



# Влияние флюенса ионного облучения на структуру многостенных углеродных нанотрубок



А.П. Евсеев<sup>1,2</sup>, Е.А. Воробьева<sup>1</sup>, А.В. Степанов<sup>3</sup>, А.В. Кононина<sup>1,2</sup>,  
А.В. Назаров<sup>1</sup>, Ю.В. Балакшин<sup>1,2</sup>, А.Е. Иешкин<sup>2</sup>, А.А. Шемухин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>ИИЯФ МГУ, Москва, Россия

<sup>2</sup>Физический факультет МГУ, Москва, Россия

<sup>3</sup>Чувашский государственный аграрный университет, Чебоксары, Россия

## Введение

Радиационно-индуцированные дефекты в твердых телах могут как ухудшать свойства материалов и конструкций, так и придавать им уникальные и полезные свойства, которые отсутствуют в идеальных твердых телах. При ионном облучении углеродных нанотрубок на их стенках образуются вакансии, а между слоями появляются междоузельные атомы. При сшивке образовавшихся оборванных связей происходит реконструкция вакансий – образуются новые типы дефектов. При помощи направленной радиационно-индуцированной инженерии дефектов в углеродных наноматериалах оказывается возможным управлять их свойствами, облучение ускоренными ионами приводит к снижению теплопроводности дефектного графена, изменения характера смачиваемости поверхности многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ), повышению чувствительности газовых сенсоров на основе нанотрубок к присутствию таких газов, как CO, NH<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>.

## Материалы и методы

МУНТ, произведенные в ООО "НаноТехЦентр", г. Тамбов, были спрессованы ручным прессом в таблетки с размерами 2,1 см в диаметре и толщиной в 0,35 см. В данной работе использовались 2 типа нанотрубок: Таунит («Т») – МУНТ, имеющие внешний диаметр 20-50 нм, длиной более 2 мкм, Таунит-М («ТМ») – МУНТ, имеющие внешний диаметр 5-15 нм, длиной более 2 мкм.

Для изучения воздействия ионного облучения на структуру МУНТ на ускорительном комплексе HVEE-500 в ИИЯФ МГУ (рис.1) были проведены облучения ионами гелия с энергией 80 кэВ и флюенсами в диапазоне от  $2.5 \times 10^{15}$  до  $3 \times 10^{16}$  ион/см<sup>2</sup>. Для этого был использован экспериментальный тракт ионной имплантации, который содержит системы фокусировки ионного пучка и сканирования мишени, а также ловушку нейтральных частиц. Давление в камере во время облучений не превышало  $10^{-5}$  Па.

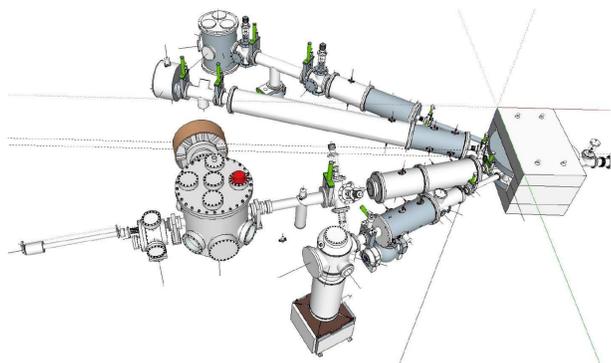


Рис. 1. Ускорительный комплекс HVEE-500.

## Результаты

Показано, что при малых флюенсах степень разупорядочивания, характеризуемая отношением интегральных интенсивностей I(D)/I(G) на спектрах КР, не зависит от диаметра МУНТ (Рис. 2). При высоких флюенсах плотность оборванных связей в слоях МУНТ достаточно высока, чтобы эти связи начали взаимодействовать друг с другом, и слои начали «сшиваться» вместе. Разница в отношении I(D)/I(G) для образцов «Т» и «ТМ» становится более значительной, это означает, что нанотрубки меньшего диаметра имеют более высокую степень разупорядоченности при одинаковом флюенсе облучения. Чтобы проверить возможность «сшивки» слоев МУНТ при использованных параметрах облучения, было проведено моделирование дефектообразования при помощи программного пакета LAMMPS. Результаты компьютерного моделирования явно показывают, что после облучения появляются различные типы поперечных связей (рис. 3). Бездефектные МУНТ содержат sp<sup>2</sup>-гибридизованные атомы углерода: энергия связи на один атом составляет ~ 6 эВ. После ионного облучения образуются дефекты: вакансии (7,8 эВ), междоузлия (1,2 эВ), межслойные сшивки (5,5 эВ).

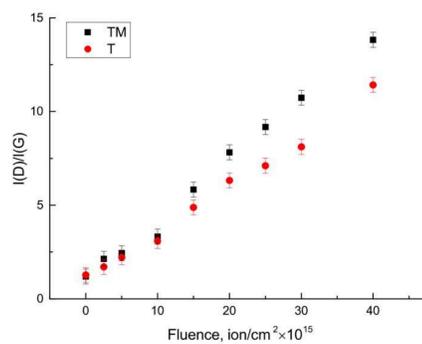


Рис. 2. Зависимость отношения интегральных интенсивностей I(D)/I(G) от плотности потока излучения.

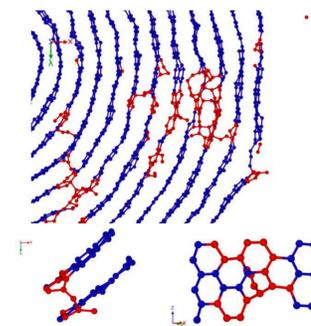


Рис. 3. Моделирование дефектообразования в МУНТ при помощи LAMMPS.

В результате проведения экспериментов по смачиваемости с дистиллированной водой было показано, что угол смачивания меняется от гидрофобного к гидрофильному в зависимости от флюенса облучения: при низких флюенсах образуются супергидрофобные поверхности, с увеличением флюенса наблюдается значительное уменьшение угла смачивания, особенно для нанотрубок меньшего диаметра (Рис. 4). Чем больше диаметр нанотрубок, тем более высокий флюенс требуется для уменьшения угла смачиваемости после достижения супергидрофобности, что согласуется с разницей в скорости образования дефектов, наблюдаемой с помощью КР.

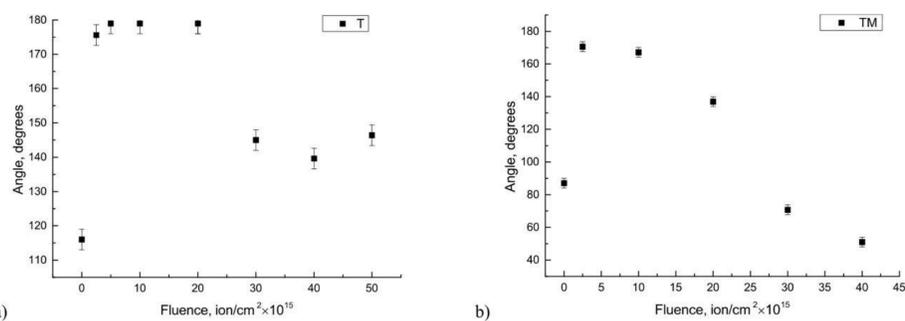


Рис. 4. Зависимость угла смачиваемости МУНТ водой от флюенса облучения: а) Таунит, б) Таунит-М.

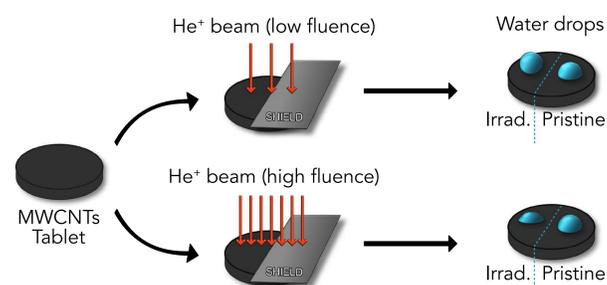


Рис. 5. Графическое представление изменения смачивания поверхности.

## Контакты

Евсеев Александр Павлович

ap.evseev@physics.msu.ru

МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия



## Заключение

При высоких флюенсах скорость образования дефектов в образцах «ТМ» выше, чем в «Т». Моделирование методом молекулярной динамики показало, что ионное облучение вызывает образование поперечных связей между слоями нанотрубок. Угол смачивания зависит от флюенса излучения: при меньших флюенсах образцы становятся супергидрофобными, с увеличением флюенса угол смачивания уменьшается, для нанотрубок меньших диаметров эта зависимость более резкая.