

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ
ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ГРАФЕНЕ,
МОДИФИЦИРОВАННОМ АТОМАМИ ВОДОРОДА**

В.Н. Мищенко, П.А. Матусевич, А.Д. Митрофанов, И.С. Сурвило

*Учреждение образования «Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники», Минск, Беларусь*

Приведены результаты моделирования из первых принципов транспортных свойств носителей заряда в графене модифицированном атомами водорода. Разработка новых полупроводниковых приборов требует исследования свойств новых материалов и графен является одним из таких материалов, которые привлекают интерес исследователей. Графен с добавлением атомов ряда других химических элементов, в том числе и водорода, позволяет создавать его химические модификации, обладающими новыми свойствами и характеристиками. Было выполнено моделирование из первых принципов параметров и характеристик гидрированного графена типа C_2H_2 , который в литературе получил название графан. При моделировании были использованы программные комплексы Quantum Espresso и EPW, используя параметризацию PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) и обобщенное градиентное приближение вида GGA. Для расчета зависимостей скорости и подвижности носителей заряда от величины энергии был использован программный комплекс EPW. Для установления зависимостей величин скорости и подвижности носителей заряда от величины параметров моделирования их значения выбирались из специальных диапазонов. Так размер сеток вида $N \times N \times 1$ для при процедурах интерполяции определялся значением параметра N , величина которого изменялась в пределах от 120 до 300. Величина коэффициента сглаживания по Гауссу принималась равной 0,001 эВ. Количество функций Ванье (Wannier) при операциях интерполирования принималось равным величине 12. Путем итерационного решения транспортного уравнения Больцмана определены зависимости скорости и подвижности носителей заряда от величины температуры и ряда других параметров. Полученные зависимости и параметры гидрированного графена могут служить основой для создания новых гетероструктурных приборов, содержащих слои

модифицированного графена и других полупроводниковых материалов. Совершенствование технологии формирования гетероструктурных приборов с использованием графена и его модификаций позволит получить новые устройства и структуры, которые найдут широкое применение в системах передачи и обработки сигналов диапазонов сантиметровых и миллиметровых волн.