

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ПАРАМЕТРОВ И ХАРАКТЕРИСТИК ГИДРИРОВАННОГО ГРАФЕНА**

В.В. Муравьев, В.Н. Мищенко, А.Д. Митрофанов, Н.Н. Павлюченко, Д.А. Филоненко

Рассмотрены вопросы моделирования из первых принципов параметров и характеристик гидрированного графена. Графен стал предметом многих исследований ввиду того, что он обладает особыми механическими, электрическим и другими свойствам. Но его использование для полупроводниковой электроники сдерживается из-за существующих проблем, связанных 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 этих проблемы. 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. Было выполнено моделирование из первых принципов параметров и характеристик гидрированного графена с применением программного комплекса Quantum Espresso. В рамках теории функционала электронной плотности с использованием обменно-корреляционных функционалов вида PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) были получены зонные диаграммы, а также значения основных электрофизических параметров графана в составе гетероструктурного прибора при наличии внешнего электрического поля. Применение отмеченного подхода позволяет проектировать полупроводниковые приборы с регулируемым зазором между зоной проводимости и валентной зоной и добиваться улучшения коммутационных и выходных характеристик. Реализация гетероструктурных приборов с использованием графена и его модификаций позволит реализовать новые устройства, которые найдут широкое применение в системах передачи и обработки сигналов в диапазонах СВЧ и КВЧ.