

石墨烯层数及化学势对近场热二极管热通量与整流效应的协同调控*

张佳瑶¹⁾ 郝雨¹⁾ 郭永鑫¹⁾ 何智慧¹⁾²⁾³⁾ 苏山河⁴⁾ 杨智敏^{1)2)3)†}

1) (延安大学物理与电子信息学院, 延安 716000)

2) (先进光电材料与器件陕西省高等学校重点实验室, 延安 716000)

3) (陕西省能源大数据智能处理省市共建重点实验室, 延安 716000)

4) (厦门大学物理系, 厦门 361000)

(2026 年 2 月 12 日收到; 2026 年 4 月 15 日收到修改稿)

石墨烯因其电子特性可调且能激发极化激元, 在近场热辐射调控方面展现出巨大潜力. 本文基于多层石墨烯覆盖碳化硅基底, 构建了对称和非对称近场热二极管模型, 用以揭示石墨烯层数、化学势及间隙距离对辐射热通量与整流比的协同调控规律. 研究表明, 石墨烯化学势和层数对热通量的调控效果强烈依赖于间隙距离. 与无石墨烯覆盖和非对称石墨烯覆盖结构相比, 当间隙距离小于 300 nm 时, 对称单层和多层石墨烯覆盖结构可显著增强辐射热通量. 在 50—500 nm 的间隙范围, 热通量随石墨烯层数增加而升高, 但其增幅随层数增加逐渐减缓. 对于非对称石墨烯覆盖结构, 间隙距离越小, 石墨烯化学势及层数对热通量的调控作用越显著; 当间隙距离超过 300 nm 时, 该调控作用显著减弱, 几乎可忽略不计. 非对称石墨烯覆盖结构的整流比随间隙距离的增大呈现先增后减的趋势, 其最大整流比可达 0.155. 较小的间隙距离、较低化学势及较少石墨烯层数是提升非对称石墨烯覆盖结构热整流比的有利因素. 本研究揭示了石墨烯层数、化学势和近场效应之间的协同调控作用规律, 为高性能近场热整流器的设计提供了理论支撑.

关键词: 近场热辐射, 热二极管, 石墨烯, 整流效应, 协同调控

DOI: 10.7498/aps.75.20260241

CSTR: 32037.14.aps.75.20260241

1 引言

随着微纳技术的发展, 集成电路集成度不断提高, 芯片产生的热流密度急剧增大, 传统散热方式难以实现局部热点定向排热. 近场热二极管可构建“热逻辑门”, 实现对热流路径的主动调控^[1]. 近场热辐射是当两个物体间的距离小于或相当于热辐射的特征波长时, 由于倏逝波和表面极化激元的贡献, 辐射传热强度可远超黑体极限的现象^[2]. 近场辐射传热的增强特性和可调性, 使其在热二极

管^[3,4]、热管理^[5,6]以及热开关^[5,7]等领域展现出广泛应用潜力. 热二极管是一种具有单向换热特性的功能器件, 其工作原理类比于电二极管^[8]; 当高温热源与低温热源处于正向配置(正向偏置)时, 热二极管可产生显著的热通量; 而当两者位置互换(反向偏置)时, 热通量大幅降低, 这种现象称为热整流. 传统的热整流系统依赖于热传导和热对流, 其整流效果受限于界面热阻、声子输运各向异性等因素, 这严重限制了整流系统的性能. 非接触热辐射热传递却不存在该限制^[1], 特别是近场热二极管利用光子隧穿和表面极化激元耦合, 不仅突破了上述

* 国家自然科学基金(批准号: 12364008)、陕西省教育厅重点科学研究计划(重点实验室项目)(批准号: 25JS138)和延安大学博士科研启动项目(批准号: YDBK2019-54)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yzm@yau.edu.cn

限制,还表现出高热整流效率、对热传导的精确控制能力,以及相较于对流和传导型热整流器件更快的响应速度等显著优势^[9].这些特性使其在微纳电子器件散热领域具有重要价值,同时在能量转换与废热回收利用^[10]等方面也展现出巨大的应用潜力.

热整流效应的实现机制可归纳为以下途径:

1) 利用温度依赖型介电函数的不同材料组合; 2) 构建几何结构的不对称; 3) 设计不同材料组成的非对称界面.这些机制已在近场热二极管理论与实验研究中得到了验证.2010年,Qtay和Fan^[11]首次从理论层面提出了在温差为300 K,真空间距为100 nm的条件下,由3C-SiC和6H-SiC组成的近场热二极管,其整流比可达0.41.2017年,Elzouka和Ndao^[12]首次实验展示了近场热辐射在高温条件下实现热整流的可能性,终端温度在375 K和530 K的条件下,该器件实现了最大整流比0.109.在近场热辐射实验中,特别是平板结构中建立和保持两个平面之间纳米级间隙距离是一个极大的挑战,为了克服这一挑战,研究人员提出了多种方法,这些方法可归纳为3类^[13]: 1) 利用纳米柱/纳米球维持间隙; 2) 制造微纳机电系统(N/MEMS)器件; 3) 设计纳米定位平台.近些年Zhang等^[14,15]利用纳米定位平台使平面结构间隙距离达到100 nm以下.尽管近场热整流效应已在理论与实验层面取得显著进展,但在小温差条件下实现高整流比仍然是当前研究的核心挑战.近年来,研究者们提出多种调控策略以尝试突破这一瓶颈,包括材料革新^[16]、多体系统构建^[17,18]、二维材料界面工程(石墨烯表面覆盖)^[19,20]、外场调控(施加外部电场或磁场)^[21]、纳米结构构筑(光栅、薄膜和纳米颗粒)等.石墨烯因其可调的电子特性与极化激元激发能力,在近场热辐射调控中表现出了显著优势,作为典型的二维狄拉克材料,通过电场调控或化学掺杂可实现对石墨烯费米能级动态调控(0—1.0 eV范围)^[22,23],达到对表面等离子激元波长与强度的连续调控,其表面等离子激元的频率与温度响应呈现高度非线性特征^[24,25],为小温差下的热通量方向选择性调控提供了理想平台.2017年,Zheng等^[26]探讨了石墨烯覆盖带来的增强效应,在真空间隙为10 nm、化学势为0.3 eV,温差保持在50 K时,石墨烯覆盖热二极管结构的整流系数是相同条件下无石墨烯覆盖结构的1.69倍.在石墨烯基热整流器件的研究中,层数调控因其对电子

结构与热输运特性的显著影响,也引起了学者的关注.2017年,Lim等^[27]在50 nm的真空间隙距离下发现三层石墨烯结构的热光伏电池输出功率是不含石墨烯结构的5.8倍.2018年,杨将^[28]通过理论研究指出多层石墨烯能够显著增强近场辐射传热,但三层石墨烯增强作用相比两层石墨烯有所减弱.2021年,何明键^[29]提出通过金属纳米粒子表面覆盖一层二氧化硅球壳并在基底材料中嵌入多层石墨烯薄膜的方式,使辐射热导在温差为100 K时增大了两个数量级.2024年,Deng等^[30]通过非对称结构设计和表面等离激元调控,在小温差下(1—5 K)实现了超过 10^5 的整流比.2025年,Zhang等^[31]通过在两个石墨烯/碳化硅核壳纳米粒子之间引入石墨烯-六方氮化硼(hBN)多层作为中介,通过引入中间结构辐射热通量是没有中间多层结构纳米粒子的1772倍.2025年,Zhang等^[32]利用电流偏置石墨烯诱导产生非互易热辐射,在100 K温差下理论热整流比超过0.8.这些研究为石墨烯对近场热二极管性能的调控提供了基础.石墨烯层数和化学势对近场热辐射的调控已被众多学者研究,而石墨烯层数和化学势及间隙距离协同作用对近场辐射的调控仍需探索,其协同调控在近场热二极管的作用也需要进一步明确.

本文构建了多种对称/非对称近场辐射热辐射模型,讨论并分析了基底材料覆盖石墨烯层数、石墨烯化学势和近场间隙距离对近场辐射热通量和热二极管整流效应的影响.

2 理论模型

本研究所提出的模型是由真空间隙分隔的高温端与低温端构成,如图1所示.图中标号1, 2, 0, 3和4分别代表:高温端基底、高温端石墨烯层、真空层、低温端石墨烯层及低温端基底; T_e , T_r 和 d 分别表示高温端温度、低温端温度及两端之间的真空间隙宽度.定义正向偏置为:高温端由多层石墨烯覆盖的半无限厚碳化硅(SiC)基底构成,低温端由单层石墨烯覆盖的半无限厚SiC基底构成,此时产生的热通量记为 Q_f .反向偏置则为高温端与低温端的温度互换,对应热通量记为 Q_r .计算中假设高温端温度 $T_e = 400$ K,低温端温度 $T_r = 300$ K,且每层石墨烯的厚度相同.近场热二极管的整流比可定义为 $\varphi = Q_f/Q_r - 1$.

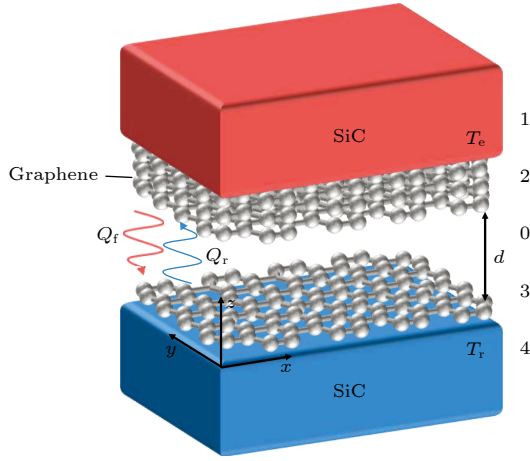


图 1 多层石墨烯覆盖碳化硅基底所组成的近场辐射热二极管示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the near-field radiation thermal rectifier composed of multilayer graphene-coated SiCs.

在构建多层石墨烯/SiC 异质结的近场辐射传热模型时, 为考虑不同层之间的极化激元的耦合作用, 对于辐射热通量的计算采用基于非平衡格林函数的涨落耗散定理结合传递矩阵法, 该模型框架计入了多层结构中层间电磁相互作用的相干叠加, 从而能够描述由层间耦合对光子隧穿概率的贡献. 因此, 温度分别为 T_e 和 T_r 的两个半无限均匀介质之间的正向和反向辐射热通量 ($Q_{f/r}$) 可表示为 [33]

$$Q_{f/r} = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \Theta(T_e, \omega) - \Theta(T_r, \omega) \times \left[\int_0^\infty \xi(\omega, \beta) \beta d\beta \right] d\omega, \quad (1)$$

其中 $\Theta(\omega, T) = \hbar\omega / [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]$ 是普朗克振子在角频率 ω 和局部热平衡温度 T 下的平均能量, $\hbar$ 表示约化普朗克常数, k_B 是玻尔兹曼常数, β 表示波矢的平行分量, β 与真空波矢 k_0 的关系表示电磁波在真空间隙中的模式: ($\beta < k_0$) 表示传播模式, ($\beta > k_0$) 表示倏逝模式, 传输系数 $\xi(\omega, \beta)$ 计算的关键点是确定高温端和低温端的反射系数 R_e 和 R_a [33]:

$$\xi_{\text{prop}}(\omega, \beta) = \sum_{\gamma=s,p} \frac{(1 - |R_e^\gamma|^2)(1 - |R_a^\gamma|^2)}{4|1 - R_e^\gamma R_a^\gamma \exp(2ik_{z0}d)|^2}, \quad (2)$$

$$\xi_{\text{evan}}(\omega, \beta) = \sum_{\gamma=s,p} \frac{\text{Im}(R_e^\gamma) \text{Im}(R_a^\gamma) \exp(-2\text{Im}k_{z0}d)}{|1 - R_e^\gamma R_a^\gamma \exp(2ik_{z0}d)|^2}, \quad (3)$$

其中 $\gamma = s$ 或 $\gamma = p$ 是电磁波的偏振态.

多层结构的反射系数 R_i^γ 是基于界面处的菲涅耳反射系数 $r_{i-1,i}$ 和所有下层的反射系数 R_{i+1}^γ 递归求解所得 [33], 可表示为

$$R_i^\gamma = \frac{r_{i-1,i}^\gamma + R_{i+1}^\gamma e^{2ik_{z,i}t_i}}{1 + r_{i-1,i}^\gamma R_{i+1}^\gamma e^{2ik_{z,i}t_i}}, \quad (4)$$

其中:

$$r_{i-1,i}^s = \frac{k_{z,i-1} - k_{z,i}}{k_{z,i-1} + k_{z,i}}, \quad r_{i-1,i}^p = \frac{\varepsilon_i k_{z,i-1} - \varepsilon_{i-1} k_{z,i}}{\varepsilon_i k_{z,i-1} + \varepsilon_{i-1} k_{z,i}}, \quad (5)$$

式中在真空和材料 i 中垂直于界面的波矢分量分别为 $k_{z0} = \sqrt{k_0^2 - \beta^2}$ 和 $k_{z,i} = \sqrt{k_0^2 \varepsilon_i - \beta^2}$ [34], ε_i 为材料 i 的介电函数.

基底材料 6H-SiC 温度依赖型介电函数可用洛伦兹模型描述为 [35] $\varepsilon_{\text{SiC}}(\omega) = \varepsilon_{\text{SiC},\infty}(\omega^2 - \omega_{\text{LO}}^2 + i\Gamma\omega)/(\omega^2 - \omega_{\text{TO}}^2 + i\Gamma\omega)$, 其中 $\varepsilon_{\text{SiC},\infty} = 6.7 \exp[2.5 \times 10^{-5} \times (T - 300)]$ 是高频常数, $\omega_{\text{LO}} = 1.808 \times 10^{14} - 5.839 \times 10^9 \times (T - 300)$ 是纵向光声子频率, $\omega_{\text{TO}} = 1.480 \times 10^{14} - 5.651 \times 10^9 \times (T - 300)$ 是横向光声子频率, T 为材料温度, $\Gamma = 1.063 \times 10^{12} \text{ rad/s}$ 是室温下的散射率. 由于沿着寻常轴和非寻常轴方向的温度依赖型介电函数非常相似, 因此假设 6H-SiC 各向同性 [6,36]. 图 2(a) 展示了不同温度下 6H-SiC 介电函数的实部 ($\text{Re}(\varepsilon)$) 随角频率的变化曲线, 从该图可看出 6H-SiC 存在负介电函数区间, 这意味着 6H-SiC 具有激发表面声子极化激元的能力, 且温度对其介电函数的影响较小.

单层石墨烯的介电函数可表示为 $\varepsilon_{\text{GR}} = 1 + i\sigma(\omega, T, \mu)/(\Delta\omega\varepsilon_0)$ [37], 其中 ε_0 为真空介电函数, $\Delta = 0.34 \text{ nm}$ 为单层石墨烯厚度, 石墨烯电导率 $\sigma(\omega, T, \mu) = \sigma^{\text{intra}}(\omega, T, \mu) + \sigma^{\text{inter}}(\omega, T, \mu)$ 包括带内和带间电导率 [38]:

$$\sigma^{\text{intra}} = \frac{e^2}{\hbar^2} \frac{2k_B T \log[2 \cosh(\mu/2k_B T)]}{\pi(\omega + i/\tau)}, \quad (6)$$

$$\sigma^{\text{inter}} = \frac{e^2}{4\hbar} \left[G\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) + i \frac{4\hbar\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{G(\xi) - G(\hbar\omega/2)}{(\hbar\omega)^2 - 4\xi^2} d\xi \right], \quad (7)$$

其中 e 表示元电荷电量, $\tau = 10^{-13} \text{ s}$ 是弛豫时间, μ 代表石墨烯化学势, $G(\xi) = \frac{\sinh(\xi/k_B T)}{\cosh(\mu/k_B T) + \cosh(\xi/k_B T)}$. 值得注意的是, 文中石墨烯电导率采用了 Kubo 局域模型, 该模型的适用性已在先前工作中得到验证 [39,40], 其在 $d > 20 \text{ nm}$ 时能准确估计近场辐射热流, 仅在石墨烯表面等离子激元共振频率附近及

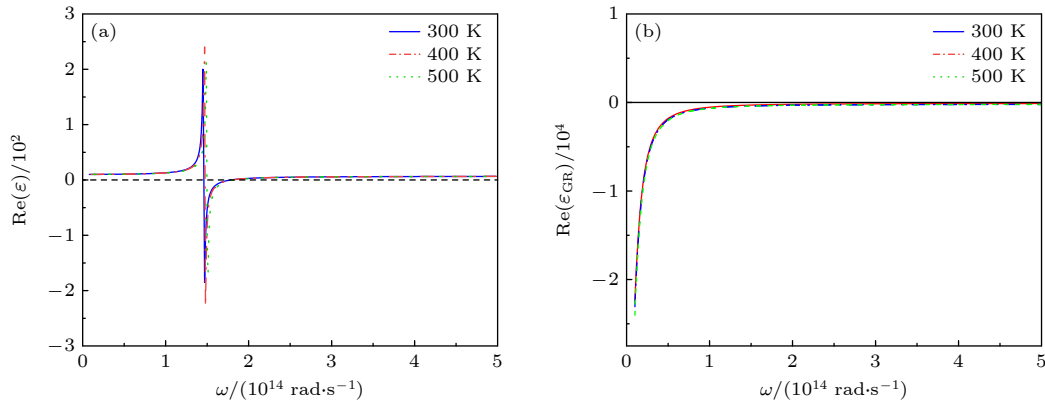


图 2 不同温度下 (a) 碳化硅和 (b) 石墨烯介电函数实部随角频率的变化

Fig. 2. The real part of dielectric functions of (a) SiC and (b) graphene as a function of the angular frequency under different temperatures.

更小间隙 ($d < 20$ nm)时需要引入非局域修正^[41], 图 2(b) 展示了不同温度下单层石墨烯介电函数实部随频率的变化曲线, 图中 $\mu = 0.1$ eV. 从图 2(b) 看出, 在整个频率范围内石墨烯介电函数实部小于零 ($\text{Re}(\epsilon_{\text{GR}}) < 0$), 这表明石墨烯表现出强的金属性质且温度对其影响较弱. 此外, 在中红外和远红外范围内, 带内跃迁可被忽视, 则石墨烯电导率可近似表示为^[42]

$$\sigma_s = \frac{e^2 \mu}{\pi \hbar^2} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau}. \quad (8)$$

3 结果与讨论

本研究构建了石墨烯和 SiC 组成的四种结构: 两端均为裸 SiC 基底 (记为 SiC-SiC); 仅高温端覆盖石墨烯而低温端为裸 SiC (记为 GSiC-SiC); 两端基底均覆盖多层石墨烯 (记为 MGSiC-MGSiC); 两端基底均覆盖单层石墨烯 (记为 GSiC-GSiC).

图 3 展示了不同结构及条件下的光谱热通量随角频率的变化关系. 图 3(a) 为不同高温端温度下的 SiC-SiC 结构; 图 3(b) 为仅高温端覆盖单层石墨烯时, 不同化学势下的 GSiC-SiC 结构; 图 3(c) 为两端均覆盖石墨烯且化学势相同时的 GSiC-GSiC; 图 3(d) 为三种结构的光谱热通量对比, μ_c 和 μ_r 分别为高温端和低温端覆盖石墨烯的化学势. 从图 3(a) 可以看出, 当高温端温度升高, SiC-SiC 结构的光谱热通量显著增大, 这表明温度是影响近场热辐射的关键因素, 高温端热激发直接促进了热通量传输增大. 在单层石墨烯覆盖的 GSiC-SiC 结构中 (图 3(b)), 随着化学势的增大, 光谱热通量的

峰值逐渐下降. 当两端均覆盖石墨烯时 (图 3(c)), 光谱峰分裂为 2 个, 相比图 3(b), 尽管单峰强度下降, 但峰的覆盖区域变宽, 这说明石墨烯化学势的调节可通过改变极化激元特性对光谱热通量的分布形态产生显著影响. 从图 3(d) 可以看出, 当角频率等于 $\omega_{\text{sph}} = 1.78 \times 10^{14} \text{ rad/s}$ 时, SiC-SiC 结构的光谱热通量出现了一个峰值 ($3.18 \times 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s} \cdot \text{rad}^{-1}$), 这是由 SiC 表面声子极化激元 (SPhPs) 耦合引起的. 单层石墨烯覆盖的 GSiC-SiC 结构, ω_{sph} 处的光谱热通量减小为 $3.62 \times 10^5 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s} \cdot \text{rad}^{-1}$, 这是因为石墨烯激发的表面等离子极化激元 (SPPs) 和 SiC 激发的表面声子极化激元 (SPhPs) 频率失配. 对于两端覆盖石墨烯的 GSiC-GSiC 结构, ω_{sph} 处的高窄峰消失, 而在其附近出现两个振幅较小的宽峰, 尽管 ω_{sph} 处光谱热通量值下降, 但宽峰区域使总辐射热通量增大. 图 3 结果表明极化激元的频率匹配对近场热辐射具有显著增强作用 (如 SiC-SiC 结构的 SPhPs 耦合); 非对称覆盖石墨烯导致的极化激元失配, 对近场热辐射的调控效果较弱; 双层覆盖石墨烯时, 多极化激元耦合匹配引起的光谱峰的展宽可有效提升总热通量.

图 4 所示为 SiC-SiC, GSiC-SiC 和 GSiC-GSiC 结构的正向热通量随石墨烯化学势的变化曲线. 当石墨烯化学势在 0.05—0.5 eV 区间时, GSiC-GSiC 结构的热通量始终高于 SiC-SiC 与 GSiC-SiC 结构, 其中 GSiC-SiC 结构的热通量低于 SiC-SiC 结构. 值得注意的是 GSiC-GSiC 结构的热通量随化学势的变化呈现单峰极值, 这是因为石墨烯化学势对其电导率影响显著, 且随着化学势的增大, 光谱

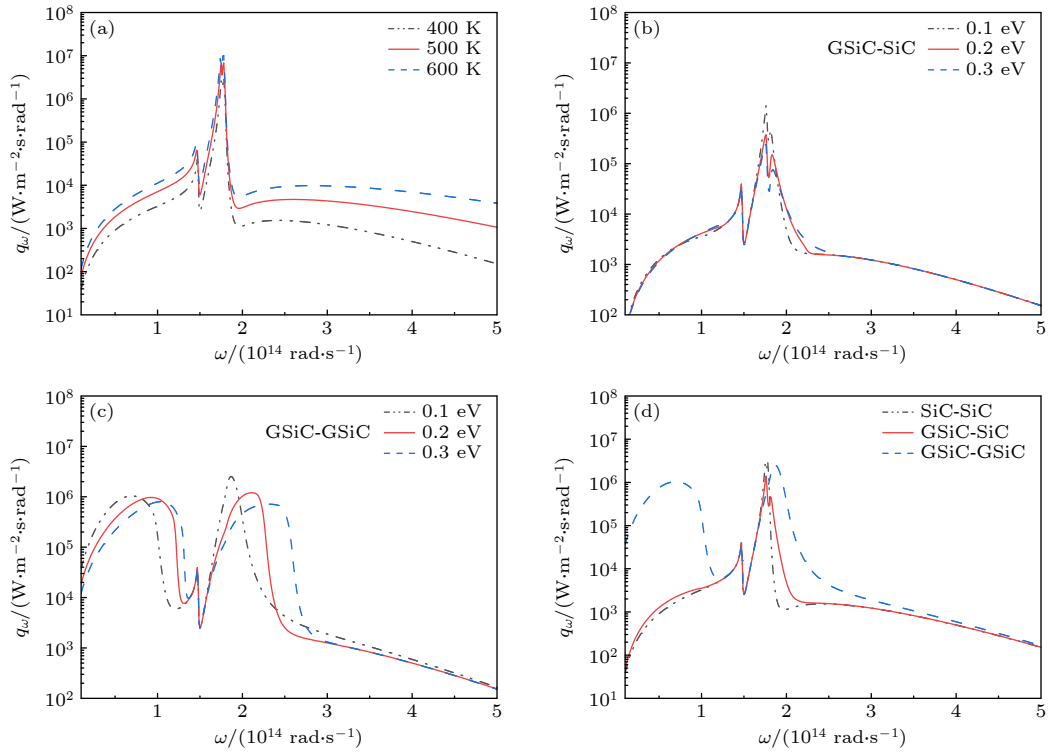


图 3 不同结构及条件下正向光谱热通量随角频率的变化, 其中 $d = 20$ nm (a) SiC-SiC 结构, 高温端温度分别为 400, 500, 600 K (低温端 300 K); (b) 仅高温端覆盖单层石墨烯结构 (GSiC-SiC), 化学势 $\mu = 0.1, 0.2, 0.3$ eV; (c) 两端均覆盖石墨烯且化学势相同 (GSiC-GSiC), 化学势 $\mu_e = \mu_r = 0.1, 0.2, 0.3$ eV; (d) 3 种结构 (SiC-SiC, GSiC-SiC, GSiC-GSiC) 在相同条件 ($T_e = 400$ K, $T_r = 300$ K, $\mu = 0.1$ eV) 下的正向光谱热通量对比

Fig. 3. Forward spectral heat flux versus angular frequency at different structures and conditions, where $d = 20$ nm: (a) SiC-SiC structure with different high temperatures of 400, 500, 600 K (low temperature with 300 K); (b) structure with monolayer graphene only on high-temperature terminal (GSiC-SiC), chemical potentials $\mu = 0.1, 0.2, 0.3$ eV; (c) structure with monolayer graphene on two terminals (GSiC-GSiC), $\mu_e = \mu_r = 0.1, 0.2, 0.3$ eV; (d) comparison of forward spectral heat flux in three different structures (SiC-SiC, GSiC-SiC, GSiC-GSiC) at the same conditions ($T_e = 400$ K, $T_r = 300$ K, $\mu = 0.1$ eV).

热通量峰值逐渐向高频方向移动 (如图 3(c)). 当石墨烯的等离激元与 SiC 的 SPhP 发生耦合, 热通量将迅速上升. 当石墨烯化学势增加到一定值, 石墨烯等离激元频率继续向高频移动, 逐渐偏离 SiC 的 SPhP 共振峰, 这将导致耦合效率下降; 同时石墨烯的损耗 (如电子-声子散射) 增大, 使热通量增长放缓甚至略微降低. 当化学势 $\mu_e = \mu_r = 0.15$ eV 时, 辐射热通量达到最大值 1.03×10^6 W/m², 约为 SiC-SiC 结构热通量 (1.72×10^5 W/m²) 的 6 倍. 而 GSiC-SiC 结构的辐射热通量随化学势的增大呈单调递减趋势. 对于 GSiC-SiC 和 GSiC-GSiC 结构, 随着化学势的增加, 其对热通量的影响逐渐减弱. 当石墨烯的化学势为 0.5 eV 时, SiC-SiC 结构与 GSiC-GSiC 结构的辐射热通量远大于 GSiC-SiC 结构. 上述现象表明, 化学势的升高会削弱不同极化激元之间的耦合强度, 并加剧不同混合共振的光谱失配; 在较小间隙距离下, GSiC-GSiC 结构对辐

射传热的提升更为显著. 图 4 结果表明, 单层石墨烯能够通过调节化学势, 有效调控并显著增强近场辐射热通量, 但随着化学势持续升高会使其调控作用逐渐减弱. 这一结果为利用石墨烯化学势优化近场热辐射性能提供了理论支撑.

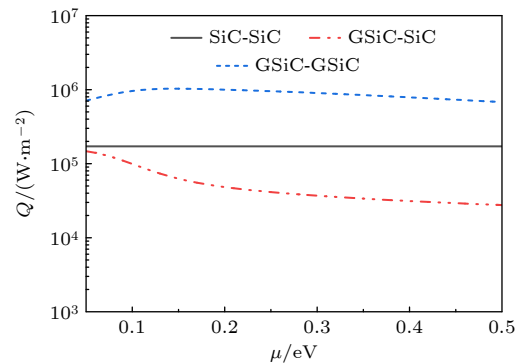


图 4 不同结构的正向热通量随石墨烯化学势的变化曲线, 图中 $d = 20$ nm

Fig. 4. Forward heat fluxes of different structures as function of graphene chemical potential, where $d = 20$ nm.

图5展示了高温端和低温端覆盖相同多层石墨烯结构 (MGSiC-MGSiC) 的正向热通量随间隙距离的变化曲线, 图中对比了 SiC-SiC 结构与不同石墨烯层数 (1—4 层) 覆盖结构的热通量差异. 从图5可看出, 对称多层石墨烯覆盖结构 (MGSiC-MGSiC) 的热通量要明显高于 SiC-SiC 结构. 对于多层石墨烯覆盖结构, 在较大间隙区域, 多层石墨烯覆盖结构具备显著的热通量增强效应, 且热通量随层数增加而提升, 但其增幅随层数增加逐渐趋缓. 例如, 当 $d = 50$ nm 时, 4 层石墨烯覆盖结构的热通量是单层石墨烯覆盖结构热通量的 1.37 倍; 当 $d = 100$ nm 时, 4 层石墨烯覆盖结构是单层石墨烯覆盖结构热通量的 1.64 倍. 图6揭示了间隙距离与层数对近场热辐射的调控作用, 表明多层石墨烯覆盖结构相比 SiC-SiC 结构能产生更高的热通量, 而多层石墨烯覆盖结构在较高间隙距离体现出明显优势.

为揭示多层石墨烯覆盖结构对热通量的影响, 图6展示了不同间隙距离 $d = 20, 50, 100, 200$ nm,

MGSiC-MGSiC 结构的正向光谱热通量随角频率的变化曲线. 单层石墨烯对辐射热通量的增强仅局限于小近场间隙, 因为石墨烯激发的 SPP 在大波矢分量 β . 而随着间隙距离的增大, 热传输发生在小 β 区域. 图6(a)—(d) 所示极值峰发生了分裂,

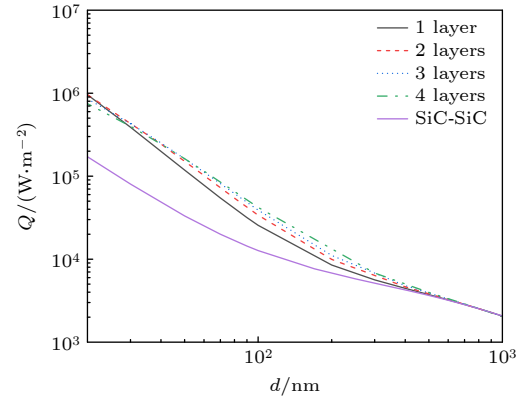


图5 对称多层数石墨烯覆盖结构 (MGSiC-MGSiC) 的正向热通量随着间隙距离的变化曲线, 图中 $\mu = 0.1$ eV

Fig. 5. Forward heat flux of MGSiC-MGSiC structure versus gap distance under different graphene layers, where $\mu = 0.1$ eV.

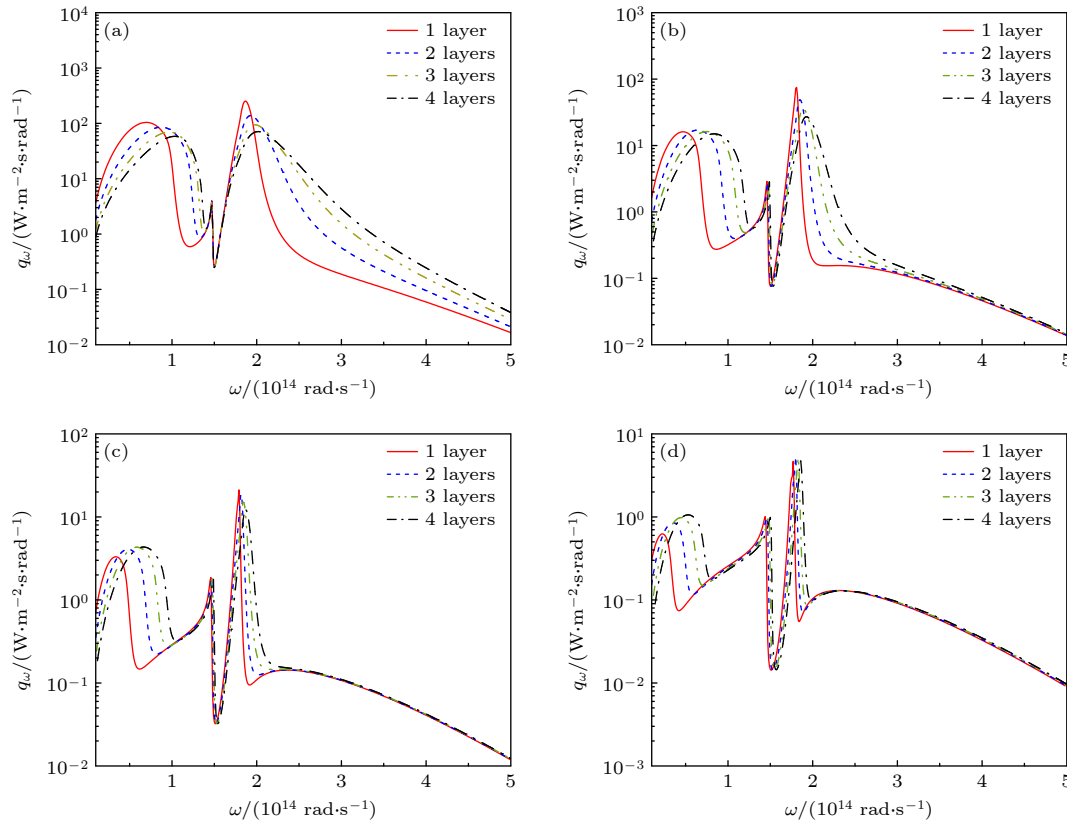


图6 不同间距 (a) $d = 20$ nm, (b) $d = 50$ nm, (c) $d = 100$ nm, (d) $d = 200$ nm 时 MGSiC-MGSiC 结构正向光谱热通量随角频率的变化曲线, 图中 $\mu = 0.1$ eV

Fig. 6. Forward spectral thermal flux of MGSiC-MGSiC structure versus angular frequency for (a) $d = 20$ nm, (b) $d = 50$ nm, (c) $d = 100$ nm, and (d) $d = 200$ nm, where $\mu = 0.1$ eV.

这是因为每层石墨烯的 SPP 之间存在耦合, 导致出现多个 SPP 分支, 在较低的 β 区域也会出现 SPP 分支, 因此, 与较低 β 相关的 SPP 可通过表面模式贡献大量的辐射热通量. 然而层数的增加并不会一直促使辐射热通量增加, 这是因为发射器和接收器之间距离增加和材料损失增大^[27]. 如图 6 所示, 随石墨烯层数的增加, 峰值向高频方向偏移且峰所对应的频率宽度增大, 此外高频所对应峰的幅值随着层数增加而增大. 因此, 在高间隙距离, 多层石墨烯覆盖可以有效增大辐射热通量.

图 7 展示了仅单层石墨烯覆盖时, 不同化学势下 GSiC-SiC 结构的正向热通量 (图 7(a)) 和整流比 (图 7(b)) 随间隙距离的变化曲线, 其中虚线代表温度相关介电函数, 实线表示温度无关介电函数. 从图 7(a) 可以看出, 当间隙距离高于 300 nm (即 $d > 300$ nm) 时, 不同化学势的 GSiC-SiC 结构

和 SiC-SiC 结构的热通量趋于一致. 此外, 随着石墨烯化学势和间隙距离的增大, 基于温度相关 (虚线) 与温度无关 (实线) 的介电函数产生的辐射热通量差异减小, 这说明温度相关介电函数的调制作用在小间隙距离或低化学势下更为显著. 从图 7(b) 可以看出, 不同化学势条件下, GSiC-SiC 结构的整流比随间隙距离的增大均表现出单峰极值, 且化学势越小, 极大值越高. 例如, 当 $\mu = 0.1$ eV 且 $d = 30$ nm 时, 整流比最大值为 0.155. 图 7 表明, 较小的间隙距离 ($d < 300$ nm), 即近场效应, 是提升整流比的关键因素, 此时极化激元强耦合主导热传输, 较小的化学势 (如 $\mu < 0.3$ eV) 有利于维持高整流比.

图 8 展示了高温端多层石墨烯覆盖与低温端无石墨烯覆盖结构 (MGSiC-SiC) 的热通量和整流比随间隙距离的变化曲线. 从图 8(a) 可以看出,

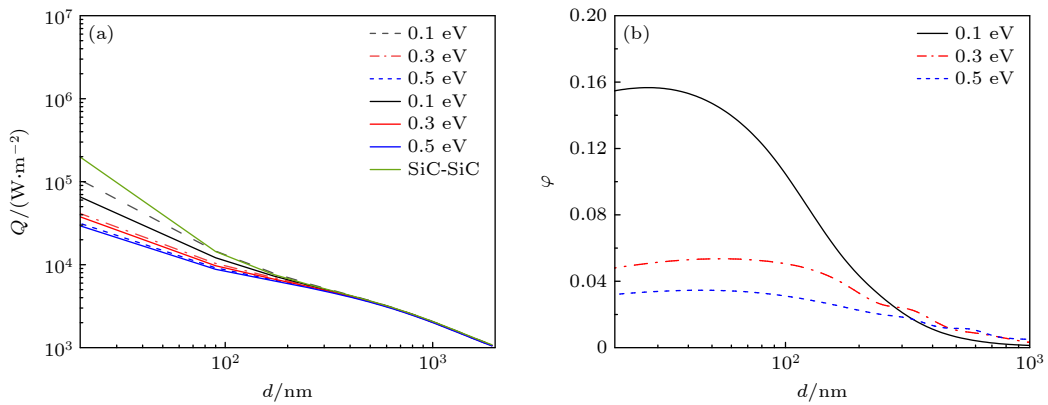


图 7 单层石墨烯覆盖下不同化学势 GSiC-SiC 结构的 (a) 正向热通量和 (b) 整流比随间隙距离的变化曲线

Fig. 7. (a) Forward heat flux and (b) rectification ratio of GSiC-SiC structure with monolayer graphene coverage as function of gap distance for different graphene chemical potentials.

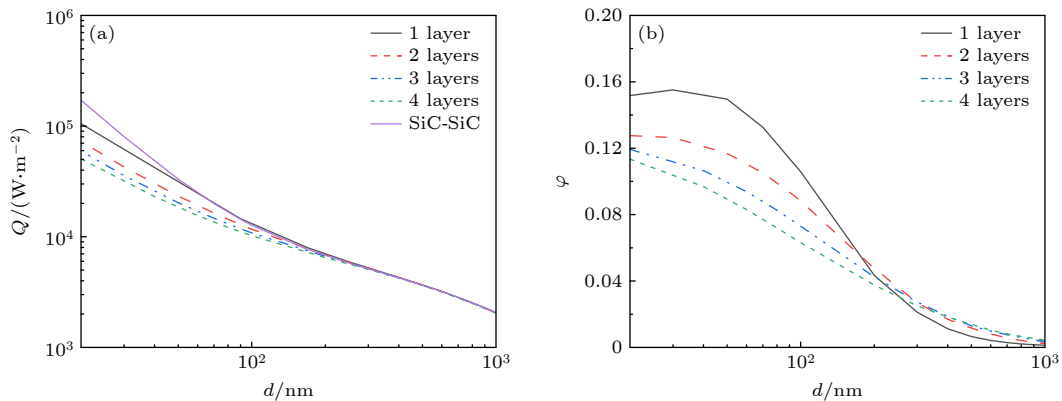


图 8 高温端多层石墨烯覆盖与低温端无石墨烯覆盖结构 (MGSiC-SiC) 的 (a) 正向热通量和 (b) 整流比随间隙距离的变化曲线, 图中 $\mu = 0.1$ eV

Fig. 8. (a) Forward heat flux and (b) rectification ratio of MGSiC-SiC structure with multilayer graphene-covered high-temperature terminal and no graphene-covered low-temperature terminal as function of gap distance, where $\mu = 0.1$ eV.

随着高温端石墨烯覆盖层数的增加 (1—4 层), 热通量呈现单调递减趋势. 此外, 当间隙距离高于 300 nm (即, $d > 300$ nm) 时, 高温端不同石墨烯覆盖层数的 MGSiC-SiC 结构和 SiC-SiC 结构的热通量趋于一致. 从图 8(b) 可以看出, 在小间隙距离区域 ($d < 300$ nm), 石墨烯层数的增加会抑制其整流性能的提升, 高温端单层石墨烯覆盖与低温端无石墨烯覆盖结构 (GSiC-SiC) 的整流比随间隙距离的增加出现极大值, 且在 $d = 30$ nm 时, 整流比最大值达到 0.155, 随着间隙距离的增大, 4 种结构 (GSiC-SiC, 2GSiC-SiC, 3GSiC-SiC, 4GSiC-SiC) 整流比趋近于 0.

图 7 和图 8 分析了 GSiC-SiC 结构的热通量与整流比, 为进一步分析非对称结构的性能, 图 9 展示了高温端覆盖多层石墨烯与低温端覆盖单层石墨烯结构 (MGSiC-GSiC) 的热通量和整流比随真空间隙距离的变化曲线, 图中对比了高温端不同石墨烯层数 (1—4 层) 对辐射热通量的调控效果. 从图 9(a) 可以看出, 随着石墨烯层数的增加 (1—4 层), 热通量呈现单调递减趋势. 例如, 当间隙距离 $d = 20$ nm, 高温端单层石墨烯覆盖与低温端单层石墨烯覆盖结构 (GSiC-GSiC) 的热通量是高温端 4 层石墨烯覆盖与低温端单层石墨烯覆盖结构 (4GSiC-GSiC) 的热通量的 5.4 倍. 当 $d = 300$ nm 时, 不同层数结构的热通量趋于一致, 表明在较大间隙距离区域, 石墨烯层数对热通量的调控作用显著减弱. 从图 9(b) 可以看出, 随着间距的增大, 整流比呈现先增大后减小的趋势. 当 $d < 50$ nm 时, 高温端 2 层、3 层和 4 层石墨烯覆盖结构的热整流

比均为负 ($Q_r > Q_f$), 因为多层石墨烯覆盖结构的热通量优势, 仅在较大间隙距离下得以体现 (如图 5 和图 6 所示). 当 $d = 100$ nm, 整流比达到最大值, 其中 3GSiC-GSiC 结构的整流比为 0.035, 为 4 种结构 (GSiC-GSiC, 2GSiC-GSiC, 3GSiC-GSiC, 4GSiC-GSiC) 中的最优值. 此外, 随着间隙距离的增大, 整流比趋近于 0, 热通量方向对称性恢复.

为说明图 9(b) 中小间隙距离下负整流比现象, 图 10 所示为间隙距离 (a) $d = 20$ nm 和 (b) $d = 100$ nm 下高温端 3 层石墨烯覆盖和低温端 1 层石墨烯覆盖结构 (3GSiC-GSiC) 正向和反向光谱热通量随角频率的变化曲线. 从图 10(a) 看出, 正向光谱热通量略低于反向光谱热通量, 特别是在高频区域尤为明显, 这导致在较低间隙距离正向热通量低于反向热通量. 图 10(b) 所示在较大间隙距离, 正向光谱热通量高于反向光谱热通量, 这在高频区域也表现得尤为明显, 导致正向热通量高于反向热通量.

相对于裸 SiC-SiC 结构, 在较低间隙距离 ($d < 300$ nm), 石墨烯覆盖 SiC 对称结构 (GSiC-GSiC, MGSiC-MGSiC) 均可有效提升辐射热通量, 石墨烯化学势调控存在最佳值, 当间隙距离处在 50—500 nm 之间, 随着层数增加热通量增大, 但随着层数增加提升效果减缓; 对于非对称结构 (GSiC-SiC, MGSiC-SiC, MGSiC-GSiC), 在较低间隙距离 ($d < 300$ nm), 提高化学势或增加层数都不利于辐射热通量的提升, 在高间隙距离 ($d > 300$ nm), 石墨烯化学势和层数对热通量的调控效果趋于零; 对于 MGSiC-SiC 结构, 降低化学势 (0.5, 0.3, 0.1 eV)

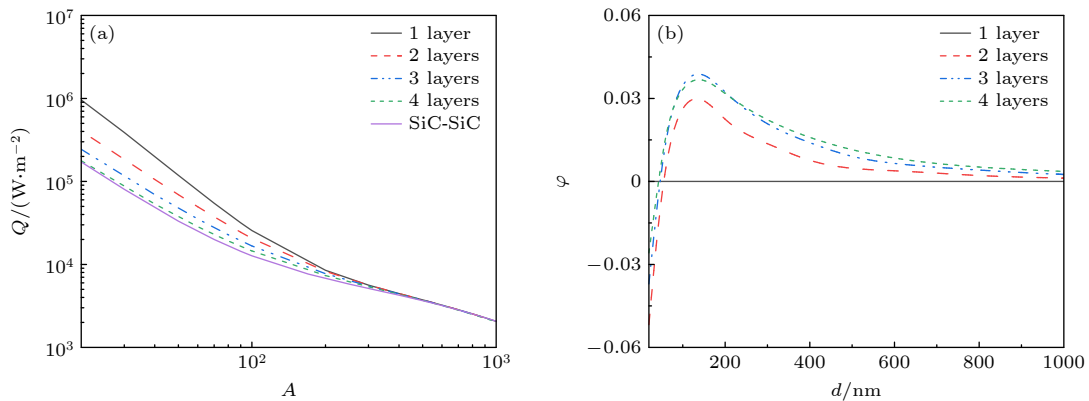


图 9 高温端覆盖多层石墨烯与低温端覆盖单层石墨烯结构 (MGSiC-GSiC) 的 (a) 热通量和 (b) 整流比随真空间隙距离的变化曲线, 图中 $\mu = 0.1$ eV

Fig. 9. (a) Heat flux and (b) rectification ratio of MGSiC-GSiC structure with multilayer graphene-covered high-temperature terminal and monolayer graphene-covered low-temperature terminal as function of gap distance, where $\mu = 0.1$ eV.

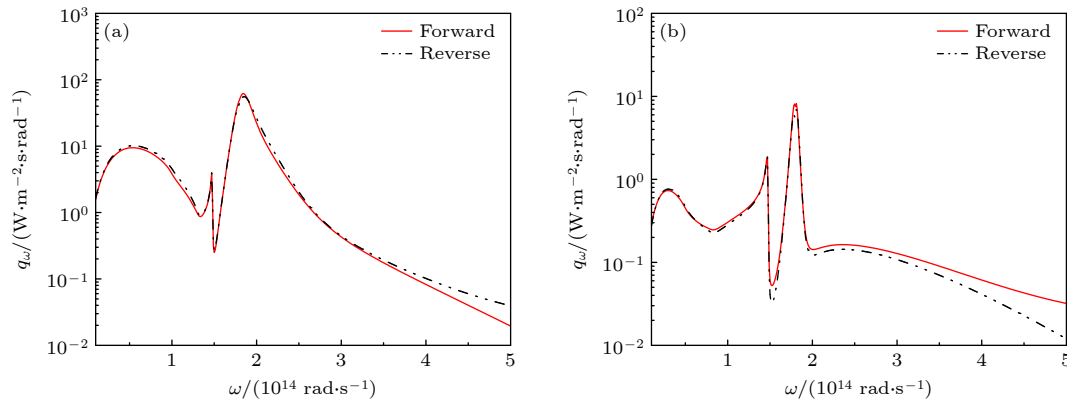


图 10 不同间距 (a) $d = 20$ nm 和 (b) $d = 100$ nm 下 3GSiC-GSiC 结构正向和反向光谱热通量随角频率的变化曲线, 图中 $\mu = 0.1$ eV

Fig. 10. Forward and reverse spectral heat fluxes of 3GSiC-GSiC structure as function of angular frequency for (a) $d = 20$ nm (b) $d = 100$ nm, where $\mu = 0.1$ eV.

和减少层数 (4—1 层) 可有效增加热整流比. 计算表明, 当石墨烯覆盖层数为 1 层, 化学势为 0.1 eV, 间隙距离为 30 nm, MGSiC-SiC 结构的热整流比为 0.155. 对于 MGSiC-GSiC 结构, 随着石墨烯覆盖层数的增加 (1—4 层), 当石墨烯覆盖层数为 3 层化学势为 0.1 eV 时, 热整流比达到最大值 0.035. 可以看到化学势调控获得的热整流比略高于层数调控获得的热整流比, 且化学势调控比层数调控精细. 值得注意的是, 对于非对称结构 (GSiC-SiC, MGSiC-SiC, MGSiC-GSiC), 最大整流比均出现在近场区域.

4 结 论

本文构建了多种对称/非对称多层石墨烯覆盖碳化硅基底所组成的近场热二极管结构, 探索了石墨烯层数、化学势和间隙距离对辐射热通量和整流比的影响规律.

1) 极化激元的频率匹配对辐射热通量具有显著增强作用 (如 SiC-SiC 结构的 SPhPs 耦合); 非对称石墨烯覆盖导致的极化激元失配, 对辐射热通量的调控效果减弱; 对称石墨烯覆盖导致的多极化激元耦合匹配引起光谱峰的展宽可有效提升总热通量.

2) 非对称石墨烯覆盖结构的近场热二极管整流比随间隙距离的增加呈现单峰极大值, 且较小的化学势有利于获得高热整流比. 当 $\mu = 0.1$ eV 和 $d = 30$ nm 时, GSiC-SiC 结构整流比最大值为 0.155. 近场效应 ($d < 300$ nm) 和较小的化学势 (如 $\mu < 0.3$ eV) 有利于获得高整流比.

3) 在较小间隙距离 ($d < 300$ nm), 对称单层和多层石墨烯覆盖结构的热通量要明显高于 SiC-SiC 结构产生的热通量. 在对称多层石墨烯覆盖结构中, 在 50—500 nm 的间隙区域, 多层石墨烯覆盖结构的热通量增强优势明显, 层数越多热通量越高, 但增幅随层数增加逐渐减缓.

4) 在非对称多层石墨烯覆盖结构中, 间隙距离存在阈值 ($d < 300$ nm) 使得石墨烯化学势和层数可以有效调控热通量. MGSiC-GSiC 结构在间隙距离为 100 nm, 化学势为 0.1 eV 和 3 层石墨烯覆盖时, 最大整流比为 0.035; MGSiC-SiC 结构在间隙距离为 30 nm, 化学势为 0.1 eV 和 1 层覆盖时, 最大整流比为 0.155, 且随着层数增加整流比显著降低.

参考文献

- [1] Tian P, Li S S, Gao L, Xu Y D 2024 *Acs Photonics* **11** 1271
- [2] Liu Y, Pan D, Chen W, Wang W Q, Shen H, Xu H X 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 036501 (in Chinese) [刘扬, 潘登, 陈文, 王文强, 沈昊, 徐红星 2020 *物理学报* **69** 036501]
- [3] Liu H T, Hu Y, Ai Q, Xie M, Wu X H 2022 *J. Appl. Phys.* **132** 175105
- [4] Moncada-Villa E, Cuevas J C 2021 *Phys. Rev. Lett.* **15** 024036
- [5] Shi K Z, Chen Z Y, Xing Y X, Yang J X, Xu X N, Evans J S, He S L 2022 *Nano Lett.* **22** 7753
- [6] Liu R Y, Liu H T, Hu Y, Cui Z, Wu X H 2024 *Chin. Phys. B* **33** 044403
- [7] Ott A, Hu Y, Wu X H, Biehs S A 2021 *Phys. Rev. Appl.* **15** 064073
- [8] Yang X, Li J, Mao Y, Tao K A, Sun K, Chen S S, Zhou Y L, Zheng Y J 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 058301 (in Chinese) [杨旭, 李静, 毛宇, 陶可爱, 孙宽, 陈珊珊, 周永利, 郑玉杰 2024 *物理学报* **73** 058301]

- [9] Odebowale A A , As' Ham K, Berhe A M, Alim N, Hattori H T, Miroschnichenko A E 2024 *Int. Commun. Heat Mass* **157** 107707
- [10] Chen B S, Hu Y, Jiang L Y, Wu X H 2026 *Acta Phys. Sin.* **75** 070401 (in Chinese) [陈博森, 胡奕, 蒋乐勇, 吴小虎 2026 物理学报 **75** 070401]
- [11] Otey L, Fan S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 154301
- [12] Elzouka M, Ndao S 2017 *Sci. Rep.* **7** 44901
- [13] Ghashami M, Jarzembki A, Lim M, Lee B J, Park K 2020 *Annu. Rev. Heat Transfer* **23** 13
- [14] Zhang W B, Wang B X, Jin S H, Zhou J H, Gong Z, Zhao C Y 2024 *Adv. Mater.* **36** 2405885
- [15] Wang C Y, Feng X B, Yang X, Shen Y N, Zhao H B, Bai Y, Chen H S, Zhang T, Zheng X H 2025 *Renew Sust. Energ. Rev.* **218** 115836
- [16] Chen F Q, Liu X J, Tian Y P, Liu Y, Zheng Y 2021 *Appl. Phys. Lett.* **119** 221107
- [17] Latella I, Ben-Abdallah P, Nikbakht M 2021 *Phys. Rev. B* **104** 045410
- [18] Moncada-Villa E, Cuevas J C 2021 *Phys. Rev. Appl.* **15** 024036
- [19] Xu G D, Sun J, Mao H M, Pan T 2018 *J Quant. Spectrosc. RA* **220** 140
- [20] Landrieux S, Ben-Abdallah P, Messina R 2022 *Appl. Phys. Lett.* **120** 143502
- [21] Ott A, Messina R, Ben-Abdallah P, Biehs S A 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 163105
- [22] Low T, Avouris P 2014 *Acs Nano* **8** 1086
- [23] Wen E C H, Jacobse P H, Jiang J, Wang Z, Louie S G, Crommie M F, Fischer F R 2023 *J. Am. Chem. Soc* **145** 19338
- [24] Jadidi M M, KoNig-Otto J C, Winnerl S, Sushkov a B, Drew H D, Murphy T E, Mittendorff M 2016 *Nano Lett.* **16** 2734
- [25] Xing Q X, Song C Y, Wang C, Xie Y G, Huang S Y, Wang F J, Lei Y C, Yuan X, Zhang C, Mu L, Huang Y, Xiu F X, Yan H G 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 147401
- [26] Zheng Z H, Liu X L, Wang A, Xuan Y M 2017 *Int. J Heat. Mass. Tran.* **109** 63
- [27] Lim M, Lee S S, Lee B J 2017 *J Quant. Spectrosc. Ra.* **197** 84
- [28] Yang J 2018 *Master Thesis* (Hangzhou: Zhejiang University) (in Chinese) [杨将 2018 硕士学位论文 (杭州: 浙江大学)]
- [29] He M J 2021 *Doctoral Dissertation* (Harbin: Harbin Institute of Technology) (in Chinese) [何明键 2021 博士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学)]
- [30] Deng Y, Shi K Z, Bao F L, Antezza M, Evans J, He S L 2024 *Adv. Opt. Mater.* **12** 2401633
- [31] Zhang K, Zhang B, Luo Z X, Song J L, Cheng Q 2025 *Int. J. Heat Mass Tran.* **236** 126288
- [32] Zhang J Y, Hao Y, Xiong B W, Su S H, Yang Z M 2025 *Chin. Phys. B* **34** 094402
- [33] Yu H T, Liu D, Duan Y Y, Yang Z 2018 *J. Quant. Spectrosc. Ra.* **217** 235
- [34] Francoeur M, Mengü M P, Vaillon R 2010 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43** 075501
- [35] Olego D, Cardona M, Vogl P 1982 *Phys. Rev. B* **25** 3878
- [36] Habibzadeh M, Lin H, Edalatpour S 2023 *J Quant. Spectrosc. RA* **307** 108662
- [37] Lim M, Lee S S, Lee B J 2013 *Opt. Express* **21** 22173
- [38] Messina R, Hugonin J P, Greffet J J, Marquier F, Wilde Y D, Belarouci A, Frechette L, Cordier Y, Ben-Abdallah P 2013 *Phys. Rev. B* **87** 085421
- [39] Shi K Z, Sun Y C, Chen Z Y, He N, Bao F L, Evans J, He S L 2019 *Nano Lett.* **19** 8082
- [40] Song J L, Yao X J, Jin L, Chen L, Zhao H L, Cheng Q 2024 *Sci. China Technol. Sci.* **67** 3405
- [41] Zare S, Zeinali Tajani B, Edalatpour S 2022 *Phys. Rev. B* **105** 125416
- [42] Wu X H, Liu R Y 2020 *ES Energy Environ.* **10** 66

Synergistic modulation of graphene numbers and chemical potentials for heat flux and rectification effects in near-field thermal diodes^{*}

ZHANG Jiayao¹⁾ HAO Yu¹⁾ GUO Yongxin¹⁾ HE Zhihui¹⁾²⁾³⁾
 SU Shanhe⁴⁾ YANG Zhimin^{1)2)3)†}

1) (*School of Physics and Electronic Information, Yan'an University, Yan'an 716000, China*)

2) (*Shaanxi Key Laboratory of Advanced Optoelectronic Materials and Devices, Yan'an University, Yan'an 716000, China*)

3) (*Shaanxi Key Laboratory of Intelligent Processing for Big Energy Data, Yan'an University, Yan'an 716000, China*)

4) (*Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361000, China*)

(Received 12 February 2026; revised manuscript received 15 April 2026)

Abstract

Graphene exhibits great potential in near-field thermal radiation regulation due to its tunable electronic properties and ability to support polariton excitation. In this work, symmetric and asymmetric near-field thermal diode models composed of multilayer graphene-covered silicon carbide (SiC) substrates are constructed, and the synergistic regulation of graphene layer number, chemical potential, and gap distance on the radiative heat flux and rectification ratio is systematically investigated. The results show that the modulation effect of graphene chemical potential and layer number on the heat flux strongly depends on the gap distance. Compared with the structure without graphene coating (SiC-SiC) and the asymmetric graphene-covered structure (GSiC-SiC), the symmetric monolayer and multilayer graphene-covered structures (MGSiC-MGSiC) significantly enhance the radiative heat flux at small gap distances ($d < 300$ nm), and heat flux presents a peak as the chemical potential rises. In the gap distance range of 50–500 nm, the radiative heat flux increases with the graphene layer number, but the enhancement gradually slows down as the layer number further increases. For asymmetric graphene-covered structures (GSiC-SiC, MGSiC-SiC, MGSiC-GSiC), increasing the chemical potential or the layer number is detrimental to the enhancement of the radiative heat flux at small gap distance ($d < 300$ nm); at large gap distance ($d > 300$ nm), the modulation effect of graphene chemical potential and layer number on the heat flux tends to zero. For the asymmetric graphene-covered structure (MGSiC-SiC), reducing the chemical potential (0.5, 0.3, 0.1 eV) and decreasing the layer number (from 4 to 1) effectively improve the thermal rectification ratio. Numerical calculations show that when the graphene layer number, chemical potential and gap distance are 1, 0.1 eV, and 30 nm, respectively, the rectification ratio of the MGSiC-SiC structure reaches 0.155. For the MGSiC-GSiC structure, as the layer number increases from 1 to 4, the maximum rectification ratio of 0.035 is achieved at 3 layers, 100 nm and a chemical potential of 0.1 eV. For all asymmetric structures (GSiC-SiC, MGSiC-SiC, MGSiC-GSiC), the maximum rectification ratios appear in the near-field region. These results indicate that a smaller gap distance, lower chemical potential, and fewer graphene layers are favorable for achieving superior thermal rectification performance in asymmetric graphene-covered structures. This study reveals the synergistic regulation mechanism among graphene layer number, chemical potential, and near-field effects, providing theoretical guidance for the design of high-performance near-field thermal rectifiers.

Keywords: near-field thermal radiation, thermal diode, graphene, rectification effect, synergistic modulation

DOI: [10.7498/aps.75.20260241](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260241)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260241](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260241)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12364008), the Key Scientific Research Program (Key Laboratory Program) of the Shaanxi Provincial Department of Education, China (Grant No. 25JS138), and the Research Start-up Funding for Ph.D by Yan'an University, China (Grant No. YDBK2019-54).

[†] Corresponding author. E-mail: yzm@yau.edu.cn

石墨烯层数及化学势对近场热二极管热通量与整流效应的协同调控

张佳瑶 郝雨 郭永鑫 何智慧 苏山河 杨智敏

Synergistic modulation of graphene numbers and chemical potentials for heat flux and rectification effects in near-field thermal diodes

ZHANG Jiayao HAO Yu GUO Yongxin HE Zhihui SU Shanhe YANG Zhimin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 140706 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260241

CSTR: 32037.14.aps.75.20260241

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260241>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于六水氯化钙的单相变材料热二极管的实验研究

Experimental study of single-phase change material thermal diode based on calcium chloride hexahydrate

物理学报. 2024, 73(5): 058301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231686>

一维异质结构的瞬态热整流效应

Transient thermal rectification effect of one-dimensional heterostructure

物理学报. 2023, 72(4): 044401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222085>

石墨烯的形貌特征对其场发射性能的影响

Influence of morphological characteristics of graphene on its field emission properties

物理学报. 2024, 73(8): 086101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231784>

石墨烯狄拉克等离激元调控的第一性原理研究

First-principles study of modulation of graphene Dirac plasmons

物理学报. 2025, 74(21): 217101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250913>

石墨烯过渡层对金属/SiC接触肖特基势垒调控的第一性原理研究

First principle study on modulating of Schottky barrier at metal/4H-SiC interface by graphene intercalation

物理学报. 2022, 71(5): 058102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211796>

氮化镓/石墨烯/金刚石异质界面热输运调控研究

Thermal transport regulation at GaN/graphene/diamond heterojunction interfaces

物理学报. 2025, 74(21): 058102 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250895>