

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ СВОЙСТВ ГРАФЕНА
МОДИФИЦИРОВАННОГО АТОМАМИ ФТОРА**

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 свойств графена модифицированного атомами фтора. Разработка новых полупроводниковых приборов требует исследования свойств новых материалов и графен является одним из таких материалов, которые

привлекают интерес исследователей. Графен с добавлением атомов – фтора, водорода и других химических элементов позволяет создавать его химические модификации. Используя этот подход, можно разрабатывать полупроводниковые приборы и устройства с более совершенными выходными характеристиками. Было выполнено моделирование из первых принципов параметров и характеристик фторированного графена с применением программного комплекса Quantum Espresso. В рамках теории функционала электронной плотности, используя обменно-корреляционные функционалы вида PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof), были получены основные характеристики модификации графена с использованием атомов фтора – зонная диаграмма, зависимости плотности состояния (параметр DOS) электронов и дырок от величины энергии. Путем итерационного решения транспортного уравнения Больцмана определены зависимости подвижности носителей заряда от величины температуры. Полученные зависимости и параметры фторированного графена могут служить основой для создания новых гетероструктурных приборов, содержащих слои модифицированного графена и других полупроводниковых материалов. Формирование гетероструктурных приборов с использованием графена и его модификаций позволит реализовать новые устройства, которые найдут широкое применение в системах передачи и обработки сигналов СВЧ и КВЧ диапазонов.