



А.П. Евсеев^{1,2}, Е.А. Воробьева¹, Ю.В. Балакшин^{1,2},
А.В. Степанов³, Д.К. Миннебаев^{1,2}, А.А. Шемухин^{1,2}

¹НИИЯФ МГУ, Москва, Россия

²Физический факультет МГУ, Москва, Россия

³ Чувашский государственный аграрный университет, Чебоксары, Россия

Abstract

A study of He⁺ ion irradiation influence on the wettability of the multi-walled carbon nanotubes is presented. Tablets of pressed nanotubes of two types with different diameters were prepared and irradiated by 80 keV He⁺ ions. Raman and X-ray photoelectron spectroscopies showed the differences in the rate of radiation-induced defect formation for different types of nanotubes. The formation of cross-links between the layers of nano- tubes under ion irradiation was demonstrated by the molecular dynamics simulation. Contact angle changes drastically with an increase in the fluence for both types of nanotubes: at low fluences superhydrophobic surfaces are formed, with an increase in the fluence a significant reduction in contact angle is observed, especially for the nanotubes of smaller diameters.

With the help of radiation-induced defect engineering of in carbon nanomaterials, it is possible to control their properties: irradiation by accelerated ions leads to a decrease in the thermal conductivity of defective graphene, a change in the nature of the surface wettability of multi-walled carbon nanotubes, an increase in the sensitivity of gas sensors based on nanotubes to the presence of such gases. like CO, NH₃, NO₂.

Результаты

Показано, что при малых флюенсах степень разупорядочивания, характеризующая 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 sp²-гибридизованные атомы углерода: энергия связи на один атом составляет ~ 6 эВ. После ионного облучения образуются дефекты: вакансии (7,8 эВ), междоузлия (1,2 эВ), межслоевые сшивки (5,5 эВ).

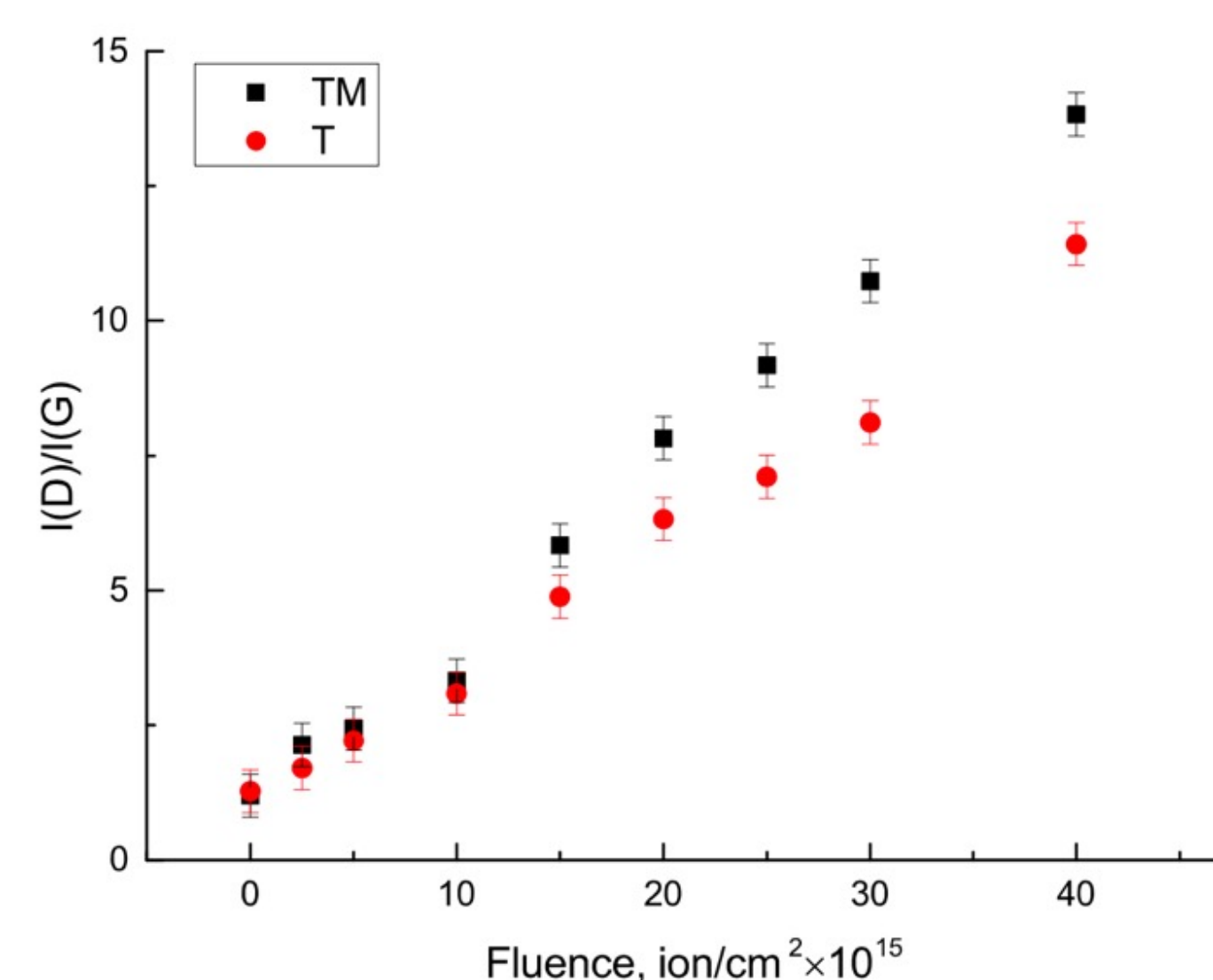


Рис. 2. Зависимость отношения интегральных интенсивностей I(D)/I(G) от плотности потока излучения.

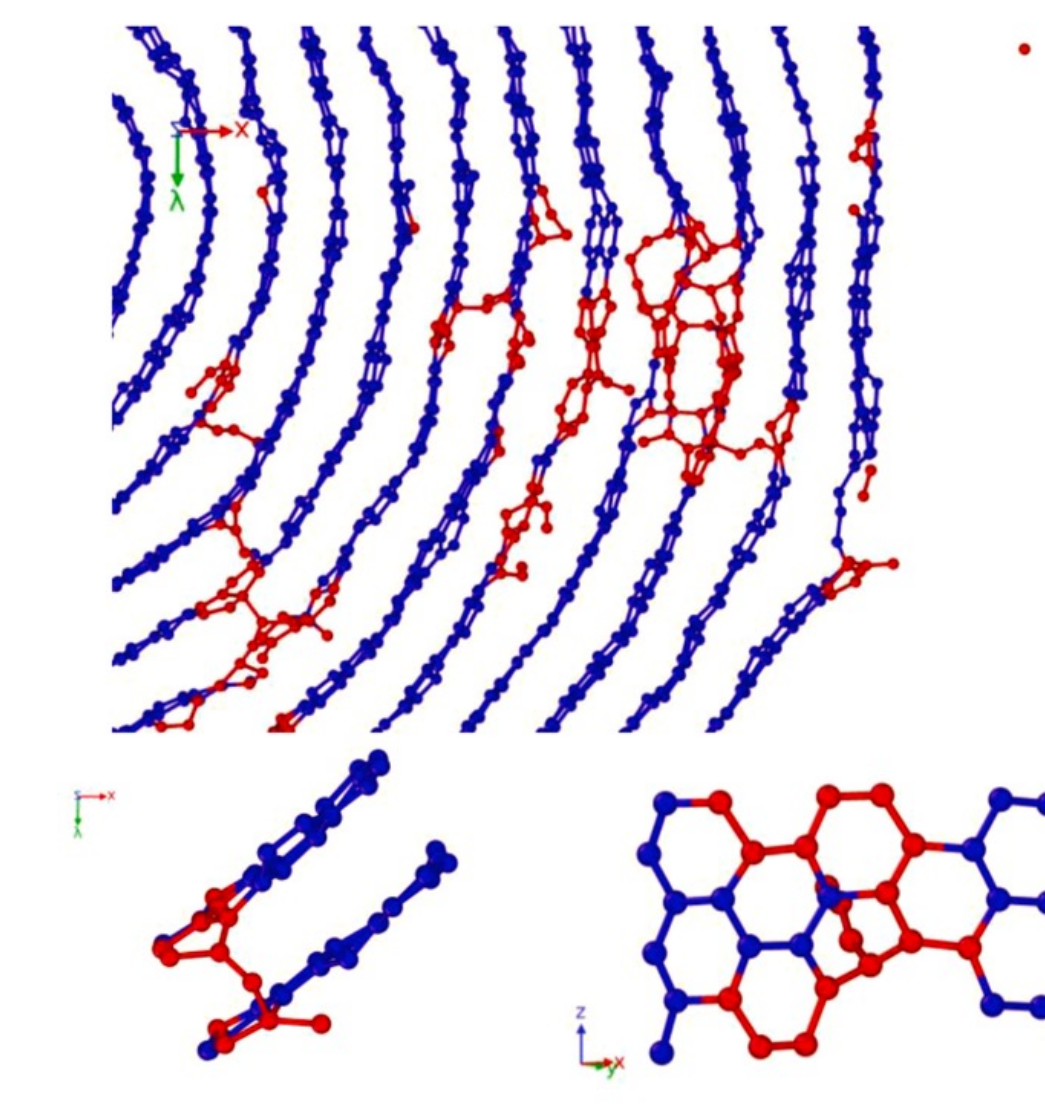


Рис. 3. Моделирование дефектообразования в МУНТ при помощи LAMMPS.

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.

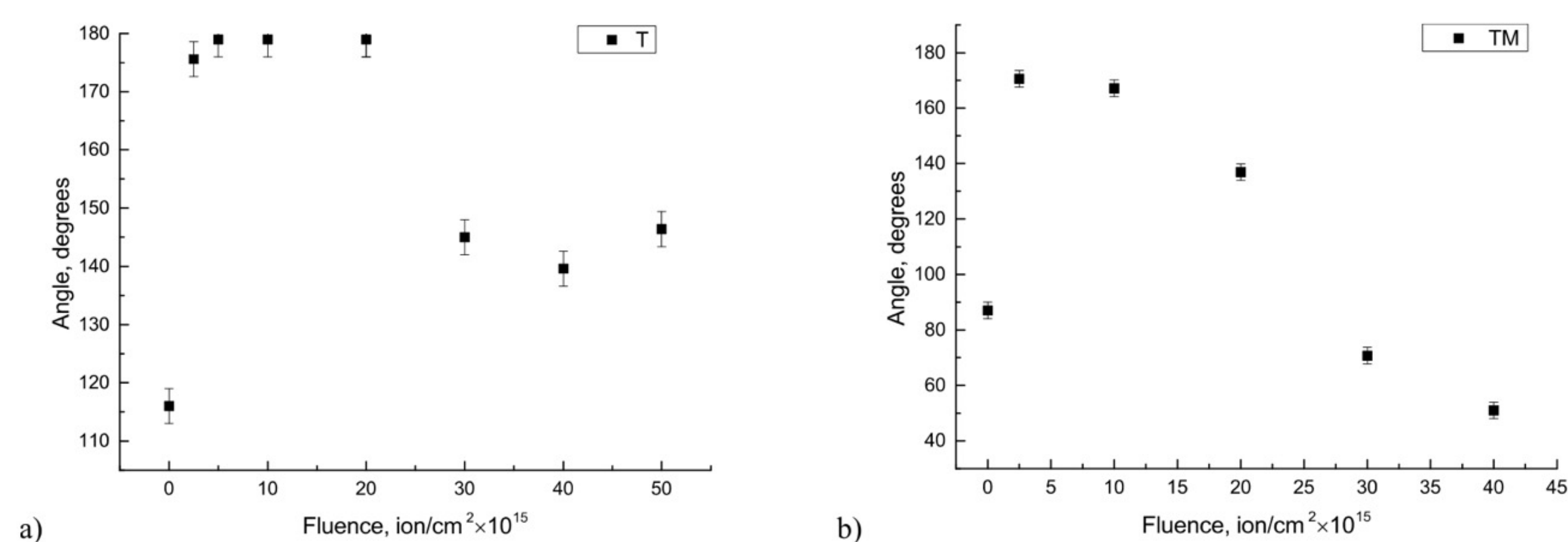


Рис. 4. Зависимость угла смачиваемости МУНТ водой от флюенса облучения: а) Таунит, б) Таунит-М.

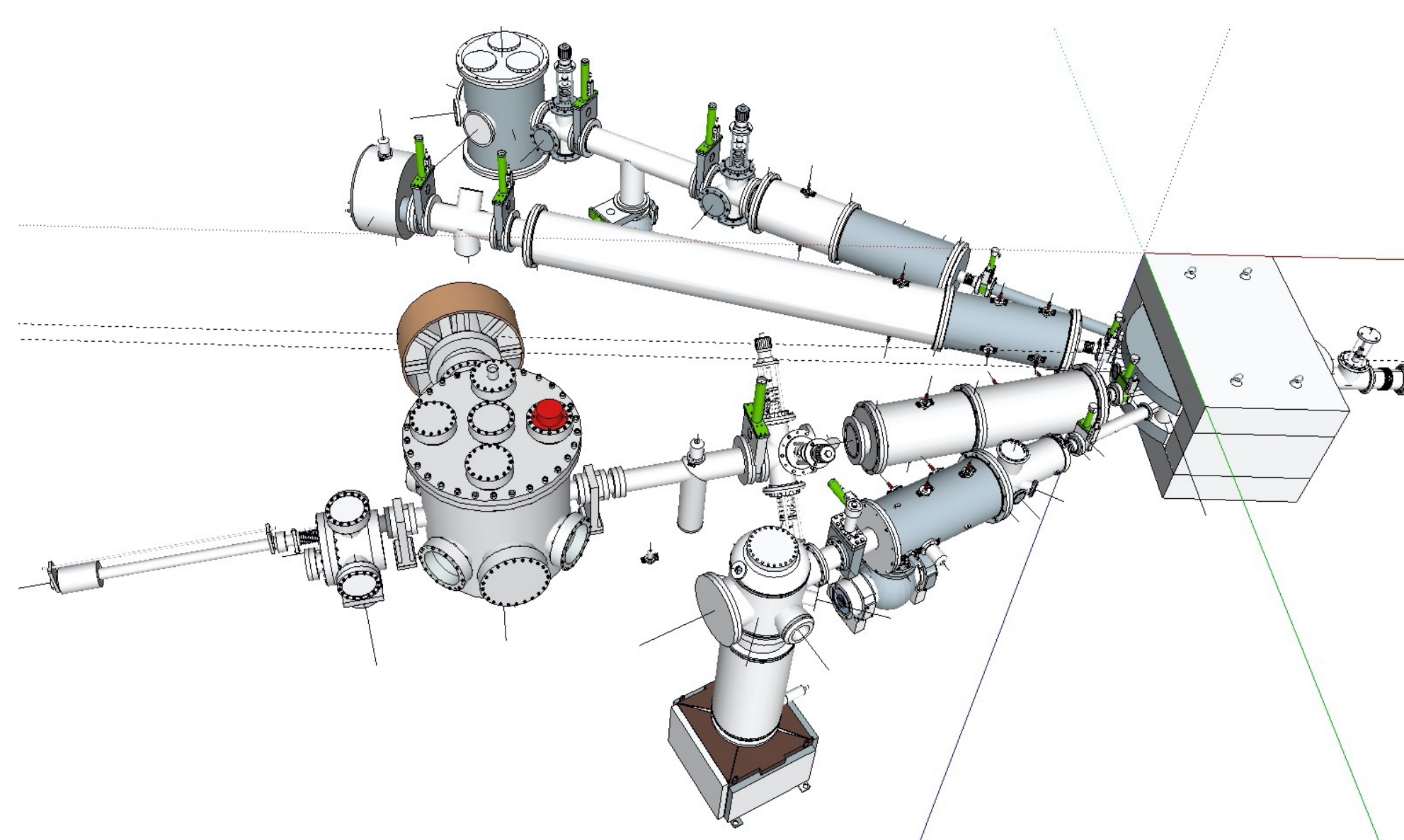


Рис. 1. Ускорительный комплекс HVEE-500.

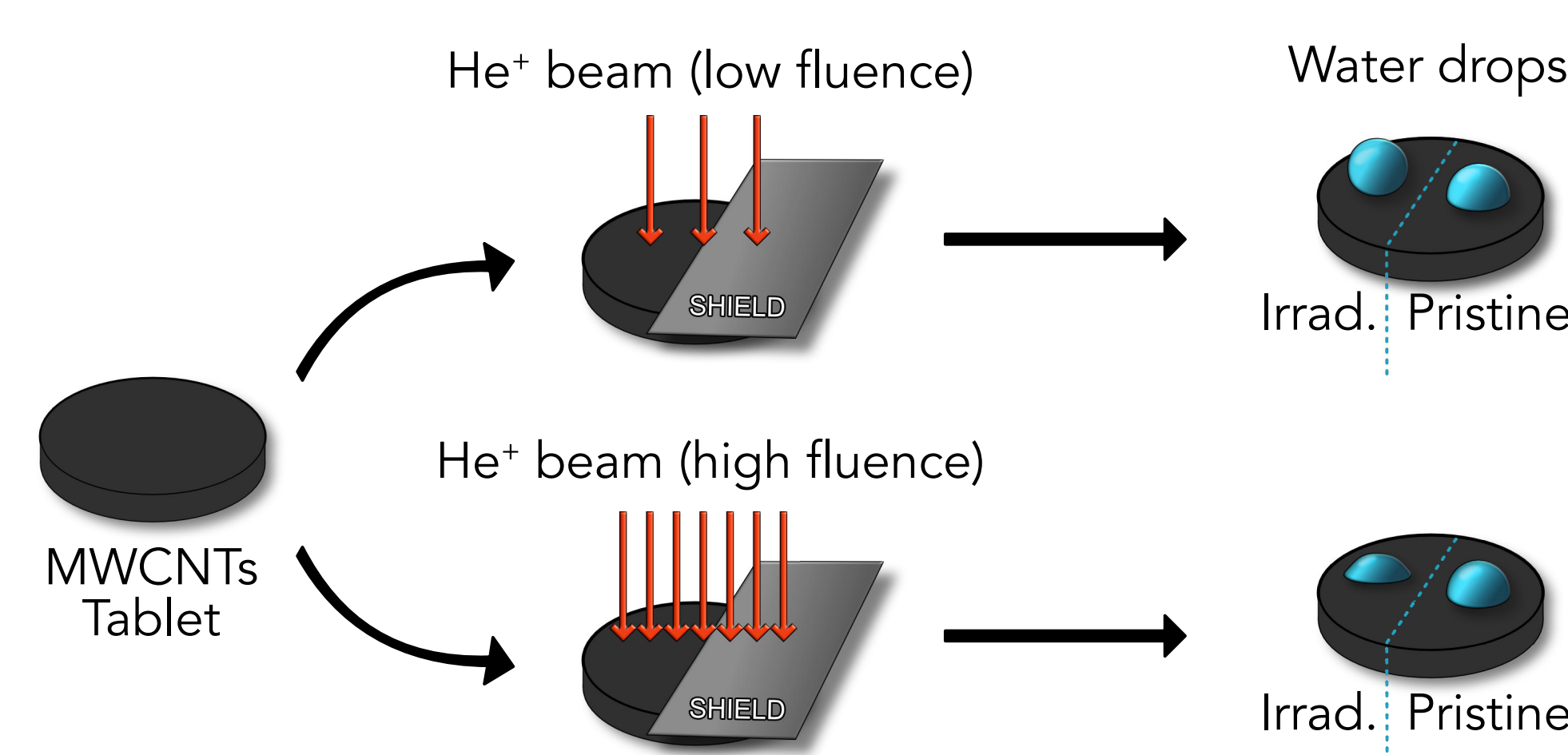
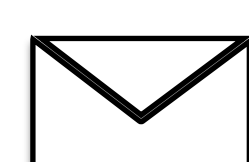


Рис. 5. Графическое представление изменения смачивания поверхности.

Контакты

Евсеев Александр Павлович / Evseev Alexander
ap.evseev@physics.msu.ru



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

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.