

функций в нулевом магнитном поле. Приведены результаты расчета обменной энергии двух квантовых точек в зависимости от расстояния между точками и магнитного поля. Установлено, что относительная скорость уменьшения обменной энергии под действием магнитного поля становится меньше при малых расстояниях между точками.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells / J. Wu [et al.] // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – V. 48. – P. 363001.
2. Silicon quantum electronics / F.A. Zwanenburg [et al.] // Rev. Mod. Phys. – 2013. – V. 85, № 3. – P. 961.
3. Loss, D. Quantum computation with quantum dots / D. Loss, D.P. DiVincenzo // Phys. Rev. A. – 1998. – V. 57, № 1. – P. 120-126.
4. Kane, B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B.E. Kane // Nature (London). – 1998. – V. 393. – P. 133-137.
5. Exchange coupling in silicon quantum dots: Theoretical considerations for quantum computation / Q. Li [et al.] // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 81, № 8. – P. 085313.
6. Фейнман, Р. Фейнмановские лекции по физике: Квантовая механика (II) / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – Мир, 1967. – Т. 9. – С. 256.
7. Calderon, M.J. D. Magnetic-field-assisted manipulation and entanglement of Si spin qubits / M.J. Calderon, B. Koiller, S.D. Sarma // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 74, № 8. – P. 081302.
8. Fang, A. Effect of J-gate potential and uniform electric field on a coupled donor pair in Si for quantum computing / A. Fang, Y.C. Chang // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 155331.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ СВОЙСТВ ГРАФЕНА, МОДИФИЦИРОВАННОГО АТОМАМИ ВОДОРОДА

В. Н. Мищенко

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
П. Бровки 6, 220013 Минск, Беларусь, e-mail: mishchenko@bsuir.by*

Приведены результаты моделирования свойств графена, модифицированного атомами водорода. Графен рассматривается в настоящее время как один из наиболее перспективных материалов для создания новых полупроводниковых приборов для различных диапазонов частот. Использование графена и его различных модификаций с добавлением атомов – водорода, фтора и других химических элементов, позволяет разрабатывать полупроводниковые приборы и устройства с улучшенными выходными характеристиками. Путем моделирования из первых принципов получены основные характеристики материала графана, модификации графена с использованием атомов водорода, – зонная диаграмма, зависимости общей интенсивности рассеивания носителей заряда от величины энергии. Полученные зависимости и параметры графана могут служить основой для создания новых гетероструктурных приборов, содержащих слои графена и других полупроводниковых материалов.

Ключевые слова: графен; графан; моделирование; зонная диаграмма.

MODELING FROM FIRST PRINCIPLES OF THE PROPERTIES OF GRAPHENE MODIFIED BY HYDROGEN ATOMS

V. N. Mishchenka

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P. Brovki 6, 220013 Minsk, Belarus
Corresponding author: V. N. Mishchenka (mishchenko@bsuir.by)*

The results of modeling the properties of graphene modified by hydrogen atoms are presented. Graphene is currently considered as one of the most promising materials for the creation of new semiconductor devices for different frequency ranges. The use of graphene and its various modifications with the addition of atoms - hydrogen, fluorine and other chemical elements, allows to develop semiconductor devices and devices with improved output characteristics. By modeling from first principles, the main material characteristics of graphene, modifications of graphene with the use of hydrogen atoms, - the band diagram, the dependence of the total intensity of charge carrier scattering on the energy value were obtained. The obtained dependences and parameters of graphene can serve as a basis for the creation of new heterostructured devices containing layers of graphene and other semiconductor materials.

Key words: graphene; graphane; modeling; zone diagram.

ВВЕДЕНИЕ

Графен стал предметом многих исследований, благодаря своим особым механическим, электрическим и другими свойствам [1]. Но его использование для полупроводниковой электроники показывает, что существуют проблемы, связанные с отсутствием зазора между валентной зоной и зоной проводимости в зонной диаграмме. Химическая модификация графена под названием графан недавно стала предметом исследования как возможный кандидат для решения этой проблемы [2–4]. Графан – это соединение, состоящее из двумерного графена, ковалентно связанного с атомами водорода. Он представляет собой перспективную основу для фундаментальных исследований и возможных технологических приложений при создании разнообразных электронных приборов. Основной задачей в данной работе является исследование параметров и характеристик гидрированного графена с использованием моделирования из первых принципов (ab-initio метод).

МЕТОД И ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ГИДРИРОВАННОГО ГРАФЕНА

Моделирование из первых принципов было выполнено с помощью программных комплексов Quantum Espresso [5] и EPW [6], используя параметризацию Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) и обобщенное градиентное приближение вида GGA. Были использованы следующие параметры моделирования: энергия отсечки волновой функции составляла величину $40 R_y$ ($1 R_y \approx 13,605$ эВ), энергия отсечки плотности заряда и потенциалов – $160 R_y$. Зона Бриллюэна была представлена с помощью сетки Монкхорста-Пака размером $12 \times 12 \times 1$. Для устранения возможных паразитных осцилляций энергии при выполнении моделирования к рассматриваемой структуре сверху и снизу структуры добавлялись слои вакуума каждый толщиной 20 бор ($1 \text{ бор} \approx 5,29 \cdot 10^{-11}$ м).

На рис. 1, *a* показаны особенности расположения атомов углерода (C) и водорода (H) для 100% гидрированного графена (графана типа C₂H₂).

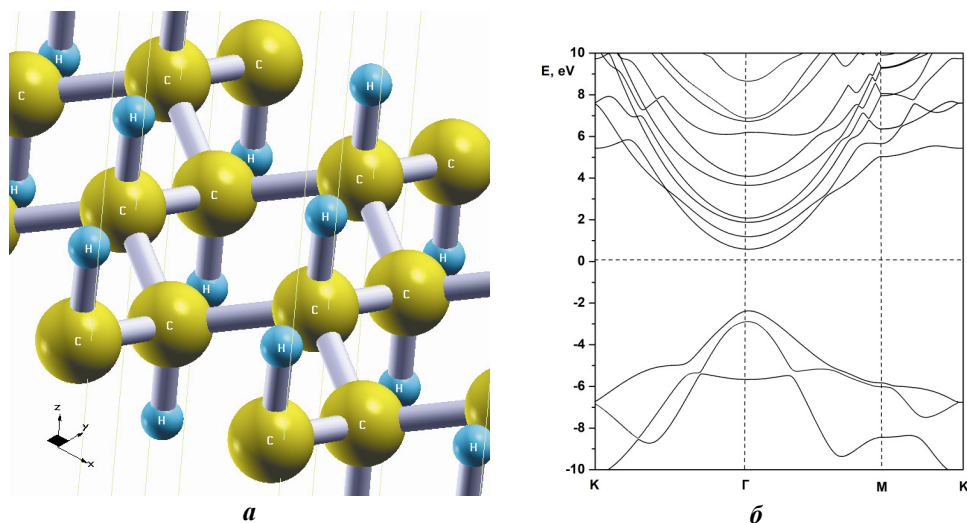


Рисунок 1. Особенности расположения атомов углерода (C) и водорода (H) (*a*); зонная диаграмма для структуры 100 % гидрированного графена (графан типа C₂H₂) (*б*)

Были выполнены итерационные процедуры, целью которых было определение параметров элементарной ячейки, использованной для описания исследуемой структуры. В процессе моделирования были уточнены координаты атомов углерода и водорода, значения постоянной кристалла и ряд других параметров с использованием подпрограмм *vc-relax* и *vc*, входящих в программный комплекс «Quantum Espresso». Этап работ, связанный с самосогласованным и несамосогласованным моделированием с помощью подпрограмм *scf* и *nscf*, позволил получить зонную диаграмму.

Для расчета зависимости общей интенсивности рассеивания носителей заряда от величины энергии был использован программный комплекс EPW [6]. При этом использованы следующие параметры моделирования: величина коэффициента сглаживания по Гауссу принималась равной 0,05 эВ, количество функций Ванье (Wannier) – равным 16, количество учитываемых ветвей в зонной диаграмме – 16. Размер сеток для электронов и фононов при процедурах интерполяции принимался одинаковым и равным 120×120×1.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ПАРАМЕТРОВ И ХАРАКТЕРИСТИК ГИДРИРОВАННОГО ГРАФЕНА

На рис. 1, *б* показана полученная путем моделирования зонная диаграмма 100% гидрированного графена (графана типа C₂H₂). Как видно из анализа этих данных, представленных на рис. 1, *б*, графан типа C₂H₂ характеризуется энергетическим зазором между валентной зоной и зоной проводимости, величина которого приблизительно составляет 3,2 эВ. Полученные данные находятся в хорошем соответствии с результатами, представленными в [2–4]. На рис. 2 показаны зависимости общей интенсивности рассеивания электронов и дырок от величины энергии (*a*) и зависимость общей интенсивности рассеивания электронов от величины энергии в диапазоне значений энергии от 2,5 до 4,5 эВ (*б*).

Анализ зависимости, которая была получена для дырок, показывает, что с ростом величины энергии общая интенсивность рассеивания вначале в целом монотонно увеличивается до значений энергии приблизительно 3,5 эВ, а затем в целом монотонно уменьшается. Для электронов значения общей интенсивности рассеивания имеют величину в целом значительно меньше величин общей интенсивности рассеивания дырок при значениях энергии выше 1 эВ.

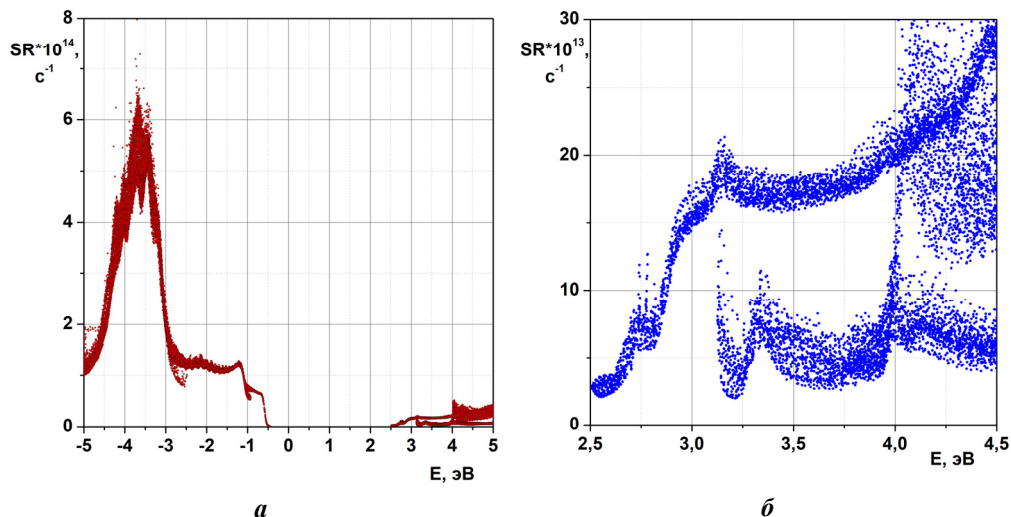


Рисунок 2. Зависимости общей интенсивности рассеивания электронов и дырок от величины энергии (а) и зависимость общей интенсивности рассеивания электронов от величины энергии в диапазоне значений энергии от 2,5 до 4,5 эВ (б)

Зависимость общей интенсивности рассеивания электронов имеет сложный характер поведения в диапазоне энергий приблизительно от 2,5 эВ и выше. Монотонный характер интенсивностей рассеивания электронов для небольших значений энергии обычно наблюдается в слое одиночного графена [7].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведены результаты исследования свойств и характеристик гидрированного графена типа C_2H_2 (графан). Путем моделирования из первых принципов получены основные характеристики этого материала – зонная диаграмма, зависимости интенсивности рассеивания носителей заряда от величины энергии. Полученные зависимости и параметры графана могут служить основой для создания новых гетероструктурных приборов, содержащих слои графена и других полупроводниковых материалов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Electric field effect in atomically thin carbon films / K. S. Novoselov [et al.] // Science. — 2004. — V. 306, P. 666—669.
2. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphane / Elias D. C., Nair R. R., Mohiuddin T. M. G., Morozov S. V., Blake P., Halsall M. P., Ferrari A. C., Boukhalov D. W., Katsnelson M. I., Geim A. K. and Novoselov K. S. // Science. — 2009. — V. 323. — P. 610–616.

3. GraphAne: From Synthesis to Applications / Sahin H., Leenaerts O., Singh S. K., Peeter F. M. // *Materials Science*. – 2015. – P. 1 – 15.
4. Ab-initio simulations of deformation potentials and electron mobility in chemically modified graphene and two dimensional hexagonal boron-nitride / Bruzzone S., Fiori G. // *Appl. Phys. Lett.* – 2011. – V. 99. – P. 22108.
5. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G. L., Cococcioni M., Dabo I. et al // *J.Phys.: Condens. Matter*. – 2009. – V.21, P. 395502.
6. EPW: Electron–phonon coupling, transport and superconducting properties using maximally localized Wannier functions / Ponc  S., Margine E. R., Verdi C. // *Computer Physics Communications*. – 2016. – V. 209. – P. 116 – 133.
7. Определение интенсивностей рассеивания электронов в одиночном слое графена / В.В. Муравьев, В.Н. Мищенко // *Доклады БГУИР*. – 2017. № 6 (108). — С. 128—129.

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ НАНОСТРУКТУР Ge/Si С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ Ge

**А. В. Мудрый¹, В. Д. Живулько¹, О. М. Бородавченко¹, А. В. Гацак¹,
В. А. Зиновьев², Ж. В. Смагина², А. Ф. Зиновьева², А. В. Двуреченский²**

¹⁾ *Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению,
ул. П. Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь; e-mail: mudryi@physics.by*

²⁾ *Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, ул. Академика Лаврентьева,
13, 630090 Новосибирск, Россия; e-mail: zinoviev@isp.nsc.ru*

При температуре 4,2 К исследована фотолюминесценция многослойных наноструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge, созданными при обычной молекулярно-лучевой эпитаксии и эпитаксии из ионно-молекулярных пучков Ge⁺. Установлено, что облучение ионами Ge⁺ в процессе зарождения nanoостровков Ge на Si приводит к увеличению интенсивности полосы фотолюминесценции в области энергии ~ 0,81 эВ и стабилизации ее спектрального положения. Обсуждается возможный механизм излучательной рекомбинации носителей заряда в наноструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge.

Ключевые слова: молекулярно-лучевая эпитаксия; наноструктуры Ge/Si; квантовые точки Ge; фотолюминесценция

PHOTOLUMINESCENCE OF Ge/Si NANOSTRUCTURES WITH Ge QUANTUM DOTS

**A. V. Mudryi¹, V. D. Zhivulko¹, O. M. Borodavchenko¹, A. V. Hatsak¹,
V. A. Zinoviyev², Zh. V. Smagina², A. F. Zinovieva², A. V. Dvurechenskii²**

¹⁾ *Scientific-Practical Materials Research Centre of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*

²⁾ *Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, SB RAS, Novosibirsk, Russia*

Corresponding author: V. D. Zhivulko (zhivulko@physics.by)

The photoluminescence of multilayer Ge/Si nanostructures with Ge quantum dots produced by conventional molecular-beam epitaxy and epitaxy from Ge⁺ ion-molecular beams