

碳纳米管光学天线的有效波长和谐振特性

武小芳 谢树果 何云涛 李丽 李小路

Effective wavelength and resonance characteristics of carbon nanotube optical antenna

Wu Xiao-Fang Xie Shu-Guo He Yun-Tao Li Li Li Xiao-Lu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 097801 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.097801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.097801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I9>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

半导体材料基因组计划: 硅基发光材料

Semiconductor Materials Genome Initiative: silicon-based light emission material

物理学报.2015, 64(20): 207803 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.207803>

金属微结构纳米线中等离激元传播和分光特性

Plasmonic propagation and spectral splitting in nanostructured metal wires

物理学报.2015, 64(9): 097803 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.097803>

Au 的金属颗粒对二硫化钼发光增强

PL enhancement of MoS₂ by Au nanoparticles

物理学报.2014, 63(21): 217802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.217802>

内嵌圆饼空心方形银纳米结构的光学性质

Optical properties of silver hollow square embedded disk nanostructures

物理学报.2014, 63(10): 107803 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.107803>

超小间距纳米柱阵列中的谐振调制

Tuning surface plasmons in nanorod arrays with ultrasmall spacing

物理学报.2013, 62(23): 237806 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.237806>

碳纳米管光学天线的有效波长和谐振特性*

武小芳¹⁾ 谢树果¹⁾ 何云涛^{1)†} 李丽¹⁾ 李小路²⁾

1) (北京航空航天大学电子信息工程学院, 北京 100191)

2) (北京航空航天大学仪器科学与光电工程学院, 北京 100191)

(2016年1月2日收到; 2016年2月2日收到修改稿)

将经典金属自由电子气模型应用于金属型碳纳米管, 基于光学天线有效波长理论, 得出了金属型碳纳米管光学天线响应的有效波长与碳纳米管介电特性之间的普适关系. 在对碳纳米管介电特性进行第一性原理计算的基础上, 以金属型4 Å碳纳米管为例, 进一步研究了金属型碳纳米管光学天线响应的有效波长与入射波长之间的关系, 以及金属型碳纳米管光学偶极子天线的谐振特性. 通过将已有传统金属光学天线和碳纳米管天线有效波长的研究结果进行对比, 验证了本文理论的正确性. 结果表明, 碳纳米管光学天线响应的有效波长与入射波长呈近似线性关系, 与传统金属材料构成的同直径光学天线相比, 碳纳米管天线显示出了更强的波长压缩能力, 并且在可见光到红外波段内易于发生谐振. 该方法可为碳纳米管光学天线研究提供新的思路.

关键词: 光学天线, 碳纳米管, 介电常数, 有效波长

PACS: 78.67.-n, 78.67.Ch, 84.40.Ba

DOI: 10.7498/aps.65.097801

1 引言

光学天线是一种将自由传播光场与局域能量进行相互转换的装置^[1,2]. 纳米光学天线的概念最早由Wessel教授于1985年提出^[3], 他发现金纳米颗粒具有与传统天线类似的特性, 能够接收电磁波. 2000年, Pohl^[4]在研究近场光学问题时, 指出近场光学探针可以看作光学天线, 并将该探针与传统天线进行比较, 得到了传统天线理论可用于近场光学的结论. 近年来, 纳米光学天线已经发展成为纳米光子学领域中的重要研究方向, 在衍射极限成像^[5]、太阳能转化效率^[6,7]、纳米光刻^[8]、提高探测精度^[9]、微纳光学传输^[10]以及生物医学^[11]方面均具有广泛的应用前景.

在纳米材料中具有代表性的是碳纳米管(carbon nanotube, CNT)^[12,13], 碳纳米管具有独特的力学和电学性能^[14], 适用于构建新型天线. 相关

学者获得了碳纳米管在可见光波段的的天线效应, 证实了碳纳米管与传统射频天线类似, 可以接收光波段电磁辐射^[15]. 目前, 定向碳纳米管阵列制备技术已较为成熟^[16], 为制作碳纳米管光学天线提供了现实可能. 国内外许多学者针对碳纳米管天线特性进行了研究, 并且从可见光范围延拓到红外、亚毫米波以及太赫兹波段^[15,17-24]. 已有研究方法包括传输线模型、海伦积分公式和傅里叶变换技术等^[17,25], 这些研究通常采用偶极子天线模型.

理论和实验研究表明, 光学偶极子天线的谐振长度远小于入射光波长的二分之一^[26], 这与根据传统天线理论得出的结果不相符. Novotny^[27]引入有效波长理论很好地解释了这个问题, 为光学天线研究提供了便利. 该理论指出光学天线的响应取决于有效波长, 而不是入射电磁波在自由空间中的波长, 有效波长与天线材料的等离子体波长、高频介电常数以及天线的几何结构有关. 然而, 碳纳米管等新型光学天线材料的等离子体波长在实际中

* 国家自然科学基金(批准号: 61101154)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yuntaohe@buaa.edu.cn

并不容易得到,因此本文尝试将经典金属自由电子气模型应用于金属性碳纳米管,结合光学天线有效波长理论,探究金属性碳纳米管光学天线响应的有效波长与碳纳米管介电特性之间的普适关系.根据此关系,可以避免求解碳纳米管的等离子体波长,把碳纳米管光学天线响应有效波长的研究转化为相对易行的对碳纳米管介电特性的理论计算.

相关研究表明,碳纳米管直径的理论极限值为 4 \AA [28],目前发现的最小且结构稳定的金属性碳纳米管直径也约为 4 \AA [29-31]. 4 \AA 碳纳米管由于其半径极小,具有一系列新奇的电学和光学特性 [32,33],因此本文以 4 \AA 碳纳米管光学天线为例,研究了金属性碳纳米管光学天线响应的有效波长与入射电磁波波长之间的关系,以及金属性碳纳米管偶极子天线的谐振特性.此外,由于卷曲效应对 4 \AA 碳纳米管电子结构的影响很大 [34],本文在对 4 \AA 碳纳米管介电特性的计算中采用了第一性原理方法.

2 理论分析

2.1 光学天线的有效波长理论与金属自由电子气模型

传统射频天线设计理论认为,天线参数与入射电磁波的波长密切相关,两者通常满足一定的关系: $L = \alpha \cdot \lambda$,其中 L 为天线的特征长度, λ 是电磁波在自由空间中的波长, α 是与天线设计有关的常数.对于理想半波偶极子天线,其特征长度 $L = 0.5 \cdot \lambda$.然而,在光波段,入射高频电磁波不是完全从金属表面反射,而是有部分穿透金属并激发其中自由电子气的振荡.此时,天线的响应取决于有效波长 λ_{eff} ,而不是电磁波在自由空间中的波长 λ .

假定天线为如图 1 所示的半径 $R \ll \lambda$ 的纳米棒,并且可以通过 Drude 模型用自由电子气来描述天线材料,则 λ_{eff} 与 λ 满足如下线性关系 [27]:

$$\lambda_{\text{eff}} = n_1 + n_2 [\lambda/\lambda_p], \quad (1)$$

其中 λ_p 是天线材料的等离子体波长, n_1 和 n_2 是与天线几何结构以及天线材料介电特性有关的常数.

图 1 中,天线所处介质的介电常数为 ϵ_s , ω 是光子能量,天线材料的介电常数为 $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$.由于本文的研究工作仅涉及天线的频率响应特性,因此将天线介电常数 ϵ 以其实部 $\epsilon' = \text{Re}\{\epsilon\}$ 替代.

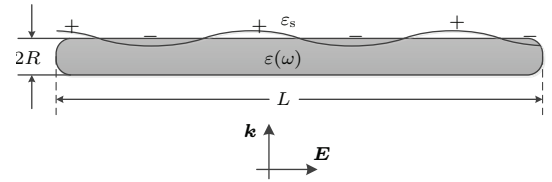


图 1 单个天线元模型 (长度为 L , 半径为 R)

Fig. 1. A single antenna element with length L and radius R .

当 R 足够小时, (1) 式中 n_1 和 n_2 的数值解为 [27]

$$n_1 = [13.74 - 0.12(\epsilon_\infty + 141.04\epsilon_s)] \cdot \frac{2\pi R}{\epsilon_s} - \frac{4R}{q}, \quad (2)$$

$$n_2 = \frac{0.24\pi R}{\epsilon_s} \cdot \sqrt{\epsilon_\infty + 141.04\epsilon_s}, \quad (3)$$

(2) 和 (3) 式中, ϵ_∞ 是天线材料的高频介电常数, q 是天线的谐振阶数.由以上关系可知, λ_{eff} 取决于天线的材料和结构特性.

此外,根据气体运动论建立的金属自由电子气模型(即 Drude 模型)自提出一个多世纪以来,为研究金属特性提供了极大的方便.碳纳米管根据结构的不同可表现为金属性或半导体性,对于金属性碳纳米管,其中的电子也可被看作自由电子气,因此可利用经典 Drude 模型来描述金属型碳纳米管.于是金属型碳纳米管的介电常数可以表示为

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\lambda^2}{\lambda_p^2}, \quad (4)$$

由 (4) 式可得

$$\frac{\lambda}{\lambda_p} = \sqrt{\epsilon_\infty - \epsilon'(\omega)}, \quad (5)$$

将 (5) 式代入 (1) 式,得

$$\lambda_{\text{eff}} = n_1 + n_2 \sqrt{\epsilon_\infty - \epsilon'(\omega)}. \quad (6)$$

综合 (2), (3) 和 (6) 式,如果已知金属型碳纳米管的半径 R , 其所处介质的介电常数 ϵ_s , 并且得到碳纳米管的介电常数 $\epsilon(\omega)$ 和高频介电常数值 ϵ_∞ , 便可得出碳纳米管光学天线响应的有效波长与入射电磁波在自由空间中波长之间的关系.

2.2 利用第一性原理方法计算碳纳米管的介电特性

碳纳米管可以看作是由石墨片层卷曲而成的无缝圆柱状结构,其电学和光学性质完全取决于手性矢量 (\mathbf{n}, \mathbf{m}) 的取值. π -band 模型能够很好地描述大半径碳纳米管在费米能级附近的电子激发情况,然而对于半径极小的碳纳米管,简单 π -band 模

型无法准确预测其性质^[33]. 第一性原理计算方法根据原子核和电子相互作用的原理及其基本运动规律, 运用量子力学原理, 经过近似处理后直接求解薛定谔方程, 从而得到体系基态的基本性质. 因此本文基于密度泛函理论, 同时采用局域密度近似, 通过第一性原理方法计算碳纳米管的介电特性.

文中以 4 Å 碳纳米管光学天线为例, 基于其介电特性, 研究金属性碳纳米管光学天线响应的有效波长以及碳纳米管偶极子天线的谐振特性. 4 Å 碳纳米管包括 (3, 3), (5, 0) 和 (4, 2) 三种结构类型, 在对 4 Å 碳纳米管的介电特性进行计算之前, 首先需要对这三种结构的碳纳米管做几何结构优化, 得到稳定的碳纳米管结构以及稳定状态下的碳纳米管半径值.

理想碳纳米管是由石墨片层卷曲而成的, 因此可以通过共轭梯度法对其原子位置和晶格常数进行优化. 理论上, 当作用在所有原子上的力均小于 0.02 eV/Å 时, 碳纳米管结构趋于稳定. 在对碳纳米管进行几何结构优化的过程中, 采用超胞模型可保证相邻碳纳米管间的距离不低于 6 Å, 从而消除碳纳米管之间的相互影响^[32]. 对几何优化后得到的碳纳米管结构, 可以通过第一性原理自洽计算得到其电子能带结构.

据已有文献报道, 独立粒子近似适用于碳纳米管介电特性的计算^[32,35], 因此在对碳纳米管介电常数的计算中可忽略激子效应与局部场校正. 根据费米黄金定则, 可由碳纳米管的电子能带结构得出由直接带间跃迁贡献的 $\epsilon''(\omega)$ ^[36], 即

$$\epsilon''(\omega) = \frac{4\pi^2}{\Omega\omega^2} \sum_{i \in \text{VB}, j \in \text{CB}} \sum_{\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}} |p_{ij}^a|^2 \delta(\varphi_{\mathbf{k}j} - \varphi_{\mathbf{k}i} - \omega), \quad (7)$$

其中, Ω 是单位晶胞的体积, VB 与 CB 分别表示导带和价带. $p_{ij}^a = \langle \mathbf{k}j | \hat{p}_a | \mathbf{k}i \rangle$ 可由上述自洽计算得到的电子能带结构得出, 其中的 $|\mathbf{k}n\rangle$ 是 n 阶布洛赫态波函数, a 为笛卡尔分量.

此外, 根据 Kramers-Kronig 关系, 介电常数的实部 $\epsilon'(\omega)$ 可以用其虚部 $\epsilon''(\omega)$ 表示, 即

$$\epsilon'(\omega) = 1 + \frac{4}{\pi} \mathbf{P} \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega' \epsilon''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}, \quad (8)$$

其中, \mathbf{P} 表示柯西主值.

由此, 通过本节所述第一性原理计算方法, 可以得到稳定状态下碳纳米管的半径精确值 R 和介

电常数 $\epsilon'(\omega)$. 结合电场线性响应公式^[37], 可以进一步计算得到碳纳米管的高频介电常数 ϵ_∞ .

2.3 光学偶极子天线谐振理论

利用有效波长的概念, 通过与传统射频偶极子天线设计理论进行类比, 光学偶极子天线的谐振条件可表示为^[38]

$$L = \left(p + \frac{1}{2}\right) \lambda_{\text{eff}}, \quad (9)$$

其中, $p = q - 1$, q 为整数. (9) 式表明在谐振模式下, 光学偶极子天线的长度与其响应的有效波长满足线性关系, 前 4 阶谐振 ($q = 1, 2, 3, 4$) 对应的天线长度分别为 $1/2\lambda_{\text{eff}}$, $3/2\lambda_{\text{eff}}$, $5/2\lambda_{\text{eff}}$, $7/2\lambda_{\text{eff}}$.

根据 2.1 节的理论分析以及 2.2 节中对碳纳米管介电特性的第一性原理计算, 得到了碳纳米管光学天线实际响应的有效波长与入射波长之间的关系, 而根据本节 (9) 式可知光学偶极子天线在各阶谐振模式下天线长度与有效波长的关系, 由此, 可以进一步推导出碳纳米管光学偶极子天线在各阶谐振模式下的谐振波长与天线长度之间的关系.

3 仿真结果与分析

3.1 4 Å 碳纳米管的介电特性

计算中利用第一性原理计算软件 CASTEP, 采用超胞模型, 利用局域密度近似, 选取超软赝势 (Ultrasoft 赝势), 截断能取 550 eV. 在对碳纳米管进行几何结构优化的过程中, 采用了一个沿纳米管轴向的网格 ($1 \times 1 \times j$), 其中 j 是 k 点的数目, 取值范围为 12 到 50 之间. 对 (3, 3), (5, 0) 和 (4, 2) 型碳纳米管做几何结构优化后的结果显示, 这三种结构的碳纳米管半径分别为 2.11, 2.04, 2.14 Å.

对几何优化得到的三种 4 Å 碳纳米管结构, 进行了电子能带结构自洽计算, 在自洽计算过程中, 使用了更密的 k 点网格, j 取值范围在 40 到 80 之间. 经第一性原理自洽计算得到的 4 Å 碳纳米管电子能带结构中, (3, 3) 和 (5, 0) 型碳纳米管的费米能级和导带相交, 因此呈现金属性; 而 (4, 2) 型碳纳米管在费米面处存在能隙, 因此呈现半导体性, 其带隙为 0.25 eV. 这之前研究者得出的结论基本相符^[32,33]. 根据第一性原理方法计算得到的 4 Å 碳纳米管能带结构明显不同于以往研究中由简单 π -band 模型得到的结果^[39,40], 例如 π -band 模型的

结果显示(5, 0)和(4, 2)型碳纳米管是半导体, 其带隙约为2.0 eV. 因此, 本文利用第一性原理方法计算4 Å碳纳米管的能带结构和介电特性确有必要.

在实际研究中, 一般采用金属纳米材料制作光学天线, 故本文仅关注呈现出金属性的(3, 3)和(5, 0)型碳纳米管的介电特性, 图2(a)和图2(b)分别给出了(3, 3)和(5, 0)型碳纳米管的介电常数实部曲线. 图2中, 红色和黑色曲线分别代表入射电磁波的电场方向与碳纳米管轴向平行时(平行极化)和垂直时(垂直极化)的情况.

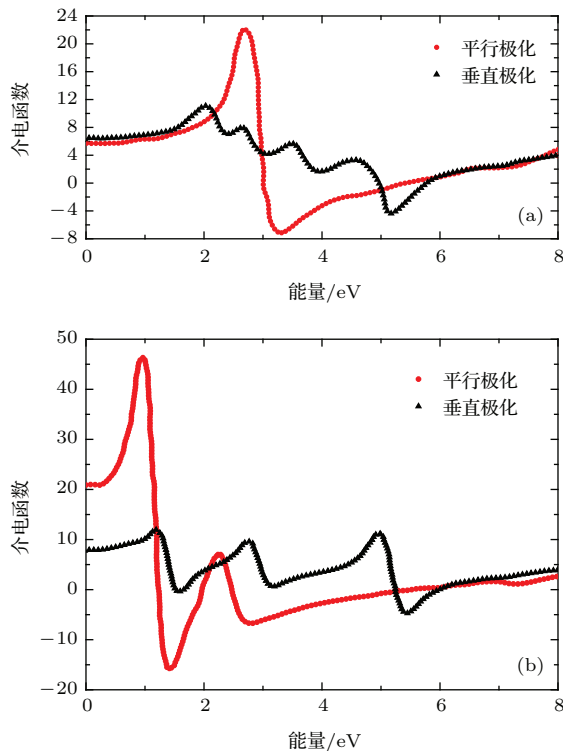


图2 (网刊彩色) 碳纳米管的介电常数实部随能量的变化关系 (a) (3, 3)型; (b) (5, 0)型

Fig. 2. (color online) Real part of the dielectric function of CNTs: (a) and (b) are the results for (3, 3) and (5, 0) tubes, respectively.

从图2中可以看出, 当光波电场方向平行于碳纳米管轴向时, $\epsilon'(\omega)$ 曲线发生剧烈振荡, 出现一个或两个峰值. 而当光波电场方向与碳纳米管轴向垂直时, $\epsilon'(\omega)$ 曲线较为平缓, 且数值较小.

(3, 3)和(5, 0)型碳纳米管的介电常数 $\epsilon'(\omega)$ 表现出显著的各向异性特性. 这是由于在光波和碳纳米管相互作用的过程中, 当光波电场方向与碳纳米管轴向平行时, 电场力垂直作用于 π 电子轨道, 使 π 电子轨道发生了偏转. 随着光波电场方向逐渐偏离碳纳米管轴向, 电场力不再和 π 电子轨道垂直, 此时 π 电子轨道的偏转随之减弱. π 电子轨道偏转

产生极化, 因此碳纳米管的介电常数在光波电场方向与管轴方向平行和垂直时显示出强烈的各向异性.

4 Å碳纳米管的高频介电常数 ϵ_∞ 可通过在CASTEP属性设置中选择“极化、红外和拉曼光谱特性”计算得到. 本文在对 ϵ_∞ 的计算中选取模守恒赝势, 先对两种金属型4 Å碳纳米管分别做几何结构优化, 在此基础上计算了这两种4 Å碳纳米管的高频介电常数值. 由于碳纳米管分子结构具有柱对称性, 因此计算中将“线性分子”作为体系类型. 同时, 计算中采用了“所有能带/EDFT电子最小化”, 因为它与“密度混合最小化”相比, 更适用于针对超胞中孤立分子的计算, 可使计算过程更加高效.

计算结果显示, (3, 3)和(5, 0)型碳纳米管的高频介电常数张量在垂直于管轴方向上的分量均为0, 而在平行于管轴方向上的分量分别为21.989, 46.308, 这是源于碳纳米管分子结构的柱对称性. 与金、银等传统金属天线材料相比(对于金, $\epsilon_\infty = 11.575$; 对于银, $\epsilon_\infty = 3.834$)^[41], 4 Å碳纳米管沿管轴方向的高频介电常数值要大得多.

由于入射光波的电场方向与碳纳米管轴向垂直时, 极化效应使得碳纳米管天线的响应受到强烈抑制, 因此本文在对4 Å碳纳米管天线的有效波长与谐振特性的分析中只考虑平行极化参数.

3.2 4 Å碳纳米管光学天线的有效波长与谐振特性

若将4 Å碳纳米管天线放置于空气中($\epsilon_s \approx 1$), 由于天线的半径 R 与介电特性($\epsilon'(\omega)$, ϵ_∞)均可通过前面3.1节中的第一性原理方法计算得到, 根据(6)式可知, 此时两种金属型4 Å碳纳米管天线实际响应的有效波长仅取决于入射空间电磁波的波长. 图3给出了550—850 nm波段内金属性4 Å碳纳米管天线在前四阶谐振模式下响应的有效波长与入射波长的关系曲线, 其中图3(a)与图3(b)分别为(3, 3)和(5, 0)型碳纳米管对应的结果.

从图3中可以看出, 与(5, 0)型碳纳米管相比, (3, 3)型碳纳米管对入射波长的压缩能力更强, 且(3, 3)型和(5, 0)型碳纳米管响应的有效波长与入射电磁波在自由空间中的波长成近似线性关系, 这与(1)式所反映的结果相一致. 对于特定的入射波长, 天线在高阶谐振模式下响应的有效波长更长.

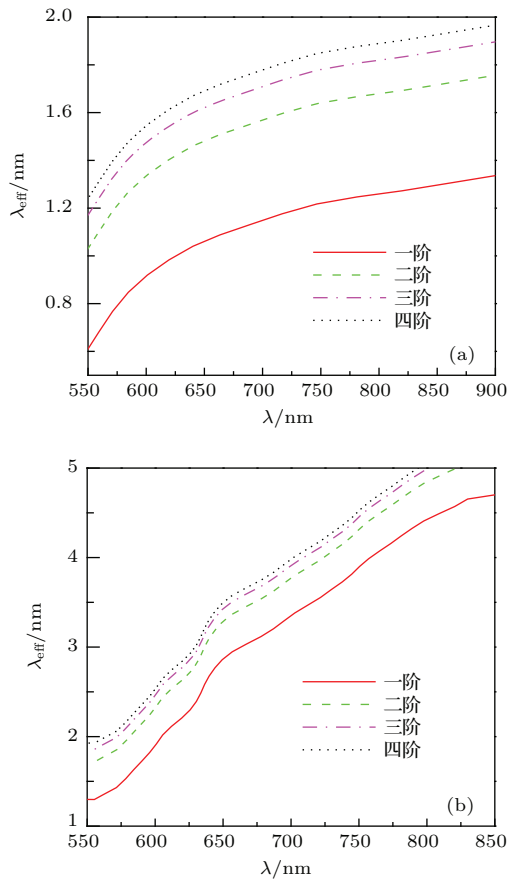


图3 (网刊彩色) 金属性4 Å碳纳米管天线在不同阶谐振时响应的有效波长与入射波长的关系曲线 (a) (3, 3)型; (b) (5, 0)型
 Fig. 3. (color online) The effective wavelength versus incident wavelength for a metallic 4 Å CNT antenna in the first four order resonant modes: (a) and (b) are the results for (3, 3) and (5, 0) tubes, respectively.

此外,如图3(a)和图3(b)所示,(3, 3)和(5, 0)型碳纳米管天线响应的有效波长分别约为入射光波在自由空间中波长的1/650, 1/220. 以往研究表明,(40, 40)碳纳米管响应的波长约为入射波在自由空间中波长的1/50 [42], 而由传输线模型得出的碳纳米管上有效波长约为自由空间中波长的1/100 [43]. 相比之下,4 Å碳纳米管显示出了对入射波长更强的压缩能力. 将传统金属如金、银等做光学天线材料时,对同种金属材料构成的天线而言,天线半径越小,对入射波长的压缩能力就越强 [27]. 注意到上述研究中金属性碳纳米管的直径远大于4 Å,比如(40, 40)碳纳米管的直径为5.424 nm,故图3中的结果可认为是合理的.

根据(1),(2)与(3)式,将直径为4 Å的金纳米棒($\epsilon_\infty \approx 11$, $\lambda_p \approx 138$ nm)置于空气中时,金纳米棒所响应的有效波长约为入射电磁波在自由空间中波长的1/117. 由同样的方法可得,相同尺寸

的银纳米棒($\epsilon_\infty \approx 3.5$, $\lambda_p \approx 135$ nm)置于空气中时响应的有效波长约为入射波在自由空间中波长的1/86. 而由图3可知,金属性4 Å碳纳米管所响应的有效波长大约是电磁波在自由空间中波长的1/650—1/220. 由此可见,与传统金属材料构成的同直径光学天线相比,金属性碳纳米管光学天线对波长的压缩能力更强. 根据光学偶极子天线谐振条件,对于特定波长的入射电磁波,金属性碳纳米管天线的谐振长度将小于同直径金属天线的同阶谐振长度,因此将金属性碳纳米管作为光学天线材料时,更易于构建小型化器件.

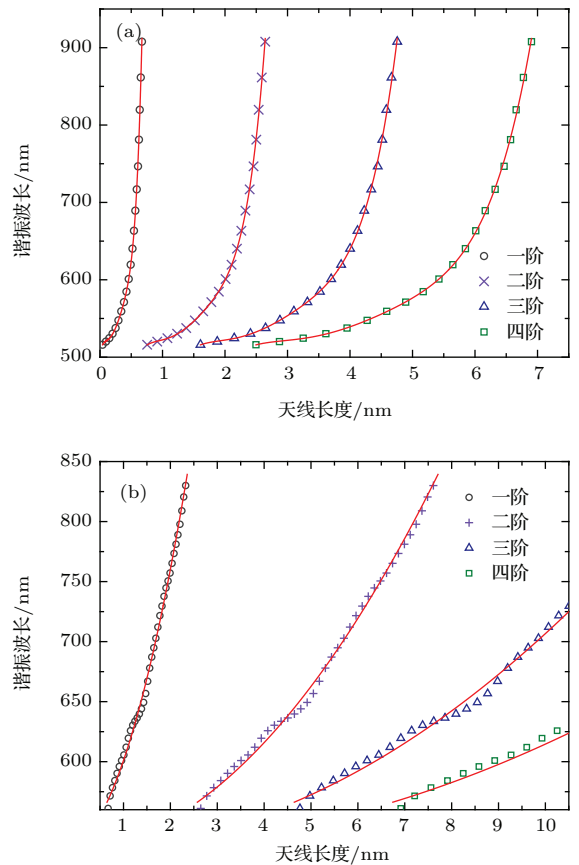


图4 (网刊彩色) 4 Å碳纳米管偶极子天线的各阶谐振波长与天线长度的关系曲线 (a) (3, 3)型; (b) (5, 0)型
 Fig. 4. (color online) The relationship between resonant wavelength of 4 Å CNT dipole antenna and length of the antenna in the first four resonant orders, where (a) and (b) are the results for (3, 3) and (5, 0) tubes, respectively.

图4(a)和图4(b)分别给出(3, 3)和(5, 0)型碳纳米管偶极子天线前4阶谐振波长与天线长度之间的关系. 从图4中可以看出,在低阶谐振模式下,4 Å碳纳米管上的有效波长与入射波在自由空间中的波长成近似线性关系. 同时,对于特定频率的入射电磁波,有多个长度相近的4 Å碳纳米管偶极子

天线满足谐振条件. 例如, 对于波长为700 nm的入射波, 长度为0.6, 2.3, 4.3以及6.2 nm的(3, 3)型碳纳米管天线将产生不同模式的谐振, 且长度为1.8, 5.5, 9.7 nm的(5, 0)型碳纳米管天线也将产生不同模式的谐振.

从图4中还可以看出, 对于特定长度的天线, 在520—850 nm波段内对应一个或多个谐振模式. 同一长度的天线对应的不同谐振模式, 均表现为谐振阶数越高、谐振波长越短. 例如, 对于(3, 3)型碳纳米管偶极子天线, 当天线长度为2 nm时, 天线产生二阶和三阶谐振的空间波长分别为590 nm和520 nm; 当天线长度增加到4 nm时, 产生三阶和四阶谐振的空间波长分别为630 nm和530 nm. 而对于(5, 0)型碳纳米管偶极子天线, 当天线长度为2 nm时, 对应于入射波长为740 nm的一阶谐振; 当天线长度增加到4 nm时, 对应于入射波长为620 nm的二阶谐振.

此外, 随着天线长度增加, 天线一阶谐振所对应的入射波长将超出所关注的波长范围(520—850 nm), 同时天线将进入高阶谐振模式(二阶, 三阶等). 例如, 对于(3, 3)型碳纳米管偶极子天线, 当天线长度增加到0.7 nm以上时, 一阶谐振波长将大于850 nm, 此时天线将进入二阶谐振模式, 该模式下谐振波长约为520 nm. 对于(5, 0)型碳纳米管, 情况与(3, 3)型碳纳米管类似, 当天线长度增加到2.5 nm, 在所研究的波长范围内, 天线的一阶谐振模式消失, 进入二阶谐振模式.

通过以上对金属性4 Å碳纳米管偶极子天线谐振特性的分析, 我们发现碳纳米管天线在可见光到红外波段内易于产生谐振, 因此有助于提高该波段内电磁波的能量转换效率. 然而另一方面, 在纳米半径条件下碳纳米管的阻抗较高, 且碳纳米管天线一般在太赫兹到可见光频率范围内工作, 因此电磁波在碳纳米管中传输时损耗较大, 这将导致碳纳米管天线的效率较低, 构造碳纳米管束天线有助于解决这一问题^[44,45].

4 结 论

本文将金属自由电子气模型应用于金属性碳纳米管, 基于光学天线有效波长理论, 得出了金属性碳纳米管光学天线所响应的有效波长与碳纳米管介电特性之间的关系. 通过对4 Å碳纳米管光学

天线响应的有效波长的仿真分析, 验证了本文理论的正确性.

仿真结果同时表明, 与传统金属材料构成的同直径光学天线相比, 碳纳米管天线显示出了更强的波长压缩能力, 因此碳纳米管光学天线比传统金属材料光学天线的尺寸更小, 更易于构建小型化器件. 在谐振特性方面, 对于可见光到红外波段内的某个入射波长, 有多个长度的碳纳米管偶极子天线满足谐振条件, 而某个特定长度的碳纳米管偶极子天线在该波段内存在一个或多个谐振模式. 因此碳纳米管天线在可见光到红外波段内易于发生谐振, 从而有助于提高该波段内电磁波的能量转换效率.

在实际应用中, 碳纳米管光学天线将面临电磁波在碳纳米管中传输时损耗比较大的问题, 构造碳纳米管束天线有助于这一问题的解决^[44,45]. 在提供相应整流器件及技术支持的情况下, 可预期碳纳米管天线阵列所构成的碳纳米管薄膜将对太阳能量有较高的俘获能力及转化利用效率^[46]. 本文研究方法可为碳纳米管光学天线的研究提供新的思路, 论文的研究结果对于碳纳米管在太阳能接收领域的应用具有一定的参考价值.

参考文献

- [1] Bharadwaj P, Deutsch B, Novotny L 2009 *Adv. Opt. Photonics* **1** 438
- [2] Novotny L, van Hulst N 2011 *Nature Photon.* **5** 83
- [3] Wessel J 1985 *J. Opt. Soc. Am. B* **2** 1538
- [4] Pohl D W 2000 *Near-Field Optics Seen as an Antenna Problem in Near-Field Optics: Principles and Applications* (Singapore: World Scientific) pp9–21
- [5] Hecht B, Mühlischlegel P, Farahani J N, Eisler H, Pohl D W, Martin O J F, Biagioni P 2006 *Chimia Int. J. Chem.* **60** A765
- [6] Briones E, Briones J, Cuadrado A, Briones E, Briones J, Cuadrado A, Martinez-Anton J C, McMurtry S, Hehn M, Montaigne F, Alda J, Gonzalez F J 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 093108
- [7] Catchpole K R, Polman A 2008 *Opt. Express* **16** 21793
- [8] Sundaramurthy A, Schuck P J, Conley N R, Fromm D P, Kino G S, Moerner W E 2006 *Nano Lett.* **6** 355
- [9] Yuan Y Y, Yuan Z H, Li X N, Wu J, Zhan W T, Ye S 2015 *Chin. Phys. B* **24** 262
- [10] Xiong Z C, Zhu L L, Liu C, Gao S M, Zhu J Q 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 247301 (in Chinese) [熊志成, 朱丽霖, 刘诚, 高淑梅, 朱健强 2015 物理学报 **64** 247301]
- [11] Geoffrey V M, Ji-Ho P, Amit A, Nanda K B, Das S K, Sailor M J, Bhatia S N 2009 *Cancer Res.* **69** 3892
- [12] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56

- [13] Lan Y C, Wang Y, Ren Z F 2011 *Adv. Phys.* **60** 553
- [14] Liu H J, Wen Y W, Miao L, Hu Y 2007 *Nanotechnology* **18** 445708
- [15] Wang Y, Kempa K, Kimball B, Carlson J B, Benham G, Li W Z, Kempa T, Rybczynski J, Herczynski A, Ren Z F 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 2607
- [16] Ajayan P M, Stephan O, Colliex C, Trauth D 1994 *Science* **265** 1212
- [17] Jin H, Hanson G W 2006 *IEEE Trans. Nanotechnol.* **5** 766
- [18] Wang Y, Wu Q, Shi W, He X J, Yin J H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 919 (in Chinese) [王玥, 吴群, 施卫, 贺训军, 殷景华 2009 物理学报 **58** 919]
- [19] Shuba M V, Slepian G Y, Maksimenko S A, Thomsen C, Lakhtakia A 2009 *Phys. Rev. B* **79** 155403
- [20] Wu Q, Wang Y, Wu Y M, Zhuang L L, Li L W, Gui T L 2010 *Chin. Phys. B* **19** 067801
- [21] Huang Y, Yin W Y, Liu Q H 2008 *IEEE Trans. Nanotechnol.* **7** 331
- [22] Kempa K, Rybczynski J, Huang Z, Gregorczyk K, Vidan A, Kimball B, Carlson J, Benham G, Wang Y, Herczynski A, Ren Z F 2007 *Adv. Mater.* **19** 421
- [23] Wang Y, Wu Q, He X J, Zhang S Q, Zhang L L 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1801
- [24] Wang Y, Wu Q, Wu Y M, Fu J H, Wang D X, Wang Y, Li L W 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 057801 (in Chinese) [王玥, 吴群, 吴昱明, 傅佳辉, 王东兴, 王岩, 李乐伟 2011 物理学报 **60** 057801]
- [25] Hanson G W 2005 *IEEE Trans. Antennas Propagat.* **53** 3426
- [26] Mühlischlegel P, Eisler H J, Martin O J F, Hecht B, Pohl D W 2005 *Science* **308** 1607
- [27] Novotny L 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 266802
- [28] Sawada S I, Hamada N 1992 *Solid State Commun.* **83** 917
- [29] Peng L M, Zhang Z L, Xue Z Q, Wu Q D, Gu Z N, Pettifor D G 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3249
- [30] Wang N, Tang Z K, Li G D, Chen J S 2000 *Nature* **408** 50
- [31] Qin L C, Zhao X L, Hirahara K, Miyamoto Y, Ando Y, Iijima S 2000 *Nature* **408** 50
- [32] Guo G Y, Chu K C, Wang D S, Duan C G 2004 *Phys. Rev. B* **69** 205416
- [33] Liu H J, Chan C T 2002 *Phys. Rev. B* **66** 115416
- [34] Qin W, Zhang Z H, Liu X H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 037302 (in Chinese) [秦威, 张振华, 刘新海 2011 物理学报 **60** 037302]
- [35] Ahuja R, Auluck S, Wills J M, Alouani M, Johansson B, Eriksson O 1997 *Phys. Rev. B* **55** 4999
- [36] Li J, Duan C G, Gu Z Q, Wang D S 1998 *Phys. Rev. B* **57** 2222
- [37] Baroni S, de Gironcol S, Dal Corso A, Giannozzi P 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 515
- [38] Ghenuche P, Cherukulappurath S, Taminiau T H, van Hulst N F, Quidant R 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 116805
- [39] Lin M F, Shung K W K 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17744
- [40] Tasaki S, Maekawa K, Yamabe T 1998 *Phys. Rev. B* **57** 9301
- [41] Gai H, Wang J, Tian Q 2007 *Appl. Opt.* **46** 2229
- [42] Hanson G W 2005 *Proceedings of the Antennas and Propagation Society International Symposium, 2005 IEEE* July 3–8, 2005 p247
- [43] Burke P J, Li S, Yu Z 2006 *IEEE Trans. Nanotechnol.* **5** 314
- [44] Wu Q, Wang Y, Wu Y M, Zhang S Q, Li L W, Zhuang L L 2010 *IET Microwaves Antennas Propag.* **4** 1500
- [45] Hanson G W 2008 *IEEE Antennas Propag. Mag.* **50** 66
- [46] Sharma A, Singh V, Bougher T L, Cola B A 2015 *Nature Nanotech.* **10** 1027

Effective wavelength and resonance characteristics of carbon nanotube optical antenna*

Wu Xiao-Fang¹⁾ Xie Shu-Guo¹⁾ He Yun-Tao^{1)†} Li Li¹⁾ Li Xiao-Lu²⁾

1) (School of Electronic and Information Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China)

2) (School of Instrumentation Science and Opto-Electronics Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China)

(Received 2 January 2016; revised manuscript received 2 February 2016)

Abstract

The effective wavelength scaling theory for optical antennas indicates that an optical antenna does not respond to the wavelength of incident electromagnetic wave, but to a shorter effective wavelength which depends on the plasma wavelength and optical dielectric permittivity of the antenna material, and also on the geometric structure of the antenna.

In this paper, based on the effective wavelength scaling theory for optical antennas and on the assumption that metallic carbon nanotube (CNT) can be described by a free electron gas according to the Drude model, the general relationship between effective wavelength and dielectric properties of the antenna material for a metallic carbon nanotube optical antenna is derived. According to this relationship, the investigation into the effective wavelength that a metallic CNT optical antenna responds to can be transferred to easier theoretical calculation for the dielectric properties of CNT, instead of exploring its plasma wavelength. Following first-principle calculations for dielectric properties of CNT with 4 Å diameter, the effective wavelength versus incident wavelength for each of two types of metallic 4 Å CNT antennas is investigated. In addition, the resonance characteristics of metallic 4 Å CNT dipole antennas are analyzed.

It is shown that the effective wavelength approximately follows a linear relationship with wavelength of the incident light for the 4 Å metallic CNT antenna, which is consistent with the wavelength scaling theory. In addition, CNT optical antenna has good wavelength scaling performance compared with nano-antennas made of conventional metals like silver and gold; hence metallic CNTs as optical antennas are beneficial for constructing more compact devices. Moreover, according to the simulation results of resonance characteristics of metallic 4 Å CNT dipole antennas, there are several 4 Å metallic CNT dipole antennas with small difference in length meeting the resonance conditions for incident electromagnetic wave with a certain frequency, while there are one or more corresponding resonant modes in the optical and near-infrared spectral range concerned for a 4 Å metallic CNT dipole antenna with fixed length. Therefore, it is easier to meet the resonance conditions for CNT optical antenna than for conventional metal optical antenna, which also arises from the superior wavelength scaling ability of CNT. These advantages of CNT can help to miniaturize the optical antenna and improve the efficiency of energy conversion of the incident radiation in the optical and near-infrared spectral range.

Reliability of the assumption and the theoretical process in this paper are validated by comparing the simulation results with existing investigations. Therefore, the theoretical investigations in this paper may provide a new approach to studying metallic CNT optical antennas. The simulation results also demonstrate the potential applications of CNT optical antenna, including solar energy harvesting and conversion.

Keywords: carbon nanotubes, optical antenna, dielectric properties, effective wavelength

PACS: 78.67.-n, 78.67.Ch, 84.40.Ba

DOI: 10.7498/aps.65.097801

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61101154).

† Corresponding author. E-mail: yuntaohe@buaa.edu.cn