

文章编号: 1005-5630(2020)06-0049-05

DOI: 10.3969/j.issn.1005-5630.2020.06.008

# 石墨烯热电器件栅控特性研究

马志豪, 王 宁, 孟 丛, 高 聪, 贾宏志

(上海理工大学上海市现代光学系统重点实验室, 上海 200093)

**摘要:** 为了获得一种稳定可控的能量, 提出一种栅控石墨烯热电器件。通过对石墨烯通道的载流子输运机理的分析, 获得了温度和栅压对通道电阻的影响。依据半经典 Mott 公式推导了石墨烯塞贝克系数的表达式, 同时给出了石墨烯的电导率和热导率模型。最后通过有限元分析 (FEA) 建模获得不同栅压条件下的器件温度, 当栅极电压  $V_B=0$  V 时, 石墨烯热电器件热端和冷端温度差为 30 K; 当  $V_B=6$  V 时, 最大温差达到 50 K; 当  $V_B=30$  V 时, 最小温差只有 10 K。结果表明, 栅压对热电器件的性能有明显的调控性。该研究可为石墨烯热电器件的设计提供理论参考。

**关键词:** 热电器件; 石墨烯; 迁移率; 塞贝克系数

**中图分类号:** TK 01+9 **文献标志码:** A

## Research on characteristics of gate-controlled graphene thermoelectric device

MA Zhihao, WANG Ning, MENG Cong, GAO Cong, JIA Hongzhi

(Shanghai Key Laboratory of Modern Optical System, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

**Abstract:** In order to obtain a stable and controllable energy source, a gate-controlled graphene thermoelectric device was proposed in this paper. The effects of temperature and gate voltages on channel resistance were obtained by the carriers' transport mechanism of graphene channels. According to the semiclassical Mott formula, the expression of graphene Seebeck coefficient was derived. The conductivity and thermal conductivity models of graphene were also exhibited. Finally, the finite element analysis (FEA) method was used to obtain the device temperatures under different gate voltages. When back-gate voltage  $V_B=0$  V, the temperature difference between the hot and cold side of graphene thermoelectric devices is 30 K; when  $V_B=6$  V, the maximum temperature difference reaches 50 K; when  $V_B=30$  V, the minimum temperature difference is only 10 K. The results show that the gate voltage has obvious regulation on the performance of thermoelectric devices. This article provides a theoretical reference for the design of graphene thermoelectric devices.

收稿日期: 2020-01-07

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(61804096)

作者简介: 马志豪(1995—), 男, 硕士研究生, 研究方向为热电能量转换/热电器件。E-mail: 957848162@qq.com

通信作者: 王 宁(1984—), 男, 副教授, 研究方向为热电能量转换/热电器件、微波毫米波高速电互连技术。

E-mail: nwang@usst.edu.cn

**Keywords:** thermoelectric devices; graphene; mobility; Seebeck coefficient

## 引 言

随着半导体产业的飞速发展,高度集成的微纳电子器件在正常工作时会产生大量余热进而影响其工作性能和使用寿命。传统风冷和液冷方式无法解决大功率器件或高热流密度芯片的热管理问题。热电制冷器件能够直接将热能转换为电能,并且具有无机械传动部件、体积小、重量轻、使用寿命长等优点,非常适合解决传统器件的热管理问题。这种热电器件的工作原理归因于塞贝克效应、帕尔帖效应和汤姆逊热效应<sup>[1-2]</sup>,能够直接实现热能和电能的相互转换。热电器件中所使用的常见材料有碲化铋、碲化铅、硅锗合金等。在低维纳米材料的量子受限效应被提出后,因其电子态密度更加集中有助于提高材料的导电性,并且固有的材料界面有利于声子散射而降低材料的热导率,所以研究者对低维纳米材料的物理热电性质进行了广泛的研究,而石墨烯正是一种新型低维纳米材料。

石墨烯是一层致密蜂窝状二维晶体结构的单层碳原子,其电子输送遵循狄拉克方程,因此表现出无质量、零带隙、双极性<sup>[3]</sup>等物理特性,使石墨烯成为电学、光学和力学等方面的热门材料。石墨烯的载流子迁移率可高达  $20\,000\text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ,且是目前电阻率最小的材料,只有  $10^{-6}\ \Omega\cdot\text{cm}$ ,并且其带隙、载流子浓度和极性可以通过光照、电场和磁场等条件实现灵活调控<sup>[4-5]</sup>,使得石墨烯在热电领域也备受关注。

本文提出一种可以通过背栅电压调控参数的石墨烯热电器件结构。首先,从栅压和温度对载流子迁移率和浓度的影响出发,分析了栅压和温度对石墨烯通道电阻的影响。然后,依据半经典 Mott 公式推导塞贝克系数的表达式,进一步给出了石墨烯通道电导率和热导率的模型。最终,给出了不同背栅电压下石墨烯热电器件的温度分布图。

## 1 石墨烯热电器件模型

石墨烯热电器件示意图如图 1 所示。这种结

构的背栅电极被放置在 Si 衬底之下,与石墨烯层通过  $\text{SiO}_2$  介质层相隔离。在背栅电极的作用下石墨烯的带隙被打开形成 PN 结<sup>[6-7]</sup>,并改变石墨烯通道中载流子迁移率和浓度。此结构作为热电器件工作时,电流  $I$  从电极流经石墨烯,石墨烯和电极接触界面会发生热量的释放和吸收过程。吸收的热量为  $Q=(S_g-S_e)IT_c-k_g s_g \Delta T/L-I^2 R/2$ ,释放的热量为  $Q=(S_g-S_e)IT_h-k_g s_g \Delta T/L+I^2 R/2$ 。其中  $S_g$ 、 $S_e$ 、 $T_c$ 、 $T_h$ 、 $k_g$ 、 $s_g$ 、 $L$  和  $R$  分别为石墨烯的塞贝克系数、电极的塞贝克系数、冷端温度、热端温度、石墨烯的热导率、石墨烯横截面积、石墨烯通道的长度和电阻。

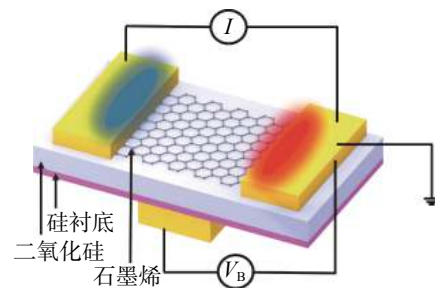


图 1 石墨烯热电器件示意图

Fig. 1 Schematic of graphene thermoelectric device

## 2 石墨烯热电器件仿真建模

### 2.1 石墨烯通道的载流子输运

石墨烯通道的载流子迁移率<sup>[7]</sup>受载流子浓度 ( $n$ ) 和环境温度 ( $T$ ) 影响,其变化关系可表示为

$$\mu(n, T) = \frac{\mu_0}{(1 + (n/n_{\text{ref}})^\alpha)(1 + (T/T_{\text{ref}} - 1)^\beta)} \quad (1)$$

式中:初始载流子迁移率  $\mu_0=4\,650\text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ; 初始载流子浓度  $n_{\text{ref}}=1.1\times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ ; 初始温度  $T_{\text{ref}}=300\text{ K}$ ;  $\alpha=2.2$ ;  $\beta=3$ 。背栅电压对石墨烯载流子浓度的影响可以表示为

$$n_B = \frac{(V_B - V_{B,\text{Dirac}}) \cdot C_B}{e} = \frac{(V_B - V_{B,\text{Dirac}}) \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_r}{e \cdot t_B} \quad (2)$$

式中  $V_{B,\text{Dirac}}$ 、 $C_B$ 、 $\epsilon_0$ 、 $\epsilon_r$ 、 $t_B$  分别为背栅狄拉克电压、背栅电容、真空中介电常数、背栅材料的

相对介电常数和厚度。石墨烯通道的载流子浓度可以表示为

$$n = \sqrt{4 \cdot n_0^2 + n_B^2} = \sqrt{4 \cdot n_0^2 + \left( \frac{(V_B - V_{B,Dirac}) \cdot C_B}{e} \right)^2} \quad (3)$$

式中  $n_0 = ((n^*/2)^2 + n_{th}^2)^{1/2}$ , 石墨烯剩余载流子浓度  $n^* = 2.33 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 热致载流子浓度  $n_{th} = (\pi/6) \cdot (k_B \cdot T/\hbar \cdot v_F)^2$ , 其中  $v_F = 1.1 \times 10^6 \text{ m/s}$ ,  $k_B$ 、 $\hbar$  分别为玻尔兹曼常数、约化普朗克常数。求出载流子浓度和迁移率的表达式后, 可以得到电阻<sup>[8]</sup>大小, 石墨烯的通道电阻可以表示为

$$R_{\text{channel}} = \frac{L(1 + (n/n_{\text{ref}})^\alpha)(1 + (T/T_{\text{ref}} - 1)^\beta)}{We\mu_0 \sqrt{n_0^2 + \left( \frac{(V_B - V_{B,Dirac}) \cdot C_B}{e} \right)^2}} \quad (4)$$

式中  $L = 10 \text{ }\mu\text{m}$  和  $W = 8 \text{ }\mu\text{m}$  分别为石墨烯通道的长和宽。

## 2.2 石墨烯热电器件性能参数

热电优值(ZT)是衡量热电材料性能的关键参数

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{k} \quad (5)$$

式中  $S$ 、 $\sigma$  和  $k$  分别为塞贝克系数、电导率和热导率。首先从半经典 Mott 关系式出发, 得到石墨烯的近似塞贝克系数, 化简得到

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e} \frac{1}{G} \frac{dG}{dE} \Big|_{E=E_F} = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e} \frac{1}{R} \frac{dR}{dn} \frac{dn}{dE} \Big|_{E=E_F} \\ &= \frac{2\pi^2 k_B^2 T}{3e\hbar v_F} \left( \frac{n_B \sqrt{n_B}}{n^{*2} + n_B^2 + 4n_{th}^2} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

式中  $E_F = \hbar \cdot v_F \cdot (\pi \cdot n)^{1/2}$ 。石墨烯通道的等效电导率<sup>[9]</sup>可由  $\sigma = L \cdot R/s_g$  和式(4)得到

$$\sigma = \frac{e\mu_0 \sqrt{n_0^2 + \left( \frac{(V_B - V_{B,Dirac}) \cdot C_B}{e} \right)^2}}{d(1 + (n/n_{\text{ref}})^\alpha)(1 + (T/T_{\text{ref}} - 1)^\beta)} \quad (7)$$

式中  $d$  为石墨烯的厚度。石墨烯的热导率由电子热导和声子热导两部分组成, 其中电子热导率部分可以被忽略, 而石墨烯的声子热导率( $k$ )<sup>[10]</sup>可以表示为

$$k = \begin{cases} k_0 & (T \leq 350\text{K}) \\ \frac{k_0}{1 + 0.01(T - 350)} & (T > 350\text{K}) \end{cases} \quad (8)$$

式中  $k_0 = 5000 \text{ W/(K} \cdot \text{m)}$ 。

## 3 结果与讨论

如图2(a)所示, 载流子迁移率受背栅电压的影响很小, 当  $T = 500 \text{ K}$  时,  $\mu = 3500 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ ;  $T = 100 \text{ K}$  时,  $\mu = 6500 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ , 可见迁移率主要受环境温度变化的影响。载流子迁移率主要受声子散射和库伦散射的限制。声子散射和温度有关, 而库伦散射与电场有关。当温度从  $100 \text{ K}$  升高到  $200 \text{ K}$  时, 石墨烯的声子散射增强, 限制了载流子的迁移率; 由式(1)可知, 当系统温度在参考温度附近( $200 \sim 400 \text{ K}$ )时, 迁移率对温度变化不敏感; 当温度从  $400 \text{ K}$  升高到  $500 \text{ K}$  时, 高温激发了二氧化硅衬底的表面极性声子散射, 进一步降低了载流子的迁移率。如图2(b)所示, 在背栅狄拉克电压处, 当环境温度  $T$  从  $100 \text{ K}$  升高  $500 \text{ K}$  时, 载流子浓度从  $2.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  升高到  $4.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 因为当温度升高时, 石墨烯内热激发产生的热致载流子增多使浓度升高。同样当背栅电压施加时, 石墨烯因为场效应会在通道区域形成电子导电区(n型载流子)或空穴导电区(p型载流子), 使载流子浓度上升。因为载流子迁移率和浓度的影响, 石墨烯通道电阻同时受背栅电压和温度调控, 图2(c)中通道电阻整体呈现  $\Lambda$  形状, 电阻的最大值出现在狄拉克电压处。由图2(d)可知, 温度与塞贝克系数成正比关系。当  $T = 500 \text{ K}$ ,  $V_B = -2 \text{ V}$  时, 塞贝克系数最大值达到  $230 \text{ }\mu\text{V/K}$ ; 当  $V_B = 7 \text{ V}$  时, 塞贝克系数为  $-230 \text{ }\mu\text{V/K}$ , 这也是石墨烯双极性的体现。

通过有限元分析(FEA)建模, 输入电流密度为  $1 \times 10^{11} \text{ A/m}^2$ , 设定冷端温度为  $270 \text{ K}$ 。图3展示了不同背栅电压下石墨烯热电器件表面温度分布, 当  $V_B = 0 \text{ V}$  时, 石墨烯热电器件热端和冷端温度差为  $30 \text{ K}$ ; 当  $V_B = 6 \text{ V}$  时, 热端和冷端的最大温差升高到  $50 \text{ K}$ 。此后, 随背栅电压的增加, 温差逐渐变小, 当  $V_B = 30 \text{ V}$ , 温差只有  $10 \text{ K}$ 。在热电器件内部的能量可以分为三部分: 塞贝克效应产生的能量  $(-S_e)IT_c$ 、帕尔贴效应产生的能量  $s_g \Delta T/L$  以及汤姆逊热效应部分  $I^2 R$ 。其中塞贝克系数  $S_g$  和热导率  $k_g$  均与栅压有关, 可见背栅

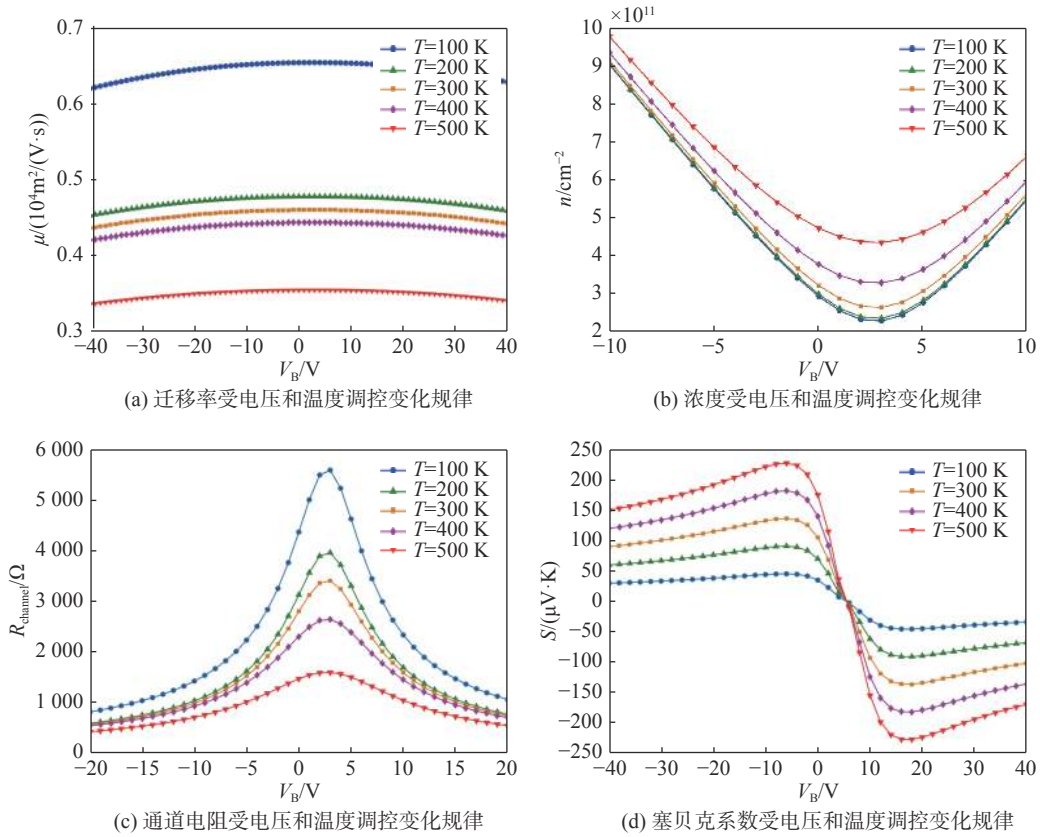


图 2 背栅电压和温度与石墨烯热电参数的关系

Fig. 2 Relationship between back gate voltage and temperature to graphene thermoelectric parameters

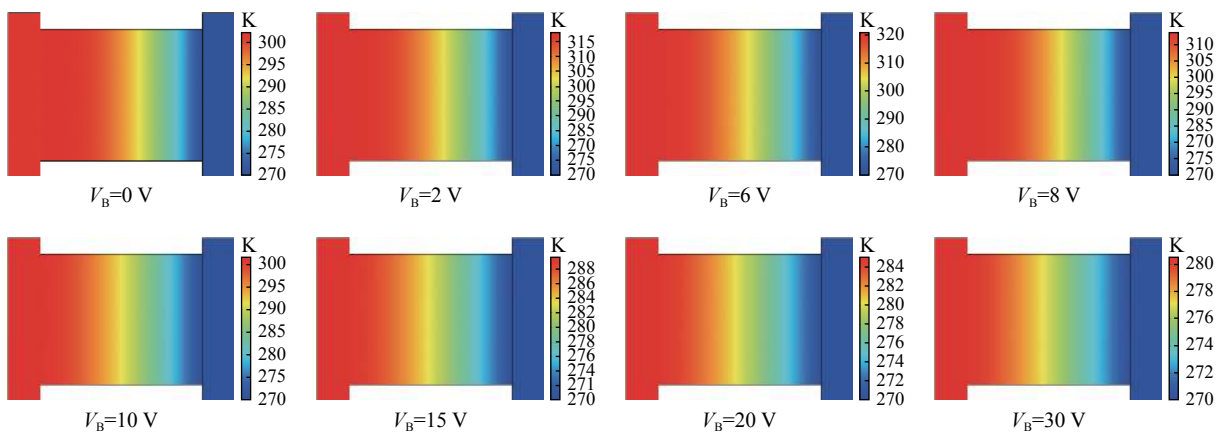


图 3 不同背栅电压下石墨烯热电器件热端和冷端温度图

Fig. 3 Charts of hot and cold side temperatures of graphene thermoelectric device at different back gate voltages.

电压可以对石墨烯器件的热电性能进行调控。

## 4 结 论

本文通过对石墨烯热电器件的载流子迁移率、载流子浓度、电阻、塞贝克系数、电导率和

热导率的模型搭建，分析了背栅电压和温度对各热电参数的影响，并通过有限元分析(FEA)方法直观给出了热电器件冷端和热端的温度差。体现了温度和背栅电压对石墨烯热电性能的调控特性，为新型石墨烯热电器件的设计提供参考。

## 参考文献:

- [ 1 ] BELL L E. Cooling, heating, generating power, and recovering waste heat with thermoelectric systems[J]. *Science*, 2008, 321(5895): 1457 – 1461.
- [ 2 ] QIU P F, SHI X, CHEN L D. Cu-based thermoelectric materials[J]. *Energy Storage Materials*, 2016, 3: 85 – 97.
- [ 3 ] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene[J]. *Nature*, 2005, 438(7065): 197 – 200.
- [ 4 ] PHARE C T, DANIEL LEE Y H, CARDENAS J, et al. Graphene electro-optic modulator with 30 GHz bandwidth[J]. *Nature Photonics*, 2015, 9(8): 511 – 514.
- [ 5 ] YAO B C, HUANG S W, LIU Y, et al. Gate-tunable frequency combs in graphene-nitride microresonators[J]. *Nature*, 2018, 558(7710): 410 – 414.
- [ 6 ] FENG T T, XIE D, XU J L, et al. Back-gate graphene field-effect transistors with double conductance minima[J]. *Carbon*, 2014, 79: 363 – 368.
- [ 7 ] DORGAN V E, BAE M H, POP E. Mobility and saturation velocity in graphene on SiO<sub>2</sub>[J]. *Applied Physics Letters*, 2010, 97(8): 082112.
- [ 8 ] KIM S, NAH J, JO I, et al. Realization of a high mobility dual-gated graphene field-effect transistor with Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dielectric[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 94(6): 062107.
- [ 9 ] HU J, WU T, TIAN J, et al. Coulomb drag and counterflow Seebeck coefficient in bilayer-graphene double layers[J]. *Nano Energy*, 2017, 40: 42 – 48.
- [ 10 ] FREITAG M, STEINER M, MARTIN Y, et al. Energy dissipation in graphene field-effect transistors[J]. *Nano Letters*, 2009, 9(5): 1883 – 1888.

(编辑: 张 磊)