

Несмотря на то что собранные данные относятся к сетям с научной спецификой, отмеченные закономерности в целом согласуются с общемировыми [1]. В частности, подтверждается тезис о насыщении азиатских стран компьютерными технологиями и выравнивании вирусной и спам-активности. К сожалению, в России пока не наблюдается тенденции к уменьшению источников опасностей и по динамике развития Россия похожа на Индию и Бразилию. Внедрение новых, оснащенных встроенной защитой операционных систем и сетевых клиентов позволяет сдерживать распространение интернет-угроз. Однако сеть Интернет по-прежнему остается небезопасной, так как происходит постоянное обнаружение новых уязвимостей сетевых сервисов, и при несвоевременном их устра-

нении вероятность несанкционированного вторжения резко увеличивается.

Библиографические ссылки

1. Гудкова Д. Планета, захваченная спамерами // SECURELIST.RU : ежедн. интернет-изд. 2011. 20 сент. URL: http://www.securelist.com/ru/analysis/208050717/Planeta_zakhvachennaya_spamerami (дата обращения: 20.10.2011).
2. Соколов А. В., Шаньгин В. Ф. Защита информации в распределенных корпоративных сетях и системах. М. : ДМК Пресс, 2002.
3. Галицкий А. В., Рябко С. Д., Шаньгин В. Ф. Защита информации в сети – анализ технологий и синтез решений. М. : ДМК Пресс, 2004.

S. V. Isaev

ANALYSIS OF INTERNET THREATS DYNAMICS OF THE NETWORK OF KRASNOYARSK SCIENTIFIC CENTER SB RAS

The work is devoted to the analysis of Internet threats, made on the basis of long-term data of the network of Krasnoyarsk scientific center of the Siberian Branch of Russian Academy of Science. The main tendencies of development of dangerous factors and the structure of danger sources are determined.

Keywords: Internet, viruses, e-mail, data security.

© Исаев С. В., 2012

УДК 538.915

А. А. Кузубов, Ю. Г. Михалев, М. В. Сержантова

ВЛИЯНИЕ ВАКАНСИЙ НА МАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В МОНОСЛОЕ h-BN

Исследовано влияние вакансий бора и азота, а также расстояния между ними на магнитное упорядочение в структуре монослоя гексагонального нитрида бора.

Ключевые слова: монослой гексагонального нитрида бора, теория функционала плотности, электронная структура, вакансии.

Одним из важных вопросов физики конденсированного состояния остается установление взаимосвязи между наличием в системе электронов проводимости и магнитными свойствами материала [1; 2]. Факт появления магнитного упорядочения в плоских структурах типа графена и гексагонального нитрида бора (h-BN) оценивался ранее как маловероятный, поскольку в атомах углерода, бора и азота отсутствуют *d*- и *f*-электроны. Тем не менее данный эффект объясняется кристаллическими [3–7] и структурными дефектами [8].

В работах [9; 10] показано, что точечные дефекты (вакансии) в графене обладают локальными магнитными моментами, взаимодействие которых с электронами проводимости приводит к появлению в системе эффекта Кондо [2; 11–13]. В работе [9] авторы предполагают, что с помощью модификаций решетки графена вакансиями могут быть реализованы магнитно-

упорядоченные системы на основе углеродных наноструктур, в которых возможны переходы «ферромагнетик–антиферромагнетик» [14].

Монослой h-BN с вакансиями – это еще один пример появления намагниченности в плоских структурах [15–17], когда спонтанная намагниченность в отсутствие дефектов не возникает. В работе [15] была получена спонтанная намагниченность в присутствии примесей замещения (C_B , C_N) или вакансий (V_B , V_N) в структуре h-BN. Спин-поляризованные расчеты для C_B - и C_N -дефектов показывают намагниченность монослоя h-BN, которая составляет $1,0 \mu_B$ на один дефект. При вакансионных дефектах V_B и V_N в системе наблюдается спиновая поляризация, которая приводит к появлению магнитных моментов с величинами $3,0$ и $1,0 \mu_B$ соответственно. Это объясняется тем, что при удалении атома азота из монослоя h-BN структура имеет только один неспаренный электрон, а при

удалении атома бора в ней появляется три неспаренных электрона.

Таким образом, появление одиночной вакансии может приводить к возникновению локальных магнитных моментов. Однако до сих пор остается открытым вопрос о наличии магнитного упорядочения в случае высокой концентрации вакансий. Авторами было проведено исследование магнитных свойств вакансий в монослое h-BN, в частности влияния расстояния между вакансиями на переход «ферромагнетик–антиферромагнетик» и влияния деформации ячейки на спиновое состояние монослоя гексагонального нитрида бора с одиночной вакансией бора или азота. Изучение деформации ячейки важно с той точки зрения, что монослои h-BN получают методом химического осаждения из газовой фазы на подложку из другого материала (графен, кремний, никель и т. д.), в результате чего в структуре возникают напряжения, которые приводят к изменению свойств вещества.

Объекты и методы исследования. Расчеты проводились в рамках формализма функционала плотности (DFT) [18] с градиентными поправками (PBE) с использованием пакета VASP (Vienna Ab-Initio Simulation Package) [19–21]. В ходе вычислений применялся псевдопотенциал Вандербиля (Vanderbilt Ultrasoft Pseudopotential) [22]. Программа, в которой выполнялись расчеты, работает с применением периодических условий, вследствие чего для моделирования монослоя по нормали к его плоскости был задан вакуумный промежуток 15 Å. Значение вакуумного промежутка подбиралось исходя из предположения, что на таком расстоянии слои h-BN, находящиеся в соседних суперъячейках, не будут оказывать влияния друг на друга. Обратное пространство в первой зоне Брлюлюэна [23] автоматически разбивалось на сетку по схеме Монхорста–Пака [24], количество k -точек вдоль каждого из направлений составляло $2 \times 2 \times 1$. При расчетах плотности состояния количество k -точек принималось равным $6 \times 6 \times 1$. Все расчеты проводились с максимальным значением энергии плоских волн 348,1 эВ. При оптимизации геометрии минимальное значение сил составляло 0,01 эВ / атом.

На первом этапе рассчитывался монослой h-BN без вакансий с моделированием гексагональной элементарной ячейки, содержащей два атома. На втором этапе для монослоя h-BN рассматривалось три вида суперъячеек с вакансиями, содержащих $6 \times 6 \times 1$ (68 атомов), $8 \times 8 \times 1$ (124 атома) и $10 \times 10 \times 1$ (196 атомов) элементарных ячеек. Каждая смоделированная суперъячейка содержала четыре вакансионных дефекта. Суперъячейки такого рода были выбраны, чтобы выполнить условие равномерного удаления вакансий друг от друга. В результате моделировались структуры с однородным распределением вакансий и различными концентрациями.

Для исследования влияния деформации на магнитные свойства монослоя h-BN был смоделирован монослой h-BN с одной вакансией бора (азота) в виде суперъячейки, содержащей $5 \times 5 \times 1$ прямоугольных ячеек (100 атомов). Деформация ячейки осуществля-

лась путем уменьшения или увеличения вектора трансляции вдоль одной из осей на 2 и 4 %.

Результаты и их обсуждение. Исследовались ферромагнитное, антиферромагнитное и диамагнитное состояния. Ферромагнитное состояние, которое предполагает начальное заселение системы электронами с одинаково направленной проекцией спина, было получено автоматически при использовании спин-поляризованного расчета в программе VASP. Антиферромагнитное состояние задавалось посредством чередования магнитных моментов на атомах, окружающих вакансию. Для сравнения был проведен неспин-поляризованный расчет диамагнитного состояния вещества, который не учитывает магнитное взаимодействие. Расчет показал, что диамагнитное состояние является энергетически невыгодным (табл. 1).

Для монослоев h-BN магнитный момент в системе появляется при вакансиях как бора, так и азота. В обоих случаях атомы, окружающие вакансию, равноудалены друг от друга и димеризации не наблюдается. Спиновая плотность равномерно распределена на атомах, окружающих вакансию, при этом проекции спинов имеют одинаковое направление (рис. 1).

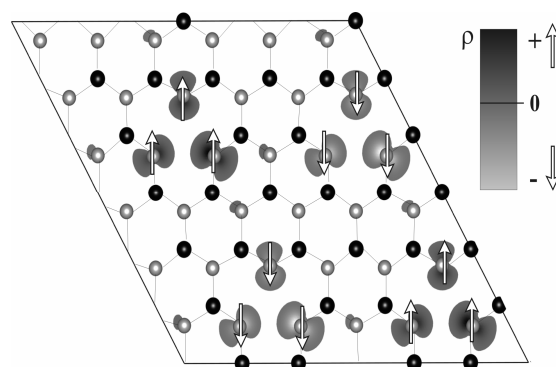


Рис. 1. Локализация магнитных моментов для антиферромагнитного состояния монослоя h-BN с вакансиями азота (черным цветом обозначены атомы азота, серым – бора; стрелками указано направление проекции магнитного момента)

В случае вакансий бора по мере увеличения расстояния между вакансиями наблюдается переход от антиферромагнитного к ферромагнитному упорядочению, а для вакансий азота характерна обратная ситуация, т. е. переход от ферромагнитного к антиферромагнитному состоянию (см. табл. 1).

Таким образом, в ходе проведенных исследований было установлено, что присутствие вакансий в монослое h-BN приводит к появлению магнитного момента, а при высоких концентрациях вакансий – к возникновению магнитно-упорядоченных состояний. При увеличении расстояния между вакансиями возможен переход от антиферромагнитного к ферромагнитному состоянию и наоборот в зависимости от типа вакансий, что предоставляет новые возможности для использования вакансий в монослое h-BN, связанные с внедрением и управлением магнитным упорядочением.

Таблица 1

Магнитные свойства монослоя h-BN с вакансиями бора и азота

Соединение	Концентрация вакансий, %	Расстояние между вакансиями r , Å	M , μ_B	ΔE_{F-AF} , эВ	$\Delta E_{\text{немаг.-маг}}$, эВ
Монослой h-BN с вакансиями бора	5,56	7,5	1,7	0,337 8	0,139 4
	3,13	10,0	2,2	-0,067 0	0,984 3
	2,00	12,5	2,3	-0,032 3	1,183 4
Монослой h-BN с вакансиями азота	5,56	7,5	0,9	-0,007 9	0,217 4
	3,13	10,0	0,9	0,008 0	0,257 0
	2,00	12,5	0,9	0,000 7	0,288 2

Таблица 2

Значение магнитного момента для монослоя h-BN

Деформация ячейки, %	Магнитный момент μ_B	
	Монослой h-BN с вакансией бора	Монослой h-BN с вакансией азота
-4	0,999 8	0,936 7
-2	1,083 4	0,928 3
0	1,988 9	0,921 3
2	1,059 4	0,911 1
4	1,014 4	0,901 7

При исследовании влияния деформации на магнитные свойства рассматривались структуры монослоя h-BN с одиночной вакансией бора или азота при деформации, осуществляемой путем увеличения или уменьшения одного из векторов ячейки на 2 или 4 %.

При любой деформации монослоя h-BN с вакансией бора появляется дополнительное внедренное состояние в области запрещенной зоны, которое локализовано на атомах азота, окружающих вакансию, и не зависит от вида деформации (сжатия или растяжения). Появление магнитного момента в деформированной системе обусловлено электронами, находящимися на орбиталях атомов, окружающих вакансию. Характер зависимости магнитного момента от деформации в этом случае носит сложный характер с максимумом значения магнитного момента, приходящимся на систему без деформации (рис. 2). При этом для системы без деформации характерно высокоспиновое состояние, т. е. все спины на атомах, окружающих вакансию, направлены в одну сторону и разность энергий высокоспинового и низкоспинового состояний $\Delta E_{\uparrow\uparrow-\downarrow\downarrow}$ составляет 0,03 эВ. Для деформированной системы энергетически выгодным является низкоспиновое состояние, при котором две из трех проекций спинов на атомах, окружающих вакансию, направлены в одну сторону, а третья – в противоположенную. Разность энергий высокоспинового и низкоспинового состояний $\Delta E_{\uparrow\uparrow-\downarrow\downarrow}$ для монослоя h-BN с вакансией бора при деформации составляет -0,17 эВ.

Для монослоя h-BN с вакансией азота при деформации на 2 или 4 % внедренное состояние локализовано на атомах бора, окружающих вакансию. Внедренный уровень при сжатии приближается к верхнему уровню, а при расширении – к вакантному нижнему уровню.

Характер зависимости магнитного момента от деформации в случае монослоя h-BN с вакансией азота носит линейный характер: значение магнитного мо-

мента монотонно убывает с увеличением деформации (см. рис. 2).

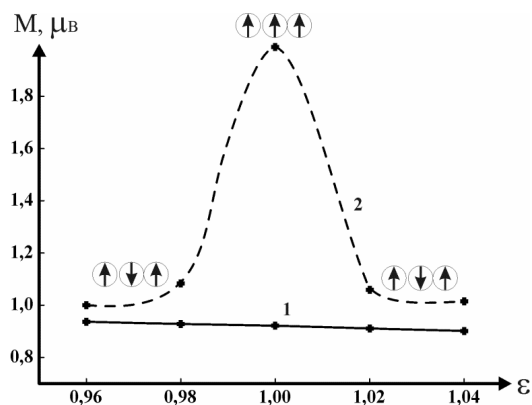


Рис. 2. График зависимости магнитного момента от величины деформации:

1 – для монослоя h-BN с вакансией азота; 2 – для монослоя h-BN с вакансией бора

Также была установлена зависимость магнитного момента M от величины относительной деформации ϵ для каждого типа вакансий. Величины магнитных моментов приведены в табл. 2.

На основании полученных данных можно сделать вывод, что на спиновое состояние в монослое гексагонального нитрида бора с вакансией бора оказывает влияние деформация решетки. Для системы без деформации характерно высокоспиновое состояние, а для системы с деформацией – низкоспиновое.

Таким образом, анализ результатов проведенных спин-поляризованных расчетов показал, что в монослое гексагонального нитрида бора с вакансиями бора или азота возможно магнитное упорядочение, а изменение расстояние между вакансиями вызывает переход «ферромагнетик–антиферромагнетик».

В результате исследования электронной структуры монослоя h-BN с вакансиями бора и азота и анализа влияния деформации ячейки обнаружено, что магнитный момент в монослое гексагонального нитрида бора появляется в случае вакансии бора или азота при всех видах деформации.

Получена зависимость магнитного момента M от величины относительной деформации ячейки ϵ . Показано, что для монослоя h-BN с вакансией бора характерно высокоспиновое состояние, при этом разность энергий высокоспинового и низкоспинового состояний $\Delta E_{\uparrow\uparrow-\uparrow\downarrow}$ составляет 0,03 эВ. В случае деформации ячейки монослоя h-BN с вакансией бора энергетически более выгодным является низкоспиновое состояние ($\Delta E_{\uparrow\uparrow-\uparrow\downarrow} = -0,17$ эВ). Для монослоя h-BN с вакансией азота подобной зависимости не выявлено: в этом случае значение магнитного момента монотонно убывает с увеличением деформации.

Авторы выражают благодарность Институту компьютерного моделирования СО РАН (Красноярск), Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН (Москва), а также Комплексу высокопроизводительных вычислений ИКИТ Сибирского федерального университета (Красноярск) за предоставление возможности использования вычислительных кластеров для проведения расчетов.

Библиографические ссылки

1. Anderson P. W. // Phys. Rev. 1961. Vol. 124. P. 41.
2. Kondo J. // Progress of Theoretical Physics. 1964. Vol. 32. P. 37.
3. Cervenka J., Katsnelson M. I., Flipse C. F. J. // Nature Physics. 2009. Vol. 5. P. 840.
4. Esquinazi P. [et al.] // Phys. Rev. Letters. 2003. Vol. 91. P. 227201.
5. Ugeda M. M., Brihuega I., Guinea F., et al. // Phys. Rev. Letters. 2010. Vol. 104. P. 096804.
6. Lehtinen P. O., Foster A. S., Ma Y., et al. // Phys. Rev. Letters. 2004. Vol. 93. P. 187202.
7. Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K. et al. // J. Phys. Soc. Jap. 1996. Vol. 65. P. 1920.
8. Park N., et al. // Phys. Rev. Letters. 2003. Vol. 91. P. 237204.
9. Chen J.-H., Li L., Cullen W. G., et al. // Nature Physics. 2011. Vol. 7. P. 535.
10. Chen J.-H., Cullen W. G., Jang C., et al. // Phys. Rev. Letters. 2009. Vol. 102. P. 236805.
11. Sengupta K., Baskaran G. // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77. P. 045417.
12. Cornaglia P. S., Usaj G., Balseiro C. A. // Phys. Rev. Letters. 2009. Vol. 102. P. 046801.
13. Hentschel M., Guinea F. // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76. P. 115407.
14. Yazyev O. V., Helm L. // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. P. 125408.
15. Azevedo S., Kaschny J. R., de Castilho C. M. C., de Brito Mota F. // Europ. Phys. J. B. 2009. Vol. 67. P. 507–512.
16. Сержантова М. В., Кузубов А. А., Федоров А. С. и др. // Журн. эксперим. и теорет. физики. 2011. Т. 139 (4). С. 764.
17. Кузубов А. А., Сержантова М. В., Федоров А. С. и др. // Письма в Журн. эксперим. и теорет. физики. 2011. Т. 93 (6). С. 368.
18. Kohn W., Sham L. J. // Phys. Rev. 1965. Vol. B 140. P. A1133.
19. Kresse G., Hafner J., et al. // Phys. Rev. 1993. Vol. B 47. P. 558.
20. Kresse G., Hafner J., et al. // Phys. Rev. 1993. Vol. B 48. P. 13115.
21. Kresse G., Hafner J., et al. // Phys. Rev. 1994. Vol. B 49. P. 14251.
22. Vanderbilt D. // Phys. Rev. 1990. Vol. B bf 41. P. 7892.
23. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М., 1978.
24. Monkhorst H. J., Pack J. D. // Phys. Rev. 1976. Vol. B B 13. P. 5188.

A. A. Kuzubov, Yu. G. Mickalev, M. V. Serzhantova

INFLUENCE OF VACANCIES ON THE MAGNETIC ORDERING IN THE MONOLAYER h-BN

This paper is devoted to investigation of the influence of boron and nitrogen vacancies, as well as the distance between them, on the magnetic ordering in the structure of a monolayer of hexagonal boron nitride.

Keywords: hexagonal boron nitride monolayer (h-BN), density functional theory (DFT), electronic structure, vacancies.

© Кузубов А. А., Михалев Ю. Г., Сержантова М. В., 2012