

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ГРАФЕНЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ АТОМАМИ ФТОРА

В.Н. Мищенко, А.Д. Васютич, П.А. Матусевич, А.В. Турло

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

Аннотация. Графен, обладающий высокой подвижностью носителей заряда, которая превышает подвижность носителей заряда для всех известных материалов, рассматривается в настоящее время как один из наиболее перспективных материалов для создания новых полупроводниковых приборов. Приведены результаты моделирования интенсивностей рассеивания электронов на акустических и оптических фононах в слое графена, который модифицирован атомами фтора, без учета воздействия подложки. При моделировании этих интенсивностей рассмотрен вариант одновременного протекания процессов излучения и поглощения фононов. Полученные зависимости интенсивностей рассеивания носителей заряда позволят путем моделирования с использованием метода Монте Карло исследовать основные характеристики переноса носителей заряда в полупроводниковых структурах, содержащих слои модифицированного графена. Полученные в результате моделирования характеристики и параметры рассмотренного соединения могут быть использованы для создания новых гетероструктурных приборов, обладающих улучшенными выходными характеристиками.

Ключевые слова: графен; фтор; фонон; моделирование; полупроводниковая структура.

STUDY OF ELECTRON-PHONON INTERACTION IN GRAPHENE MODIFIED BY FLUORINE ATOMS

V.N. Mishchanka, A.D. Vasiutich, P.A. Matusevich, A.V. Turlo

*Educational Institution "Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics",
Minsk, Belarus*

Abstract. Graphene, which has a high mobility of charge carriers, which exceeds the mobility of charge carriers for all known materials, is currently considered as one of the most promising materials for the creation of new semiconductor devices. The results of modelling of electron scattering intensities on acoustic and optical phonons in a layer of graphene, which is modified by fluorine atoms, without taking into account the influence of the substrate, are presented. When modelling these intensities, a variant of simultaneous emission and absorption of phonons is considered. The obtained dependences of the charge carrier scattering intensities will allow us to investigate the main characteristics of the charge carrier transfer in semiconductor structures containing layers of modified graphene by means of Monte Carlo simulations. The characteristics and parameters of the considered compound obtained as a result of modelling can be used to create new hetero-structural devices with improved output characteristics.

Keywords: graphene; fluorine; phonon; modelling; semiconductor structure.

Введение

Графен является перспективным материалом для разработки новых полупроводниковых приборов и структур [1, 2]. Исследование процессов переноса носителей заряда для полупроводниковых соединений, содержащих слои графена, является актуальной задачей, которая связана с разработкой быстродействующих и мощных приборов диапазонов СВЧ и КВЧ, а также оптического диапазона частот. Для анализа полупроводниковых структур широкое применение находит использование статистического метода Монте Карло. Одной из основных особенностей этого метода является то, что он позволяет учесть процессы рассеяния носителей заряда в полупроводнике и исследовать работу полупроводниковых приборов в разных условиях функционирования. В полупроводниковых структурах важное место занимают процессы электронно-фононного взаимодействия (ЭФВ), среди которых основную роль занимают процессы рассеивания электронов на оптических и акустических фононах [3, 4]. В данной работе проведено *ab initio* исследование свойств ЭФВ, связанного с рассеиванием электронов на оптических и акустических фононах в графене, модифицированным атомами фтора. Полученные результаты моделирования позволяют определить вклад различных составляющих ЭФВ в общем процессе рассеивания носителей заряда.

Метод и результаты моделирования интенсивностей электрон-фононных взаимодействий в графене, модифицированным атомами фтора

Моделирование из первых принципов было выполнено с помощью программных комплексов Quantum Espresso [5] и EPW [6], используя параметризацию Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) в рамках приближения локальной плотности (LDA). Программный комплекс Quantum Espresso позволяет выполнить самосогласованное энергетическое моделирование и расчет электронно-фононных динамических матриц. При моделировании в программном комплексе Quantum Espresso были использованы псевдопотенциалы вида Norm-conserving и следующие параметры моделирования: энергия отсечки волновой функции составляла величину 60 Ry (1 Ry $\approx$ 13,605 эВ), энергия отсечки плотности заряда и потенциалов - 240 Ry. Зона Бриллюэна (BZ) была представлена с помощью сетки Монкхорста-Пака размером 12 x 12 x 1 [7]. Для устранения возможных паразитных осцилляций энергии при выполнении моделирования к рассматриваемой структуре добавлялся слой вакуума толщиной 20 Å (1 Å = $1 \cdot 10^{-10}$ м).

Для моделирования интенсивностей (скоростей) электронно-фононного взаимодействия был использован программный комплекс EPW [6].

Дисперсионные фононные зависимости графена, модифицированного атомами фтора, рассматриваются для мод вида ZA, TA, LA, ZO, TO, LO, LB, TB, LB*, TB*, ZS, ZS* [8]. Результаты моделирования интенсивностей рассеивания для мод LA (продольное направление и взаимодействие с акустическими фононами) и LO (продольное направление и взаимодействие с оптическими фононами) от энергии, полученные в программе EPW, представлены на рис. 1-2 в виде массивов цветных точек. Полученные массивы точечных данных были далее подвергнуты аппроксимации с помощью аналитических степенных функций в программе для обработки данных и построения графиков ORIGIN при выполнении операций Fitting и Polynomial Fit в разделе Analysis [9].

При выполнении этих операций в программе ORIGIN обеспечивается получение аналитических зависимостей при минимальной величине ошибок при аппроксимации. Была выполнена аппроксимация данных моделирования из первых принципов для мод LA и LO для интенсивностей рассеивания τ^{-1} , имеющих размерность s^{-1} , от величины энергии E , имеющей размерность eV. Используя полученные аналитические зависимости, были построены кривые 1, представленные на рис. 1, 2. Использование аналитических зависимостей дает возможность выполнить сравнительный анализ поведения интенсивностей рассеивания для перечисленных выше мод и применить эти данные для программного комплекса, который использует метод Монте-Карло, при анализе полупроводниковых приборов.

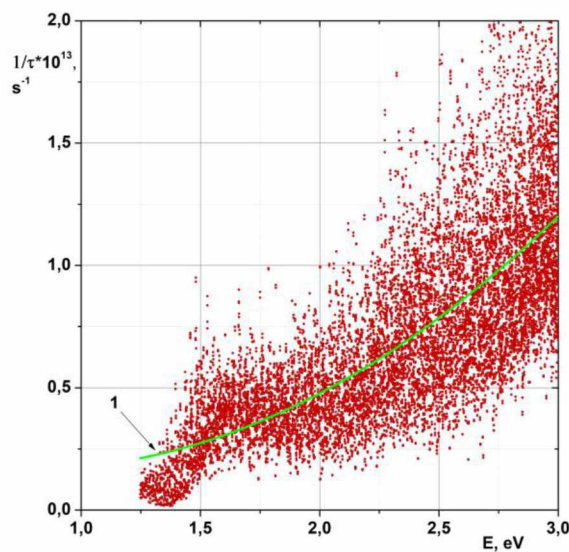


Рис. 1. Зависимость интенсивности рассеивания для акустической моды LA от энергии
Fig. 1. Dependence of the scattering intensity for the LA acoustic mode on energy

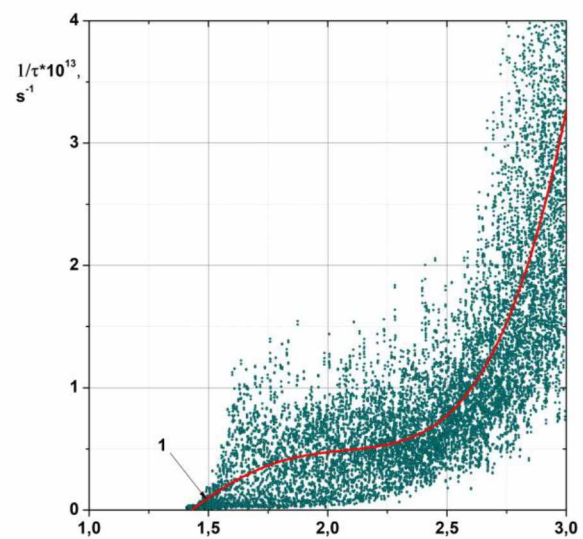


Рис. 2. Зависимость интенсивности рассеивания для оптической моды LO от энергии
Fig. 2. Dependence of the scattering intensity for the optical mode LO on the energy

Заключение

Приведены результаты исследования взаимодействия электронов с акустическими и оптическими фононами в графене, который модифицирован атомами фтора, без учета влияния подложки. При моделировании из первых принципов для мод вида ZA, TA, LA, ZO, TO, LO, LB, TB, LB*, TB*, ZS, ZS*, которые наблюдаются в этом материале, получены интенсивности рассеиваний электронов при одновременном протекании процессов излучения и поглощения фононов. Представленные зависимости и параметры интенсивностей рассеиваний электронов на акустических и оптических фононах в графене, который модифицирован атомами фтора, могут служить основой для моделирования новых гетероструктурных приборов, содержащих этот и другие полупроводниковые материалы.

Список использованных источников / References

1. Novoselov K. S., Geim A. K., et al. (2004) Electric field effect in atomically thin carbon film. *Science*, 306, 666-669.
2. Morozov, V. S., et al. (2008) Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer. *Phys. Rev. Lett.* 100, 016602.
3. Hess K. (1999) *Advanced Theory of Semiconductor Devices*. Wiley-IEEE Press. Piscataway, NJ.

4. Lundstrom M. (2009) *Fundamentals of Carrier Transport*. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
5. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., et al. (2009) QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *J. Phys.: Condens. Matter*. 21, 395502.
6. Lee H., Poncé S., Bushick K., Hajinazar S., Lafuente-Bartolome J., Leveillee J., et al. (2023) Electron-phonon physics from first principles using the EPW code. *npj Computational Materials*. 9, 156.
7. Mishchanka V.N. (2024) First-principles modeling of electron-phonon scattering rates in graphene. *Modern Electronic Materials*. 10 (3), 177-184.
8. Long Cheng, Chenmu Zhang and Yuanyue Liu. (2019) How to resolve a phonon-associated property into contributions of basic phonon modes *J. Phys.: Mater.* 2, 045005.
9. Isakova O. P., Tarasevich Y. Y., Yuzyuk Y. I. (2009) *Processing and visualization of data from physical experiments using Origin package*. Moscow: LIB-COM Book House. 136.

Сведения об авторах

Мищенко В.Н., канд. техн. наук, доцент, учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», mishchenko@bsuir.by.
Васютич А.Д., студент, учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», andrew.andrew22@mail.ru.
Матусевич П.А., инженер, учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», koalapavel@mail.ru.
Турло А.В., инженер, учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», a.turlo@bsuir.by.

Information about the authors

Mishchanka V.N., PhD, associate professor, Educational Institution "Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics", mishchenko@bsuir.by.
Vasiutich A.D., student, Educational Institution "Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics", andrew.andrew22@mail.ru.
Matusevich P.A., engineer, Educational Institution "Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics", koalapavel@mail.ru.
Turlo A.V., engineer, Educational Institution "Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics", a.turlo@bsuir.by.