

На рисунке (а) представлены результаты моделирования выходных ВАХ БТ при воздействии потока электронов с энергиями 2–4 МэВ и дозами 10^{14} и 10^{15} см⁻². Для сравнения приведены экспериментальные результаты для энергии электронов 4 МэВ.

На рисунке (б) представлены результаты моделирования зависимости коэффициента усиления БТ от дозы облучения электронами с энергиями 3 и 4 МэВ для значений входного тока 0,15, 0,2 и 0,25 мА.

На рисунке (в) представлены результаты моделирования входных характеристик БТ до и после облучения потоком электронов с энергией 4 МэВ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При облучении БТ потоком электронов его рабочие характеристики значительно ухудшаются. На примере коэффициента усиления видно, что при наборе дозы 10^{15} см⁻² его значение снижается почти в 2 раза и скорость падения зависит от выбора рабочей точки прибора. Результаты моделирования выходных ВАХ БТ хорошо согласуются с экспериментальными данными.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Влияние облучения электронами с энергией 4 МэВ на рабочие характеристики кремниевых биполярных транзисторов / С.А. Мискевич [и др.] // Взаимодействие излучений с твердым телом (ВИТТ-2023): матер. XV Междунар. науч. конф., Минск, 26-29 сентября 2023 г. – Минск: БГУ, 2023. – С. 180–182.
2. Radiation degradation of bipolar transistor current gain / S.A. Miskiewicz [et al.] // Acta Physica Polonica A. - 2017. - №132. - P. 288–290.
3. Bertolotti M. In: Radiation effects in semiconductors. - New York: Plenum press; 1968.
4. Радиационная стойкость биполярных транзисторов / Э.Н. Вологдин, А.П. Лысенко. - М., 2000. – 101 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННО-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ГРАФЕНЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ АТОМАМИ ФТОРА

В. Н. Мищенко, П. А. Матусевич, А. Д. Васютич, И. С. Сурвило, К. Д. Рахубо

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

Графен рассматривается в настоящее время как один из наиболее перспективных материалов для создания новых полупроводниковых приборов для различных диапазонов частот. Путем моделирования из первых принципов исследованы особенности электронно-фононного взаимодействия в графене модифицированном атомами фтора. Полученные характеристики и параметры графена модифицированном атомами фтора могут служить основой для создания новых гетероструктурных приборов, содержащих слои модифицированного графена и других полупроводниковых материалов.

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

INVESTIGATION OF PECULIARITIES OF ELECTRON-PHONON INTERACTION IN GRAPHENE MODIFIED WITH FLUORINE ATOMS

V. N. Mishchanka, P. A. Matusevich, A. D. Vasyutich, I. S. Survilo, K. D. Rahubo

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

Graphene is currently considered as one of the most promising materials for the creation of new semiconductor devices for different frequency ranges. By means of first-principles modeling the features of electron-phonon interaction in graphene modified by fluorine atoms are investigated. The obtained characteristics and parameters of graphene modified by fluorine atoms can serve as a basis for the creation of new heterostructured devices containing layers of modified graphene and other semiconductor materials.

Key words: graphene; fluorine; modelling; semiconductor structure.

ВВЕДЕНИЕ

Графен стал объектом многочисленных исследований, благодаря своим особым механическим, электрическим и другим 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. Модификации графена при использовании атомов водорода, фтора и других атомов стали предметом исследования как возможное решение этой проблемы. С использованием атомов фтора были получены модификации графена, среди которых наибольшей стабильностью, как считается в литературе, обладает структурная группа (изомер), которая получила название chair («кресло») [2, 3]. Полученный таким образом материал представляет собой перспективную основу для фундаментальных исследований и возможных технологических приложений при создании разнообразных электронных и оптических приборов. Основной задачей в данной работе является исследование особенностей электронно-фононного взаимодействия в графене, модифицированном атомами фтора.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Моделирование из первых принципов было выполнено с помощью программного комплекса Quantum Espresso [4], используя параметризацию Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Были использованы 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 в программном комплексе Quantum Espresso 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 добавлялся слой вакуума толщиной 20 Å (Å = $1 \cdot 10^{-10}$ м). Количество рассмотренных долин в зонной диаграмме составило 12.

С использованием программного комплекса «Quantum Espresso» были получены дисперсионные фононные зависимости для фторированного графена типа C₂F₂, который относится к структурной группе, получившей название chair («кресло»). Это соединение состоит из двумерного (вдоль координат X–Y) графена, к атомам угле-

рода которого в направлении координаты z присоединены атомы фтора. Особенности расположения атомов углерода C и фтора F в такой структуре и полученная зонная диаграмма фторированного графена типа C_2F_2 представлены в [5].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В результате моделирования получены и исследованы дисперсионные фононные зависимости в графене, модифицированном атомами фтора, которые представлены на рис. 1.

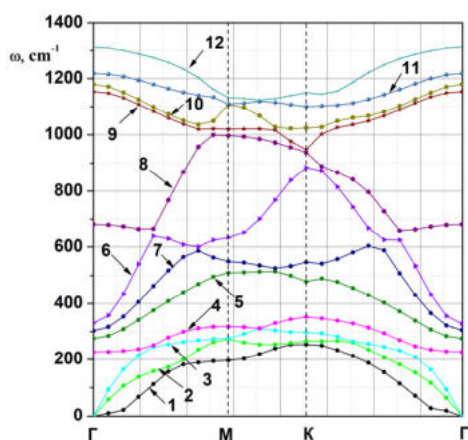


Рис. 1. Дисперсионные фононные зависимости для графена, модифицированного атомами фтора

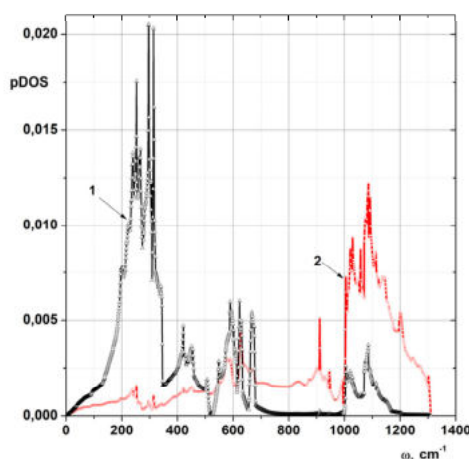


Рис. 2. Зависимости фононной плотности состояний (параметр pDOS) от значений фононной частоты

Установлено, что фторирование графена приводит к появлению дополнительных шести фононных мод к шести модам LA, TA, ZA, LO, TO и ZO, которые характерны для обычного графена. Дисперсионные фононные зависимости вида ZA, TA, LA, ZO, LO, TO представлены на рис. 1 кривыми 1–3, 8–10, соответственно, и разделяются на две группы. Первая группа обозначена как LA, TA, ZA и представляет собой рассеивание на акустических фононах вдоль условных продольной и поперечной направлений (координаты x - y), а также ортогональной к ним координате z , соответственно. Вторая группа обозначена как LO, TO и ZO и представляет собой рассеивание на оптических фононах вдоль условных продольной и поперечной направлений (координаты x - y), а также ортогональной к ним координате z , соответственно. Дополнительные моды, которые появляются при фторировании графена, связаны с процессами изгиба и растяжения первоначальной структуры графена. Так при процессах изгиба структуры появляются две симметричные моды – LB и TB, соответственно, продольная и поперечная, и две несимметричные моды LB* и TB* [6]. Дисперсионные фононные зависимости LB, TB, LB*, TB* представлены кривыми 4–7 на рис. 1, соответственно. В направлении координаты z формируются две моды, связанные с процессами растяжения. Одна из них – симметричная мода ZS, а другая – несимметричная мода ZS* (кривые 11 и 12 на рис. 1, соответственно) [6]. Анализ полученных результатов показывает, что значения фононных частот для акустических мод соответствуют неравенствам $ZA < TA < LA$, для оптических мод – неравенствам $ZO <$

TO < LO, для мод, связанных с изгибами, – неравенствам $LB < TB$ ($LB^* < TB^*$) и для мод, связанных с растяжением, – $ZS < ZS^*$. При этом поперечные моды в двухмерной плоскости структуры имеют более низкое значение фононной частоты, чем продольные, а моды, связанные с изгибом структуры, также имеют более низкое значение фононной частоты, чем моды, связанные с растяжением структуры ($B < S$).

На рис. 2 показаны зависимости фононной плотности состояний (параметр pDOS) в зависимости от значения фононной частоты для фторированного графена. При этом кривая 1 на рис. 2 соответствует вкладу атомов фтора, а кривая 2 – атомов углерода.

Анализ этих зависимостей показывает, что для фононных мод, связанных с рассеиванием на акустических фононах, преобладающий вклад обеспечивается атомами фтора, а при более высоких фононных частотах, связанных с рассеиванием на оптических фононах, преобладающий вклад обеспечивается атомами углерода. В диапазоне фононных частот, величина которых превышает значение равное приблизительно 700 см^{-3} , преобладает вклад атомов углерода (кривая 2, на рис. 2) над атомами фтора (кривая 1, на рис. 2), что оказывается существенным для формирования мод ZS (кривая 11, рис. 2) и ZS^* (кривая 12, рис. 2) и мод ZO, LO, TO, представленных на рис. 1 кривыми 8–10, соответственно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведены результаты исследования особенностей электронно-фононного взаимодействия в графене модифицированном атомами фтора. Путем моделирования из первых принципов получены и исследованы дисперсионные фононные зависимости фторированного графена типа C_2F_2 . Полученные зависимости и параметры этого материала 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 film / K. S. Novoselov, A. K. Geim [et al.] // Science. – 2004. – V. 306. – P. 666–669.
2. First-principles investigation of graphene fluoride and graphane / O. Leenaerts, H. Peelaers, A. D. Hernández-Nieves [et al.] // Phys. Rev. – 2010. – B 82. – P. 195436.
3. Graphene Fluoride: A Stable Stoichiometric Graphene Derivative and its Chemical Conversion to Graphene / Karlický F. [et al.] // Small. – 2012. – V. 6. – P. 2885–2891.
4. Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter. – 2009. – Vol. 21. – P. 395502.
5. Мищенко, В.Н. Моделирование из первых принципов свойств графена модифицированного атомами фтора / В.Н. Мищенко // Доклады БГУИР. – 2023. – Т. 21. – № 4. – С. 71–75.
6. Feng Huang L. Lattice dynamics and disorder-induced contraction in functionalized graphene / Huang L. Feng, Z. Zeng // J. Appl. Phys. – 2013. – P. 113 083524.