

На правах рукописи

Сержантова Мария Викторовна

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ НА СТРУКТУРУ И
СВОЙСТВА МОНОСЛОЯ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО НИТРИДА БОРА

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2012

Работа выполнена в Сибирском федеральном университете, г. Красноярск

Научные руководители: доктор химических наук, профессор
Михалев Юрий Глебович
кандидат физико-математических наук, доцент
Кузубов Александр Александрович

Официальные оппоненты: Козлова Светлана Геннадьевна
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
(Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт неорганической химии
им. А.В. Николаева Сибирского отделения
Российской академии наук, лаборатория физической
химии конденсированных сред, заведующий
лабораторией)

Наслузов Владимир Алексеевич
кандидат химических наук
(Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт химии и химической
технологии Сибирского отделения РАН, лаборатория
молекулярной спектроскопии, старший научный
сотрудник)

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт катализа
им. Г.К. Борескова Сибирского отделения
Российской академии наук, г. Новосибирск

Защита состоится «___» декабря 2012 г. в ___ час. на заседании диссертационного
совета Д. 003.055.02 при Учреждении Российской академии наук Институте физики
им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук по адресу:
660036, г. Красноярск, ул. Академгородок 50/38.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института физики
им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук по адресу:
660036, г. Красноярск, ул. Академгородок 50/38.

Автореферат разослан «___» ноября 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Втюрин Александр Николаевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Спрос на компактные лазерные устройства ультрафиолетового спектра увеличивается, так как они имеют важное применение в таких областях как оптические накопители, фотокатализ, стерилизация, офтальмологическая хирургия и нанохирургия. Гексагональный нитрид бора (h-BN) является перспективным материалом для применения в лазерных устройствах. h-BN подобно графиту может существовать в виде отдельных монослоев. Подобные структуры могут быть использованы в наноэлектронике.

Монослой при выращивании располагается на подложке из других материалов (графен, никель, медь), в результате чего возникает напряжение в материале, что приводит к деформации решетки монослоя и как следствие к изменению его свойств.

В 2009-2010 гг. Li Song, Lijie Ci, Hao Lu, Pavel B. Sorokin и др. синтезировали монослой гексагонального нитрида бора и провели расчет модуля упругости. Структурные и электронные свойства были исследованы экспериментально и теоретически в работах N. Ooi, M. Hubacek, V.L. Solozhenko, T. Wittkowski, T. Kuzuba, Nag Angshuman, E. Hernandez и др. Однако влияние деформации на структуру монослоя гексагонального нитрида бора с вакансиями изучено, а это необходимо для получения материалов с заданными свойствами. Другим дефектом являются адатомы, их появление на поверхности будет приводить к изменениям электронной структуры. Кроме того, концентрация адатомов на поверхности и скорость их миграции будет оказывать влияние на концентрацию вакансий в монослое гексагонального нитрида бора.

Существует предположение, что монослой h-BN, подобно графену, могут обладать локальным магнитным моментом, вызванным вакансиями. Тем не менее, данный вопрос остается открытым, как и вопрос о магнитном упорядочении и возможности перехода ферромагнетик-антиферромагнетик в зависимости от расстояния между вакансиями в монослое h-BN.

Таким образом, можно утверждать, что исследование стабильности дефектов и их влияния на электронную структуру и магнитные свойства монослоя гексагонального нитрида бора в равновесных и неравновесных условиях является актуальной научной задачей.

Цель диссертационной работы состоит в теоретическом исследовании стабильности дефектов (вакансий и адатомов), их поведения и влияния на электронную структуру, и магнитные свойства монослоя гексагонального нитрида бора в равновесных и неравновесных условиях.

В соответствии с целью диссертационной работы были поставлены следующие задачи:

1. Провести моделирование монослоя гексагонального нитрида бора (h-BN) с вакансией (бора, азота или бивакансией) и с адатомом (бора или азота) без деформации. А так же моделирование деформации (сжатие или растяжение) ячейки на 2 % и 4 % для монослоя h-BN с вакансиями. Смоделировать суперячейки монослоя h-BN с различным расстоянием между вакансиями (бор, азот) для изучения магнитного упорядочения в системе.
2. Выявить зависимость энергии образования вакансии (бора, азота, бивакансии) от деформации ячейки монослоя гексагонального нитрида бора.
3. Проанализировать влияние вакансий (бора, азота, бивакансии) на электронную структуру гексагонального нитрида бора в равновесных и неравновесных условиях (сжатие или растяжение ячейки на 2 % и 4 %).

4. Определить возможность магнитного упорядочения в структуре монослоя гексагонального нитрида бора с вакансиями бора и азота.
5. Проанализировать влияние адатомов (бора, азота) на электронную структуру, а также провести оценку возможности их миграции по поверхности монослоя гексагонального нитрида бора.

Методы исследования. В качестве методики исследований используется вычислительный эксперимент, включающий в себя следующие этапы: формулировка задачи, проведение расчетов, анализ и визуализация полученных численных результатов. Для моделирования электронной и атомной структуры монослоя гексагонального нитрида бора используется теория функционала плотности (DFT) с обобщенным градиентным приближением (GGA) с применением пакета VASP (ViennaAb-initioSimulationPackage). Моделирование физических процессов с помощью теории функционала плотности позволяет прогнозировать свойства материалов в различных условиях (наличие дефектов, деформация ячейки), провести оценку возможности протекания процессов и определить их эффективность, а также получить параметры процессов, не прибегая к дорогостоящим экспериментам.

Научная новизна работы. В работе впервые получена зависимость стабильности вакансий монослоя гексагонального нитрида бора от деформации ячейки. Установлено, что наиболее стабильными являются вакансии атомов азота вне зависимости от деформации монослоя.

Расчеты электронной структуры монослоя гексагонального нитрида бора с вакансией (бора, азота, бивакансией) или адатомом (бора, азота) приводит к появлению внедренных состояний в области запрещенной зоны. В зависимости от деформации ячейки монослоя с вакансией изменяется количество внедренных уровней и их положение – смещение к вакантному нижнему уровню или заполненному верхнему. Все внедренные состояния локализованы на атомах, окружающих дефект.

По результатам расчетов установлено, что магнитный момент в монослое гексагонального нитрида бора появляется в случае вакансии бора и азота. На основе полученных данных, выявлена зависимость магнитного момента (M) от величины относительной деформации ячейки (ϵ) и обнаружено, что магнитный момент в монослое гексагонального нитрида бора появляется и при наличии бивакансии в условиях растяжения ячейки на 4 %.

Предсказана возможность магнитного упорядочения в монослое гексагонального нитрида бора. Установлено, что расстояние между вакансиями в монослое h-BN оказывает влияние на магнитное упорядочение. В случае вакансий бора при увеличении расстояния между вакансиями (т.е. при уменьшении концентрации вакансий) возможен переход антиферромагнетик-ферромагнетик. Для вакансий азота при аналогичных условиях, характерна противоположенная ситуация, переход ферромагнетик-антиферромагнетик.

Выявлено, что наиболее стабильным является положение адатома (бора или азота) по связи B-N со смещением адатома бора к атому азота кристаллической решетки, и адатома азота со смещением к атому бора.

В ходе процесса моделирования миграции адатома (бора, азота) по поверхности монослоя гексагонального нитрида бора, получены значения энергетических барьеров перехода адатома между наиболее выгодными положениями. Малая величина барьера для адатома бора указывает на то, что данный тип адатомов будет достаточно быстро перемещаться по поверхности, в отличие от адатомов азота, для которых величина энергетического барьера лимитирующей стай миграции составляет $\sim 1,23$ эВ.

Основные научные положения, выносимые на защиту:

1. Установлено, что наиболее стабильными являются вакансии атомов азота вне зависимости от деформации монослоя h-BN.
2. Обнаружено, что наличие вакансий (бора, азота, бивакансии) и адатомов (бора, азота) приводит к появлению внедренных состояний в области запрещенной зоны. Деформация ячейки в случае монослоя гексагонального нитрида бора с вакансией приводит к перемещению внедренного состояния к вакантному нижнему или заполненному верхнему уровню.
3. Выявлено, что магнитный момент в монослое гексагонального нитрида бора появляется в случае вакансии бора и азота, а так же при наличии бивакансии в условиях растяжения ячейки на 4 %. Найдена зависимость магнитного момента от величины относительной деформации ячейки.
4. Установлено, что вакансии в монослое гексагонального нитрида бора приводят к магнитному упорядочению: ферромагнетик или антиферромагнетик – в зависимости от расстояния между вакансиями.
5. Определено, что наиболее стабильным положением адатома (бора, азота) на поверхности монослоя гексагонального нитрида бора является расположение адатома над связью B-N, а низкое значение энергетического барьера миграции адатома бора будет приводить к быстрой рекомбинации с одноименными вакансиями по сравнению с адатомом азота.

Практическая значимость. Реализация результатов исследования влияния дефектов (вакансий и адатомов) и деформации на электронную структуру монослоя гексагонального нитрида бора позволит получать материалы с заданными свойствами для применения в нанoeлектронике. Кроме того, реализация магнитного упорядочения в монослое h-BN даст возможность управления магнитными свойствами и получения неметаллического магнита.

Апробация работы: Результаты, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на научных конференциях различного уровня, в том числе на Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике (г. Владивосток, 2010 г. и 2011 г.), VI (XXXVIII) Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Образование, наука, инновации - вклад молодых исследователей» (г. Кемерово, 2011 г.), Семнадцатой всероссийской конференции студентов - физиков и молодых ученых физиков (г. Екатеринбург, 2011 г.) и Восемнадцатой всероссийской конференции студентов - физиков и молодых ученых физиков (г. Красноярск, 2012 г.), XIV Всероссийской научно-методической конференции «Фундаментальные исследования и инновации в технических университетах» (г. Санкт-Петербург, 2010г.), II Всероссийской научной конференции «Научное творчество XXI века» с международным участием (г. Красноярск, 2010г.), Региональной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых НКСФ-XXXIX (2010) (г. Красноярск, 2010г.), XIV Международной научной конференции, посвященной памяти генерального конструктора ракетно-космических систем академика М.Ф. Решетнева (г. Красноярск, 2010г.), семинарах.

Публикации. По теме данной работы опубликовано 18 печатных работ, из них пять статей в научных изданиях, входящих в Перечень ВАК.

Структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, выводов и списка литературы. Работа изложена на 114 страницах машинописного текста, проиллюстрирована 5 таблицами и 31 рисунком. Библиография включает 249 источников.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** приведен краткий обзор литературы, посвященной проблеме исследования монослоев гексагонального нитрида бора. Дано обоснование актуальности выбранной темы, указывается ее научная новизна, сформулированы цели и методы исследования, а также кратко излагается содержание диссертационной работы по главам, перечислены основные результаты работы.

В **главе 1**, которая носит обзорный характер, рассмотрены существующие модификации нитрида бора, изложены основные свойства и методы получения пленок кубического и гексагонального нитрида бора, описаны возможные дефекты в структуре гексагонального нитрида бора. Приведены области применения гексагонального нитрида бора.

В **§ 1 главы 1** рассмотрены основные модификации нитрида бора. Существует несколько модификаций нитрида бора: аморфная (a-BN) и четыре кристаллических фазы нитрида бора. Гексагональный нитрид бора (h-BN) представляет собой графитоподобную слоистую структуру с sp^2 -связями в шестичленных кольцах с чередованием атомов бора и азота, уложенных в последовательности (ABAB). Ромбоэдрический нитрид бора состоит из sp^2 -связанных шестичленных колец (подобно, h-BN), которые укладываются в трехслойную последовательность (ABCABC). Подобно лонсдейлитной форме алмаза (гексагональный алмаз) высокого давления и низких температур, существует аналогичная форма нитрида бора – вюрцитный нитрид бора (ω -BN). Атомы в гексагональной структуре ω -BN находятся в sp^3 -гибридизированном состоянии и группируются в тетраэдры с разными углами между соседними тетраэдрами. ω -BN метастабилен в условиях окружающей среды. Кубический нитрид бора (c-BN) является аналогом алмаза, имеет структуру кристалла сфалерита, атомы находятся в sp^3 -связанном состоянии. Кроме того, существует спектр фаз, обычно называемых турбостратным нитридом бора (t-BN), они находятся между высоко упорядоченным h-BN и аморфным материалом. Наибольшее распространение в промышленности получили кубический и гексагональный нитриды бора, что объясняется широким спектром свойств данных соединений.

В **§ 2 главы 1** изложены основные свойства кубического нитрида бора. Кубический нитрид бора (c-BN) – кристаллическое соединение с широкой запрещенной зоной. Кубический нитрид бора имеет низкую плотность (3480 кг / м^3), исключительную твердость, уступающую лишь алмазу, высокую теплопроводность ($1300 \text{ Вт / (м} \cdot \text{К)}$ для $T = 300 \text{ К}$), широкую запрещенную зону (6-6,4 эВ), большое сопротивление ($10^{14} \text{ Ом} \cdot \text{м}$). Отличается химической стойкостью к окислению (до 1300 К), прозрачностью в интервале от ближнего ультрафиолета до инфракрасного спектра (показатель преломления $n = 2,1$ для $\lambda = 600 \text{ нм}$). Не смотря на сходства свойств c-BN и алмаза, существуют и значительные различия между ними. Кубический нитрид бора обладает высокой термической стабильностью, как в окислительных средах, так и при контакте с такими металлами как Fe, Co, Ni.

В **§ 3 главы 1** описаны основные методы получения пленок кубического нитрида бора. Для получения порошка кубического нитрида бора (c-BN) обычно используется гексагональный нитрид бора (h-BN), который может быть синтезирован при нагревании оксида бора с азотом. Превращение h-BN в c-BN, происходит при высоком давлении и высокой температуре (6 ГПа и 2300 К). Чаще всего в современных устройствах применение порошков не приемлемо и необходимо использование пленок. Получение тонких пленок c-BN возможно с помощью молекулярного наплаивания (Chemical Vapour Deposition (CVD) – метод химического осаждения из газовой

фазы). Метод ионно-импульсного лазерного нанесения используют для производства более 85 % sp^3 -гибридизированного кубического нитрида бора (c-BN).

В § 4 главы 1 изложены основные свойства гексагонального нитрида бора. Гексагональный нитрид бора (h-BN, α -BN или g-BN) является наиболее стабильной формой нитрида бора и представляет собой слоистую структуру подобную графиту. Межплоскостная связь в кристалле является достаточно слабой, хотя в отличие от графита к Ван-дер-ваальсовому притяжению между слоями добавляется взаимодействие между разноименно заряженными атомами азота и бора в соседних плоскостях. Однако этот вклад незначителен, и параметры решетки h-BN близки к графиту $a_0 = b_0 = 2,50-2,51 \text{ \AA}$ и $c_0 = 2,66-2,67 \text{ \AA}$. В связи с этим сходством между графитом и h-BN, последний используется для изготовления нанотрубок и наноконусов, так же, как графит. h-BN имеет ту же механическую прочность и теплопроводные свойства, что и графит, и ширину запрещенной зоны ($\sim 4-6 \text{ эВ}$), что делает его изолятором. Гексагональная слоистая фаза имеет температуру плавления более 3000 К при относительно низкой плотности (2250 кг / м^3).

В § 5 главы 1 описаны основные методы получения гексагонального нитрида бора. Промышленный синтез h-BN основан на 2-х этапном процессе. На первом этапе, при температуре около 1100 К в качестве источника бора используется, такие вещества как B_2O_3 (оксид бора) и H_3BO_3 (борная кислота), которые вступают в реакцию с источником азота (в основном меламин или мочевины, а иногда даже аммиачной воды $[NH_3]$), продуктом является аморфный нитрид бора. На втором этапе происходит кристаллизация при температуре более 1800 К в атмосфере N_2 . Контроль параметров процесса отжига на втором этапе определяет не только степень чистоты продукта, но и все свойства порошка. h-BN пленки могут быть получены из объемного BN микромеханическим расщеплением и использоваться в качестве диэлектрика. Несколько слоев h-BN были также получены с помощью ультразвукового диспергирования кристаллов h-BN в 1,2-дихлорэтановом растворе полифениленвинилена. Основным же способом получения пленок h-BN является химическое осаждение из газовой фазы (CVD). Подобный метод позволяет выращивать пленки, состоящие от двух до пяти слоев, с большой шириной запрещенной зоны и обладающие уникальными механическими свойствами.

В § 6 главы 1 рассмотрены дефекты в монослое гексагонального нитрида бора. Понимание формирования и механизмов диффузии точечных дефектов в слоистых структурах представляет фундаментальный интерес в связи с ключевым влиянием дефектов на электронные и механические свойства таких систем.

В структуре монослоя могут возникать различные типы дефектов: точечные, линейные, зигзаги, вакансии замещения. Установлено, что дефекты в h-BN формируются в основном в результате выброса атомов бора из решетки, а зигзагообразные края из-за выброса атомов азота. Так же возможно образование дефектов Стоуна-Уэльса.

В § 7 главы 1 показаны возможные области применения гексагонального нитрида бора. Гексагональный нитрид бора имеет широкую область применения от металлургии до косметики. h-BN является изолятором и может, применяется в качестве барьерного слоя при утечке заряда в электронном оборудовании. Светоизлучающие устройства на основе h-BN в дальней ультрафиолетовой зоне (FUV), могут быть использованы в компактной оптоэлектронике УФ-спектра. h-BN остается химически инертным при температурах выше 2000 К, не смачивается расплавленными металлами и галоидными флюсами. Благодаря этим свойствам порошок h-BN стал незаменимым компонентом в производстве различных огнеупорных покрытий и

керамики. Поверхность h-BN очень ровная и гладкая. Благодаря последнему качеству порошок h-BN стал использоваться в качестве основы для косметики.

В главе 2 приведены методы расчета структуры и свойств кластеров и периодических структур.

В § 1 главы 2 описана теория функционала плотности. Метод функционала плотности *ab-initio*, т.е. первопринципный метод изначально использует информацию только о конфигурации электронных оболочек атомов, составляющих систему, однако из-за высокой сложности расчёта в ней также применяются некоторые приближения. Одночастичное уравнение Шредингера решается для набора отдельных электронов, движущихся в самосогласованном потенциале, создаваемом остальными электронами и ядрами атомов. Таким образом, многоэлектронная система рассматривается как система невзаимодействующих электронов.

В приближении локальной плотности (ЛПД) – *LocalDensityApproximation (LDA)* – значение обменно-корреляционной энергии равно известному значению энергии многоэлектронного взаимодействия в электронной системе с постоянной электронной плотностью (однородный электронный газ).

В обобщённом градиентном приближении (ОГП) – *GeneralizedGradientApproximation (GGA)* обменно-корреляционный функционал зависит не только от плотности, но и от её первой пространственной производной. Для расчёта свойств твёрдых тел наиболее широко используется обобщенное градиентное приближение (ОГП) – *GeneralizedGradientApproximation (GGA)*, предложенное группой Perdew.

В § 2 главы 2 описан метод псевдопотенциала. Суть метода псевдопотенциала состоит в том, чтобы путем некоторой процедуры уменьшить степень осцилляций рассчитываемых валентных волновых функций вблизи ядра атома. При этом учитываются только валентные электроны. Внутренние же электроны считаются неизменными, т.е. предполагается, что поведение волновых функций внутренних электронов не меняется при изменении внешнего химического окружения атома. Эти электроны будут только приводить к изменению эффективного заряда иона.

В § 3 главы 2 описан метод псевдопотенциала Вандербиля. Один из видов псевдопотенциала был предложен Вандербилтом и независимо от него Блохом в 1990 г. Важной его особенностью является ослабление условия сохранения нормировки. Псевдоволновая функция представляется настолько сглаженной, насколько это возможно, вследствие чего значительно уменьшается необходимая энергия отрыва. Получающийся в результате недостаток заряда компенсируется введением присоединённых атомно-центровых зарядов. Псевдопотенциал Вандербиля имеет широкую область применения позволяет производить расчёты с высокой скоростью и точностью.

Глава 3 посвящена обсуждению результатов исследования влияния дефектов на структуру и свойства монослоя гексагонального нитрида бора.

В § 1 главы 3 приводится описание объектов и методов исследования. Расчёты проводились в рамках формализма функционала плотности (*DensityFunctionalTheory (DFT)*) с градиентными поправками (*ThePerdew-Burke-Ernzerhof (PBE) functional*) с использованием пакета *VASP (ViennaAb-initiationSimulationPackage)*. В ходе вычислений применялся ультрамягкий псевдопотенциал Вандербиля (*Vanderbiltultrasoftpseudopotential*).

Для построения зонной структуры монослоя h-BN без вакансий и деформации использовалась гексагональная ячейка, для которой зонная структура строилась по

следующим направлениям, соединяющим точки: Γ (0; 0; 0); M (0,5; 0,5; 0); K (2/3; 1/3; 0). Во всех остальных случаях использовалась прямоугольная ячейка, которая имеет следующие точки, соединяющие направления: Γ (0; 0; 0); X (0,5; 0; 0); M (0,5; 0,5; 0). Для исследования влияния деформации и вакансий на электронное строение и магнитные свойства, был смоделирован монослой h-BN в виде суперячейки, содержащей 5 x 3 x 1 прямоугольных ячеек (60 атомов; 12,3 x 11,2 Å). Вдоль направления a суперячейка составляла 5 векторов трансляции прямоугольной ячейки, а вдоль b – 3.

Для расчета энергии вакансий монослоя h-BN без деформации и в присутствии одноосной деформации (2 % и 4 %), а так же параметров миграции атомов бора и азота по его поверхности был смоделирован монослой h-BN в виде суперячейки, содержащей 5 x 5 x 1 прямоугольных ячеек (100 атомов; 11,2 x 18,1 Å). Подобные параметры были выбраны, чтобы исключить взаимодействие моделируемых дефектов, расположенных в различных суперячейках. Поскольку программа, в которой выполнялись расчеты, работает с использованием периодических условий, то для отделения монослоя, вдоль направления c (направление нормали к поверхности монослоя h-BN) вводился вакуумный интервал. Значение вакуумного промежутка подбиралось исходя из предположения, что на данном расстоянии слои h-BN, находящиеся в соседних суперячейках не будут оказывать влияния друг на друга. Для нахождения оптимального интервала между слоями проводились предварительные расчеты, установлено, что оптимальным является вакуумный интервал равный 15 Å. Обратное пространство в первой зоне Брлюэна в ходе оптимизации геометрии автоматически разбивалось на сетку по схеме Монхорста-Пака, количество k -точек вдоль каждого из направлений составляло 2 x 2 x 1. При расчетах плотности состояния количество k -точек составляло 6 x 6 x 1. Все расчеты в работе проводились с максимальным значением энергии плоских волн 348,1 эВ. При оптимизации геометрии минимальное значение сил составляло 0,01 эВ / Å.

В § 2 главы 3 описано влияние деформации на стабильность вакансий. Для этого рассматривались структуры монослоя h-BN с вакансией бора, с вакансией азота и с бивакансией (вакансии бора и азота одновременно). Моделирование деформации осуществлялось с помощью уменьшения или увеличения вектора трансляции вдоль одной из осей на 2 % и на 4 %. Расчет энергии образования вакансии по бору производился по формуле:

$$E(B) = E(B_{49}N_{50}) - E(B_{50}N_{50}) + \mu(B), \quad (3.1)$$

где $E(B)$ – энергия образования вакансии по В (N), $E(B_{49}N_{50})$ – полная энергия монослоя h-BN с вакансией В (N), $E(B_{50}N_{50})$ – полная энергия монослоя h-BN, $\mu(B)$ – химический потенциал атома В в гексагональном нитриде бора. В свою очередь величина химического потенциала μ определялась как:

$$\mu(B) = E(BN) - \frac{E(N_2)}{2}, \quad (3.2)$$

где $E(BN)$ – энергия элементарной ячейки h-BN, а $E(N_2)$ – энергия молекулярного азота. Расчет энергии вакансии по азоту производился по формуле аналогичной (3.1), за исключением того, что использовалось рассчитанное значение химического потенциала азота в h-BN:

$$\mu(N) = E(BN) - \frac{E(B_{12})}{12}, \quad (3.3)$$

где $E(BN)$ – энергия элементарной ячейки h-BN, а $E(B_{12})$ – энергия элементарной ячейки для наиболее стабильной фазы бора.

Для расчета энергии образования бивакансии использовалась следующая формула:

$$E_{\text{бивак}} = E(B_{49}N_{49}) - E(B_{50}N_{50}) + E(BN), \quad (3.4)$$

где $E_{\text{бивак}}$ – энергия образования бивакансии, $E(\text{B}_{49}\text{N}_{49})$ – полная энергия монослоя h-BN с бивакансией, $E(\text{B}_{50}\text{N}_{50})$ – полная энергия монослоя h-BN, $E(\text{BN})$ – энергия элементарной ячейки h-BN.

Полученные результаты представлены в виде графической зависимости на рисунке 1.

Из полученных зависимостей можно сделать вывод о том, что наиболее стабильными являются вакансии азота.

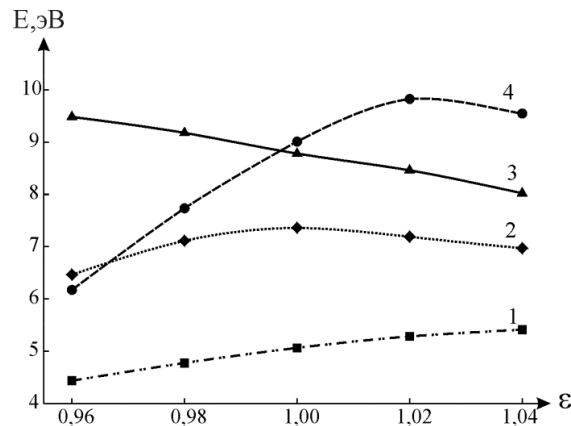


Рисунок 1 – График зависимости энергии образования вакансии от величины относительной деформации ячейки монослоя h-BN

1 – с вакансией азота; 2 – с вакансией бора; 3 – с бивакансией при сжатии перпендикулярно направлению вакансии; 4 – с бивакансией при сжатии вдоль направления вакансии

Для оценки концентраций вакансий использовалась формула (3.5), расчеты проводились для температур 298 К и 900 К.

$$n_{\text{вак}} = \exp\left(\frac{-E_{\text{вак}}}{kT}\right), \quad (3.5)$$

где $n_{\text{вак}}$ – концентрация вакансий в монослоях h-BN; $E_{\text{вак}}$ – энергия образования вакансии В (N) в монослоях h-BN; k – постоянная Больцмана ($8.617 \cdot 10^{-5}$ эВ / К); T – температура (К).

Так, концентрация вакансий азота, обладающих минимальной энергией образования, равна $1 \cdot 10^{-75}$, при стандартной температуре 298 К. Концентрация вакансий атомов бора и бивакансий будут существенно ниже, поскольку они обладают гораздо более высокой энергией образования. При температуре синтеза методом CVD, которая составляет ~ 900 К, концентрация вакансий атомов азота будет составлять $1 \cdot 10^{-25}$. Такая незначительная концентрация вакансий, даже при подобной температуре, практически не будет влиять на свойства “белого графена”.

§ 3 главы 3 посвящен исследованию поведения адатомов на поверхности монослоя гексагонального нитрида бора.

Пункт 3.3.1. В параграфе 2, главы 3 показано, что количество вакансий в монослоях h-BN достаточно мало, при этом наиболее стабильными являются вакансии атомов азота. Однако, на число вакансий будет влиять подвижность адатомов азота и бора на поверхности слоя, и как следствие, возможность их рекомбинации с вакансиями. Для оценки вероятности данных процессов, в работе проводилось моделирование движения адатомов с целью расчета кинетических параметров их перескоков по поверхности монослоя h-BN.

Для этого были найдены наиболее выгодные положения адатомов на поверхности. Рассматривалось четыре различных места возможной локализации адатома В (N) (рисунок 2).

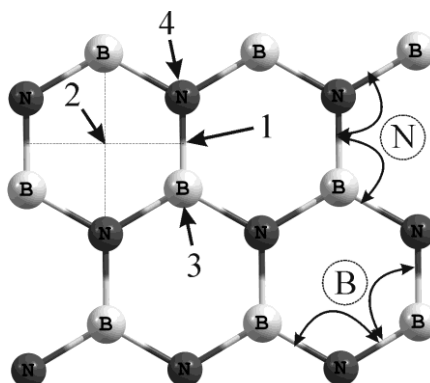


Рисунок 2 – Места возможного расположения адатомов бора и азота, а также условные траектории перехода адатомов В и N по поверхности монослоя h-BN
 1 – адатом В (N) располагается по связи В-N; 2 – адатом В (N) располагается в центре шестиугольника BN; 3 – адатом N располагается над атомом бора монослоя h-BN; 4 – адатом В располагается над атомом азота монослоя h-BN

Из полученных данных можно сделать вывод о том, что наиболее выгодным положением является расположение адатомов В и N по связи В-N со смещением адатома бора к атому азота кристаллической решетки (рисунок 2, положение 1), и адатома азота со смещением к атому бора.

Пункт 3.3.2 посвящен моделированию движения адатомов по поверхности монослоя h-BN между наиболее выгодными положениями осуществлялось с использованием метода упругой ленты (NudgedElasticBand (NEB) method). Данный метод используется для оптимизации пути реакции между двумя наиболее выгодными положениями атомов. Оптимизация осуществляется линейной интерполяцией, т.е. возможный путь реакции разбивается на определенное количество шагов, на каждом шаге производится оптимизация геометрии и находится минимальная энергия системы. В случае монослоя h-BN возможны две траектории переходов адатомов бора и азота: через одноименный атом принадлежащий монослою h-BN и разноименный. Для перехода адатома бора по поверхности через атом азота монослоя h-BN величина энергетического барьера составляет $\sim 0,12$ эВ, и для перехода адатома бора через атом бора – энергетический барьер $\sim 0,23$ эВ. Для адатома азота энергетический барьер для перехода через атом бора монослоя h-BN составляет $\sim 0,38$ эВ, а для перехода через атом азота $\sim 1,23$ эВ. Малая величина барьера для адатома бора указывает на то, что данный тип адатомов будет достаточно быстро перемещаться по поверхности, в отличие от адатомов азота. Следовательно, выращивание монослоя h-BN методами, в которых существует возможность появления адатомов на поверхности (например, химическое осаждение из газовой фазы (CVD)), будет приводить к получению структуры, в которой возможно существование только вакансий азота.

Пункт 3.3.3. Адатомы бора (азота), вызывают изменения в электронной структуре монослоя h-BN подобно вакансиям, т.е. появляется внедренное состояние. Анализ распределения полных и парциальных спиновых плотностей показал, что в присутствии адатома бора наблюдается три внедренных состояния, два из которых являются вакантными и одно заполненное.

Во всех случаях внедренные состояния образованы вкладами от орбиталей адатома бора и атома кристаллической решетки, к которому смещается адатом в ходе оптимизации.

Для системы h-BN с адатомом азота плотность состояний рассчитывалась лишь для случая, когда адатом располагался над связью B-N. Во всех других случаях: расположения адатома азота над атомом азота или над атомом бора, принадлежащих кристаллической решетки и расположение в центре шестиугольника h-BN, плотность состояний не рассчитывалась, т.к. данные состояния являются невыгодным и в ходе процедуры оптимизации адатом азота удаляется от поверхности монослоя h-BN. Распределение полных и парциальных спиновых плотностей показывает, что для подобной системы характерно одно вакантное внедренное состояние, образованное орбитальми адатома азота.

В §4 главы 3 описывается влияние деформации на электронную структуру монослоя гексагонального нитрида бора.

Пункт 3.4.1. Ширина запрещенной зоны, рассчитанная для монослоя h-BN, сильно варьируется в зависимости от метода расчета и составляет 4,5 эВ при использовании LDA-приближения, 4,6 эВ при использовании GGA-приближения, при использовании гибридного B3LYP функционала ширина запрещенной зоны составляет 6,4 эВ, и достигает 8,1 эВ при применении функций Грина (GW-приближение). Большое значение ширины запрещенной зоны при расчете с использованием GW-приближения обусловлено тем, что в двумерной структуре h-BN отсутствует взаимодействие между слоями и как следствие отсутствует размытие электронных уровней, что приводит к увеличению запрещенной зоны по сравнению с объемными кристаллами.

Для сравнения нами были рассчитаны зонная структура (рисунок 3а) и распределение плотности электронных состояний (рисунок 3б) для монослоя h-BN без дефектов и деформации.

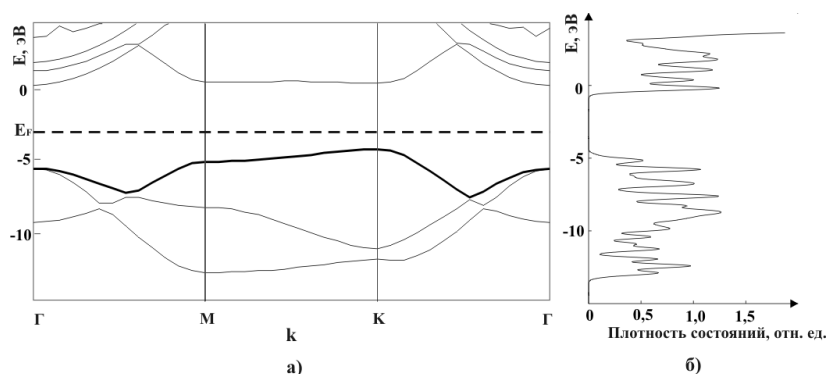


Рисунок 3 – Зонная структура (а) и плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми (б) для монослоя h-BN без дефектов и деформации

Было установлено, что монослой h-BN является диэлектриком с прямой запрещенной зоной в точке К, ширина которой составляет 4,56 эВ.

Для выявления зависимости ширины запрещенной зоны от деформации было проведено исследование плотности электронных состояний для монослоя h-BN. Рассматривалась одноосное сжатие и растяжение на 2 % или 4 % монослоя h-BN без вакансий. При деформации наблюдается незначительное изменение ширины запрещенной зоны и смещение уровня Ферми к заполненному верхнему уровню. При сжатии монослоя h-BN на 4 % и 2 % ширина запрещенной зоны составляет 4,50 эВ и 4,53 эВ, соответственно. Для системы без деформации соответствует ширина щели 4,56 эВ. При растяжении на 2 % и 4 % ширина запрещенной зоны составляет 4,60 эВ и 4,61 эВ, соответственно. Таким образом, деформации, которые присутствуют при выращивании монослоев h-BN, приводят к варьированию ширины запрещенной зоны.

Еще одним фактором, влияющим на разброс ширины запрещенной зоны, может быть наличие дефектов, которые в определенном количестве всегда присутствуют в кристалле. Поскольку присутствие вакансии указывает на существование в системе оборванных связей, это может приводить не только к изменению прочности материала, но и к появлению в нем магнитного момента и изменению его электронного строения. Получаемые в эксперименте подобные структуры, располагаются на подложке. Взаимодействие материала с подложкой приводит к возникновению в нем напряжений, под действием которых происходит последующее изменение свойств. Ранее одновременное влияние вакансий и деформации на свойства монослоя h-BN в данный момент не исследовано.

Пункт 3.4.2.С помощью вышеперечисленных методов была проведена качественная оценка ширины запрещенной зоны в структурах монослоя h-BN, h-BN с вакансией бора, с вакансией азота и с бивакансией (рисунок 4). Вакансии в атомной структуре h-BN приводят к изменению электронной структуры соединения. В интервале от -3 до 1 эВ, в случае дефекта бора, появляется внутреннее состояние (внедренный уровень) в области запрещенной зоны, образованное вакантными орбиталями. В случае дефекта азота наблюдается аналогичное состояние, частично заполненное электронами. При наличии в пластине бивакансий наблюдается два внедренных уровня, образованных вакантными орбиталями атомов, окружающих бивакансию.

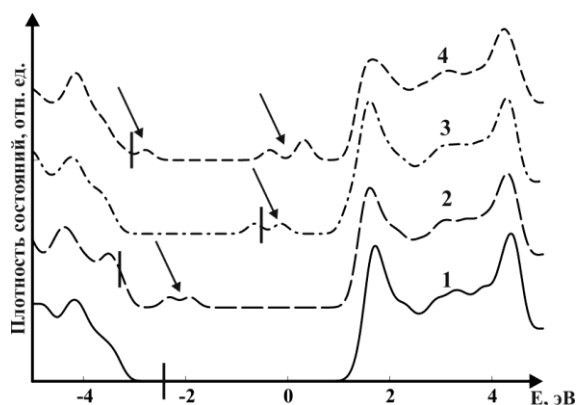


Рисунок 4 – Плотности состояний для плоскости h-BN без деформации (стрелками указаны внедренные состояния, вертикальными линиями отмечены уровни Ферми)
 1 – плоскость h-BN; 2 – плоскость h-BN с вакансией бора; 3 – плоскость h-BN с вакансией азота; 4 - плоскость h-BN с вакансиями бора и азота

Для плоскости h-BN уровень Ферми равен -2,42 эВ, ширина запрещенной зоны 4,56 эВ. При этом данное соединение является прямозонным диэлектриком.

Для плоскости h-BN с вакансией атома бора уровень Ферми равен -3,26 эВ, расстояние до внедренного уровня 0,11 эВ. Для плоскости h-BN с дефектом азота уровень Ферми равен -0,44 эВ, расстояние до внедренного уровня 2,68 эВ. Для плоскости h-BN с бивакансией уровень Ферми равен -3,16 эВ, расстояние до первого внедренного уровня 0,55 эВ, до второго – 3,66 эВ.

Как было показано в пункте 3.4.2, появление внедренных уровней при наличии вакансий бора, азота и бивакансий в структуре монослоя h-BN приводит к изменению свойства соединения. Следствием данного факта является изменение свойств соединения, например, наличие в системе оборванных связей, обусловленных вакансиями, приводит к возникновению магнитного момента.

Экспериментальные работы показывают, что спонтанной намагниченности в монослоях h-BN не существует. Тем не менее, авторы теоретических исследований

утверждают, что в монослоях h-BN наблюдается спонтанная намагниченность в присутствии примеси замещения или при введении вакансий в структуру. В ходе проведенного нами исследования, установлено, что в монослое h-BN без вакансий, при сжатии или растяжении магнитный момент отсутствует. При наличии вакансии бора или азота в монослое h-BN всегда присутствует магнитный момент.

Анализ электронной структуры для монослоя h-BN с вакансией бора (рисунок 5), показывает, что пики (внедренные состояния), расположенные в области 1,3 – 1,8 эВ присутствуют в полных и парциальных спиновых плотностях состояний. Внедренное состояние локализовано на атомах азота окружающих вакансию. Несовпадение спиновых плотностей для заполненных уровней, указывает на существование в системе оборванных связей, которые приводят к перераспределению электронов в соединении и как следствие к появлению магнитного момента.

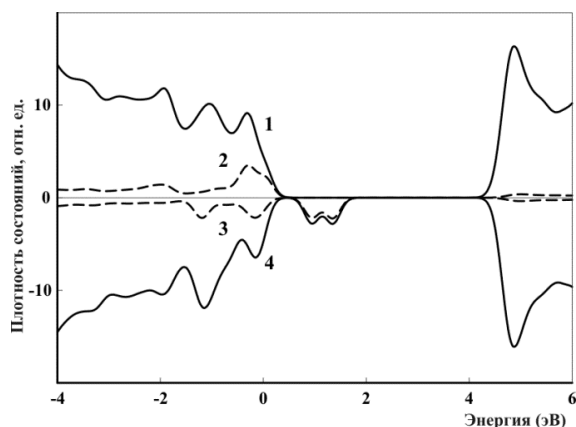


Рисунок 5 – Полная и парциальная плотности состояний для структуры h-BN с дефектом атома бора без деформации. На этом рисунке и далее 0 эВ соответствует уровню Ферми

- 1, 4 - полная спиновая плотность состояний со спином вверх и вниз, соответственно; 2, 3 - парциальная спиновая плотность состояний атомов азота, окружающих дефект со спином вверх и вниз, соответственно

На рисунке 6 приведена зонная структура монослоя h-BN с вакансией бора без деформации, можно видеть, что уровень Ферми пересекает верхнюю заполненную зону, что делает данное соединение проводником. В области запрещенной зоны наблюдается два внедренных состояния, обусловленных вакантными орбиталями атомов азота, окружающих вакансию бора.

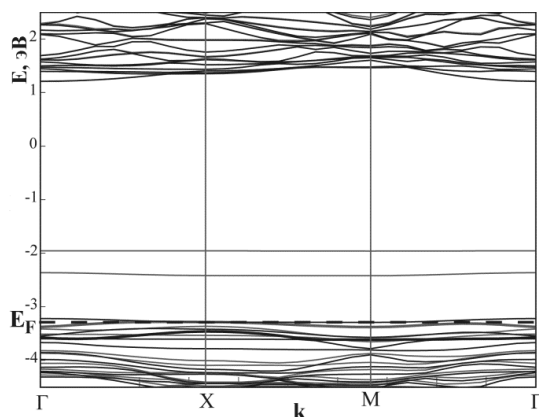


Рисунок 6 – Зонная структура монослоя h-BN с дефектом бора без деформации

Для системы h-BN с вакансией азота, внедренное состояние локализовано на орбиталях атомов бора, окружающих вакансию (рисунок 7). Зонная структура для монослоя h-BN с вакансией атома азота без деформации изображена на рисунке 8. Соединение является полупроводником. В области запрещенной зоны наблюдается два внедренных состояния, одно из которых, заполнено электронами, второе – вакантное. При этом оба состояния образованы орбиталями атомов бора, окружающих вакансию азота.

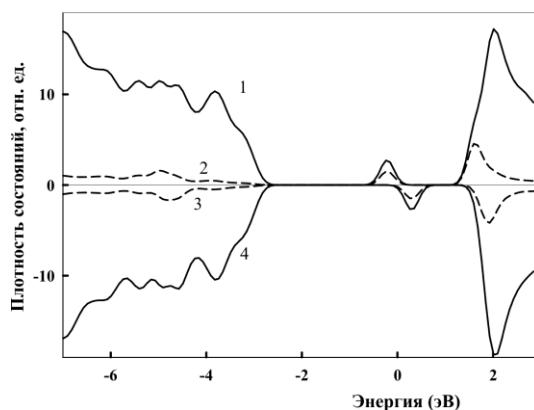


Рисунок 7 – Полная и парциальная плотности состояний для структуры h-BN с дефектом атома азота без деформации

1, 4 - полная спиновая плотность состояния со спином вверх и вниз, соответственно; 2, 3 - парциальная спиновая плотность состояния атомов бора, окружающих дефект со спином вверх и вниз, соответственно

Аналогично монослою h-BN с вакансией бора, в системе с вакансией азота появление магнитного момента обусловлено электронами, принадлежащим атомам, окружающим вакансию азота.

Для структуры h-BN с бивакансией, внедренные уровни локализованы на атомах, окружающих бивакансию. На это указывают парциальные вклады от ближайших атомов, которые окружают бивакансию. Полная и парциальная плотности состояний, а так же зонная структура для монослоя h-BN с бивакансией без деформации приведены на рисунках 9 и 10, соответственно. В области запрещенной зоны наблюдается два внедренных состояния, обусловленных вакантными орбиталями атомов, окружающих вакансию. В данном случае уровень Ферми располагается между валентной зоной и первым из внедренных состояний. Не смотря на то, что в системе существуют оборванные связи, магнитный момент отсутствует, т.к. в системе четное число электронов.

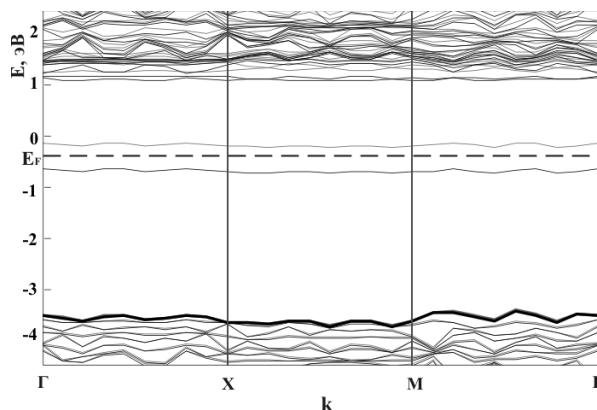


Рисунок 8 – Зонная структура монослоя h-BN с вакансией атома азота без деформации

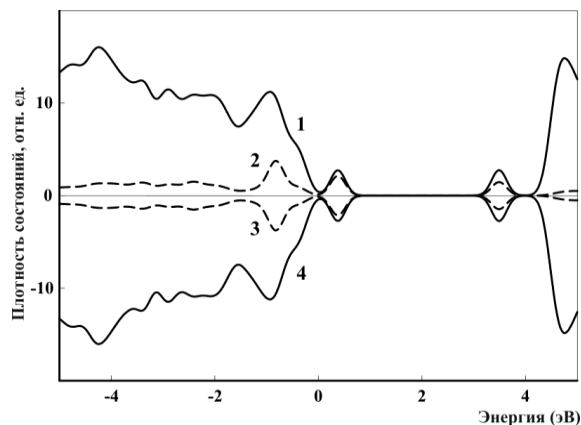


Рисунок 9 – Полная и частичная плотности состояний для структуры h-BN с бивакансией без деформации

1, 4 - полная спиновая плотность состояния со спином вверх и вниз, соответственно; 2, 3 - частичная спиновая плотность состояния атомов, окружающих бидефект со спином вверх и вниз, соответственно

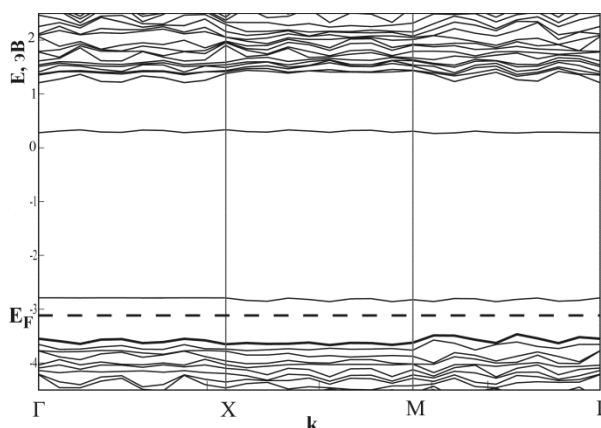


Рисунок 10 – Зонная структура монослоя h-BN с бивакансией без деформации

Таким образом, показано, что появление в системе вакансий приводит к изменению электронной структуры. Данные изменения зависят от типа вакансии.

Пункт 3.4.3. В ходе исследования также рассматривались структуры монослоя h-BN с вакансией бора, азота или с бивакансией при деформации. Деформация осуществлялась 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. Анализ частичных плотностей состояния показывает, что внедренные уровни в монослое h-BN с вакансией бора, образованы вакантными орбиталями атомов азота окружающих вакансию, причем это картина не зависит от деформации (сжатия или растяжения). Появление магнитного момента в данной системе обусловлено электронами, находящимися на орбиталях атомов, окружающих вакансию. Характер зависимости магнитного момента от деформации в данной системе носит сложный характер, значения магнитного момента для монослоя h-BN с вакансией бора приведены в таблице 1. Для монослоя h-BN с вакансией бора наблюдается смещение внедренных уровней при сжатии к вакантному нижнему уровню, а при расширении – к заполненному верхнему уровню.

Распределения электронных плотностей и зонная структура для монослоя h-BN с вакансией азота при деформации на 2 % или 4 % аналогичны системе без вакансии. Внедренный уровень в данном случае при сжатии приближается к верхнему заполненному 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 момента монотонно убывает с увеличением деформации. При этом значение магнитного момента изменяется незначительно (таблица 1).

Распределение спиновых плотностей и зонные структуры для монослоя h-BN с бивакансией при растяжении на 2 % и сжатии на 2 % и 4 % аналогичны монослою h-BN с бивакансией без деформации. Следовательно, свойства в данных системах аналогичны – магнитный момент отсутствует. Исключением является монослой h-BN с бивакансией при растяжении на 4 %. Несмотря на четное количество электронов в данном случае, в системе появляется магнитный момент (таблица 1). Его появление, обусловлено электронами, лежащими на орбиталях атомов, окружающих бивакансию. Не совпадение спиновых плотностей для заполненных уровней, указывает на наличие в системе оборванных связей. Перемещение внедренных уровней в системе с бивакансией носит сложный характер и зависит от вида деформации (сжатие, растяжение).

Таким образом, анализ электронной структуры показал, что при наличии в системе h-BN вакансий бора, азота или бивакансий в области запрещенной зоны наблюдаются внедренные уровни. Во всех случаях, за исключением вакансии азота, внедренные уровни образованы вакантными орбиталями атомов, окружающих вакансию. В случае вакансии азота, внедренное состояние образовано частично заполненными орбиталями атомов, окружающих вакансию. Более того, установлено, что при деформации происходит смещение внедренных уровней к заполненному нижнему уровню или к вакантному верхнему.

Пункт 3.5. 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. В представленной работе проводилось исследование магнитных свойств вакансий в монослое h-BN. В частности, исследовалось влияние расстояния между вакансиями на переход ферромагнетик-антиферромагнетик.

На первом этапе рассчитывался монослой h-BN без вакансий. В данном случае моделировалась гексагональная элементарная ячейка, содержащая два атома. Далее для монослоя h-BN рассматривались три вида суперячеек 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 суперячейка содержала четыре вакансионных дефекта. Подобные суперячейки были выбраны, чтобы выполнить условие равномерного удаления вакансий друг от друга. Таким образом, моделировались структуры с однородным распределением вакансий и различными концентрациями, таблица 1.

Исследовались ферромагнитное, антиферромагнитное и диамагнитное состояния. Ферромагнитное состояние было получено автоматически при использовании спин-поляризованного расчета в программе VASP, которое предполагает начальное заселение системы электронами с одинаково направленной проекцией спина. Антиферромагнитное состояние в исследуемых соединениях задавалось посредством чередования магнитных моментов на атомах, окружающих вакансию. Для сравнения был проведен не спин-поляризованный расчет (диамагнитное состояние вещества), который не учитывает магнитное взаимодействие.

Таблица 1. Магнитные свойства монослоя h-BN с вакансиями

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	0,3378	0,1394
	3,13	10,0	2,2	-0,0670	0,9843
	2,00	12,5	2,3	-0,0323	1,1834
Монослой h-BN с вакансиями азота	5,56	7,5	0,9	-0,0079	0,2174
	3,13	10,0	0,9	0,0080	0,2570
	2,00	12,5	0,9	0,0007	0,2882

Расчеты показали, что диамагнитное состояние является энергетически невыгодным. Данные приведены в таблице 2, где ΔE_{F-AF} – разница по энергии между ферромагнитным и антиферромагнитным состояниями; $\Delta E_{\text{немаг-маг}}$ – разница по энергии между наиболее выгодным из магнитоупорядоченным (ферро- либо антиферро-) и диамагнитным состояниями.

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, димеризация не наблюдается. Спиновая плотность равномерно распределена на атомах, окружающих вакансию, при этом проекции спинов имеют одинаковое направление (рисунок 11).

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 (таблица 2).

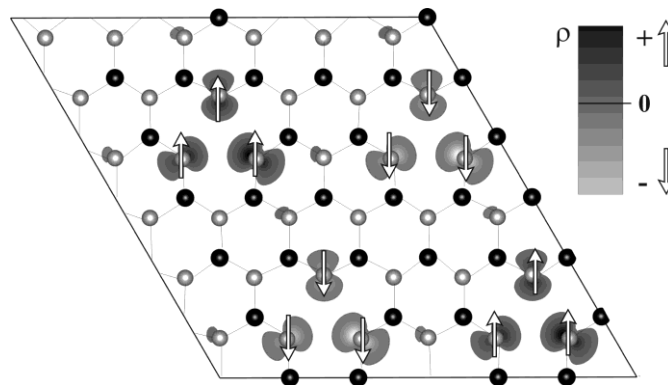


Рисунок 11 – Локализация магнитных моментов для антиферромагнитного состояния монослоя h-BN с вакансиями азота; черным цветом обозначены атомы азота, серым – бора; стрелками указано направление проекции магнитного момента

Таким образом, в ходе проведенных теоретических исследований было установлено, что присутствие вакансий в монослое h-BN приводит к появлению магнитного момента. Показано, что при высоких концентрациях вакансий будут возникать магнитоупорядоченные состояния. При увеличении расстояния между вакансиями возможен переход от антиферромагнитного к ферромагнитному состоянию и наоборот, в зависимости от типа вакансий. Открытие подобного явления дает новые возможности использования вакансий монослоя h-BN для внедрения и управления магнитным упорядочением.

Кроме того, появление магнитного момента в системах h-BN с вакансией бора или азота, а также с бивакансией при растяжении на 4 %, обусловлено некомпенсированными связями. Магнитный момент во всех случаях локализован в области вакансии. Таким образом, для каждого типа вакансий была установлена зависимость магнитного момента (M) от величины деформации (ϵ), таблица 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	Монослой h-BN с бивакансией
-4	0,9998	0,9367	0,0000
-2	1,0834	0,9283	0,0000
0	1,9889	0,9213	0,0000
2	1,0594	0,9111	0,0224
4	1,0144	0,9017	1,9999

Итак, было выявлено, что на возникновение магнитного момента в системе влияет не только наличие вакансий в монослое h-BN, но и деформация решетки.

ВЫВОДЫ

1. В результате моделирования монослоя гексагонального нитрида бора (h-BN) с вакансией (бора, азота и бивакансией) и исследования влияния деформации монослоя на 2 % или 4 %, выявлено, что термодинамически стабильными являются вакансии атомов азота вне зависимости от деформации монослоя, следовательно, в материале будут преобладать вакансии данного типа.
2. Анализ полных и парциальных плотностей состояния показал, что присутствие в структуре монослоя гексагонального нитрида бора вакансий или адатомов приводит к изменению электронной структуры – появлению внедренного состояния в области запрещенной зоны. В результате анализа деформации ячейки монослоя h-BN с вакансией (бора, азота, бивакансией) установлено, что внедренный уровень перемещается к вакантному нижнему или заполненному верхнему уровню в зависимости от типа деформации (сжатие или растяжение).
3. В результате исследования электронной структуры монослоя h-BN с вакансией (бора, азота, бивакансией) и анализа влияния деформации ячейки обнаружено, что магнитный момент в монослое гексагонального нитрида бора появляется в случае вакансии бора или азота, а также в случае бивакансии при растяжении на 4 %. Найдена зависимость магнитного момента (M) от величины относительной деформации ячейки (ϵ).
4. Анализ данных, полученных в ходе спин-поляризованных расчетов, показал, что в монослое гексагонального нитрида бора с вакансиями бора или азота возможно магнитное упорядочение. Изменение расстояние между вакансиями вызывает переход ферромагнетик-антиферромагнетик.
5. В ходе исследования атомной структуры монослоя h-BN с адатомом (бора, азота) выявлено, что наиболее стабильным является положение адатома (бора, азота) над связью B-N.
6. В результате применения метода упругой ленты (NEB-метод) рассчитан барьер миграции адатома по поверхности монослоя h-BN. При этом рассматривалось два возможных перехода по структуре монослоя h-BN. Установлено, что для адатома бора максимальная величина барьера миграции составляет $\sim 0,23$ эВ, а для адатома азота $\sim 1,23$ эВ. Следовательно, скорость перемещения адатомов бора по поверхности монослоя h-BN выше, чем адатомов азота, что приводит к высокой скорости рекомбинации с вакансиями бора в структуре.

Список публикаций по теме диссертации

1. Сержантова М.В. Теоретическое исследование магнитных свойств упорядоченных вакансий в 2D гексагональных структурах: графен, SiC, h-BN / Н.С. Елисеева, А.А. Кузубов, С.Г. Овчинников, М.В. Сержантова, Ф.Н. Томилин, А.С. Федоров // Письма в ЖЭТФ. – 2012. – 95 (11). – С. 633-637.
2. Сержантова М.В. Влияние вакансий на магнитное упорядочение в монослое h-BN / А.А. Кузубов, Ю.Г. Михалев, М.В. Сержантова // Вестник СибГАУ. – 2012. – 3 (43). – С. 25 – 28.
3. Сержантова М.В. Теоретическое исследование влияния вакансий на электронную структуру монослоя h-BN / М.В. Сержантова, А.А. Кузубов, А.С. Федоров, П.О. Краснов, Ф.Н. Томилин // ЖЭТФ. – 2011. – 139 (4). – С. 764-768.
4. Сержантова М.В. Теоретическое исследование вакансий и адатомов в белом графене / А.А. Кузубов, М.В. Сержантова, А.С. Федоров, Ф.Н. Томилин, Т.А. Кожевникова // Письма в ЖЭТФ. – 2011. – 93 (6). – С. 368-371.
5. Сержантова М.В. Теоретическое исследование влияния деформации на электронную структуру монослоя гексагонального нитрида бора / М.В. Сержантова, А.А. Кузубов, А.С. Федоров, Ф.Н. Томилин, П.О. Краснов // Вестник СибГАУ. – 2011. – 3 (36). – С. 150 – 155.
6. Сержантова М.В. Теоретическое исследование влияния вакансий на магнитное упорядочение в монослое гексагонального нитрида бора // Материалы Международной научно-практической конференции «Физико-математические науки и информационные технологии: прошлое, настоящее, будущее», г. Новосибирск, 2012 г.
7. Сержантова М.В. Квантово-химическое исследование магнитных свойств вакансий в монослое h-BN // Материалы VI Всероссийской конференции молодых учёных, аспирантов и студентов с международным участием "Менделеев-2012", г. Санкт-Петербург, 2012 г.
8. Сержантова М.В. Теоретическое исследование магнитных свойств вакансий в гексагональном нитриде бора // Материалы Восемнадцатой всероссийской научной конференции студентов – физиков и молодых ученых, г. Красноярск, 2012 г.
9. Сержантова М.В. Численное моделирование магнитных свойств вакансий в монослое h-BN // Материалы VIII Всероссийской научно-практической конференции творческой молодежи «АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ АВИАЦИИ И КОСМОНАВТИКИ», г. Красноярск, 2012 г.
10. Сержантова М.В. Теоретическое исследование влияния дефектов на свойства монослоя h-BN // Материалы Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике, г. Владивосток, 2011 г.
11. Сержантова М.В. Теоретическое исследование влияния деформации на дефектную структуру монослоя h-BN // Материалы VI (XXXVIII) Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Образование, наука, инновации - вклад молодых исследователей», г. Кемерово, 2011 г.
12. Сержантова М.В. Теоретическое исследование вакансий и адатомов в монослое h-BN // Материалы Семнадцатой всероссийской научной конференции студентов – физиков и молодых ученых, г. Екатеринбург, 2011 г.
13. Сержантова М.В. Квантово-химическое исследование влияния вакансий и адатомов на свойства монослоя h-BN // Тезисы Региональной научной конференции

- студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков НКСФ-XL (2011), г. Красноярск, 2011 г.
14. Сержантова М.В., Кузубов А.А. Теоретическое исследование влияния дефектов на электронную структуру монослоя h-BN // Материалы XIV Международной научной конференции, посвященной памяти генерального конструктора ракетно-космических систем академика М.Ф. Решетнева. г. Красноярск, 2010 г.
 15. Сержантова М.В., Кузубов А.А. Квантово-химическое исследование влияния дефектов на электронную структуру h-BN // Материалы II Всероссийской научной конференции «Научное творчество XXI века» с международным участием, г. Красноярск, 2010 г..
 16. Сержантова М.В. Теоретическое исследование влияния дефектов бора и азота на электронную структуру h-BN // Материалы XIV Всероссийской научно-методической конференции «Фундаментальные исследования и инновации в технических университетах», г. Санкт-Петербург, 2010 г.
 17. Сержантова М.В. Теоретическое исследование влияния дефектов на электронную структуру h-BN // Материалы Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по физике, г. Владивосток, 2010 г.
 18. Сержантова М.В. Теоретическое исследование влияния вакансий бора и азота на электронную структуру h-BN // Тезисы Региональной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков НКСФ-XXXIX (2010), г. Красноярск, 2010 г.

Подписано в печать __.11.2012 г.

Формат 60 × 84 / 16. Усл. печ. л. 1,4. Тираж 100 шт. Заказ № __.

Издательство Сибирского государственного аэрокосмического университета имени академика М.Ф. Решетнева

660014, г. Красноярск, проспект имени газеты «Красноярский рабочий», 31