



<http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2022-20-2-5-12>

Оригинальная статья  
Original paper

УДК 621.794.61

## ЭФФЕКТЫ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ГЕКСОГОНАЛЬНОМ НИТРИДЕ БОРА

В.В. МУРАВЬЁВ, В.Н. МИЩЕНКО

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
(г. Минск, Республика Беларусь)*

*Поступила в редакцию 30 июня 2021*

© Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2022

**Аннотация.** Выполнено исследование эффектов рассеяния электронов в объемном гексагональном нитриде бора (h-BN). В настоящее время материал h-BN, совместно с графеном, считается одним из наиболее перспективных материалов для формирования новых полупроводниковых приборов с хорошими характеристиками для диапазонов СВЧ и КВЧ. Рассмотрены основные электрофизические параметры и характеристики h-BN. Для исследования свойств этого материала использована трехдолинная К-М-Г зонная структура. Отмечено, что долина К характеризуется наименьшим энергетическим зазором между зоной проводимости и валентной зоной. Выполнен расчет величин эффективных масс электронов и коэффициентов непараболичности для долин К, М и Г. Представлены формулы, которые позволяют выполнить моделирование основных интенсивностей рассеяния электронов в h-BN. Рассмотрены и проанализированы полученные интенсивности рассеяния электронов в зависимости от энергии и температуры. Опираясь на полученные характеристики, становится возможной реализация статистического многочастичного метода Монте – Карло для определения характеристик переноса электронов в гетероструктурных полупроводниковых приборах, содержащих слои h-BN.

**Ключевые слова:** гексагональный нитрид бора, полупроводниковая структура, интенсивность рассеяния, графен, метод Монте – Карло.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Для цитирования.** Муравьев В.В., Мищенко В.Н. Эффекты рассеяния электронов в гексагональном нитриде бора. Доклады БГУИР. 2022; 20(2): 5-12.

## EFFECTS OF ELECTRON SCATTERING IN BORON HEXOGONAL NITRIDE

VALENTIN V. MURAVYOV, VALERY N. MISHCHENKA

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Republic of Belarus)*

*Submitted 30 June 2021*

© Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2022

**Abstract.** Investigation the effects of electron scattering in boron hexagonal nitride (h-BN) was performed. At present, material h-BN, together with graphene, is considered to be one of the most promising materials for the formation of new semiconductor devices with good characteristics for the ranges of ultrahigh and extreme high frequency bands. The main electrophysical parameters and characteristics of h-BN was considered. For this material the three valley K-M-Г band structure has been used. It is noted that the K valley has the smallest energy gap between the conductivity zone and the valence zone. Calculation of relative electron masses and parabolicity coefficients in K, M and G valleys was performed. Formulas that allow to model the main electron scattering intensities in h-BN were presented. The obtained electron scattering intensities as a function of energy and temperature were considered and analyzed. Based on the obtained characteristics, it was possible to implement a statistical multi-particle Monte Carlo method to determine the characteristics of electron transfer in the heterostructure of a semiconductor devices containing layers of hexagonal boron nitride.

**Keywords:** hexagonal boron nitride, semiconductor structure, scattering intensity, graphene, Monte Carlo method.

**Conflict of interests.** The authors declare no conflict of interests.

**For citation.** Muravyov V.V., Mishchenka V.N. Effects of Electron Scattering in Boron Hexagonal Nitride. Doklady BGUIR. 2022; 20(2): 5-12.

### Введение

Разработан ряд гетероструктурных полупроводниковых приборов, которые содержат слои графена, размещенные на подложке из объемного материала h-BN [1–3]. Использование h-BN в качестве подложки для графена, привлекает рядом положительных свойств: близкая к графену структура кристаллической решетки, низкая шероховатость поверхности, большой зазор между долинами зоны проводимости и валентной зоны, относительно большие значения энергий оптических фононов. Отмеченные выше достоинства h-BN позволяют надеяться на создание новых конструкций полупроводниковых приборов диапазонов СВЧ и КВЧ с улучшенными характеристиками. Однако для разработки новых конструкций приборов и изучения их работы необходим детальный анализ зонной структуры и основных электрофизических параметров используемых материалов. В полупроводниковых приборах применение метода Монте – Карло для анализа процессов дрейфа носителей заряда, как в продольном, так и в поперечном направлениях, позволяет учесть все их механизмы рассеяния и получить зависимости распределения для стационарных и нестационарных процессов [4–7]. Целью данной статьи является исследование основных механизмов рассеяния электронов в объемном материале h-BN при изменении энергии электронов и температуры. Был разработан вычислительный алгоритм, составлена и отлажена программа моделирования с целью внедрения полученных результатов в процедуры, связанные с использованием метода Монте – Карло.

### Основные электрофизические параметры и характеристики h-BN

Известно, что результаты моделирования приборных полупроводниковых структур с использованием метода Монте – Карло определяются значениями электрофизических параметров материала и параметрами зоны проводимости [4–7]. Исследование электронных

структур, построенных с использованием h-BN, было выполнено рядом авторов в [8–10]. Кристаллическая структура анизотропных модификаций и нормальные решеточные колебания нитрида бора рассмотрены в [11]. Так, в [8] был получен ряд электрофизических параметров этого материала с использованием в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) обменно-корреляционных функционалов PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof), LDA (приближение локальной плотности) и гибридного HSE06. Распространено использование простого функционала LDA, в котором принято, что этот функционал, вычисляемый для некоторой точки пространства, зависит только от плотности заряда в этой точке. Для расчетов сложных физических задач необходимо применение, по-видимому, более уточненной обменной модели PBE. В [9, 10] моделирование h-BN было выполнено на основе подхода Ab-initio (из первых принципов) с использованием программных комплексов Quantum Espresso [12] и Atomistik Toolkit (Synopsys QuantumWise A/S; available at <http://www.quantumwise.com>) соответственно при параметризации PBE и обобщенной градиентной аппроксимации вида GGA. Однако в представленных исследованиях были получены данные только для долин К и Г зоны проводимости, отсутствует информация о долине М в зоне проводимости и о ряде других параметров материала h-BN, которые необходимы для реализации процедуры моделирования электронных свойств с использованием метода Монте – Карло.

Для изучения свойств и характеристик материала h-BN был использован программный комплекс Quantum Espresso [12] при параметризации PBE. С использованием этого программного комплекса было выполнено моделирование и получены данные для построения зонной структуры материала h-BN, которая показана на рис. 1.

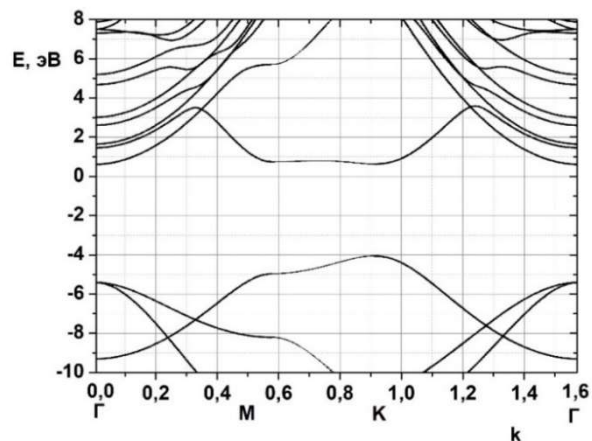


Рис. 1. Зонная структура для гексагонального нитрида бора  
Fig. 1. Band structure of hexagonal boron nitride

Представленные на рис. 1 зависимости хорошо соответствуют данным, полученным в [8]. Из анализа этого рисунка, где приведены зависимости значений энергии  $E$  (эВ) от нормированной величины волнового вектора  $k$ , видно, что для гексагонального нитрида бора характерна трехдолинная К-М-Г зонная диаграмма. Долина К характеризуется наименьшим энергетическим зазором между зоной проводимости и валентной зоной. При моделировании электронных характеристик и параметров материала h-BN необходим анализ параметров всех трех долин К, М и Г. Для материала h-BN значения электрофизических параметров и параметров долин проводимости выбирались из данных, представленных в табл. 1.

Для расчета эффективной массы электронов долин К, М и Г материала h-BN использовалась формула из [13]:

$$m_e = \frac{m_0}{\left(1 + \frac{2 \cdot p_0^2}{m_0 \cdot E_g}\right)}, \quad (1)$$

где  $m_0$  – масса электрона в свободном пространстве;  $E_g$  – энергетический зазор между зоной проводимости и валентной зоной для долины, для которой производится расчет эффективной

массы электронов; параметр  $p_0 \approx \frac{h}{a_0}$ , где  $h = 2 \cdot \pi \cdot \hbar$  – постоянная Планка,  $a_0$  – постоянная решетки, величина которой для материала h-BN принималась равной 2,50 Å [14].

Определение величины коэффициентов непараболичности для долин К, М и Г производилось по формуле из [4, 5]:

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left( 1 - \frac{m_e}{m_0} \right)^2. \quad (2)$$

Результаты расчетов относительной эффективной массы электронов и коэффициентов непараболичности в долинах К, М и Г, выполненных по формулам (1) и (2), и значения ряда других параметров, которые были приняты при моделировании, представлены в табл. 2. Величина параметра  $E_g$  определялась из данных, полученных при моделировании с использованием программного комплекса Quantum Espresso.

**Таблица 1.** Электрофизические параметры h-BN  
**Table 1.** Electrophysical parameters h-BN

Параметр, размерность / parameter, dimension	Величина / quantity
Плотность, гр/см <sup>3</sup>	2,2 [14]
Статическая диэлектрическая проницаемость	5,06 [14]
Высокочастотная диэлектрическая проницаемость	2,2 [14]
Скорость звука, 10 <sup>6</sup> см/с	1,8464 [14]
Энергия оптических фононов, эВ	0,102 [14, 15]

**Таблица 2.** Значения параметров моделирования материала h-BN  
**Table 2.** Values of material modeling parameters h-BN

Параметр / parameter	Долина / valley	Величина / quantity
Акустический деформационный потенциал, эВ [9]	К	3,66
	Г	3,66
	М	3,66
Эффективная масса электрона	К	0,8868
	Г	0,9096
	М	0,9051
Коэффициент непараболичности, эВ <sup>-1</sup>	К	0,0241
	Г	0,015
	М	0,0198
Величина параметра $E_g$ , эВ	К	4,692
	Г	6,024
	М	5,733

### Определение интенсивностей рассеивания электронов в объемном материале h-BN

Наиболее важными механизмами рассеяния в полярных полупроводниковых соединениях являются рассеяние на полярных оптических фононах, на ионизированных примесях, акустическое рассеяние, а также междолинное рассеяние в сильном электрическом поле [4, 6, 7]. Для расчета интенсивностей (частот) рассеяния для материала h-BN были применены соотношения, представленные в [4, 6], с использованием электрофизических параметров (табл. 1, 2) и других данных, которые присущи материалу h-BN.

Для полярного оптического рассеяния его интенсивность определяется следующим выражением [4, 6]:

$$\lambda_0(k) = \frac{e \cdot \sqrt{m_e} \cdot \omega_0}{\sqrt{2} \cdot \hbar} \left( \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \frac{(1 + 2 \cdot \alpha \cdot E')}{\gamma^{1/2}(E)} F_0(E, E') \times \left\{ \begin{array}{l} N_0 - \text{поглощение} \\ (N_0 + 1) - \text{испускание} \end{array} \right\}, \quad (c^{-1}), \quad (3)$$

где  $e$  – заряд электрона,

$$N_0 = \left[ \exp\left(\frac{\hbar \cdot \omega_0}{T \cdot k_B}\right) - 1 \right]^{-1},$$

$$\gamma(E) = E \cdot (1 + \alpha \cdot E),$$

$$F_0(E, E') = C^{-1} \cdot \left( A \cdot \ln \left| \frac{\gamma^{1/2}(E) + \gamma^{1/2}(E')}{\gamma^{1/2}(E) - \gamma^{1/2}(E')} \right| + B \right), \quad A = \left[ 2 \cdot (1 + \alpha \cdot E) \cdot (1 + \alpha \cdot E') + \alpha \cdot \{\gamma(E) + \gamma(E')\} \right]^2,$$

$$B = -2 \cdot \alpha \cdot \gamma^{1/2}(E) \cdot \gamma^{1/2}(E') \cdot \left[ 4 \cdot (1 + \alpha \cdot E) \cdot (1 + \alpha \cdot E') + \alpha \cdot \{\gamma(E) + \gamma(E')\} \right],$$

$$C = 4 \cdot (1 + 4 \cdot \alpha \cdot E) \cdot (1 + \alpha \cdot E') \cdot (1 + 2 \cdot \alpha \cdot E) \cdot (1 + 2 \cdot \alpha \cdot E').$$

В формуле (3)  $E, \varepsilon В$  – энергия электронов,  $\omega_0$  – частота полярных оптических фононов,  $\varepsilon_\infty$  и  $\varepsilon_0$  – соответственно высоко- и низкочастотная диэлектрические проницаемости,  $T$  – температура, К,  $k_B$  – постоянная Больцмана. Для процессов с испусканием полярного оптического фонона выражение (3) применимо только при условии  $E' = E - \hbar \cdot \omega_0 > 0$ . В противном случае  $E' = E - \hbar \cdot \omega_0 < 0$  и интенсивность рассеяния  $\lambda_0$  равна нулю.

Для рассеяния на акустических фононах его интенсивность определяется выражением [4, 6]

$$\lambda_a(k) = \frac{(2 \cdot m_e)^{3/2} \cdot T \cdot k_B \cdot D_a^2}{2 \cdot \pi \cdot \rho \cdot s^2 \cdot \hbar^4} \cdot \gamma^{1/2}(E) \cdot (1 + 2 \cdot \alpha \cdot E) \cdot F_a(E), \quad (c^{-1}), \quad (4)$$

где  $F_a(E) = \frac{(1 + \alpha \cdot E)^2 + 1/3 \cdot (\alpha \cdot E)^2}{(1 + 2 \cdot \alpha E)^2}$ ;  $\rho$ , г/см<sup>3</sup> – плотность кристалла;  $D_a$ , эВ – акустический

деформационный потенциал,  $s$  – скорость звука, см/с.

Интенсивность рассеяния на ионизированных примесях определяется выражением [6]

$$\lambda_0(k) = \frac{2 \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot e^4 \cdot m_e^{1/2} \cdot (1 + 2 \cdot \alpha \cdot E)}{\varepsilon_0^2 \cdot \beta^2 \cdot \hbar^2 \cdot [E \cdot (1 + \alpha \cdot E)]^{1/2}}, \quad (c^{-1}), \quad (5)$$

где параметр  $\beta^2 = \frac{4 \cdot \pi \cdot n_i \cdot e^2}{\varepsilon_0 \cdot k_B \cdot T}$ ,  $n_i$  – концентрация ионизированной примеси.

### Расчет интенсивностей рассеяния электронов в материале h-BN

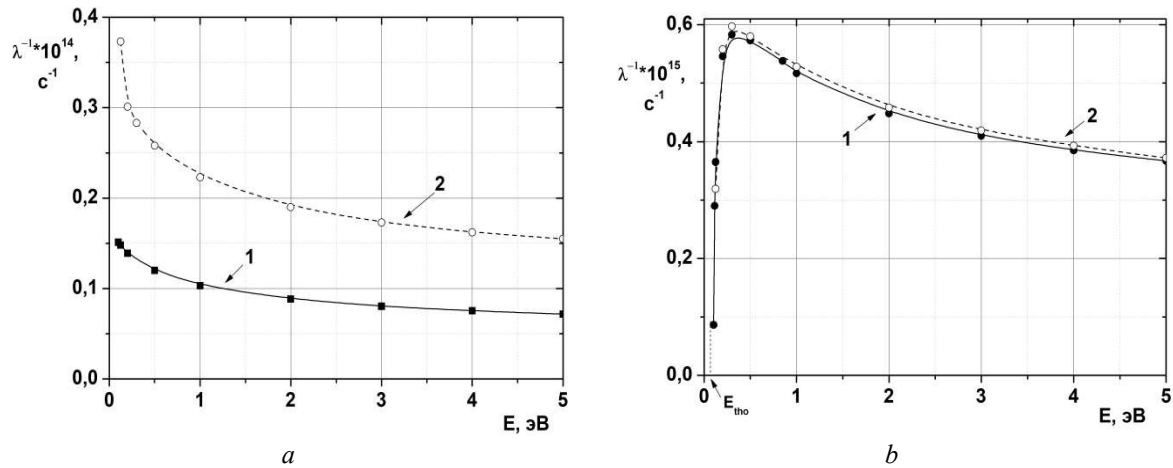
Путем моделирования с использованием представленных выше выражений определены и исследованы интенсивности (частоты) рассеяния электронов в зависимости от энергии и температуры в материале h-BN. Полученные зависимости интенсивностей (частот) рассеяния электронов для материала h-BN и для долины К показаны ниже на рис. 2, 3.

На рис. 2 представлены результаты расчета интенсивностей рассеяния на полярных оптических фононах в h-BN при поглощении (рис. 2, *a*) и испускании (рис. 2, *b*) фононов в зависимости от энергии электронов. Кривые, обозначенные на рис. 1 цифрой 1, получены при величине температуры  $T$ , равной 300 К, а цифрой 2 – при величине  $T$ , равной 370 К. На рис. 2, *b* символом  $E_{th0}$  показано значение энергии оптических фононов.

Анализ этих кривых показывает, что с ростом энергии интенсивность рассеяния на полярных оптических фононах в случае с поглощением фононов монотонно уменьшается. С ростом температуры интенсивность рассеяния на полярных оптических фононах с поглощением фононов увеличивается. Изменение интенсивностей рассеяния на полярных оптических фононах при испускании фононов с ростом энергии и температуры носит сложный, немонотонный характер.

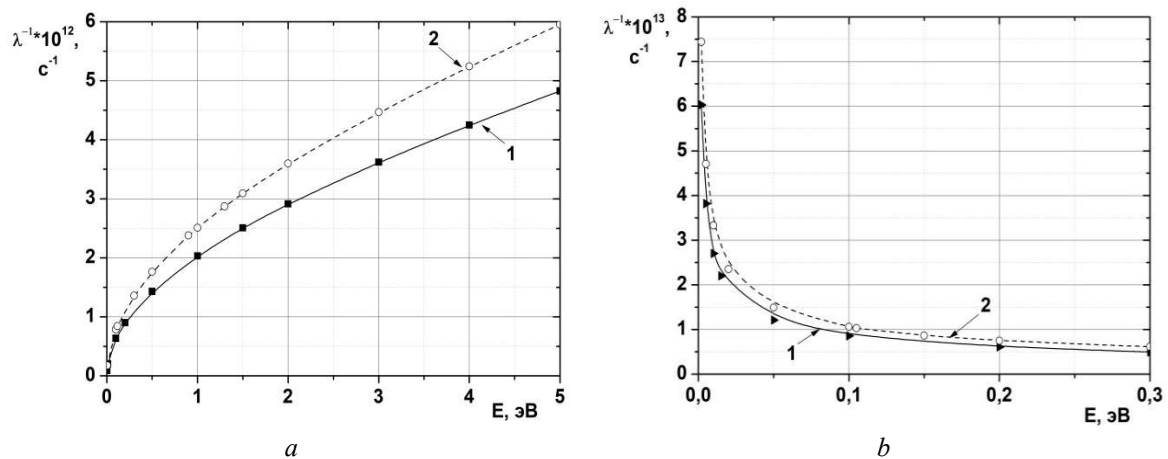
На рис. 3 показаны зависимости интенсивностей рассеяния на акустических фононах (рис. 3, *a*) и на ионизированных примесях (рис. 3, *b*) от энергии электронов. Кривые, обозначенные

на рис. 3 цифрами 1, получены при величине температуры  $T$ , равной 300 К, а кривые, обозначенные цифрой 2, соответствуют величине  $T$ , равной 370 К. Величина параметра  $n_i$  при моделировании принималась равной  $1E+16$ , а величина параметра  $\epsilon_0$  – равной 5,06. Как видно из этого рисунка, интенсивности рассеяния на акустических фоновых монотонано увеличиваются с увеличением энергии электронов и температуры. Интенсивность рассеяния на ионизированных примесях монотонано уменьшается с ростом энергии электронов, а с ростом температуры – увеличивается.



**Рис. 2.** Зависимости интенсивности рассеяния на полярных оптических фоновых при поглощении (а) и испускании (b) фононов от энергии электронов и температуры

**Fig. 2.** Dependence of scattering intensity on polar optical phonons during phonon absorption (a) and emission (b) from electron energy and temperature



**Рис. 3.** Зависимости интенсивностей рассеяния на акустических фоновых (а) и на ионизированных примесях (b) от энергии электронов и температуры

**Fig. 3.** Dependences of scattering intensity on acoustic phonons (a) and on ionized impurities (b) from electron energy and temperature

Таким образом, выполнены исследования основных механизмов рассеяния электронов в объемном материале h-BN. На основе моделирования получены зависимости интенсивностей рассеяния электронов в материале h-BN от энергии электронов и температуры при рассеянии на полярных оптических фоновых, на ионизированных примесях и при акустическом рассеянии.

### Заключение

Рассмотрены основные электрофизические параметры и характеристики материала h-BN, который характеризуется трехдолинной К-М-Г зонной структурой. Отмечено, что долина К характеризуется наименьшим энергетическим зазором между зоной проводимости и валентной зоной. Выполнен расчет величин эффективной массы электронов и коэффициентов непараболичности для долин К-М-Г зонной структуры. Получены основные зависимости

интенсивностей рассеяния электронов в материале h-BN на полярных оптических фононах, на акустических фононах и на ионизированных примесях. Это позволяет выполнить анализ основных механизмов рассеяния электронов в объемном материале h-BN. При моделировании установлено, что при низких значениях энергии преобладают рассеяния на ионизированных примесях и на оптических фононах. При увеличении величины энергии возрастает интенсивность рассеяния на акустических фононах. С ростом температуры, как правило, интенсивности отмеченных выше механизмов рассеяния увеличиваются.

### Список литературы

1. Stolyarov M., Liu G., Shur M., Balandin A. *Suppression of  $I/f$  in near-ballistic h-BN-graphene-h-BN heterostructure field-effect transistors*. *Applied Physics Letters*. 2015;107:023106. DOI: 10.1063/1.4926872.
2. Lee K.H., Shin H.J., Lee J., Lee I.Y., Kim G.H., Choi J.Y., Kim S.W. Large-Scale Synthesis of High-Quality Hexagonal Boron Nitride Nanosheets for Large-Area Graphene Electronics. *NanoLetters*. 2012;12:714. DOI: 10.1021/nl203635v.
3. Свинцов Д.А., Вьюрков В.В., Лукичев В.Ф., Буренков А., Охснер Р. Туннельные полевые транзисторы на основе графена. *Физика и техника полупроводников*. 2013;47(2):244-250.
4. Fawcett W., Boardman D.A., Swain S. Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide. *Journal of Physical Chemistry Solids*. 1970;31:1963-1990.
5. Хокни Р., Иствуд Дж. *Численное моделирование методом частиц*. Пер. с англ. Москва: Мир; 1987.
6. Шур М. *Современные приборы на основе арсенида галлия*. Пер. с англ. Москва: Мир; 1991.
7. Муравьев В.В., Мищенко В.Н. Определение интенсивностей рассеивания электронов в одиночном слое графена. *Доклады БГУИР*. 2017;6(108):128-129.
8. Drummond N.D., Zolyomi V., Fal'ko V.I. *Electronic Structure of Two-Dimensional Crystals of Hexagonal Boron Nitride. Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps VIII (International workshop)*. TTI, Tuscany, Italy, Saturday 27th July – Saturday 3rd August 2013. <http://www.vallico.net/tti/master.html> (accessed 11 November 2019).
9. Bruzzone S., Fiori G. Ab-initio simulations of deformation potentials and electron mobility in chemically modified graphene and two-dimensional hexagonal boron-nitride. *Applied Physics Letters*. 2011;99:222108. DOI: 10.1063/1.3665183.
10. Zhenqiang Y., Hua G., Xiaoping Z. Theoretical Study on Carrier Mobility of Hydrogenated Graphene/Hexagonal Boron-Nitride Heterobilayer. *Nanoscale Research Letters*. 2018;13:376. DOI: 10.1186/s11671-018-2780-2.
11. Ордин С.В., Шарупин Б.Н., Фёдоров М.И. Нормальные решеточные колебания и кристаллическая структура анизотропных модификаций нитрида бора. *Физика и техника полупроводников*. 1998;32(9):1033-1042.
12. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G.L., Cococcioni M., Daboli I. Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal Phys.: Condens. Matter*. 2009;21:395502.
13. Hermann C., Weisbuch C.  $k \rightarrow p$  perturbation theory in III-V compounds and alloys: a reexamination. *Physical Review*. 1977;B15:823. DOI: 10.1103/PhysRevB.15.823.
14. *Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. Edited by Levinshtein M.E., Rumyantsev S.L., Shur M.S. New York: John Wiley&Sons; 2001.
15. Yamoah M.A., Yang W., Pop E., Goldhaber-Gordon D. High Velocity in Graphene Encapsulated by Hexagonal Boron Nitride. *Nano*. 2017;11:9914-9919. DOI: 10.1021/acsnano.7b03878.

### References

1. Stolyarov M., Liu G., Shur M., Balandin A. *Suppression of  $I/f$  in near-ballistic h-BN-graphene-h-BN heterostructure field-effect transistors*. *Applied Physics Letters*. 2015;107:023106. DOI: 10.1063/1.4926872.
2. Lee K.H., Shin H.J., Lee J., Lee I.Y., Kim G.H., Choi J.Y., Kim S.W. Large-Scale Synthesis of High-Quality Hexagonal Boron Nitride Nanosheets for Large-Area Graphene Electronics. *NanoLetters*. 2012;12:714. DOI: 10.1021/nl203635v.
3. Svintsov D.A., Vyurkov V., Lukichev V.F., Orlikovsky A.A., Burenkov A., Ohsner R. [Tunneling field effect transistors based on graphene]. *Phisika i tehnika polyprovodnikov = Physics and Technology of Semiconductors*. 2013;47(2):244-250. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.115452. (In Russ.)
4. Fawcett W., Boardman D.A., Swain S. Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide. *Journal of Physical Chemistry Solids*. 1970;31:1963-1990.

5. Hockney R., Eastwood J. [Numerical simulation using particles]. Per. with English. Moscow: Mir; 1987. (In Russ.)
6. Shur M. [Modern devices based on gallium arsenide]. Per. with English. Moscow: Mir; 1991. (In Russ.)
7. Muravyov V.V., Mishchenka V.N. [Determination of the electron scattering intensities in a single graphene layer]. *Doklady BGUIR = Doklady BGUIR*. 2017;6(108):128-129. (In Russ.)
8. Drummond N.D., Zrolyomi V., Fal'ko V.I. *Electronic Structure of Two-Dimensional Crystals of Hexagonal Boron Nitride. Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps VIII (International workshop)*. TTI, Tuscany, Italy, Saturday 27th July – Saturday 3rd August 2013. <http://www.vallico.net/tti/master.html> (accessed 11 November 2019).
9. Bruzzone S., Fiori G. Ab-initio simulations of deformation potentials and electron mobility in chemically modified graphene and two-dimensional hexagonal boron-nitride. *Applied Physics Letters*. 2011;99:222108. DOI: 10.1063/1.3665183.
10. Zhenqiang Y., Hua G., Xiaoping Z. Theoretical Study on Carrier Mobility of Hydrogenated Graphene/Hexagonal Boron-Nitride Heterobilayer. *Nanoscale Research Letters*. 2018;13:376. DOI: 10.1186/s11671-018-2780-2.
11. Ordin S.V., Sharupin B.N., Fedorov M.I. [Normal lattice oscillations and crystal structure of anisotropic modifications of boron nitride]. *Phisika i tehnika polyprovodnikov=Physics and Technology of Semiconductors*. 1998;32(9):1033-1042. (In Russ.)
12. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G.L., Cococcioni M., Daboli I. Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal Phys.: Condens. Matter*. 2009;21:395502.
13. Hermann C., Weisbuch C.  $k \rightarrow p$  perturbation theory in III-V compounds and alloys: a reexamination. *Physical Review*. 1977;B15:823. DOI: 10.1103/PhysRevB.15.823.
14. *Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. Edited by Levinshtein M.E., Rumyantsev S.L., Shur M.S. New York: John Wiley&Sons; 2001.
15. Yamoah M.A., Yang W., Pop E., Goldhaber-Gordon D. High Velocity in Graphene Encapsulated by Hexagonal Boron Nitride. *Nano*. 2017;11:9914-9919. DOI: 10.1021/acsnano.7b03878.

#### Вклад авторов

Муравьев В.В. предложил идею проведения исследования эффектов рассеяния электронов в гексагональном нитриде бора.

Мищенко В.Н. выполнил моделирование эффектов рассеяния электронов в гексагональном нитриде бора.

#### Authors' contribution

Muravyov V.V. proposed the idea of study of the electron scattering effects in hexagonal boron nitride.

Mishchenko V.N. fulfilled the simulation of electron scattering effects in hexagonal boron nitride.

#### Сведения об авторах

Муравьев В.В., чл.-корр. Национальной академии наук Республики Беларусь, д.т.н., профессор Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Мищенко В.Н., к.т.н., доцент Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

#### Information about the authors

Muravyov V.V., Corr. Mem. of National Academy of Sciences of Belarus, Dr. of Sci., Professor at the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics.

Mishchenka V.N., Cand. of Sci., Associate Professor at the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics.

#### Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,  
г. Минск, ул. П. Бровки, 6,  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники;  
тел. +375-017-293-80-70;  
e-mail: [mishchenko@bsuir.by](mailto:mishchenko@bsuir.by)  
Мищенко Валерий Николаевич

#### Address for correspondence

220013, Republic of Belarus,  
Minsk, P. Brovka st., 6,  
Belarusian State University  
of Informatics and Radioelectronics;  
tel. +375-017-293-80-70;  
e-mail: [mishchenko@bsuir.by](mailto:mishchenko@bsuir.by)  
Mishchenka Valery Nikolaevich