



# 二氧化钒太赫兹辐照温度自限制效应研究

崔俊怡<sup>1</sup>, 赵敏<sup>1</sup>, 徐晓峰<sup>1</sup>, 王春瑞<sup>1</sup>, 韦联福<sup>1</sup>, 曹俊诚<sup>2</sup>, 伍滨和<sup>1\*</sup>

1. 东华大学理学院, 上海 201620;

2. 中国科学院上海微系统与信息技术研究所, 上海 200025

\*联系人, E-mail: [bhwu@dhu.edu.cn](mailto:bhwu@dhu.edu.cn)

收稿日期: 2020-06-09; 接受日期: 2020-08-03; 网络出版日期: 2020-11-27

国家自然科学基金(编号: 61975029)资助项目

**摘要** 温度自限制效应能够使物体在辐照光强变化的条件下, 仍能保持稳定的温度。本文提出一种能够在太赫兹辐照下保持温度自限制效应的微粒设计。这一设想利用二氧化钒( $\text{VO}_2$ )在相变温度附近能够发生剧烈的光学性质变化, 从而使微粒的温度产生自适应调节, 最终在较宽的太赫兹辐照光强范围内, 使粒子温度维持在相变温度附近。为了验证这一设计, 我们利用米氏理论对 $\text{VO}_2$ 微粒的光热效应进行了理论分析。计算结果表明, 改变粒子尺寸可以有效地调节 $\text{VO}_2$ 的太赫兹吸收特性。在合适的粒子尺寸下, 相变后 $\text{VO}_2$ 粒子对太赫兹的吸收可以迅速降低, 有助于粒子温度在很宽的辐照强度范围内维持在相变温度附近, 不随辐照强度的增加而显著上升。这些结果为实现具有太赫兹辐照温度自限制效应的器件和应用提供了可能。

**关键词** 太赫兹, 二氧化钒, 光热效应, 温度自限制效应

**PACS:** 78.20.nb, 78.20.Ci, 78.40.Kc, 71.30.+h, 42.70.Nq

## 1 引言

微粒在可见光或红外光等电磁辐照下, 能够将电磁辐照转换为焦耳热, 从而使粒子温度升高, 直到达到热平衡。如果不考虑材料光学及热学性质的变化, 光热效应将导致粒子的平衡温度随着光强增加而不断上升。然而, 在光电对抗<sup>[1]</sup>、化学催化<sup>[2,3]</sup>、生物医学成像<sup>[4-9]</sup>等需要较强光强或光强不能准确控制的情况下, 常常需要将材料温度保持在某一固定值, 这就要求材料的光吸收能够随入射光强发生非线性改变。相变材料是一类在适当条件

下可以触发结构或物理性质剧烈改变的物质。二氧化钒( $\text{VO}_2$ )就是一种典型的相变材料。早在1959年, Morin<sup>[10]</sup>发现 $\text{VO}_2$ 可以发生可逆的绝缘态到金属态的转变。这种一阶可逆相变的转变温度约等于68°C。相变过程不仅导致材料的电导率以及电子浓度发生高达4个数量级的急剧变化, 还使晶格结构在小于1 ns的时间范围内由单斜晶格结构迅速变化为金红石结构<sup>[11,12]</sup>。进一步研究表明,  $\text{VO}_2$ 相变不仅可以通过改变温度来驱动, 应变、压力、化学掺杂、强光场、静电场, 甚至太赫兹辐照均可驱动这种相变的发生<sup>[11]</sup>。

**引用格式:** 崔俊怡, 赵敏, 徐晓峰, 等. 二氧化钒太赫兹辐照温度自限制效应研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2021, 51: 054206  
Cui J Y, Zhao M, Xu X F, et al. Design of the vanadium dioxide temperature self-regulator in the terahertz regime (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2021, 51: 054206, doi: [10.1360/SSPMA-2020-0204](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2020-0204)

伴随相变同时发生改变的还有材料的光学性质. 特别是在对载流子吸收特别敏感的红外和太赫兹(THz)波段, 材料的透射及吸收特性也会发生巨大改变, 从而使VO<sub>2</sub>在各类传感器、转换开关、光存储器件及红外探测器中得到广泛应用. 例如, 随着的材料制备与性能优化<sup>[13–16]</sup>, VO<sub>2</sub>薄膜材料已被广泛应用于新型光电子器件<sup>[11]</sup>及智能窗<sup>[17–19]</sup>等方面. Iken等人<sup>[19]</sup>将钨(W)掺杂VO<sub>2</sub>薄膜与不掺钨VO<sub>2</sub>薄膜作为智能墙体材料, 用数值研究的方法计算了不同墙体温度随太阳辐照的变化以及瞬态传热特性. 结果发现这种元素掺杂的智能墙体材料在入射光辐照下使得夏季室内表面温度降低, 冬季能量损耗减弱. 研究结果也表明了这种智能窗材料会更节能. Lee等人<sup>[20]</sup>通过对薄膜装置的光热效应研究发现改变光辐照强度可以调节相变温度. 特别地, Cortie等人<sup>[21]</sup>在可见光波段对Au/VO<sub>2</sub>核壳结构的光吸收以及纳米结构的动态温度反馈进行了研究. 该工作利用VO<sub>2</sub>相变改变金属等离激元共振频率, 发现在特定波段下核壳结构的吸收效率随着发生相变减弱, 从而有望实现温度自限制效应. 但是, 在可见光波段实现这一设想还面临很多困难, 例如发生温度自限制效应的波段范围非常狭窄; 粒子的尺寸需要减小到纳米量级; Au与VO<sub>2</sub>材料的复合结构制备也是一大挑战. 因此, 相关的实验验证尚未见报道.

太赫兹波在电磁波谱中介于红外和微波之间, 对应的频率范围为0.1–10 THz<sup>[14]</sup>. 近年来, 随着高功率的太赫兹源<sup>[22]</sup>和高灵敏太赫兹探测器<sup>[23–25]</sup>的发展, 太赫兹技术已经在生物检测<sup>[26]</sup>、成像<sup>[27]</sup>以及基因诊断<sup>[28]</sup>等方面获得了广泛的应用. 太赫兹辐照光子能量较低, 对相变过程中自由载流子密度的变化非常敏感. 可以预期, VO<sub>2</sub>相变过程能够对太赫兹辐照进行动态调控, 具有潜在的应用价值. 前期研究表明<sup>[29]</sup>, 相比于可见光波段, VO<sub>2</sub>相变能够更灵敏地改变中远红外波段的光吸收特性. 这些结果为设计基于VO<sub>2</sub>太赫兹辐照温度自限制器件提供了可能.

本文以VO<sub>2</sub>微粒为主要模型, 采用米氏(Mie)理论<sup>[30]</sup>与热传导方程对太赫兹辐照下的VO<sub>2</sub>微粒的光吸收与热响应进行理论分析. 我们分析了VO<sub>2</sub>微粒的太赫兹吸收特性与粒子尺寸、相变温度宽度、

热对流系数等参数的变化规律. 结果表明, 通过优化粒子尺寸等条件可以实现太赫兹辐照的温度自限制效应. 本论文设想的太赫兹辐照的温度自限制效应器件不依赖于VO<sub>2</sub>与Au等贵金属的复合结构, 能够克服可见光波段的器件尺寸和材料制备困难, 有助于后续实验验证.

## 2 模型与方法

本论文主要研究VO<sub>2</sub>微纳球型粒子的光吸收与热响应, 分析光热效应下粒子温度的非线性变化. 对于均匀球体的光散射问题, 米氏理论给出了该问题麦克斯韦方程的严格数学解, 被广泛地应用于粒子光散射问题的理论分析<sup>[31,32]</sup>. 该理论采用矢量球谐函数的无穷级数展开形式, 可以计算球形纳米颗粒的消光率 $Q_{\text{ext}}$ 、散射率 $Q_{\text{scat}}$ 和吸收率 $Q_{\text{abs}}$ 等物理量<sup>[33]</sup>. 其中, 吸收率 $Q_{\text{abs}}$ 与粒子吸收光能转换为焦耳热有关. 当器件达到稳态平衡时, 吸收的光功率能够维持粒子的稳态温度. 一般来说, 入射光强为 $I$ 时, 半径为 $r$ 的球体吸收的光功率可以表示为

$$P_{\text{abs}} = I S Q_{\text{abs}},$$

其中,  $S = \pi r^2$ 是粒子的截面积.

根据米氏理论, 影响 $Q_{\text{abs}}$ 的因素包括粒子尺寸, 入射频率以及粒子的介电常数. 在太赫兹(1–2 THz)波段, 实验测量的VO<sub>2</sub>介电常数可以根据Drude-Smith模型<sup>[34]</sup>进行拟合. 介电常数 $\epsilon(\omega)$ 的表达式可以写为

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{i\sigma(\omega, T)}{\omega}, \quad (1)$$

其中,  $\omega = 2\pi f$ 是圆频率,  $\epsilon_0$ 是真空介电常数, 电导率 $\sigma$ 是频率 $\omega$ 和温度 $T$ 的函数, 具体可以根据以下公式给出:

$$\sigma(\omega, T) = \frac{n(T)e^2\tau_{\text{DS}}/m^*}{1 - i\omega\tau_{\text{DS}}} \left( 1 + \frac{c}{1 - i\omega\tau_{\text{DS}}} \right).$$

温度 $T$ 的变化主要改变VO<sub>2</sub>材料中的电子浓度 $n(T)$ . 我们可以利用指数函数来近似相变过程中电子浓度的剧烈变化:

$$n(T) = n_{\min} + n_{\max} \left( 1 - \frac{1}{1 + \exp[(T - T_c)/\Delta T]} \right),$$

其中,  $n_{\min}$  和  $n_{\max}$  分别代表绝缘态和金属态的电子浓度,  $m^*$  是电子有效质量,  $T_c$  代表相变温度,  $\Delta T$  是相变的温度区间变化参数,  $\tau_{DS}$  代表Drude-Smith散射时间,  $c$  是0到-1区间内的常数. 根据文献[34], 我们在数值模拟中取以下数值:  $n_{\max} = 5.2 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ ,  $n_{\min} = 0.05 n_{\max}$ ,  $T_c = 340 \text{ K}$ ,  $\Delta T = 5 \text{ K}$ ,  $\tau_{DS} = 20 \text{ fs}$ ,  $c = -0.66$ ,  $m^* = 2m_e$ ,  $m_e$  是自由电子质量.

图1给出了入射频率为1 THz时, VO<sub>2</sub>的相对介电常数的实部和虚部随温度变化的曲线. 温度较低时, 介电常数的实部和虚部几乎不随温度变化, 此时材料处于绝缘态; 随着温度的进一步增加, 材料的光学性质在相变温度附近, 与 $\Delta T$ 相当的温度范围内发生了剧烈变化. 此后, 材料的介电常数趋于高温饱和值, 预示着材料迅速转变为金属态. 相变后的介电常数相比相变前增加了一个数量级. 与可见光及红外波段相比, VO<sub>2</sub>材料在太赫兹波段的介电常数变化更为显著. 这些结果预示VO<sub>2</sub>具备在太赫兹频段实现光学响应的调控潜力.

当VO<sub>2</sub>粒子受到太赫兹辐照时, 粒子温度T将因吸收电磁能量而上升, 直到粒子达到热平衡. 这一过程满足以下微分方程 [35]:

$$C_{\text{VO}_2} V \frac{\partial T}{\partial t} = -h_c A(T - T_\infty) + P_{\text{abs}}, \quad (2)$$

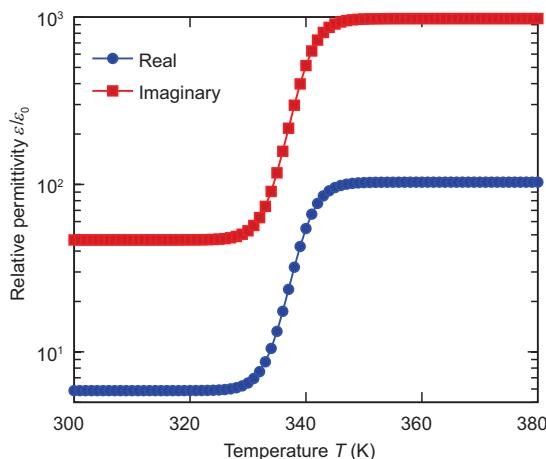


图1 (网络版彩图) VO<sub>2</sub>材料在1 THz的相对介电常数实部和虚部随温度的变化曲线

**Figure 1** (Color online) The real and imaginary part of the relative permittivity of VO<sub>2</sub> as a function of the temperature at frequency of 1 THz.

其中,  $C_{\text{VO}_2}$  代表VO<sub>2</sub>材料单位体积的热容. 根据文献报道, 尽管 $C_{\text{VO}_2}$ 随着相变过程可以发生变化, 但是变化并不剧烈. 为简单起见, 我们在模拟中取固定值  $C_{\text{VO}_2} \approx 3 \times 10^6 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$  [36]. 球体积  $V = 4\pi r^3/3$ , 表面积  $A = 4\pi r^2$ .  $h_c$  代表粒子与环境的热对流系数. 这里, 我们假设粒子处于空气中, 主要的热传递方式依赖热对流. 对于空气导致的热对流,  $h_c$  的取值范围可以在10–1000 W m<sup>-2</sup> K<sup>-1</sup>范围内改变 [37], 具体取值可以通过调节空气的流速实现. 当粒子达到热平衡时, 平衡温度可以令方程(2)左边等于零得到. 我们可以很容易看到, 改变热对流条件能够改变粒子的热平衡温度. 因此, 热对流也是调节粒子光热效应的有效手段.

### 3 计算结果与讨论

本节给出VO<sub>2</sub>太赫兹辐照温度自限制效应的结果. 根据文献[34], 在1–2 THz频率范围内, 公式(1)拟合的VO<sub>2</sub>光学常数随频率变化较小. 因此, 我们主要讨论入射频率为1 THz时的器件性能. 温度自限制效应的影响因素主要有微粒的尺寸 $r$ 以及热对流系数 $h_c$ . 下面, 我们针对这两个因素对温度自限制效应的影响进行分析.

粒子对电磁波的吸收与材料介电常数等光学性质有关, 也与粒子半径等存在复杂的非线性依赖关系. 当粒子半径固定条件下, 光吸收在共振条件下达到极大. 粒子半径过小或过大都不利于光吸收. 而在相变材料中, 当介电常数发生改变时, 粒子的吸收率也可能增大或减小吸收率. 首先, 我们分析不同尺寸VO<sub>2</sub>粒子的吸收效率 $Q_{\text{abs}}$ 随温度的变化. 图2所示的计算结果表明 $Q_{\text{abs}}$ 随温度的变化趋势与吸收体的尺寸密切相关. 计算结果也表明, 当粒子半径 $r$ 较小时, 受到粒子吸收体尺寸的限制, 粒子难以对入射太赫兹波进行高效吸收, 因而吸收率较低. 由于相变前后材料介电常数的剧烈变化, 相变后的吸收率并没有降低. 例如 $r = 5 \mu\text{m}$ 时, 高温相变后的 $Q_{\text{abs}}$ 比相变前大. 意味着, 这一尺寸的粒子不利于实现温度自限制效应. 当粒子尺寸增加至 $r = 10 \mu\text{m}$ 时, 图2显示 $Q_{\text{abs}}$ 在相变温度范围内出现了吸收效率的极大值. 进一步增大球体半径, 相变前的 $Q_{\text{abs}}$ 增加, 且相变后

的 $Q_{\text{abs}}$ 比相变前要显著减小. 例如, 当 $r = 40 \mu\text{m}$ 时, 相变前 $\text{VO}_2$ 粒子的吸收效率略小于1, 趋于极大值, 是高效的吸收体. 较大的吸收效率意味着使粒子相变所需的太赫兹辐照强度较低. 而在相变后, 吸收效率迅速降低到0.25左右, 抑制了温度的显著上升. 这一变化趋势符合温度自限制效应的要求. 这一尺寸的粒子有希望成为高效的温度自限制器件. 当我们进一步增加半径, 例如 $r = 60 \mu\text{m}$ , 在相变前的吸收效率相比 $r = 40 \mu\text{m}$ 的粒子反而略有降低. 而相变后的吸收效率则没有明显变化. 因此, 图2表明半径 $40 \mu\text{m}$ 的氧化钒粒子是实现温度自限制效应的理想器件设计.

为了寻找温度自限制效应下的最佳粒子半径, 我们计算了不同温度下,  $\text{VO}_2$ 粒子相变前后的吸收效率 $Q_{\text{abs}}$ 随球半径 $r$ 的变化规律. 计算结果如图3所示. 粒子温度分别取 $T = 300 \text{ K}$ 和 $T = 380 \text{ K}$ , 代表 $\text{VO}_2$ 相变前后的两个状态. 图3给出的变化趋势与图2相吻合. 可以看到, 当粒子半径较小时, 粒子的吸收效率较低, 且相变后的吸收效率高于相变前. 然而当粒子的半径大于约 $10 \mu\text{m}$ 后, 相变后的吸收效率低于相变前. 这两个状态的吸收效率均在半径 $r \approx 43 \mu\text{m}$ 时达到极大值, 它们的差值也达到最大. 此后, 进一步增大半径导致吸收效率的降低. 可见, 半径 $r = 43 \mu\text{m}$ 是实现温度自限制效应的最优参数

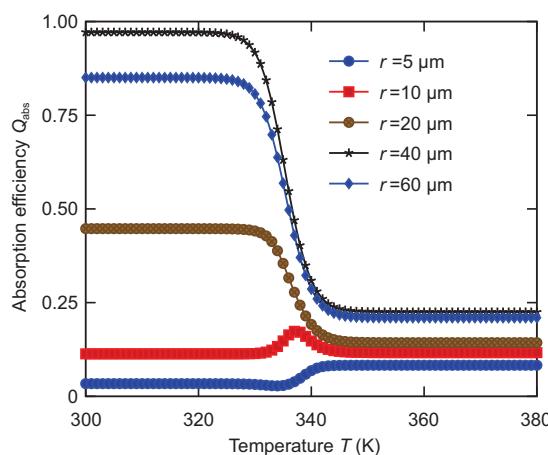


图2 (网络版彩图)不同半径 $r$ 的 $\text{VO}_2$ 球对频率为1 THz入射电磁波的吸收效率 $Q_{\text{abs}}$ 随温度 $T$ 的变化曲线

**Figure 2** (Color online) The absorption efficiency  $Q_{\text{abs}}$  as a function of the temperature  $T$  for different  $\text{VO}_2$  spheres characterized by its radius  $r$ .

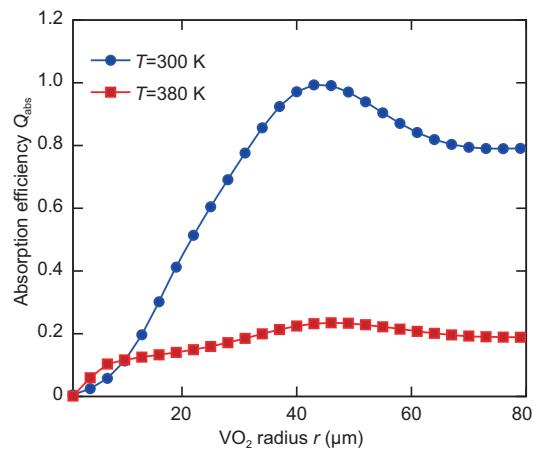


图3 (网络版彩图)不同温度下,  $\text{VO}_2$ 粒子对频率为1 THz入射电磁波的吸收效率 $Q_{\text{abs}}$ 随半径 $r$ 的变化曲线

**Figure 3** (Color online) The absorption efficiency  $Q_{\text{abs}}$  as a function of the radius  $r$  of  $\text{VO}_2$  spheres at different temperatures.

值. 这些计算结果在实验验证 $\text{VO}_2$ 太赫兹辐照温度自限制效应时可以帮助进行器件设计和加工.

当 $\text{VO}_2$ 粒子受到一定强度的太赫兹辐照, 粒子吸收辐照能量转换为焦耳热, 将使粒子温度升高. 与此同时, 粒子将与环境进行热交换, 最终粒子与环境可以达到动态热平衡. 为了模拟这一热交换过程, 我们假设粒子内部温度总是均匀的, 忽略粒子内部的温度梯度. 由于 $\text{VO}_2$ 的导热系数比周围介质(空气)大得多<sup>[37]</sup>, 这样的假设是合理的. 利用龙格库塔法求解方程(2), 可以得到粒子温度随时间的演化过程, 结果如图4所示. 在模拟中我们取热对流系数 $h_c = 100 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ , 入射频率为1 THz, 粒子半径对应 $50 \mu\text{m}$ . 可以看到, 粒子受到太赫兹辐照后, 温度迅速升高. 若入射太赫兹强度较小, 粒子温度可以在小于0.5 s内达到某一低于相变温度的稳定值. 随着入射辐照强度的增加, 这一稳定值趋于相变温度, 且在较大的强度范围内, 饱和值都处于相变稳定附近. 这就是温度自限制效应的区域, 在图4表现为一个较大的稳定温度的平台. 随着光强进一步增加, 粒子温度经过相变后, 可以再次快速增加, 直到达到最终的稳定温度. 同时, 随着太赫兹高功率器件<sup>[25]</sup>研究的不断进步, 稳定的太赫兹辐照强度值已经完全可以达到本文所设想的数值.

相变温度区间参数 $\Delta T$ 也是影响温度自限制效

应的因素之一. 图4的计算结果假设了较宽的相变温度区间 $\Delta T = 5$  K. 通过改进材料生长工艺和参数, 利用脉冲激光沉积或分子束外延等手段, 可以进一步提高相变的陡峭程度, 减小 $\Delta T$ . 保持其他参数与图4相同, 我们对比了 $\Delta T = 5$  K与 $\Delta T = 1$  K时, 粒子稳态温度与入射光强的关系. 计算结果如图5所示. 可以看到, 对于较大的 $\Delta T = 5$  K, 在温度自限制范围内, 粒子的温度随着入射太赫兹辐照强度增加, 仍然在缓慢上升. 当我们将相变温度宽度减小到 $\Delta T = 1$  K

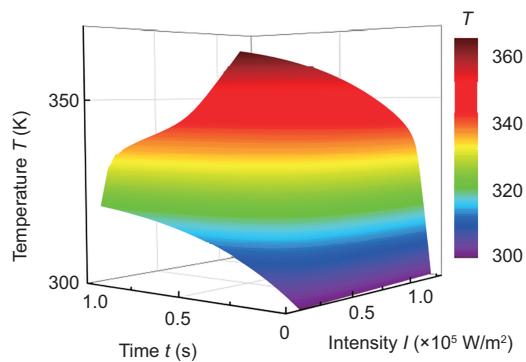


图4 (网络版彩图)不同太赫兹辐照强度 $I$ 下,  $\text{VO}_2$ 粒子的温度随时间的变化三维图. 入射频率为1 THz. 粒子半径为50  $\mu\text{m}$ , 热对流系数 $h_c = 100 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$

**Figure 4** (Color online) The time evolution of the particle temperature  $T$  under various THz radiation intensities  $I$ . The particle radius is fixed at 50  $\mu\text{m}$ , and the heat coefficient  $h_c$  is fixed at  $100 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ .

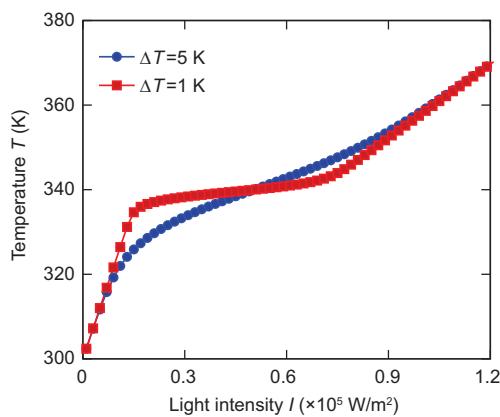


图5 (网络版彩图)不同相变温度宽带 $\Delta T$ 时,  $\text{VO}_2$ 粒子的稳态温度 $T$ 与入射光强 $I$ 的曲线. 其他参数与图4相同

**Figure 5** (Color online) The steady-state temperature  $T$  as a function of the THz intensity  $I$  for different temperature width  $\Delta T$  of the phase change. The remaining parameters are the same as in Figure 4.

时, 在温度自限制区域内的温度上升变得更为缓慢. 在较大的入射光强范围内, 粒子的温度始终保持在相变温度 $T_c = 340$  K附近. 因此, 为了更好地控制粒子的温度, 我们期望进一步改进材料的生长工艺, 使相变温度区间参数 $\Delta T$ 进一步降低. 已经有实验<sup>[38]</sup>报道了相变过程十分陡峭的测试结果, 为制备性能更好的太赫兹辐照温度自限制器件奠定材料基础.

粒子的稳恒温度依赖于光热效应与热交换的共同作用. 改变粒子的热对流系数 $h_c$ 也能够影响温度自限制效应. 我们进一步比较了不同 $h_c$ 时, 粒子的稳态温度与入射光强的依赖关系, 结果如图6所示. 由图6可以看到, 粒子的温度升高与光强呈非线性关系. 当热交换较弱时, 如 $h_c = 100 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ , 粒子温度的增加非常显著, 温度自限制效应并不明显. 这是因为粒子吸收太赫兹辐照后很难将热量耗散到环境中, 因此, 粒子温度会随着光强增大而持续升高. 进一步增加 $h_c$ 可以帮助粒子将焦耳热耗散到环境中, 更好地保持粒子温度. 在图6中, 当 $h_c$ 较大时, 出现明显的温度自限制区域, 即存在温度不显著随光强变化的光强范围, 粒子温度基本保持在相变温度附近. 这一现象对应于粒子相变, 吸收效率降低, 而较大的热对流系数使得颗粒温度最终保持在相变温度附近. 因此, 为了提高温度自限制效应器件的性能, 必须优化设计光吸收与热平衡过程. 实验上, 这

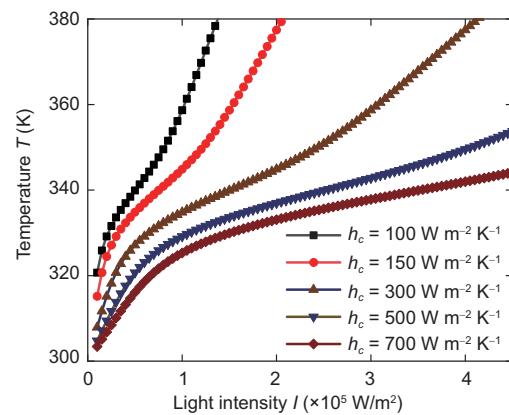


图6 (网络版彩图)不同热对流系数 $h_c$ 时,  $\text{VO}_2$ 粒子的稳态温度 $T$ 与入射光强 $I$ 的曲线. 其他参数与图4相同

**Figure 6** (Color online) The steady-state temperature  $T$  as a function of the THz intensity  $I$  for different  $h_c$ . The remaining parameters are the same as in Figure 4.

可以通过提高材料性质, 优化器件结构设计和改变热平衡条件等手段达到.

## 4 总结

本文分析了二氧化钒太赫兹辐照的温度自限制效应. 我们利用米氏理论计算了 $\text{VO}_2$ 微粒的光热效应. 材料的光学性质可以随着热诱导相变过程发生剧烈的变化, 从而影响材料的光吸收, 有望实现温度自限制效应. 与可见光波段的 $\text{VO}_2$ 温度自限制效应存在的有效波段较窄、器件尺寸加工难度大、 $\text{Au}/\text{VO}_2$ 复合材料生长困难等问题相比, 利用太赫兹实现 $\text{VO}_2$ 温度自限制效应具有显著的优势. 在太赫兹辐照下, 选择合适的 $\text{VO}_2$ 球半径等参数可以使材料相变后的吸收系数急剧降低, 从而使粒子温度保

持在相变温度附近, 实现温度自限制效应. 这一温度自限制效应还与 $\text{VO}_2$ 材料相变的温度宽度以及粒子与环境的热交换过程有关. 这些因素的都可以在实验中进行方便的调节. 我们的分析还表明, 实现 $\text{VO}_2$ 太赫兹辐照的温度自限制效应所需参数均在现有实验条件的允许范围内, 具有很好的可行性. 选择 $\text{VO}_2$ 作为温度自限制效应的材料还有一个优点, 即 $\text{VO}_2$ 相变温度可以通过掺杂等工艺进行调整, 从而有希望将相变温度降低至人体温度, 从而在光热诊疗<sup>[4-6]</sup>等方面得到应用. 此外,  $\text{VO}_2$ 相变过程中光学性质的调控特性还有利于对电磁传输进行动态调控, 有望在可编程超表面设计<sup>[39]</sup>中得到进一步应用. 总之, 我们的计算结果表明 $\text{VO}_2$ 相变材料有望实现优良的太赫兹辐照温度自限制器.

## 参考文献

- 1 Huang F, Wang Y, Wang J, et al. Study on application of high-repetition-rate solid state lasers in photoelectric countermeasure. *Infrared Laser Engg*, 2003, 32: 465–467
- 2 Cong H, Porco Jr. J A. Chemical synthesis of complex molecules using nanoparticle catalysis. *ACS Catal*, 2012, 2: 65–70
- 3 Lin C, Compton R G. Size effects in nanoparticle catalysis at nanoparticle modified electrodes: The interplay of diffusion and chemical reactions. *J Phys Chem C*, 2017, 121: 2521–2528
- 4 Govorov A O, Zhang W, Skeini T, et al. Gold nanoparticle ensembles as heaters and actuators: Melting and collective plasmon resonances. *Nanoscale Res Lett*, 2006, 1: 84–90
- 5 Huang X, El-Sayed M A. Gold nanoparticles: Optical properties and implementations in cancer diagnosis and photothermal therapy. *J Adv Res*, 2010, 1: 13–28
- 6 Xu X, Meade A, Bayazitoglu Y. Numerical investigation of nanoparticle-assisted laser-induced interstitial thermotherapy toward tumor and cancer treatments. *Lasers Med Sci*, 2011, 26: 213–222
- 7 Lee C W, Chen M J, Cheng J Y, et al. Morphological studies of living cells using gold nanoparticles and dark-field optical section microscopy. *J Biomed Opt*, 2009, 14: 034016
- 8 Li M, Lohmüller T, Feldmann J. Optical injection of gold nanoparticles into living cells. *Nano Lett*, 2015, 15: 770–775
- 9 Boyer D. Photothermal imaging of nanometer-sized metal particles among scatterers. *Science*, 2002, 297: 1160–1163
- 10 Morin F J. Oxides which show a metal-to-insulator transition at the Neel temperature. *Phys Rev Lett*, 1959, 3: 34–36
- 11 Yang Z, Ko C, Ramanathan S. Oxide electronics utilizing ultrafast metal-insulator transitions. *Annu Rev Mater Res*, 2011, 41: 337–367
- 12 Xue X, Jiang M, Li G, et al. Photoinduced insulator-metal phase transition and the metallic phase propagation in  $\text{VO}_2$  films investigated by time-resolved terahertz spectroscopy. *J Appl Phys*, 2013, 114: 193506
- 13 Brassard D, Fourmaux S, Jean-Jacques M, et al. Grain size effect on the semiconductor-metal phase transition characteristics of magnetron-sputtered  $\text{VO}_2$  thin films. *Appl Phys Lett*, 2005, 87: 051910
- 14 Dragoman D, Dragoman M. Terahertz fields and applications. *Prog Quantum Electron*, 2004, 28: 1–66
- 15 Kwan C C Y, Griffiths C H, Eastwood H K. Transport and structural properties of  $\text{VO}_2$  films. *Appl Phys Lett*, 1972, 20: 93–95
- 16 Nag J, Haglund Jr. R F. Synthesis of vanadium dioxide thin films and nanoparticles. *J Phys-Condens Matter*, 2008, 20: 264016
- 17 Wang S, Liu M, Kong L, et al. Recent progress in  $\text{VO}_2$  smart coatings: Strategies to improve the thermochromic properties. *Prog Mater Sci*, 2016, 81: 1–54
- 18 Gao Y, Luo H, Zhang Z, et al. Nanoceramic  $\text{VO}_2$  thermochromic smart glass: A review on progress in solution processing. *Nano Energy*, 2012, 1: 221–246

- 19 Iken O, Dlimi M, Agounoun R, et al. Numerical investigation of energy performance and cost analysis of Moroccan's building smart walls integrating vanadium dioxide. *Sol Energy*, 2019, 179: 249–263
- 20 Lee G Y, Mun B S, Ju H. Effect of photo-irradiation on metal insulator transition in vanadium dioxide. *Appl Phys Lett*, 2018, 113: 191902
- 21 Cortie M B, Dowd A, Harris N, et al. Core-shell nanoparticles with self-regulating plasmonic functionality. *Phys Rev B*, 2007, 75: 113405
- 22 Bei H. Study on the Mechanism and Design of High Power Terahertz Radiation Source (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Shanghai: Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, 2009 [卑华. 高功率太赫兹源辐射机理研究及设计. 博士学位论文. 上海: 中国科学院上海应用物理研究所, 2009]
- 23 Cao J C. Research progress of terahertz sources and detectors. *J Funct Mater Dev*, 2003, 9: 111–117
- 24 Cao J C. Progress on the semiconductor terahertz detectors (in Chinese). *Physics*, 2006, 11: 64–67 [曹俊诚. 太赫兹半导体探测器研究进展. 物理, 2006, 11: 64–67]
- 25 Fu Z L, Li R Z, Li H Y, et al. Progress on the application of terahertz quantum cascade lasers in bio-imaging (in Chinese). *Chin J Lasers*, 2020, 47: 020714 [符张龙, 李锐志, 李弘义, 等. 基于太赫兹量子级联激光器的生物医学成像研究进展. 中国激光, 2020, 47: 0207014]
- 26 Siegel P H. Terahertz technology. *IEEE Trans Microwave Theor Techn*, 2002, 50: 910–928
- 27 Siegel P H. Terahertz technology in biology and medicine. *IEEE Trans Microwave Theor Techn*, 2004, 52: 2438–2447
- 28 Nagel M, Haring Bolivar P, Brucherseifer M, et al. Integrated THz technology for label-free genetic diagnostics. *Appl Phys Lett*, 2002, 80: 154–156
- 29 Wu B, Zhao M, Zhou J, et al. Numerical investigation of nonlinear photothermal effect in Vanadium Dioxide phase-change particles. *Opt Commun*, 2018, 427: 184–189
- 30 Bohren C F, Huffman D R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 1998
- 31 Phan A D, Le N B, Lien N T H, et al. Multilayered plasmonic nanostructures for solar energy harvesting. *J Phys Chem C*, 2018, 122: 19801–19806
- 32 Phan A D, Le N B, Nghiem T H L, et al. Confinement effects on the solar thermal heating process of TiN nanoparticle solutions. *Phys Chem Chem Phys*, 2019, 21: 19915–19920
- 33 Quinten M. Optical Properties of Nanoparticle Systems: Mie and Beyond. Zurich: Wiley-VCH, 2011
- 34 Cocker T L, Titova L V, Fourmaux S, et al. Terahertz conductivity of the metal-insulator transition in a nanogranular VO<sub>2</sub> film. *Appl Phys Lett*, 2010, 97: 221905
- 35 Pustovalov V K. Theoretical study of heating of spherical nanoparticle in media by short laser pulses. *Chem Phys*, 2005, 308: 103–108
- 36 Kizuka H, Yagi T, Jia J, et al. Temperature dependence of thermal conductivity of VO<sub>2</sub> thin films across metal-insulator transition. *Jpn J Appl Phys*, 2015, 54: 053201
- 37 Cengel Y A, Ghajar A J. Heat and Mass Transfer. 5th ed. New York: McGraw-Hill Education, 2011
- 38 Zhang H T, Zhang L, Mukherjee D, et al. Wafer-scale growth of VO<sub>2</sub> thin films using a combinatorial approach. *Nat Commun*, 2015, 6: 8475
- 39 Wu R Y, Bao L, Wu L W, et al. Broadband transmission-type 1-bit coding metasurface for electromagnetic beam forming and scanning. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2020, 63: 284211

# Design of the vanadium dioxide temperature self-regulator in the terahertz regime

CUI JunYi<sup>1</sup>, ZHAO Min<sup>1</sup>, XU XiaoFeng<sup>1</sup>, WANG ChunRui<sup>1</sup>, WEI LianFu<sup>1</sup>,  
CAO JunCheng<sup>2</sup> & WU BinHe<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>*College of Science, Donghua University, Shanghai 201620, China;*

<sup>2</sup>*Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China*

A temperature self-regulator can keep the particle temperature almost constant over a wide range of light intensities. In this study, we propose a temperature self-regulator design under terahertz radiation. A key ingredient in this proposal is vanadium dioxide ( $\text{VO}_2$ ), whose properties in the terahertz regime vary drastically around its phase transition temperature. One would expect that the particle temperature may be self-adjusted in the phase change process. To verify this notion, we employ the Mie theory for the theoretical analysis. The results show that the absorption exhibits nonlinear dependence with different parameters. At optimized sizes, the absorption of terahertz radiation can be significantly suppressed once the phase change occurs. Consequently, the temperature does not show a significant increment with increasing intensity. These results can facilitate the future development of temperature self-regulator using phase change materials in the terahertz regime.

**terahertz, vanadium dioxide, photothermal effect, temperature self-regulator**

**PACS:** 78.20.nb, 78.20.Ci, 78.40.Kc, 71.30.+h, 42.70.Nq

**doi:** [10.1360/SSPMA-2020-0204](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2020-0204)