-CLÉS : nanotubes de carbone, dynamique moléculaire, stockage d'hydrogène