

# 碳纳米管的生长机理、缺陷控制及缺陷效应

Growth Mechanism, Defect Control and Defect Effect of Carbon Nanotubes

项目批准号: 59972017

山东大学物理系 夏曰源

用分子动力学模拟方法研究碳纳米管微观生长机理、缺陷形成和组装规律,分析各种缺陷对碳纳米管的电子结构、机械性能和贮氢能力的影响,能为生长高质量的单壁碳纳米管提供理论上的指导和参考。并能为碳纳米管在纳米电子器件、高强度复合材料、平面显示、高效无公害能源等高科技领域的应用提供理论基础。

## ● 主要研究成果与重要进展

- (1) 发现在1000K-1500K的最佳温度范围内,通过C<sub>2</sub>小团簇的加合作用,椅型碳纳米管能保持快速生长,而不一定需要催化剂的作用。
- (2) C<sub>1</sub>, C<sub>2</sub>等团簇与碳纳米管侧壁碰撞,可生长非常稳定的7-5-5-7拓扑缺陷。这种缺陷在设计纳米电子器件和碳纳米管的能隙方面有重要的应用前景。图1是一典型的7-5-5-7缺陷。
- (3) 端部封闭的碳纳米管在受到激发时可以在某些亚稳态结构之间不断地转换,从而形成能量在红外光子范围的发射和吸收脉冲(见图2)。可以进一步探索其在红外光探测方面的应用。
- (4) 用非平衡方法可以把氢及其同位素装入单壁碳纳米管中,形成高密度液氢流体。图3表示贮存于(5,5)碳纳米管中的筒状液氢(密度高达132.4Kg/m<sup>3</sup>)。在研究液氢流体和高效能源发展有重要的应用前景。

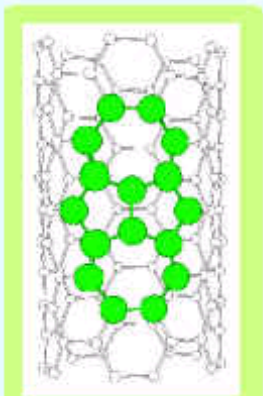


图1

在(5,5)单壁碳纳米管上形成的7-5-5-7缺陷

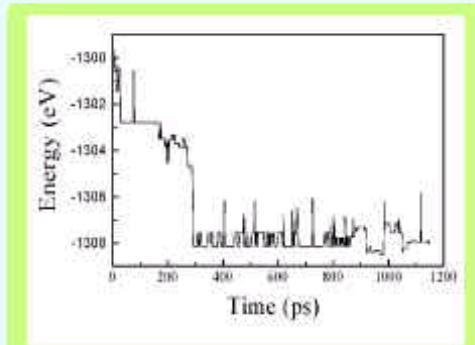


图2

在热激发条件下,从一单壁碳纳米管封闭的端部发出的能量脉冲



图3

约束于(5,5)碳纳米管中的高密度液氢的顶视图

## ● 代表性论著

- (1) Yueyuan Xia, Yuchen Ma, Yuelin Xing, Yuguang Mu, Chunyu Tan and Liangmo Mei, Growth and Defect Formation of Single-wall Carbon Nanotubes, Phys. Rev. B 61, 11088 (2000).
- (2) Yuchen Ma, Yueyuan Xia, Mingwen Zhao, Ruijin Wang, and Liangmo Mei, Effective Hydrogen Storage in Single-wall Carbon Nanotubes, Phys. Rev. B 63, 115422 (2001).