

石墨烯与金属的欧姆接触理论研究

蒲晓庆 吴静 郭强 蔡建臻

Theoretical study on ohmic contact between graphene and metal electrode

Pu Xiao-Qing Wu Jing Guo Qiang Cai Jian-Zhen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 217301 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20181479

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20181479>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I21>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[三维拓扑绝缘体 antidot 阵列结构中的磁致输运研究](#)

Magnetotransport in antidot arrays of three-dimensional topological insulators

物理学报.2018, 67(4): 047301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172346>

[三维 a-IGZO 薄膜中的电子-电子散射](#)

Electron-electron scattering in three-dimensional amorphous IGZO films

物理学报.2016, 65(16): 167301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.167301>

[不同退火方式对 Ni/SiC 接触界面性质的影响](#)

Effect of different annealing treatment methods on the Ni/SiC contact interface properties

物理学报.2015, 64(6): 067303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.067303>

[扶手椅型石墨烯介观环中的持续电流](#)

Persistent currents in mesoscopic graphene rings with armchair edges

物理学报.2015, 64(1): 017302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017302>

[金属与半导体 Ge 欧姆接触制备、性质及其机理分析](#)

Properties and mechanism analysis of metal/Ge ohmic contact

物理学报.2013, 62(16): 167304 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.167304>

# 石墨烯与金属的欧姆接触理论研究\*

蒲晓庆<sup>1)</sup> 吴静<sup>1)†</sup> 郭强<sup>1)</sup> 蔡建臻<sup>2)</sup>

1) (北京航空航天大学自动化科学与电气工程学院, 北京 100191)

2) (北京东方计量测试研究所, 北京 100086)

(2018年8月3日收到; 2018年8月27日收到修改稿)

石墨烯材料应用于多种电子器件时不可避免地要与金属电极接触, 它们之间的接触电阻直接影响了器件的性能. 为了揭示影响金属电极与石墨烯间接触电阻的因素, 提出有效地抑制这些影响的措施, 本文建立了一种求解接触电阻的物理模型, 将载流子的运输分为金属与正下方石墨烯之间、正下方石墨烯与邻近石墨烯之间的两个过程, 分别研究各个过程的运输概率; 结合金属电极与石墨烯接触对载流子分布的影响分析接触电阻, 据此分别探讨了金属电极材料、栅极电压、掺杂浓度、金属与石墨烯原子距离等对接触电阻的影响. 为验证理论分析结果的正确性, 制作了金与石墨烯接触的实验样品, 实验测得的接触电阻与理论分析结果符合. 理论分析结果表明, 可通过选择与石墨烯功函数接近的金属材料, 降低二氧化硅层厚度, 增加载流子平均自由程, 改进金属材料的表面形态使其更光滑, 减小金属与石墨烯耦合长度等方法降低石墨烯与金属电极的接触电阻.

**关键词:** 石墨烯, 运输概率, 接触电阻

**PACS:** 73.40.Cg, 73.23.-b, 12.20.Fv, 02.50.Cw

**DOI:** 10.7498/aps.67.20181479

## 1 引言

自2004年英国曼彻斯特大学的Novoselov和Geim等使用机械剥离法首次制备出石墨烯材料<sup>[1]</sup>以来, 由于石墨烯在电学、光学、热学、力学等方面具有优良的性能, 已在高性能场效应管、传感器、光电器件、量子化器件等得到应用<sup>[2-6]</sup>. 例如, 在电学计量领域, 石墨烯材料由于其高载流子迁移率、量子化电导和量子化霍尔效应, 被应用于霍尔电阻的测量, 测量精度可达到 $10^{-10}$ 量级<sup>[7-9]</sup>; 在光电领域, 石墨烯由于其高光吸收率, 被应用于红外探测器、发射器和光电探测器等<sup>[10-12]</sup>.

石墨烯应用于很多电子器件和传感器时, 不可避免地要与金属接触. 理想的石墨烯材料具有良好的导电性, 电子迁移率可达到 $2 \times 10^5 \text{ cm} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ <sup>[13]</sup>, 但在狄拉克点附近较小的态密度限制了金属与石墨烯之间载流子的转移, 造成

接触区域的高接触电阻. 控制金属与石墨烯间的接触电阻, 使其能不受制造环境和工艺的约束而复现低电阻值, 对基于石墨烯的高性能电子器件的研制至关重要. Khomyakov等<sup>[14]</sup>利用第一性原理分析了石墨烯与金属接触时, 载流子的相互作用和转移情况, 建立了物理吸附于石墨烯上的金属的费米能级和功函数变化的一般模型, 分析了化学吸附的金属对石墨烯带隙和金属功函数的影响. Matsuda等<sup>[15,16]</sup>根据金属与石墨烯之间相互作用力的大小, 将金属与石墨烯的接触分为三类, 从原子结构层面分析接触耦合力、缺陷等因素对接触电阻的影响. Chaves等<sup>[17]</sup>利用传输线方法分析金属与石墨烯的接触电阻, 并利用隧穿电子密度进行了接触电阻率的推导. 传统的半导体材料与金属接触时, 接触区域的载流子平均自由程远大于金属与半导体的耦合长度. 石墨烯与金属接触时, 载流子平均自由程并不满足这一条件, 因而需要对传输线模型进

\* 国防基础科学研究计划(批准号: JSJL2016601C001)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wujing06@buaa.edu.cn

行校准,增加了理论推导的复杂度,同时此种方法难以考虑金属下方半导体材料的薄膜电阻与半导体沟道薄膜电阻的差异. Xia等<sup>[18]</sup>建立了金属与石墨烯接触的二维物理模型,并提出金属与石墨烯接触时载流子的输运过程分为载流子从金属进入其下方的石墨烯,以及从金属下方石墨烯到门控的石墨烯沟道的两个过程,使得接触电阻的理论分析更加简单.

为了从本质上理解影响金属电极与石墨烯的接触电阻的因素,本文从载流子输运角度分析接触电阻.借鉴文献<sup>[18]</sup>的思想,将接触区域的载流子输运过程也分为两个过程,并基于朗道公式计算接触电阻.在求解过程中,利用金属与石墨烯的耦合、载流子的自由输运以及石墨烯狄拉克费米子的反射系数可得两个输运过程的输运概率,通过不同材料接触时石墨烯的费米能级变化可计算出石墨烯的量子化导通模式数量,综合上述结果可推出接触电阻的计算公式.另外,本文还利用传输线模型设计了金属电极与石墨烯接触测试样品,并用四点法测量其接触电阻,将实验数据与理论结果对比分析以验证理论结果的有效性.在此基础上分析了影响金属与石墨烯间接触电阻的因素,并提出降低接触电阻的措施.

## 2 基于朗道方法的接触电阻推导

考虑金属与石墨烯接触的实际情况,假设载流子的输运过程为如图1所示的两个步骤:

A) 载流子从金属电极转移到其正下方的石墨烯;

B) 载流子从金属电极正下方的石墨烯转移到邻近的石墨烯.

金属电极与石墨烯接触时,载流子同时存在弹道输运与扩散输运,但以载流子的弹道输运为主<sup>[18]</sup>.利用朗道公式<sup>[19]</sup>表示金属电极与石墨烯的接触电阻为

$$R_C = \frac{h}{4e^2M} \frac{1}{T_A} + \frac{h}{4e^2M} \frac{1}{T_B} - \frac{h}{4e^2M}, \quad (1)$$

其中,  $h$  为普朗克常数;  $e$  为电子电量;  $M$  为金属下方的石墨烯中量子化导通模式的数量  $M_A$  和邻近的石墨烯中量子化导通模式的数量  $M_B$  的最小值,  $M = \min\{M_A, M_B\}$ ;  $T_A, T_B$  分别为过程 A, B 的载流子的输运概率. (1) 式中右侧第一项对应过

程 A 的电阻,第二项对应过程 B 的电阻,第三项为不考虑载流子反射造成的输运引入的修正电阻.

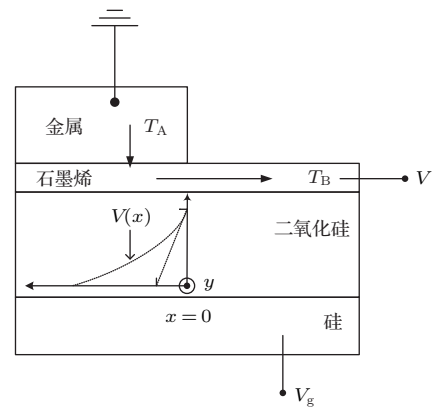


图1 金属与石墨烯接触的物理模型

Fig. 1. Physical model of the contact of metal and graphene.

### 2.1 传输概率 $T_A, T_B$ 的分析

根据图1中的坐标系,可将过程 A 的电压  $V$ 、电流  $I$  的关系表示为

$$\frac{dI}{dx} = \frac{C}{\lambda_m} V(x), \quad (2)$$

$$\frac{dV(x)}{dx} = -\frac{I}{C\lambda}, \quad (3)$$

式中,  $C = \frac{4e^2}{h} \frac{k_F}{\pi} W$ , 其中,  $k_F$  为费米波矢,  $W$  为石墨烯的宽度;  $\lambda_m$  表征金属电极与石墨烯的有效耦合长度,  $\lambda_m = \frac{\hbar V_F}{\pi \eta}$ , 其中,  $\hbar$  为约化普朗克常数,  $V_F$  为费米速度(约为  $10^8$  cm/s),  $\eta$  为金属与石墨烯接触的耦合力;  $\lambda$  为石墨烯中的载流子在扩散输运时的平均自由程,  $\lambda = \pi V_F \tau / 2$ , 其中,  $\tau$  为弛豫时间. 将(2)和(3)式的解与朗道公式对比,可知  $T_A = \sqrt{\lambda / \lambda_m}$ , 考虑马西森定律<sup>[20]</sup>对输运概率的影响,则

$$T_A = \sqrt{\lambda / (\lambda_m + \lambda)}. \quad (4)$$

利用指数形式表示如图2所示的过程 B 中每一点费米能级的变化为

$$\Delta E(x) = \Delta E_A + \frac{\Delta E_B - \Delta E_A}{e^{-x/L} + 1}, \quad (5)$$

其中,  $\Delta E_A$  为金属电极正下方石墨烯的费米能量和狄拉克点的能量差,  $\Delta E_B$  为邻近石墨烯的费米能量和狄拉克点的能量差,  $L$  为过程 B 中费米能量变化区域的长度. 过程 B 的输运概率  $T_B$  可表示为<sup>[21]</sup>





向电阻, 通反向电流并测电压得到反向电阻, 取它们的平均值为样品的电阻. 其中, 测试探针由奕叶

国际有限公司提供, 电流源的型号为KEYSIGHT B2961A, 电压测量仪的型号为RIGOL DM3068.

表 1 金属的电学参数

Table 1. Electrical parameters for different metal electrodes.

金属	$W_M/\text{eV}$	$d_{\text{eq}}/\text{\AA}$	$\Delta_c/\text{eV}$	$\Delta E_A/\text{eV}$	$\Delta E_B/\text{eV}$	接触电阻/ $\Omega\cdot\mu\text{m}$
金 (Au)	5.54	3.31	0.91	0.0927	0.019	372
银 (Ag)	4.92	3.33	0.88	-0.2298	-0.0372	149
铜 (Cu)	5.22	3.26	0.99	-0.1603	-0.0281	214
钛 (Ti)	4.65	2.10	0.90	-0.3706	-0.0479	123
钯 (Pd)	5.67	3.00	0.90	0.1641	0.0281	210

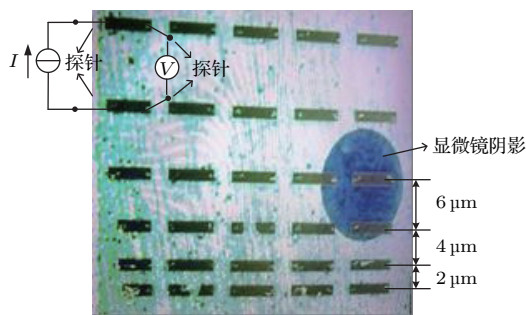


图 4 金属与石墨烯的接触样品及接触电阻测量方法示意图  
Fig. 4. Test sample of metal-graphene contact and the schematic diagram on the measurement method of contact resistance.

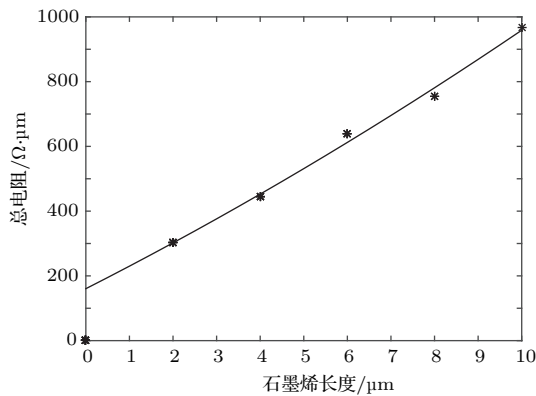


图 5 样品总电阻随石墨烯长度的变化  
Fig. 5. Variations of the total resistance with the lengths of the graphene.

实验样品两金属电极之间的石墨烯长度分别为 2, 4, 6, 8, 10  $\mu\text{m}$ , 分别在电极两端通入 10, 20, 40, 60, 80  $\mu\text{A}$  的电流, 测量两金属电极间的电压值. 根据测量数据可得测试样品总电阻变化趋势如图 5 所示, 根据传输线模型原理, 石墨烯长度为 0 时的总电阻为  $(160 \pm 30) \Omega$ . 样品的电极宽度为  $4 \mu\text{m}$ , 考虑到所测结果是两个金属电极与石墨烯接触, 则

接触电阻为  $(320 \pm 60) \Omega\cdot\mu\text{m}$ , 这与表 2 中金与石墨烯的接触电阻的理论计算值相近.

(1) 式中金属与石墨烯间接触电阻仅存在量子化导通模式的数量  $M$ 、过程 A 的运输概率  $T_A$ 、过程 B 的运输概率  $T_B$ , 而  $M$  又与  $\Delta E$  有关. 根据 (10) 和 (11) 式可知, 金属的功函数、金属与石墨烯的距离、石墨烯与栅极之间的绝缘层厚度、石墨烯掺杂浓度、栅极电压均会对  $\Delta E$  造成影响. 显然, 石墨烯的掺杂浓度越高, 接触电阻越小. 图 6 为不同金属与石墨烯在平衡距离时, 接触电阻与栅极电压的关系. 图中接触电阻总是关于某一栅极电压左右对称分布, 并在该电压处趋于无穷, 这是由于此处金属与石墨烯之间无势能差异, 即  $\Delta E = 0$ . 石墨烯的功函数、金属的功函数以及金属与石墨烯接触的势能变化的差值决定了曲线对称处栅极电压的大小. 由于不同金属与石墨烯接触的势能变化差异较小, 选择栅极电压在狄拉克点电压附近时, 金属功函数与石墨烯功函数差异越小, 接触电阻越小. 图 6 中, 对称处的接触电阻从小到大对应的金属分别为钛、银、铜、金、钯, 这与各金属的功函数和石墨烯功函数 (本文取其为  $4.5 \text{ eV}$ ) 的差异有关.

图 7(a) 是金属电极为钯,  $d_1 = 0$ ,  $d_2$  为 100, 200, 300 nm 时, 接触电阻与栅极电压的关系. 由图 7(a) 可知, 曲线的对称中心均为  $V_g - V_{\text{Dirac}} = 0$ ,  $d_2$  越大, 接触电阻值越大. 图 7(b) 是金属电极为钯,  $d_2 = 90 \text{ nm}$ ,  $d_1$  为 0.1, 0.2, 0.3 nm 时接触电阻与栅极电压的关系曲线, 金属与石墨烯距离越大, 曲线的对称中心对应的栅极电压越小, 接触电阻变化越快. 当  $(V_g - V_{\text{Dirac}})$  的变化范围为  $0-20 \text{ V}$  时, 金属与石墨烯距离越大, 接触电阻越大.

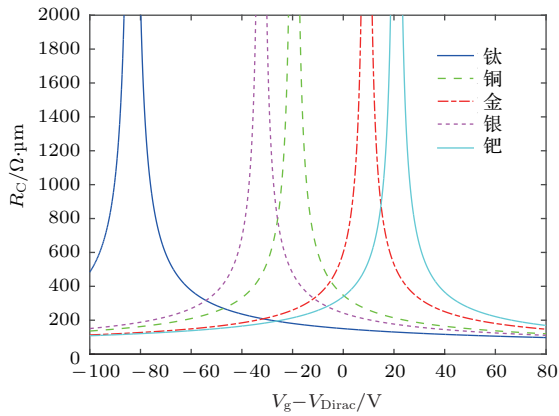


图6 不同材料金属电极下  $R_C$  与栅极电压  $V_g$  的关系  
Fig. 6. Relationship between  $R_C$  and gate voltage  $V_g$  with different metal electrodes.

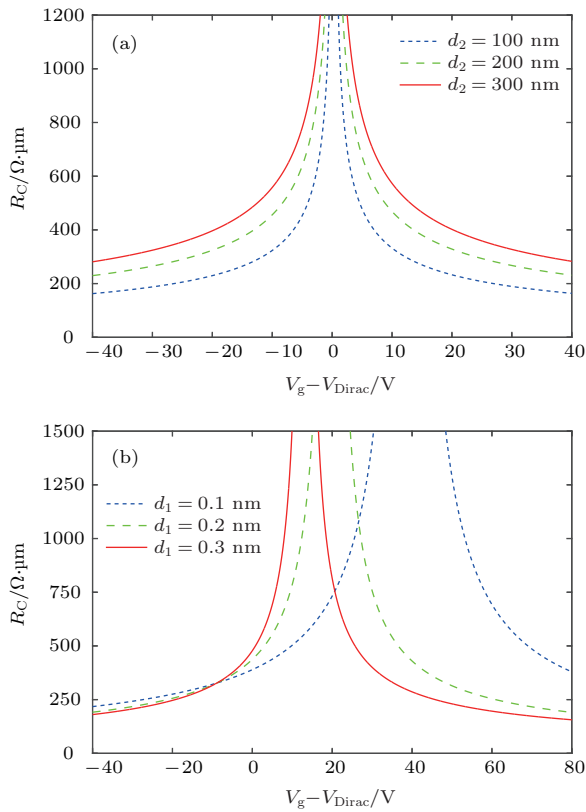


图7 接触电阻与栅极电压的关系 (a) 改变二氧化硅的厚度  $d_2$ ; (b) 改变金属与石墨烯的距离  $d_1$   
Fig. 7. Relationship between  $R_C$  and gate voltage: (a) Variations of the thickness  $d_2$  of  $\text{SiO}_2$ ; (b) variations of the distance  $d_1$  between metal and graphene.

由(4)式可知,  $\lambda$  和  $\lambda_m$  影响  $T_A$ ,  $\lambda$  与弛豫时间成正比,  $\lambda_m$  与金属-石墨烯耦合力成反比,  $\lambda/\lambda_m$  越小,  $T_A$  越大, 则接触电阻越小. 若只考虑  $T_B$  对接触电阻的影响, 由(6)式可知, 载流子在石墨烯中的入射角度、 $\Delta E$  发生改变的长度  $L$  等因素均会影响  $T_B$ . 通常入射角度越大,  $L$  越短, 接触电阻越小.

## 4 结 论

本文基于朗道公式推导了金属电极与石墨烯的接触电阻, 利用传输线模型制作了金属与石墨烯接触的实验样品, 通过对比接触电阻的理论计算值和实测值验证了理论推导的正确性. 理论分析结果表明, 为降低金属与石墨烯的接触电阻, 可从以下两方面入手.

1) 提高石墨烯量子化导通模式数量: 选择功函数与石墨烯接近的金属材料; 降低二氧化硅层的厚度, 使栅极电压变化范围一定时量子化导通模式数量变化范围更大; 增加金属下方石墨烯和沟道石墨烯之间的载流子浓度差.

2) 提高载流子传输概率: 提高石墨烯材料迁移率, 增加载流子平均自由程, 改进金属材料的表面形态, 减小金属与石墨烯耦合长度.

## 参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nature Mater.* **6** 183
- [3] Singh V, Joung D, Zhai L, Das S, Khondaker S I, Seal S 2011 *Prog. Mater. Sci.* **56** 1178
- [4] Wu P, Hu X, Zhang J, Sun L F 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 218102 (in Chinese) [武佩, 胡潇, 张健, 孙连峰 2017 物理学报 **66** 218102]
- [5] Avouris P, Xia F 2012 *MRS Bull.* **37** 1225
- [6] Huang L, Zhang Z Y, Peng L M 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 218501 (in Chinese) [黄乐, 张志勇, 彭练矛 2017 物理学报 **66** 218501]
- [7] Janssen T J B M, Tzalenchuk A, Lara-Avila S, Kubatkin S, Fal'ko V I 2013 *Rep. Prog. Phys.* **76** 104501
- [8] Novoselov K S, Jiang Z, Zhang Y, Morozov S V, Stormer H L, Zeitler H L, Zeitler U, Maan J C, Boebinger G S, Kim P, Geim A K 2007 *Science* **315** 1379
- [9] Tzalenchuk A, Lara-Avila S, Kalaboukhov A, Paolillo S, Syväjärvi M, Yakimova R, Kazakova O, Janssen T J B M, Fal'ko V, Kubatkin S 2010 *Nature Nanotech.* **5** 186
- [10] Xia F, Mueller T, Golizadeh-Mojarad R 2009 *Nano Lett.* **9** 1039
- [11] Liu N, Luo F, Wu H X, Liu Y H, Zhang C, Chen J 2008 *Adv. Funct. Mater.* **18** 1518
- [12] An X, Liu F, Jung Y J, Kar S 2013 *Nano Lett.* **13** 909
- [13] Bolotin K I, Sikes K J, Jiang Z, Klima M, Fudenberg G, Hone J, Kim P, Stormer H L 2008 *Solid State Commun.* **146** 351
- [14] Khomyakov P A, Giovannetti G, Rusu P C, Brocks G, Brink G V D, Kelly P J 2009 *Phys. Rev. B* **79** 195425
- [15] Matsuda Y, Deng W Q, Goddard W A 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 11113

- [16] Matsuda Y, Deng W Q, Goddard W A 2010 *J. Phys. Chem. C* **114** 17845
- [17] Chaves F A, Jimenez D, Cummings A W, Stephan R 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 164513
- [18] Xia F, Perebeinos V, Lin Y, Wu Y, Avouris P 2011 *Nature Nanotech.* **6** 179
- [19] Datta S 1995 *Electronics in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge University Press) pp57–65
- [20] Matthiessen A 1858 *Philos. Trans. R. Soc. London* **148** 383
- [21] Cayssol J, Huard B, Goldhaber-Gordon D 2009 *Phys. Rev. B* **79** 075428

## Theoretical study on ohmic contact between graphene and metal electrode\*

Pu Xiao-Qing<sup>1)</sup> Wu Jing<sup>1)†</sup> Guo Qiang<sup>1)</sup> Cai Jian-Zhen<sup>2)</sup>

1) (School of Automation Science and Electrical Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China)

2) (Beijing Aerospace Institute for Metrology and Measurement Technology, Beijing 100086, China)

( Received 3 August 2018; revised manuscript received 27 August 2018 )

### Abstract

Graphene has excellent electrical, optical, thermal and mechanical properties, so it has been used in high-performance field effect transistors, sensors, optoelectronic devices, and quantized devices. It is crucial to realize a high-quality junction between metal electrode and graphene. For example, in the field of electrical measurement, due only to the contact resistance in a proper order of magnitude, the quantum Hall effect can be realized. The lower the contact resistance, the higher the measurement accuracy of Hall resistance is. In order to reveal the factors affecting the contact resistance we propose an effective method to reduce it, and a physical model is established in this paper. The carrier transport between the metal electrode and graphene is divided into two cascaded processes. Carriers first transport from the metal electrode to the graphene underneath it, then transport between the graphene underneath metal and the adjacent graphene. The transport probability of first step is considered through the effective coupling length and the mean free path. The transport probability of second step is considered through the effective length of potential step change between the graphene under the metal and the adjacent graphene. The contact resistance is analyzed by combining the distribution of carriers. In order to verify the correctness of the theoretical results, an experimental sample with gold as the metal electrode is fabricated. The transport line model is used to measure the contact resistance. The length of contact area is 4  $\mu\text{m}$ . The lengths of graphene channel are set to be 2, 4, 6, 8, and 10  $\mu\text{m}$ , respectively. The current values are set to be 10, 20, 40, 60, and 80  $\mu\text{A}$ , respectively. The results show that the relationship between current and voltage is almost linear. The total resistance can be obtained with different lengths of graphene. According to the transmission line model, the resistance value can be estimated as  $(160 \pm 30) \Omega$  when the graphene length is zero. Considering that the measured result is obtained under two metal electrodes contacting the graphene, the contact resistance of experimental result is  $(320 \pm 30) \Omega \cdot \mu\text{m}$  which agrees well with the theoretical result. From the analysis of theoretical process, the factors that affect the contact resistance is determined by material, drain-source voltage, gate voltage, doping concentration, distance between metal electrode and graphene atoms, distance between graphene and gate. Finally, in order to reduce the contact resistance between graphene and metal electrode, we propose some corresponding solutions for choosing the metal material whose work function is close to graphene's, reducing the thickness of the silicon dioxide layer, increasing carrier mean free path, improving the surface morphology of the metal material, and reducing the coupling length between metal and graphene.

**Keywords:** graphene, transport probability, contact resistance

**PACS:** 73.40.Cg, 73.23.-b, 12.20.Fv, 02.50.Cw

**DOI:** 10.7498/aps.67.20181479

\* Project supported by the National Defense Basic Scientific Research Program of China (Grant No. JSJL2016601C001).

† Corresponding author. E-mail: [wujing06@buaa.edu.cn](mailto:wujing06@buaa.edu.cn)