

# 单壁纳米管薄膜在 THz 波段的电导性质

韩家广, 朱志远, 王震遐, 余礼平, 张伟, 孙立涛, 王庭太

(中国科学院上海原子核研究所, 上海 201800)

E-mail: hanjiag88@sina.com

**摘要:** 利用有效介质模型,理论上计算了单壁纳米管薄膜的太赫兹(THz)波段的光导。理论的计算解释了最近的实验结果并发现了纳米管薄膜的电导随入射光频率增加而减小。同时也计算了不同填充因子下单壁纳米管薄膜材料在太赫兹波段的电导函数曲线。

**关键词:** 单壁纳米管, 太赫兹, 电导

**中图分类号:** TP383; O484.4 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-4776(2003) 07/08-0540-03

## The conductivity of single walled nanotube films in terahertz region

HAN Ji-guang, ZHU Zhi-yuan, WANG Zhen-xia, Yu Li-ping,

ZHANG Wei, SUN Li-tao, WANG Ting-tai

(Shanghai Institute of Nuclear Research, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

**Abstract:** The optical properties of single walled nanotube films in terahertz (THz) region were calculated with the effective medium approach (EMA). The theoretical calculations gave an interpretation for the recent experiments and found a decrease of the conductivity of nanotube films with increasing frequency of incident light. Meanwhile, the conductivities of nanotube films in THz region were discussed with different filling factors.

**Key words:** single walled nanotube; THz; conductivity

## 1 引言

最近太赫兹技术正成为很热门的研究领域,它的应用已经涉及了半导体、断层成像、基因分析、分子水平成像、生物感应探测等等<sup>[1]</sup>。太赫兹的广泛应用使它成为了一个新兴的研究领域。特别是它在纳米科学技术上的应用更是激起了人们很大的兴趣。关于单壁纳米管的光学和电学性质已经有很多报道,但是在太赫兹波段的光学性质研究却只有很少的一部分工作刚刚开展<sup>[2~4]</sup>。本文利用有效介质模型计算了单壁纳米管薄膜在 0.1 ~ 10 THz 内的电导率。

在最近的实验报道中, Tae-In Jeon 和他的合作者利用光电太赫兹装置测量了单壁纳米管薄膜在 0.1 ~ 0.8 THz 内的吸收和折射系数并得到了电导

率。实验发现电导的实部随入射光的频率增加而增加<sup>[4,5]</sup>。

## 2 理论计算和讨论

我们知道,金属和半导体的电导性质通常可以用一个简单的 Drude 模型来讨论。但是对于单壁纳米管薄膜来说并不能用简单的 Drude 模型来得到和实验很好的符合。因此,用了如下的有效介质模型(EMA)来讨论纳米管的电导性质。有效介质模型描述如下<sup>[6,7]</sup>

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_i \frac{2(1-f)\epsilon_i + (1+2f)\epsilon_m(\omega)}{(2+f)\epsilon_i + (1-f)\epsilon_m(\omega)}$$

式中填充因子  $f$  定义了导电部分和绝缘部分的体积比例; $\epsilon_i$  和  $\epsilon_m(\omega)$  分别是载体和金属体的电介质函数。通常,有效介质理论是用来描述金属或半导

收稿日期: 2003-05-15

基金项目: 中科院重大创新项目资助(No. KJCX2-SW-N02)

体颗粒分散在连续绝缘介质中的电介质性质的。单壁纳米管薄膜可以看成是单壁的纳米管分散在有效的绝缘介质中。在模型的计算中选取填充因子  $f = 0.6$ ,  $\epsilon_i$  和  $\epsilon_m(\omega)$  可以从 Drude-Lorentz 模型中得到。在 Drude-Lorentz 模型中,电介质函数表达为<sup>[6-8]</sup>

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_c - \frac{p}{(\omega + i)^2} - \sum_j \frac{p_j}{(\omega^2 - \omega_j^2 + i\gamma_j)^2}$$

其中  $\epsilon_c$  是不依赖于入射频率的介质常数。第二项是 Drude 项,它表征了非局域传导部分的贡献。 $p$ ,  $\omega_p$  是等离子体频率和电荷弛豫率。局域电荷的贡献由第三项的 Lorentz 振荡项来描述。式中,  $p_j$ ,  $\omega_j$  和  $\gamma_j$  分别是中心频率,峰宽和振荡强度。在 EMA 中的金属粒子的电介质函数  $\epsilon_m(\omega)$  可以从 Drude-Lorentz 模型的 Drude 项得到,而载体电介质函数  $\epsilon_i$  则通过 Lorentz 项加上  $\epsilon_c$  给出。在计算中,在对 Jeon 的实验进行分析的基础上,选取了如下的参数:  $\epsilon_c = 5.5$ ,  $\omega_p = 0.03 \text{ eV}$ ,  $\gamma = 0.0035 \text{ eV}$ ,  $p_j = 0.02 \text{ eV}$ ,  $\omega_j = 0.004 \text{ eV}$ ,  $\gamma_j = 0.02 \text{ eV}$ ,  $f = 0.6$ 。

如图 1 所示,理论计算给出了对 Jeon 的实验的拟合。在图 1(a)和(b)的内插图中,可以看到单壁纳米管薄膜的吸收率和电导在 0.1~1.0THz 内随频率的增加而增加,这与 Jeon 的实验是一致的。在入射光频率在 1.0THz 时,电导实部出现一个很强的峰,表明这有一个强的局域吸收<sup>[9]</sup>。当频率大于 1.0THz 时,电导随频率的增加反而下降。由于实验设备的限制,Jeon 的实验只测量了从 0.1~0.8THz 范围内情况,所以对于大于 1.0THz 时的情况并没有实验报道,理论计算表明当频率大于 1.0THz 时,单壁纳米管薄膜的电导随频率的增加反而会下降。

图 2 选取了不同的填充因子  $f$  进行计算,也就是考虑了纳米管和绝缘介质的不同体积比的情况。计算发现当  $f$  在 0.3~0.8,电导实部和实验的测量结果有相同的趋势,并且当入射光频率大于 4.0THz 时,不同  $f$  下的电导值几乎一样。如图 2 所示,不同  $f$  下,电导在频率为 1.0THz 时都表现出一个很强的吸收峰,所以对于单壁纳米管薄膜来说,1.0THz 附近应该有一个吸收带的存在。通常单壁纳米管用一对整数  $(m, n)$  来表征,Hammda 等人指出对于  $n = m$  的扶手椅型的纳米管应具有金属的性质,而对于  $n \neq m$  的纳米管具有半导体的性质。单壁纳米管薄膜样品是各种类型纳米管的混合,并且纳米管的排列也是无规则的,所以在具体的计算中应该考虑到导体与绝缘体之间的比例问题,而有效

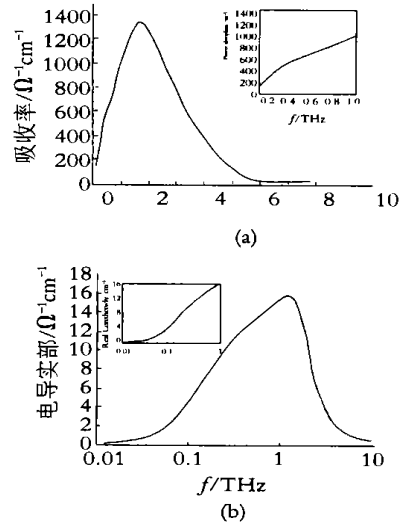


图 1 单壁纳米管薄膜的吸收率曲线和电导实部 其中小的插图是 0.1~1.0THz 时的情况

介质模型正是考虑了这些因素,从而给出了很好的与实验相符的计算结果。

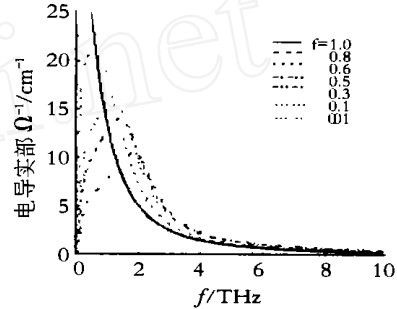


图 2 不同填充因子下纳米管薄膜的电导实部

### 3 结 论

利用有效介质模型对单壁纳米管薄膜 THz 波段内的光学性质进行了讨论,给出了对 Jeon 的实验的很好解释。同时发现当入射光频率大于 1.0THz 时,纳米管薄膜的电导随频率的增加反而减小的现象。利用不同填充因子下的计算可知,对于纳米管薄膜在 1.0THz 附近应该存在一个局域的吸收带。

#### 参考文献:

- [1] FERGUSON B, ZHANG X C. Materials for terahertz science and technology [J]. Nature Materials, 2002, 9(1): 26-33.
- [2] PHILLIPS C, SU M. Y, KO J, et al. First-order coherent THz optical sideband generation from asymmetric QW intersubband transitions[J]. Physica E, 2000, 4(7): 187-190.
- [3] CHEN Y C, et al. Ultrafast optical switching properties of single-wall carbon nanotube polymer composites at 1.55 μm [J]. Appl Phys Lett, 2002, 81(8): 975-977.
- [4] JEON T I, KIN K J, et al. Terahertz conductivity of anisotropic single walled carbon nanotube films [J]. Appl Phys Lett, 2002, 80(5): 3403-3405.
- [5] RUZICKA B, DEGIORGI L, et al. Optical and dc conductivity

- study of potassium-doped single-walled carbon nanotube films[J]. Phys Rev B, 2000, 61(1): R2468-R2471.
- [6] BOMMELI F, DEGIORGI L, *et al.* Evidence of anisotropic metallic behaviour in the optical properties of carbon nanotubes [J]. Solid State Commun, 1996, 99(7): 513-517.
- [7] COHEN R W, CODY G D, COUTTS M D, *et al.* Optical properties of granular silver and gold films[J]. Phys Rev B, 1973, 8(10): 3689-3701.
- [8] UGAWA A, G. RINZLER A, TANNER D B. Far-infrared gaps in single-wall carbon nanotubes[J]. Phys Rev B, 1999, 60(10): R11305-R11308.
- [9] PICHLER T, KNUPFER M, *et al.* Localized and delocalized electronic states in single-wall carbon nanotubes [J]. Phys Rev Lett, 1998, 80(5): 4279-4732.

作者简介:

韩家广 男, 硕士研究生, 从事 THz 和纳米材料相互作用的机理研究。

(上接第 539 页)

- [15] 许珂敬, 杨新春, 等. 高分子表面活性剂对氧化物陶瓷超微颗粒的分散作用 [J]. 中国陶瓷, 1999, 5:15.
- [16] 梁治齐, 宗惠娟, 李金华. 功能性表面活性剂 [M]. 北京: 中国轻工业出版社, 2002, 4:2-12.
- [17] 刘志强, 李小斌, 等. 湿化学法制备超细粉末过程中的团聚机理及消除方法[J]. 化学通报, 1999, 7:54.
- [18] 潭立新, 蔡一湘. 超细粉体粒度分析的分散条件比较[J]. 中国粉体技术, 2000, 6(1):23.
- [19] 孙 静, 高濂, 郭景坤. 分散剂用量对几种纳米氧化锆粉体尺寸表征的影响[J]. 无机材料学报, 1999, 14(3):465.
- [20] 仇海波, 高濂, 冯德楚, 等. 纳米氧化锆粉体的共沸蒸馏法制备及研究 [J]. 无机材料学报, 1994, 9(3):365.
- [21] LUAN W L, GAO L, GUO J K. Study on drying stage of nanoscale powder preparation [J]. Nanostructured Materials, 1998, 10(7):1119.
- [22] 杨基础, 沈忠耀. 超临界流体技术与超细颗粒的制备[J]. 化工进展, 1995, 3:28.
- [23] 马池明, 陈诵英. 超细粒子氧化铝的制备 [J]. 粉体技术, 1995, 1(4):21.
- [24] CHAUMONT D, CRAIEVICH A, ZARZYCKI A. Effect of ultrasound on the formation of ZrO<sub>2</sub> sols and wet gels [J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 1992, 41:147-148

作者简介:

冯拉俊 (1957-) 男, 西安理工大学材料科学与工程学院教授, 主要从事表面工程及粉体制备方面的研究。