

# 掺杂C<sub>60</sub> 和纳米碳管的光学和电磁性质研究

Optical、Electrical and Magnetic Properties of the doped C<sub>60</sub> and Carbon Nanotubes

项目批准号：19674027；10074026

南京大学 董锦明\*、顾刚、蒋杰、万贤纲

掺杂C<sub>60</sub> 和纳米碳管的结构、光学与电磁特性的研究是近年来国际、国内凝聚态物理和材料科学领域中的新的研究热点，预期在纳米光电器件、光通讯、磁记录、化学和化工以及新材料等高新技术领域内有巨大的应用前景和经济价值。本项目用解析和大规模数值计算方法，研究C<sub>60</sub> 和纳米碳管的各种掺杂效应以及电子关联对其电子和自旋的输运行为，电磁性质以及非线性光学特性的重要影响，并着重进行实验与理论相互配合研究其光学特性。我们的研究成果为理解掺杂C<sub>60</sub> 及相关的富勒烯分子团簇增强的非线性光学系数的微观机理，C<sub>60</sub> 固体的有序-无序相变，以及纳米碳管的螺旋对称性、管径对其光学和输运特性的影响，提供了深入的实验和理论上的研究，具有重要的基础理论研究意义。同时也为寻找C<sub>60</sub> 分子团簇材料和纳米碳管在未来纳米和分子水平的光电器件中的实用途径做了一些实验和理论上的探索。

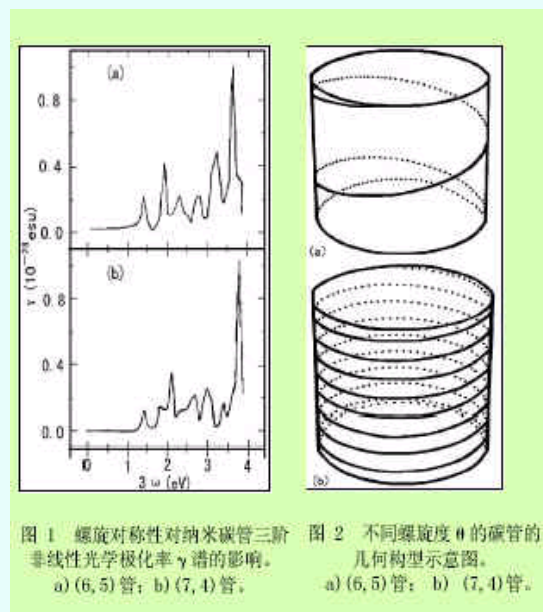
## ● 主要研究成果

### ☆ 创新点：

- (1) 首先研究了碳管的螺旋度、管径对其线性和非线性光学响应的影响。(见图1 和图2)
- (2) 发现C<sub>60</sub> 分子进入分子筛后诱导了氧化硅分子筛484nm 的光。
- (3) 实验和理论相互配合研究，发现电荷从笼内Dy 离子向C<sub>82</sub>的转移是造成Dy@C<sub>82</sub> 有大非线性光学系数的主要原因。
- (4) 运用有效媒质近似和转移矩阵方法，计算了碳管阵列的介电性质，得到了与实验观测不仅定性，而且定量上相符合的结果。和其它复杂理论计算方法相比较，可大大简化碳管阵列光学性质的数值工作量。
- (5) 在国际上首次得到了适用于各种螺旋对称性金属碳管的普适的电子局域化长度公式，提出了一种新的微观机制来解释为什么准一的纳米碳管会具有微米长度的电子平均自由程和局域化长度。

## ● 代表性论文

- 1) Gang Gu et al., “ C 60 induced photoluminescence of a silica molecular sieve ”, Applied Physics Letters 270 , 135 (1997).
- 2) X. Wang, Jinming Dong and D. Y. Xing , “ Optical properties of carbon nanotubes ”, Physical Review B 58 , 6756 (1998).
- 3) J. Jiang, Jinming Dong, et al., “ Universal expression for localization length in metallic carbon nanotubes ”, Physical Review B 63 , (in press , 2001).



工程与材料科学部、国际合作局 主办  
数理科学部、化学科学部 协办