

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫХ ПРИБОРАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГРАФЕНА И ЕГО МОДИФИКАЦИЙ

В.В. Муравьев, В.Н. Мищенко

Рассмотрены вопросы моделирования процессов переноса носителей заряда в гетероструктурных приборах с использованием графена и его модификаций. Высокое значение подвижности электронов, высокая теплопроводность и ряд других положительных свойств делают графен перспективным материалом для использования в полупроводниковых приборах и микросхемах. Однако прямое использование графена в конструкциях полевых транзисторов и других приборов затруднено из-за ряда особенностей этого материала, главной из которых является отсутствие зазора между зоной проводимости и валентной зоной, что не позволяет реализовать эффективное переключение такого рода структур и способствует появлению ряда других отрицательных свойств. Для устранения отмеченных недостатков графена используется ряд способов коррекции его свойств, главные из которых заключаются в формировании гетероструктур, а также в создании модифицированных графеновых структур, когда в слой графена добавляются атомы других химических элементов, например, атомы водорода, фтора и т.д. Для анализа новых гетероструктурных приборов с использованием графена и атомов водорода и фтора выполнено моделирование их свойств из первых принципов (*ab-initio*) с применением программного комплекса Quantum Espresso. При моделировании в рамках теории функционала электронной плотности с использованием обменно-корреляционных функционалов вида PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) были получены значения основных электрофизических параметров исследуемых структур. Применение отмеченного подхода позволит создать полупроводниковые приборы с регулируемым зазором между зоной проводимости

и валентной зоной и соответственно с более высокими коммутационными и выходными характеристиками. Реализация гетероструктурных приборов с использованием графена и его модификаций позволит получить новые устройства, которые найдут широкое применение в системах приема, усиления и обработки сигналов в диапазонах СВЧ и КВЧ.