

Irradiation de systèmes nanotubulaires

A. Zobelli^{a,b,1}, A. Gloter^a, C.P. Ewels^c, G. Seifert^b, C. Colliex^a

^a Laboratoire de Physique des Solides, Univ. Paris-Sud, CNRS, UMR 8502, F-91405 Orsay Cedex, France

^b Technische Universität Dresden, Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie, D-1062 Dresden, Germany

^c Institute des Materiaux, CNRS UMR 6502, 2 rue de la Houssinière, 44322 Nantes, France

Résumé - Nous démontrons la possibilité d'usiner à une échelle nanométrique nanotubes simple paroi de carbone et nitrure de bore en utilisant la sonde focalisée d'un microscope à transmission à balayage. Les conditions expérimentales ont été optimisées sur la base des sections efficaces d'émission dérivées dans le cadre de la théorie du fonctionnel de densité.

La nature et le rôle de défauts est de première importance pour la compréhension des propriétés physiques des nanotubes monoparoi (SWNT) de carbone et nitrure de bore. La microscopie électronique en transmission (TEM) est un outil très puissant pour l'étude des défauts dans les matériaux mais dans le cas de SWNT les atomes peuvent être aussi être éjectés par l'irradiation électronique. Cet effet peut changer la structure initiale du tube mais peut être également vu comme un outil potentiel pour "usiner" des structures nanométriques.

Nous avons développé un outil théorique pour la description du mécanisme d'irradiation [1]. Dans un premier temps, nous avons dérivé, par des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de densité, la carte des seuils d'énergie d'émission. Successivement, nous avons dérivé numériquement la section efficace totale de Mott pour différents sites d'émission dans des nanotubes de carbone et nitrure de bore. Utilisant un microscope STEM, nous avons été capables de contrôler la génération de défauts dans des systèmes nanotubulaires avec des conditions expérimentales optimisées sur la base de nos calculs de section efficace [2]. Défauts ponctuels ou ligne de dislocation peuvent ainsi être obtenus avec une résolution spatiale de quelques nanomètres. La structure, l'énergie et les propriétés électroniques des défauts ponctuels et des lignes de défauts ont été étudiées dans les systèmes de BN [3]. L'énergie d'activation et les chemins réactionnels pour la diffusion de mono et de bi-lacunes dans du BN hexagonal ont été dérivés en utilisant le "nudged elastic band method" combiné avec les techniques basées sur la fonctionnelle de la densité [4]. Nous avons aussi démontré que l'apparition de défauts étendus est plus favorable qu'une distribution aléatoire de défauts ponctuels et que cela est dû à l'existence de sites préférentiels pour l'émission d'atomes en présence de défauts préexistants plutôt qu'à des phénomènes de migration et nucléation thermique des lacunes [1,3].

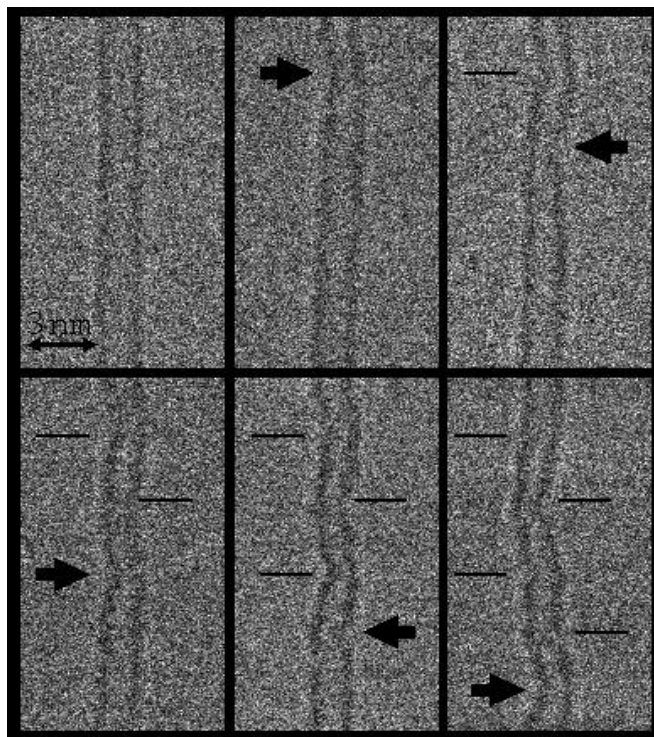


Figure 1 – Irradiation locale de nanotubes de carbone mono paroi.

Références

- [1] A. Zobelli, A. Gloter, C.P. Ewels, G. Seifert and C. Colliex, Phys. Rev. B (2007) accepted for publication
- [2] A. Zobelli, A. Gloter, C.P. Ewels and C. Colliex, submitted for publication
- [3] A. Zobelli, C. Ewels, A. Gloter, G. Seifert, O. Stephan, S. Csillag, and C. Colliex, Nano Lett. **6**, 1955 (2006)
- [4] A. Zobelli, C.P. Ewels, A. Gloter and G. Seifert, Phys. Rev. B **75**, 94104 (2007)