

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Ана Ђ. Калинић

Интеракција јона са графен-изолатор-графен
КОМПОЗИТНИМ СИСТЕМИМА

докторска дисертација

Београд, 2023

UNIVERSITY OF BELGRADE
SCHOOL OF ELECTRICAL ENGINEERING

Ana Đ. Kalinić

Interaction of ions with graphene-insulator-
graphene composite systems

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2023

Комисија за преглед и оцену тезе:

Ментор:

др Јован Цветић, редовни професор
Универзитет у Београду, Електротехнички факултет

Чланови комисије:

др Владимир Арсоки, ванредни професор
Универзитет у Београду, Електротехнички факултет

др Јелена Радовановић, редовни професор
Универзитет у Београду, Електротехнички факултет

др Иван Радовић, научни саветник
Универзитет у Београду, Институт за нуклеарне науке
„Винча”

Датум одбране: _____

Захвалница

Ова докторска дисертација је урађена у Лабораторији за атомску физику Института за нуклеарне науке „Винча” – Института од националног значаја за Републику Србију.

Захваљујем се свом ментору, др Цветић Јовану, редовном професору Електротехничког факултета у Београду, што ми је изашао у сусрет и прихватио менторство на самом крају докторских студија, а нарочито сам му захвална на поверењу које ми је указао током писања ове дисертације.

Велику захвалност дугујем и непосредном руководиоцу моје тезе, др Радовић Ивану, научном саветнику Института за нуклеарне науке „Винча”, на неисцрпној помоћи, саветима и сугестијама приликом писања тезе, као и на огромном стрпљењу које је увек имао за мене током ових година заједничке сарадње.

Др Вујисић Милошу, ванредном професору Електротехничког факултета у Београду, мом ментору за дипломски, мастер и студијско-истраживачки рад, хвала на његовој посвећености студентима, на свом знању које ми је пренео током школовања и што ме је увео у методичност научног рада.

Др Радовановић Јелени, редовном професору Електротехничког факултета у Београду, која је игром случаја била у свим комисијама које су претходиле формирању ове тезе и др Арсоски Владимиру, ванредном професору Електротехничког факултета у Београду, веома се захваљујем на времену издвојеном за преглед и оцену исте.

Посебно се захваљујем др Мишковић Зорану, редовном професору на одсеку за примењену математику Универзитета у Вотерлоу, др Деспоја Вити, вишем научном сараднику Института за физику у Загребу, др Карбунар Лазару, доценту Рачунарског факултета Универзитета Унион и др Ђорђевић Тијани, научном сараднику Института за нуклеарне науке „Винча”, на свим смерницама које су олакшале писање овог рада.

Београд, мај 2023. године

Ана Калинић

Интеракција јона са графен-изолатор-графен КОМПОЗИТНИМ СИСТЕМАМА

Сажетак

У овој дисертацији је испитивана хибридизација Дираковог плазмона из графена и површинских оптичких фонона из Al_2O_3 слоја анализирањем интеракције јона, који се креће паралелно изнад графен-изолатор-графен система, са споменутим композитима. Другим речима, проучаван је утицај те хибридизације на ефекат таласа у потенцијалу који се индукује у горњој површини система, као и на зауставну силу и силу лика које делују на упадну честицу. Ефективна диелектрична функција система, потребна при израчунавању наведених величина, добијена је на два начина: методом на бази безмасених Диракових фермиона (*MDF*) и проширеним хидродинамичким моделом (*eHD*). Добијени резултати су упоређени са *ab initio* методом, те је констатовано да се за ефекат таласа *MDF* модел слаже са *ab initio* када је брзина честице испод или мало изнад Фермијеве брзине у графену, док се *eHD* модел може користити за брзине доста изнад Фермијеве. Показано је како на облик, амплитуду, период осцилација и просторни домет таласног ефекта у индукованом потенцијалу утичу концентрација носилаца наелектрисања у графену, дебљина изолаторског слоја и његова диелектрична својства, фактор пригушења Дираковог плазмона, али и брзина упадне наелектрисане честице, као и њена удаљеност од самог система. Приликом прорачуна зауставне силе и силе лика добијено је да главни разлог неслагања међу методама представља утицај високоенергетских међузонских прелаза електрона који су укључени у *ab initio*, али не и у *MDF* моделу. Посебна пажња је посвећена ниском режиму брзина у ком се *MDF* веома добро слаже са *ab initio* методом.

Кључне речи:

Графен, плазмон-фонон хибридизација, ефекат таласа, зауставна сила, сила лика

Научна област:

Електротехничко и рачунарско инжењерство

Ужа научна област:

Физичка електроника

УДК број:

621.3

Interaction of ions with graphene-insulator-graphene composite systems

Abstract

In this dissertation the hybridization of Dirac plasmon coming from graphene and surface optical phonons from Al_2O_3 layer is studied by analyzing the interaction of ion, which moves parallel and above of the graphene-insulator-graphene systems, and aforementioned composites. In another word, the impact of that hybridization on wake potential induced in top surface of the system is considered, as well as on the stopping and image forces acting on the incident particle. Effective dielectric function needed to calculate mentioned quantities is obtained using two methods: model based on the massless Dirac fermions (MDF) and the extended hydrodynamic (eHD) model. Results were compared with the *ab initio* method and it was found that for the wake effect, MDF model agrees with *ab initio* when particle speed is below or above Fermi velocity in graphene, while eHD should be used for speeds well above the Fermi velocity. It is shown how the doping density of graphene, the thickness of the Al_2O_3 layer and its dielectric properties, the damping factor of Dirac plasmon, but also the incident particle speed, and its distance from the system affect the shape, magnitude, wavelength, and spatial distribution of the induced wake potential. For the stopping force and image force it is procured that the main reason for discrepancies between methods is the impact of the high-energy interband electron transitions, which are included in the *ab initio* method, but not in the MDF method. Special attention is paid to the regime of low-particle speeds, where the MDF method compares well with the *ab initio* method.

Key words: Graphene, plasmon-phonon hybridization, wake effect, stopping force, image force

Scientific field: Electrical and Computer Engineering

Scientific subfield: Physical Electronics

UDC number: 621.3

Садржај

| | |
|---|-----------|
| САДРЖАЈ | VIII |
| 1. УВОД..... | 1 |
| 2. ТЕОРИЈСКЕ ОСНОВЕ..... | 4 |
| 2.1. Структура материјала..... | 5 |
| 2.1.1. Кристална решетка | 5 |
| 2.1.2. Реципрочна решетка | 8 |
| 2.1.3. Потенцијална енергија | 9 |
| 2.2. Колективне осцилације | 10 |
| 2.2.1. Фонони | 12 |
| 2.2.2. Плазмони | 15 |
| 2.2.3. Интеракција плазмона и фонона..... | 17 |
| 2.3. Модели диелектричних функција | 18 |
| 3. ГРАФЕН..... | 22 |
| 3.1. Структура и електронска својства графена | 24 |
| 3.2. Фонони у графену | 28 |
| 3.3. Плазмони у графену | 29 |
| 4. АЛУМИНИЈУМ ОКСИД | 36 |
| 4.1. Кристална структура Al_2O_3 | 36 |
| 4.2. Фонони у Al_2O_3 | 37 |
| 5. МОДЕЛОВАЊЕ СИСТЕМА | 40 |
| 5.1. Ефективна диелектрична функција система | 41 |
| 5.1.1. <i>MDF</i> модел..... | 41 |
| 5.1.2. <i>eHD</i> модел..... | 44 |
| 5.2. Укупни потенцијал | 45 |
| 5.3. Заушавна сила и сила лика | 48 |
| 5.4. Нумерички прорачуни..... | 51 |
| 6. РЕЗУЛТАТИ И ДИСКУСИЈА..... | 53 |
| 6.1. Ефекат таласа у потенцијалу | 57 |
| 6.1.1. <i>Режим ниских брзина</i> | 58 |
| 6.1.2. <i>Режим средњих брзина</i> | 59 |
| 6.1.3. <i>Режим високих брзина</i> | 62 |
| 6.1.4. <i>Зависност потенцијала од промене параметара система</i> | 65 |
| 6.2. Заушавна сила и сила лика | 68 |
| 7. ЗАКЉУЧАК | 77 |
| ЛИТЕРАТУРА..... | 79 |
| ПРИЛОГ А. АВ ИНИТIO МЕТОД | 89 |
| БИОГРАФИЈА АУТОРА | 91 |

1. Увод

Истраживања Лангмира (*Langmuir Irving, 1881-1957*) која говоре да систем слободних електрона, у форми плазме, може да подржи колективне осцилације датирају још од средине 1920-их година, док су плазмонеке ексцитације у чврстим телима откривене око 1948. године у независним експериментима Рутемана (*Ruthemann Gerhard*) и Ланга (*Lang W.*). Они су уочили да брзи електрони могу на дискретан начин да губе енергију док пролазе поред танких металних филмова. Та запажања су довела до идеје о квантизованим колективним осцилацијама слободних електрона у металима, данас названим плазмонима. Недуго затим, од 1951. до 1953. године, Бом (*Bohm David, 1917-1992*) и Пајнс (*Pines David, 1924-2018*) су објавили низ радова у којима теоријски објашњавају споменути феномен [1]. У наредном периоду Ричи (*Ritchie Rufus, 1924-2017*) је пружио уопштени опис колективних интеракција у плазми и опис ексцитација плазма таласа, да би 1957. године предвидео постојање површинских плазмона [2]. Данас поље плазмонеке метала представља основу развоја многобројних области као што су нанофотоника за интегрисане фотонске системе, биосензори са наноструктурама, метаматеријали са необичним електромагнетним феноменима, транзистори за квантне рачунаре, Раманова спектроскопија за детекцију појединачних молекула итд. [3–5]. С развојем нових технологија стално се врши потрага за новим, бољим и тањим материјалима [4] са одговарајућим својствима који би могли да задовоље потребе све веће минимизације уређаја.

Дводимензионални (2Д) материјали су одавно познати науци, али њихово интензивно истраживање почиње тек 2004. године када су Гајм (*Geim Andre, 1958*) и Новоселов (*Novoselov Konstantin, 1974*) успели да издвоје *графен* из графита [6]. Графен је врло брзо постао веома атрактиван материјал и његови плазмони последњих година привлаче пажњу и са теоријске и са експерименталне тачке гледишта [7–22]. Могућност једноставног контролисања Дираковог плазмона променом концентрације носилаца наелектрисања омогућава примену графена у фотоници, оптоелектроници, трансформационој оптици и плазмоници [5, 23–25]. С друге стране, графен је и биокомпатибилан, те има потенцијалну примену у биомедицини за транспорт лекова, у терапији лечења тумора или на пољу нанотераностике [26–29]. Такође, он испољава одлична оптичка, електронска и физичка својства која би му омогућила да се користи као биосензор [30–32]. Међутим, у наведеним применама, графен не може самостално да стоји, већ је потребно да се нађе на одређеном изолаторском слоју [33–35]. Изолаторски слојеви који раздвајају слојеве графена обично подржавају јаке оптичке површинске фононеке модове који су активни у истој области учестаности као и Дираков плазмон, те самим тим могу да га пригуше или да се хибридују са њим [36, 37]. Таква плазмон-фонон хибридизација може да измени дисперзију колективних модова у графену и, последично, да утиче на примену уређаја који би садржали графен [38]. Спрега плазмона и фонона је први пут примећена 1966. године у контексту Рамановог расејања у n типу галијум арсенид (*GaAs*) узорака [39], а експериментално је уочена код графена користећи и *HREELS (High Resolution Electron Energy Loss Spectroscopy)* технику у хетеросистемима са графеном [40–42] и оптичку ексцитацију у периодичним низовима нанотрака графена [43, 44].

За побуђивање плазмон-фонон хибридизације може да се искористи интеракција јона са посматраним системом. Наиме, наелектрисана честица која се креће паралелно металној или поларној кристалној површини узрокује једночестичне ексцитације и ексцитације колективних модова у тој површини. Настанак колективних осцилација у поларизацији посматраног медијума је окарактерисан осцилаторним потенцијалом, који је познат под називом *ефекат таласа*. Овај ефекат се јавља у индукованом електростатичком потенцијалу када брзина упадне честице достигне фазну брзину колективних осцилација [45, 46]. Историјски, ефекат таласа је први пут теоријски анализиран 1974. године [47] када је предвиђена могућност везаних електронских стања у потенцијалу који се јавља иза брзог јона док он пролази кроз материјал, а убрзо затим је и експериментално потврђен [48]. Ефекат таласа у индукованом потенцијалу код дводимензионалних материјала први пут је изучаван на примеру 2Д електронског гаса [49], а затим и на разним угљеничним наноструктурама, укључујући и графен [50–56]. На основу тих истраживања установљено је да се ефекат таласа у случају слободног графена јавља само за брзине упадних честица које су веће од Фермијеве брзине у графену јер при тим брзинама долази до побуђења Дираковог плазмона. Утицај хибридизације плазмона и фонона на ефекат таласа проучаван је у случајевима графена и поларног супстрата од силицијум диоксида (SiO_2) или силицијум карбида (SiC) када се наелектрисана честица креће паралелно графенском слоју [38, 57, 58]. Ту је показано да се ефекат таласа може јавити и за брзине мање од Фермијеве услед хибридизације Диракових плазмона из слојева графена и фононских модова из супстрата. Таква геометрија, у којој се упадна наелектрисана честица креће паралелно чврстој површини или 2Д материјалу који лежи на супстрату, може бити од интереса при проучавању расејања јона под малим углом са површина [59], као и у случају спектроскопије енергетских губитака електрона слојевитих структура које садрже графен користећи снап електрона који се креће изнад њихових површина [60].

У овој дисертацији је испитивањем интеракције јона са графен-изолатор-графен композитним системима анализиран утицај хибридизације Дираковог плазмона у графену и површинских оптичких фононских модова у слоју изолатора на ефекат таласа у индукованом потенцијалу. Као изолатор изабран је алуминијум(III)-оксид (Al_2O_3), који се често користи као диелектрик у експериментима [61–65], а уз то је и биокомпатибилан [66, 67]. Показано је како на облик, амплитуду, период осцилација и просторни домет таласног ефекта у индукованом потенцијалу утичу концентрација носилаца наелектрисања у графену, дебљина изолаторског слоја и његова диелектрична својства, фактор пригушења Дираковог плазмона, али и брзина упадне наелектрисане честице, која се креће паралелно посматраном композитном систему, као и њена удаљеност од самог система [68, 69]. Осим споменутог ефекта таласа, изучаван је и утицај плазмон-фонон хибридизације на силе које делују на упадну наелектрисану честицу, тј. на *зауоставну силу* и *силу лика*, узимајући у обзир различите концентрације носилаца наелектрисања у графену, дебљине Al_2O_3 слоја, брзине и удаљености упадне честице [70]. Зауоставна сила представља брзину дисипације кинетичке енергије честице која се губи на ексцитације у посматраном систему. Сила лика описује конзервативну силу која привлачи наелектрисану честицу ка површини система. Те силе су претходно проучаване при интеракцији јона са системима који садрже графен на подлози од SiO_2 и SiC [38, 51, 52, 57, 71–83]. Интеракције брзих наелектрисаних честица са угљеничним наноструктурама су изучаване за *EELS (Electron Energy Loss Spectroscopy)*, типично користећи *STEM (Scanning Transmission Electron Microscope)* [84–86], док спољашње наелектрисање са нижим енергијама, као што је случај код *REELS (Reflection Electron Energy Loss Spectroscopy)*, може да побуди и површинске фононе супстрата и нискофреквенцијске плазмонске модове 2Д електронског гаса [87]. Вредно је напоменути да и *REELS* и *LEIGS (Low-Energy Ion Grazing Scattering)* [88–91] користе

наелектрисане честице које се крећу брзинама у опсегу Фермијеве брзине у графену, те да су због тога теоријски савршене за побуђивање плазмон-фонон хибридизације у графену.

При израчунавању величина које карактеришу интеракцију јона са графен-изолатор-графен композитним системима, тј. потенцијала у горњем слоју графена и зауставне силе и силе лика које делују на упадни јон, користи се израз за екранирану Кулонову интеракцију [92] у којем фигурише ефективна диелектрична функција система графен- Al_2O_3 -графен. Ова функција се изражава преко локалне диелектричне функције Al_2O_3 слоја [93] и поларизационих функција неинтерагујућих електрона у слојевима графена. У овом раду су коришћене поларизационе функције добијене на два начина: методом на бази безмасених Диракових фермиона и проширеним хидродинамичким моделом, а добијени резултати су упоређени са *ab initio* [94] методом. Укупни потенцијал и индуковани потенцијал у области слоја графена који је најближи упадној наелектрисаној честици су одређени помоћу Фуријеове трансформације екраниране Кулонове интеракције [68, 69], док су зауставна сила и сила лика израчунате преко одговарајућих извода индукованог потенцијала [95].

Дисертација је подељена по поглављима. У следећем поглављу су укратко приказана теоријска објашњења појмова који се користе у главном тексту, али који нису уско повезани са темом тезе. Ту спадају основни описи структуре материјала, колективних осцилација и њихових међусобних интеракција, као и полазне тачке метода који су коришћени за моделовање диелектричне функције посматраних система. Наредна два поглавља су посвећена градивним елементима испитиваних композита, тј. графену и Al_2O_3 супстрату, са посебним освртом на њихове плазмонске и фононске модове. Затим следи моделовање система, до добијања коначних израза који се користе приликом нумеричких прорачуна посматраних величина. Након тога су изложени добијени резултати: прво су објашњене функције губитака појединачних система на основу којих су дискутовани ефекат таласа у потенцијалу, зауставна сила и сила лика. Последња три поглавља представљају закључак, списак коришћене литературе и прилог о *ab initio* методи.

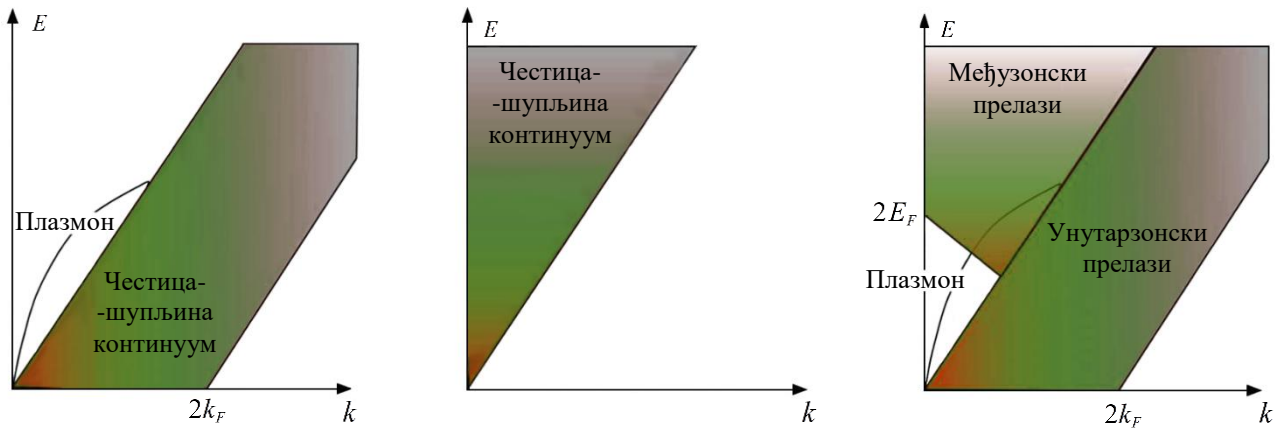
2. Теоријске основе

Динамика површина је област физике чији се почеци везују за 1885. годину када је Лорд Рејли (*John William Strutt, 1842-1919*, познатији под називом *Lord Rayleigh*) приметио постојање локализованих таласа на површини изотропног еластичног медијума [96], док су динамику кристалне решетке чврстих тела први изучавали Борн (*Max Born, 1882-1970*) и Фон Карман (*Theodore von Karman, 1881-1963*) 1912. године. Међутим, у наредном периоду истраживања су била фокусирана на бесконачна тела, да би тек у другој половини 20. века динамика решетке почела да се примењује на динамику површина. Открићем графена почетком 21. века почела је права експанзија теоријских и експерименталних радова о дводимензионалним материјалима.

Два главна приступа динамици површина јесу метод Гринових функција (*Green's function*) и метод плоче (*slab method*), што је уобичајена динамика решетке примењена на систем са површинама. Метод Гринових функција је погодан за описивање динамике дефеката, а пошто је површина посебан облик дефекта, тај метод је убрзо почео да се користи и за динамику површина. Метод је нарочито погодан за прорачуне густине фононских стања, фононске резонанције и корелационих функција. С друге стране, метод плоче даје микроскопске детаље о површинским вибрацијама, тј. помоћу њега се могу добити дисперзионе криве, вектори поларизације, слабљење амплитуда површинских модова итд. Метод плоче није толико погодан за добијање густине фононских стања као метод Гринових функција, али се тај недостатак може превазићи употребом суперрачунара [97].

Пошто је графен 2Д систем, информативно је да се прво упореди са већ познатим 2Д електронским гасом. На најједноставнијем нивоу, метални системи имају две главне врсте ексцитација: парове електрон-шупљина и колективне модове. Пар електрон-шупљина је некохерентна ексцитација Фермијевих честица и директна је последица Паулијевог принципа искључења: електрон у Фермијевом мору (*Fermi sea*) са таласним вектором \vec{k} се побуди ван мора у ново стање са вектором $\vec{k} + \vec{q}$, остављајући шупљину иза себе. Енергија која је потребна за такав прелаз је $E = E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}}$, а за стања близу Фермијеве површине ($k \approx k_F$) та енергија је линеарно сразмерна импулсу: $E_{\vec{q}} = \hbar\omega_{\vec{q}} = v_F \cdot \hbar q$, где је фактор сразмерности Фермијева брзина, v_F . Код система са нерелативистичком дисперзијом, као што су метали и полупроводници, електрон-шупљина континуум се састоји само из унутарзонских прелаза, а за стварање електрон-шупљина парова довољна је и произвољно мала енергија у близини Диракове површи. Уз то, 2Д електронски гас може да подржи и колективне модове, као што су плазмони са дисперзијом $\omega_{\text{плазмон}}(q) \propto \sqrt{q}$, који постоје изван електрон-шупљина континуума, што је приказано на слици 2.1 (лево). У системима који имају дисперзиону криву која подсећа на релативистичку, као што је недопиран/сопствен графен, Фермијева површ се сузбија у тачку тако да унутарзонске ексцитације више нису могуће, те постоје само међузонске. Електрон-шупљина ексцитације не постоје на ниским температурама, већ је потребна енергија за стварање њихових парова. Стога, електрон-шупљина континуум заузима горњи део дијаграма зависности енергије од таласног вектора (слика 2.1 (средина)), а кохерентне колективне ексцитације не постоје. Међутим, уколико се хемијски потенцијал помери ван Диракове тачке, нпр. допирањем графена, унутарзонске ексцитације су поново

могуће и плазмонски модови су дозвољени. Електрон-шупљина континуум допираног графена је приказан на слици 2.1 (десно). Како се хемијски потенцијал помера све даље од Диракове тачке, тако графен све више личи на 2Д електронски гас.

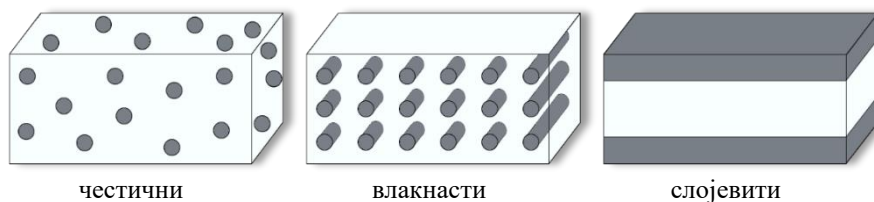


Слика 2.1. Електрон-шупљина континуум и колективни модови 2Д електронског гаса (лево), недопираног графена (средина) и допираног графена (десно) [98].

У овој дисертацији је посебна пажња посвећена хибридизацији Дираковог плазмона из графена и површинских оптичких фононских модова из изолатора, тако да су у овом поглављу укратко дате теоријске основе о фононима, плазмонима и њиховим интеракцијама. Прво је објашњена кристална структура материјала, а приказане су и основе на којима почивају модели диелектричних функција коришћени у тези.

2.1. Структура материјала

Гледано са фундаменталног становишта хемијских веза, три основне групе материјала су метали, керамике и полимери. Металне везе су одлика метала, јонске везе се јављају код диелектричних кристала и керамика, док су код полимера доминантне ковалентне везе. Композити се добијају комбиновањем два или више материјала, тако да новодобијени материјал има карактеристике које немају његове појединачне компоненте. По конструкцији композити могу бити честични, влакнасти или слојевити (слика 2.2) [99].



Слика 2.2. Шематски приказ структура честичних, влакнастих и слојевитих композита [99].

2.1.1. Кристална решетка

Распоред структурних јединица материјала одређен је дејством међуатомских сила, при чему је потенцијална енергија минимална уколико је тај распоред симетричан. Спољашње испољавање просторно периодичног распореда структурних јединица (атома, јона или молекула) је правилна геометријска форма, тј. кристал. Правилна геометријска форма се математички изражава одређеном врстом симетрије. Класификација кристала према врстама симетрије се врши математичким методама теорије група. Сви кристали поседују просторну

периодичност, односно трансляциону симетрију, а поред ње могу да имају и ротациону, рефлексивну, роторефлексивну или инверзивну симетрију. Кристална (Бравеова) решетка представља бесконачан периодичан геометријски распоред тачака које означавају равнотежне положаје структурних јединица. Положај било ког чвора решетке могуће је добити вектором трансляције:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (2.1.1)$$

где су \vec{a}_1 , \vec{a}_2 и \vec{a}_3 примитивни вектори, а коефицијенти n_1 , n_2 и n_3 су цели бројеви. У две димензије линеарна комбинација примитивних вектора је ограничена на:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2, \quad (2.1.2)$$

али је аналогна тродимензионалном случају. Примитивни вектори дефинишу део простора који је придружен само једном чвору решетке и који има најмању могућу запремину, тј. примитивну ћелију. Цео простор се може репродуковати бесконачним понављањем примитивних ћелија, с тим да је за исту решетку могуће изабрати више различитих примитивних ћелија. Примитивна ћелија не мора да одражава симетрију решетке. Елементарна ћелија има симетрију кристалне решетке, али није примитивна, односно садржи више од једног чвора и нема минималну запремину. Често се користи и термин јединична ћелија, као заједнички назив за примитивну и елементарну ћелију, када те две није неопходно разликовати. Вигнер-Зајцова ћелија је примитивна ћелија која испољава симетрију решетке, а дефинисана је као скуп тачака у простору око чвора решетке које су ближе том чвору него било ком другом чвору. Она се добија када се све линије које спајају посматрани чвор са суседним чворовима преполове ортогоналним равнима [100].

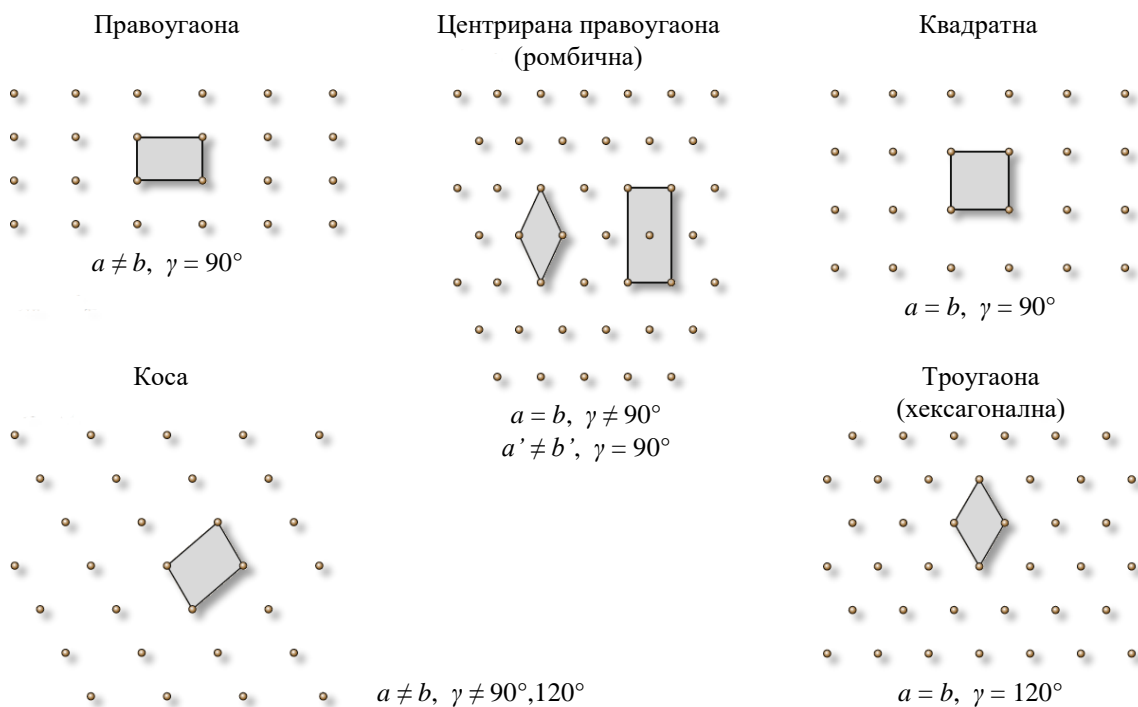
Разматрањем свих могућих симетрија закључује се да постоји 14 различитих Бравеових решетки распоређених у седам система кристалних решетки: четири у оквиру орторомбичног система, три у кубичном систему, две у оквиру тетрагоналног и моноклиничног система и по једна у хексагоналном, ромбоедарском и триклиничном систему (слика 2.3). Елементарне ћелије Бравеових решетки могу бити просте, базно центриране, просторно центриране и површински центриране. Када се чворовима тих решетки придруже одговарајући базиси од по два или више атома, добија се да постоје 32 класе кристала и 230 различитих просторних група по којима се класификују све кристалне структуре.

За дводимензионалне системе ситуација је много једноставнија. Код њих има само 10 класа кристала које дају укупно 17 просторних група. Постоји пет различитих Бравеових решетки категоризованих у четири 2Д кристална система: две у оквиру правоугаоног система и по једна у косом, троугаоном и квадратном систему (слика 2.4) [101].

Одређени материјали испољавају полиморфизам, тј. могу да формирају више кристалних структура. Уколико се та појава односи на хемијске елементе, реч је о алотропизму. Пример алотропије су модификације угљеника: дијамант, графит, графен, нанотубеви и фулерени.

| Систем Тип | Триклинични | Моноклинични | Орторомбични | Тетрагонални | Ромбоедарски | Хексагонални | Кубинни |
|-----------------------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|---------|
| Проста | | | | | | | |
| Базно центрирана | | | | | | | |
| Просторно центрирана | | | | | | | |
| Површински центрирана | | | | | | | |

Слика 2.3. Елементарне ћелије четрнаест 3Д Бравеових решетки [102].



Слика 2.4. Пет 2Д Бравеових решетки правоугаоне, ромбичне, квадратне, косе и троугаоне симетрије. У сваком случају је осенчена примитивна ћелија највише симетрије (са страницама a и b , и углом γ између њих), а код ромбичне симетрије је додатно приказана и елементарна правоугаона ћелија (a' и b') [101].

2.1.2. Реципрочна решетка

Из периодичности кристалне решетке следи периодичан облик многих физичких величина које описују кристалну структуру. За обичан синусоидалан талас:

$$f(\vec{r}) = Fe^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \quad (2.1.3)$$

са амплитудом F , таласним вектором \vec{k} и фреквенцијом ω , периодичност решетке намеће услов $f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$, где \vec{R} може бити било који вектор Бравеове решетке, односно:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R})}. \quad (2.1.4)$$

Из претходне једначине следи да је $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$, односно да је $\vec{k}\cdot\vec{R} = 2\pi n$, где је n цео број. С обзиром да постоји бесконачно много вектора \vec{R} следи да мора бити бесконачно много вектора \vec{k} који задовољавају споменути услов. Ти вектори колективно формирају простор који се означава као реципрочна решетка. Реципрочан простор је познат и под називом импулсни простор или k -простор. Кристална решетка која одговара датој реципрочној решетки се назива и директном решетком.

Аналогно директној решетки, реципрочна решетка се описује вектором трансляције:

$$\vec{K} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3, \quad (2.1.5)$$

где су \vec{b}_1 , \vec{b}_2 и \vec{b}_3 примитивни вектори у реципрчном простору, а коефицијенти m_1 , m_2 и m_3 су цели бројеви. За дводимензионалан случај је:

$$\vec{K} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2. \quad (2.1.6)$$

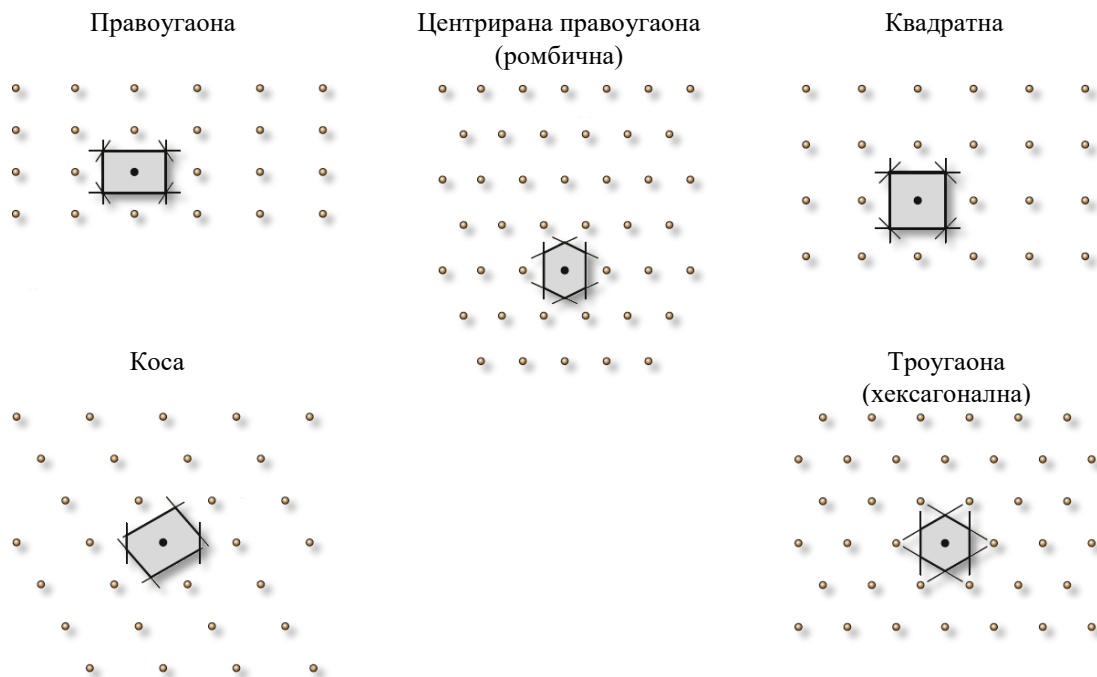
Примитивни вектори реципрчне решетке се дефинишу помоћу примитивних вектора директне решетке на следећи начин:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}, \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}. \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

Паралелопипед формиран на примитивним векторима реципрчне ћелије назива се примитивна ћелија реципрчне решетке. Примитивна ћелија реципрчне решетке може се изабрати тако да изражава пуну симетрију решетке, тј. као Вигнер-Зајцова ћелија. Вигнер-Зајцова ћелија у реципрчном простору одређује прву Брилуенову зону.

Физички значај прве Брилуенове зоне се огледа у чињеници да се у њој налазе све физички нееквивалентне вредности квазиталасног вектора \vec{k} електрона који се налази у кристалној решетки. Осим тога, реципрочна решетка се користи и при решавању других физичких проблема као што је нпр. дифракција таласа у кристалу. На слици 2.5 су приказане дводимензионалне реципрчне решетке са одговарајућим Брилуеновим зонама [100, 101].

Критичне тачке Брилуенове зоне су одређене тачке високе симетрије које су од интереса за посматрану решетку. За све решетке Γ тачка се налази у центру Брилуенове зоне, док су остале тачке именоване за сваки појединачни тип решетке.

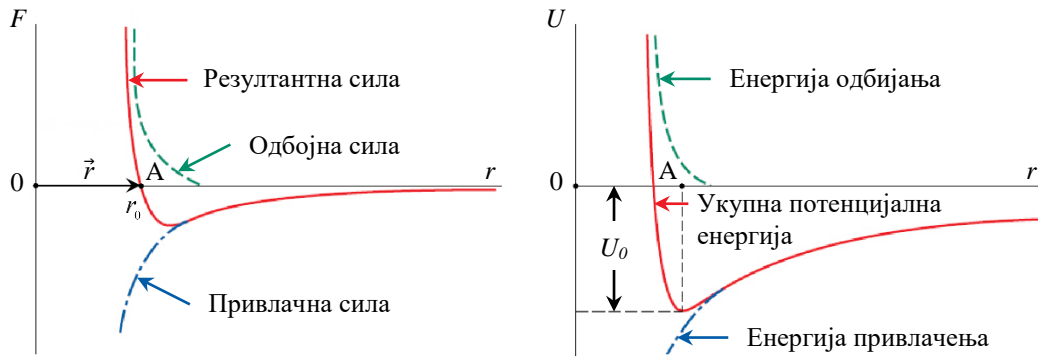


Слика 2.5. Двoдимензионалне реципрочне решетке са освeнeнoм првoм Брилуeнoвoм зoнoм [101].

Фермијева површ је површина у реципрочном простору која раздваја окупирана и неокупирана електронска стања на нултој температури. Када се електрон налази на Фермијевој површи, његова динамичка својства углавном зависе од тачне локације на тој површи. На основу облика саме Фермијевој површи у односу на Брилуенову зону могуће је одредити и одређена електронска својства материјала. Број различитих Фермијевих површи које постоје на Фермијевом нивоу дефинишу дегенерацију удолине. Симетрија прве Брилуенове зоне може да се искористи за једноставно пребројавање дегенерисаних удолина [103].

2.1.3. Потенцијална енергија

Хемијске везе су физичке интеракције, тј. силе које се испољавају између структурних јединица у материјалу. Привлачне силе се на растојањима од око $r_0 \sim 10^{-10}$ m уравнотежавају са одбојним силама. Када су те силе у равнотежи кристал поседује минималну потенцијалну енергију, што одговара стабилном термодинамичком стању. На слици 2.6 је приказ привлачне, одбојне и резултантне силе, као и њихови доприноси потенцијалној енергији система састављеног од две структурне јединице на растојању r . На растојањима $r < r_0$ преовлађује одбојна сила јер ту долази до узајамног продирања електронских облака, а по Паулијевом принципу искључења није дозвољено да се два или више електрона нађу у истом квантном стању. Уколико се два атома нађу на растојању $r > r_0$ између њих ће бити привлачна сила (јонска, ковалентна, метална или молекуларна – Ван дер Валсова и водонична). На температури апсолутне нуле у стању стабилне равнотеже, систем има минималну енергију од $E_0 = -U_0 + E_{k_0}$, где E_{k_0} представља енергију нултих вибрација коју поседују атоми у кристалима. Енергија нултих вибрација је последица Хајзенбергове релације неодређености према којој честица ограничена у одређеној области простора не може бити у мировању, тако да структурне јединице кристала вибрирају око равнотежног положаја r_0 . Са повећањем температуре расте и енергија вибрација структурних јединица, а због асиметричности потенцијалне криве равнотежни положај се помера удесно, тј. средње растојање између структурних јединица се повећава [100].



Слика 2.6. Приказ привлачне, одбојне и резултантне силе између структурних јединица кристала (лево), као и њихових доприноса укупној потенцијалној енергији система (десно) [100].

Потенцијална енергија система у пракси се често апроксимира Ленард-Џонсовим потенцијалом:

$$U(r) = U_0 \left[-2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 + \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} \right]. \quad (2.1.8)$$

Међутим, да би се објаснила вибрациона динамика кристала, потенцијалну енергију је потребно развити у Тејлоров ред временски зависних помераја $\vec{u}(lk, t) \equiv \vec{u}(lk)$ атома око њихових равнотежних положаја \vec{r}_{lk} :

$$\begin{aligned} U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{ll'kk'} \frac{\partial^2 U}{\partial \vec{r}_{lk} \partial \vec{r}_{l'k'}} \vec{u}(lk) \vec{u}(l'k') + \\ + \frac{1}{6} \sum_{ll'l''kk'k''} \frac{\partial^3 U}{\partial \vec{r}_{lk} \partial \vec{r}_{l'k'} \partial \vec{r}_{l''k''}} \vec{u}(lk) \vec{u}(l'k') \vec{u}(l''k'') + \\ + \dots \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

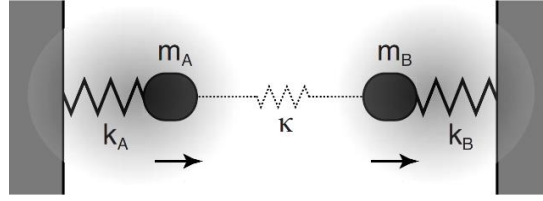
где је U_0 статичка потенцијална енергија, а равнотежни положаји су одређени помоћу примитивних вектора као $\vec{r}_{lk} = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3 + \vec{d}(k)$, где $\vec{d}(k)$ ($k = 1, 2, \dots, s$) дефинише релативне позиције s атома унутар сваке јединичне ћелије. Чланови трећег и вишег реда развоја U одређују ефекте динамике решетке, као што су термално ширење, термална отпорност и фонон-фонон интеракције. Они се обично занемарују у теорији динамике површина, тј. обично се користи хармонијска апроксимација [104].

2.2. Колективне осцилације

Осцилација представља вид периодичног кретања у коме долази до поновљених варијација физичких величина око одређене равнотежне вредности. На слици 2.7 су илустрована два механичка осцилатора маса m_A и m_B са константама опруге k_A и k_B . Сопствене фреквенције су им $\omega_A^0 = \sqrt{k_A/m_A}$ и $\omega_B^0 = \sqrt{k_B/m_B}$, респективно. У присуству спреге κ , једначине кретања система су:

$$\begin{aligned} m_A \ddot{x}_A + k_A x_A + \kappa (x_A - x_B) &= 0, \\ m_B \ddot{x}_B + k_B x_B - \kappa (x_A - x_B) &= 0, \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

чија су решења у облику $x_i(t) = x_i^0 e^{-i\omega_{\pm} t}$, где су ω_{\pm} нове сопствене фреквенције.

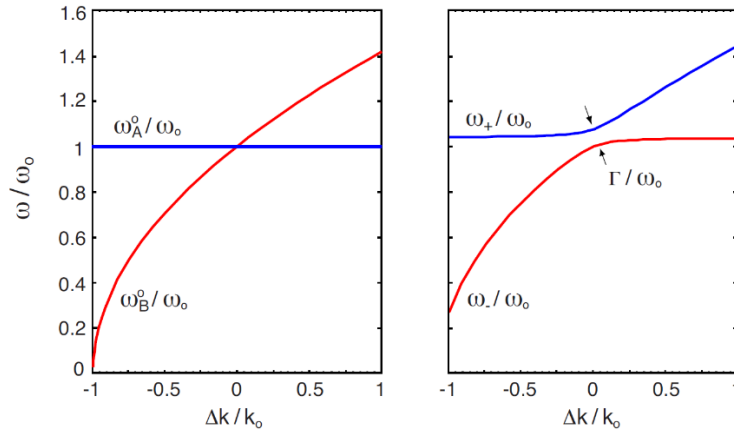


Слика 2.7. Шематски приказ спрезања (јачине κ) преко осцилатора маса m_i и константа опруге k_i [105].

Решавањем система диференцијалних једначина добија се да је:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left[\omega_A^2 + \omega_B^2 \pm \sqrt{(\omega_A^2 - \omega_B^2)^2 + 4\Gamma^2 \omega_A \omega_B} \right], \quad (2.2.2)$$

где је $\omega_A = \sqrt{(k_A + \kappa) / m_A}$, $\omega_B = \sqrt{(k_B + \kappa) / m_B}$ и $\Gamma = \sqrt{\kappa / m_A} \cdot \sqrt{\kappa / m_B} / \sqrt{\omega_A \omega_B}$. Описан систем, настао спрезањем система A и B , представља добру класичну перспективу цепања енергетских нивоа, фреквенција и антипрелаза/антиукрштања (*avoided crossing*). На слици 2.8 (лево) су приказане решења ω_{\pm} за параметре $k_A = k_0$, $k_B = k_0 + \Delta k$ и $m_A = m_B = m_0$. Повећавањем Δk од $-k_0$ до k_0 фреквенција осцилатора B се повећава од 0 до $\sqrt{2}\omega_0$, фреквенција осцилатора A остаје константна, тако да се две криве пресецају за $\Delta k = 0$. Када постоји спрезање нема пресека тих кривих, већ долази до карактеристичног антиукрштања са фреквенцијом цепања од $[\omega_+ - \omega_-] = \Gamma$. Увођењем пригушења помоћу коефицијената трења ($\gamma_A \dot{x}_A$ и $\gamma_B \dot{x}_B$) добијају се комплексне вредности сопствених фреквенција, а њихови имагинарни делови представљају ширину линија. Стога, да би се уочило спрезање, фреквенција цепања мора бити већа од збира ширина кривих линија ($\Gamma > \gamma_A / m_A + \gamma_B / m_B$), тј. дисипација у сваком систему мора бити мања од јачине спрезања [105].



Слика 2.8. (Лево) Сопствене фреквенције два неспрегнута осцилатора једнаких маса са константама опруге k_0 и $k_0 + \Delta k$. (Десно) Фреквенција антиукрштања за јачину спреге $\kappa = 0,08k_0$. Фреквенција цепања Γ се линеарно скалира са јачином спреге κ [105].

Најједноставнији пример механичких вибрација, линеарни хармонијски осцилатор, има један степен слободе. Компликованији системи имају више степени слободе, а када тај број постане произвољно велики, системи постају континуални и њихове осцилације добијају форму таласа. У природи постоје разне врсте таласа: механички, електромагнетни, гравитациони, топлотни, плазма таласи итд.

На основу правца простирања појединачних честица у медијуму, механички таласи се деле на трансверзалне (Т), лонгитудиналне (Л) и површинске. Код трансверзалних или попречних таласа осцилације честица су нормалне на правац простирања таласа, а код лонгитудиналних или уздужних таласа осцилације су дуж правца кретања таласа. Површински талас је механички талас који се простире на граници између два различита медијума. Изучавање динамике чврстих површина је почело пред крај 19. века са фундаменталним радом Рејлија о принципу кретања земљотреса. Његов рад је показао постојање акустичних таласа који се крећу дуж површине полубесконачног, хомогеног и изотропног чврстог материјала, и који експоненцијално опадају унутар материјала. Дубина продирања тих таласа је пропорционална њиховој таласној дужини, што је и очекивано јер хомогени полубесконачни континуум изгледа исто на свим удаљеностима. Стога, површински таласи постоје на површини било које размере, од површине планета до површине кристалне решетке молекула. За површинске таласе који се понашају као претходно описани Рејлијеви таласи каже се да су макроскопски, док су у супротном микроскопски [104].

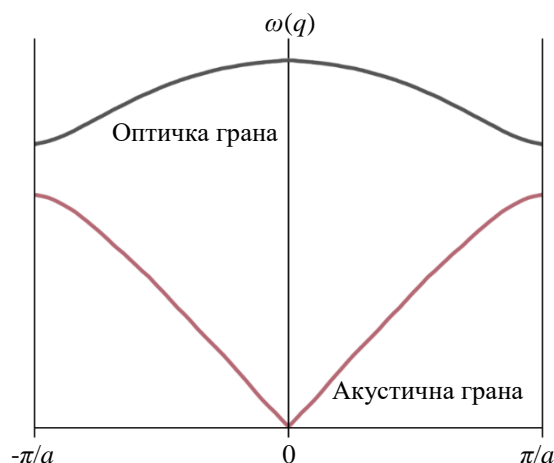
У наставку одељка су детаљније описани фонони и плазмони, тј. колективне осцилације атома и електрона, респективно, као и интеракције између њих.

2.2.1. Фонони

Атоми у кристалној решетки вибрирају око својих равнотежних положаја. Кванти тих колективних осцилација су фонони. Уколико се претпостави да су амплитуде споменутих вибрација мале у поређењу са растојањем између атома, долази се до услова хармонијске апроксимације, тј. сматра се да је за мала одступања од равнотежног положаја крива потенцијалне енергије атома симетрична у односу на тај положај. Ова апроксимација даје одлично слагање са експериментима и биће употребљена у овој дисертацији, али ипак она не може да објасни све појаве, као што је нпр. топлотно ширење кристала где је потребно узети у обзир и чланове вишег реда развоја потенцијалне енергије у ред око равнотежног положаја [100].

Сваки атом има по три степена слободе тако да кристал са N атома има $3N$ карактеристичних кружних учестаности, које се називају нормалним модовима. Учестаности свих нормалних модова формирају енергетске вибрационе нивое кристала који се могу поделити на фононске спектралне гране. Помераји атома из равнотежних положаја резултују вибрационим таласима који се простиру кроз решекту.

Вибрациона својства кристала се описују помоћу фононске дисперзионе зависности $\omega(q)$, где је ω кружна учестаност фонона, а q његов таласни вектор. Дисперзионе релације за једнодимензионални систем од два различита атома су приказане са слици 2.9. Доња грана се назива акустичном зато што за мале вредности q релација $\omega(q)$ има линеарну зависност која је карактеристична за звучне таласе, $\omega = v_z q$. Нагиб праве, v_z , представља брзину звука у посматраном материјалу. Горња грана се назива оптичком зато што њени фонони могу директно да интерагују са електромагнетним зрачењем и одговорни су за оптичка својства кристала. Спектар акустичних фонона тежи нули када $q \rightarrow 0$, док спектар оптичких фонона у том случају тежи ка одређеној коначној вредности. Акустични мод описује вибрације решетке при којима је кретање атома у фази, а оптички мод описује кретање у противфази. И акустични и оптички фонони могу бити лонгитудинални и трансверзални, а често се означавају као ЛА, ТА и ЛО, ТО фонони, респективно.



Слика 2.9. Фононска дисперзиона зависност једнодимензионалног система од два атома са периодом решетке a [100].

У тродимензионалном случају када има s атома у јединичној ћелији, укупан број модова је $3sN$, где је N број ћелија у кристалу, sN је број атома у кристалу, а $3sN$ је број степени слободе. Тада се модови расподељују на $3s$ дисперзионих грана од којих су 3 акустичне, а $3s-3$ оптичке [44, 100].

Претходни пасуси описују фононе који се налазе унутар материјала, тј. волуминозне фононе. Међутим, на површини кристала јавља се посебна класа модова који се зову површински фонони. Површински фонони су слични волуминозним фононима, али су амплитуде осциловања атома ограничене на регион близу слободне површине материјала и опадају експоненцијално са повећањем удаљености од површине. Слободна површина разбија транслациону симетрију кристала и може се објаснити на следећи начин: уколико се посматра периодични кристал, слободна површина представља раван која се налази између суседних равни кристалне решетке између којих су интеракције атома сведене на нулу. Овим смањивањем интеракција долази до опадања фреквенције нормалних модова. Фреквенције површинских фонона се обично налазе на дну гране волуминозног мода који има исту вредност компоненте таласног вектора паралелне површини материјала. Самим тим, модови површинских фонона могу да се налазе испод континуума волуминозних модова или у њиховим процепима. Међутим, у одређеним ситуацијама површински модови могу да се нађу и унутар, или чак изнад континуума волуминозног мода уколико су њихови поларизациони вектори ортогонални на векторе околних волуминозних модова. Приликом анализирања површинских фонона потребно је узети у обзир све вибрације близу површине, што обухвата и саме фононе локализоване на површини, али и манифестације волуминозних фонона на површини [97, 106].

На основу дубине продирања површинске фононе могуће је поделити на макроскопске и микроскопске. Макроскопски модови се класификују на оптичке (Фухс-Кливерови (*Fuchs-Kliwer*) [107]) и акустичне (Рејлијеви [96]). Помераји Рејлијевих површинских таласа леже у сагиталној равни која је дефинисана нормалама на слободну површину и на правац простирања таласа. Дубина продирања им је пропорционална таласној дужини у дуготаласној граници. Фреквенција Фухс-Кливерових фонона се налази између фреквенције ТО и ЛО волуминозног фонона за $q \rightarrow 0$, а може се добити решавањем Лапласове једначине за електростатички потенцијал јонског кристала под одређеним граничним условима [108]. Фухс и Кливер су показали да су модови површинских фонона танког филма директно повезани са фононима одговарајућег волуминозног материјала, као и да су последица граничних услова на површини.

Тако, примера ради, у случају изотропне решетке са једним осцилатором, постоје две гране површинских фонона, ω_+ и ω_- , које се приближавају волуминозним ЛО и ТО фреквенцијама, респективно, у Γ тачки танког филма. Повећањем дебљине филма и таласног вектора фонона две гране конвергирају ка средњој фреквенцији датог Лиден-Сакс-Телеровом (*Lyddane-Sachs-Teller*) релацијом [109].

Моделовање фонона методом плоче

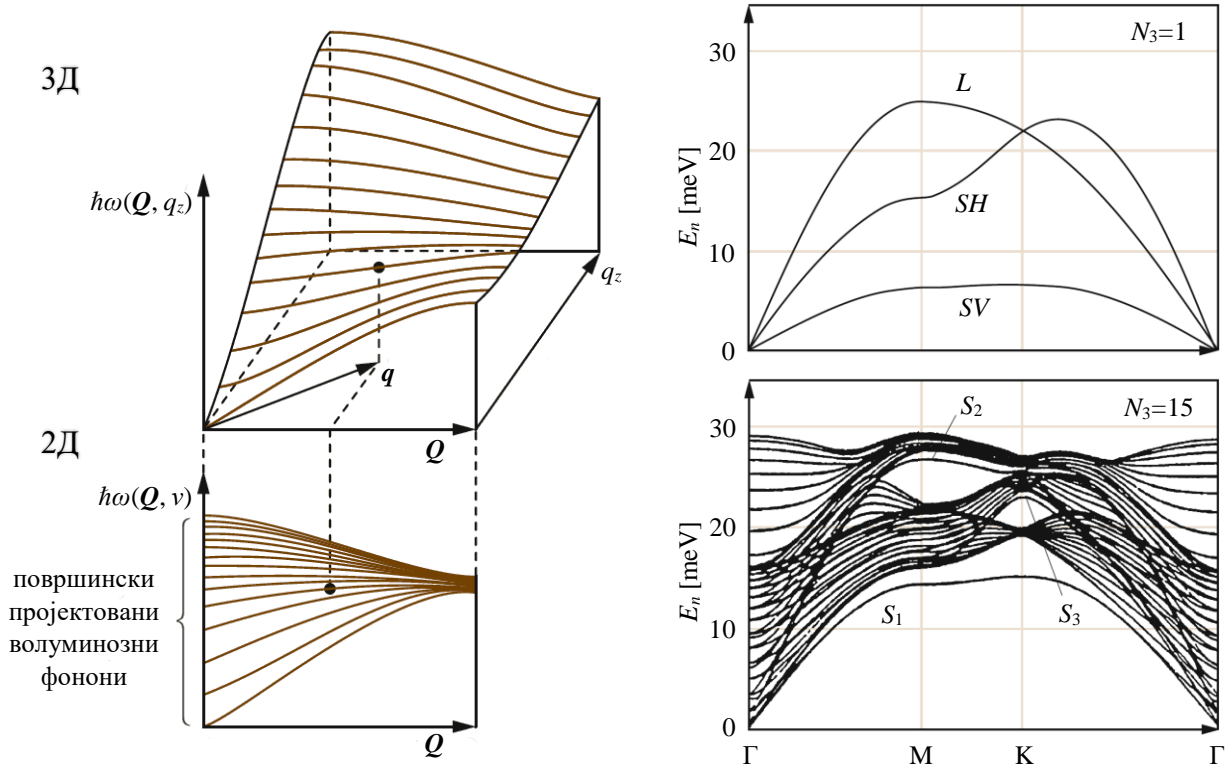
Метод плоче је врло zgodан и моћан метод за проучавање динамике танких филмова и кристала са слободним површинама. У њему се разматра кристал који је ограничен са две равне бесконачне површине између којих је коначан број паралелних кристалних равни (N_3), тј. кристал се посматра као равна плоча. Кристал има укупно $N = N_1 N_2 N_3$ јединичних ћелија, где су N_1 и N_2 јединичне ћелије дуж праваца паралелних површинама. Периодични гранични услови у оквиру једног периода ограничавају дводимензионалну, тј. површинску јединичну ћелију. Треба нагласити да се плоча било које дебљина сматра 2Д кристалом са становишта операција симетрије зато што је добијена применом операција 2Д транслационе групе на јединичну ћелију. Два главна приступа одређивању динамике тако добијене плоче јесу молекуларна динамика и динамика решетке. Динамика решетке се може сматрати линеаризованом формом молекуларне динамике [97].

Теорија динамике површина у Борн-Фон Карман формулацији се састоји из два корака. У првом кораку волуминозни фонони, који се добијају као решења система динамичких једначина за кристалну решетку са 3Д граничним условима, се пројектују на нове координате које одговарају 2Д граничним условима. У другом кораку се узимају у обзир ефекти површинске пертурбације који потичу од уклањања периодичних граничних услова у правцу нормалном на површину кристала. Волуминозни фонони на које највише утиче површинска пертурбација се претварају у површински локализоване фононе или у унутарзонске површинске резонанције [104].

На слици 2.10 (лево) је приказано пројектовање волуминозних фонона на површину. Енергија површине је добијена помоћу дисперзионих кривих које припадају акустичним волуминозним фононима плоче од $N_3 = 15$ слојева, а приказана је као функција паралелне ($\bar{Q}(q_x, q_y)$) и нормалне (q_z) компоненте таласног вектора ($\bar{q}(\bar{Q}, q_z)$). Тај сет кривих је затим конвертован у 2Д зону: нормална компонента је замењена индексом ν који означава све модове са истим паралелним таласним вектором. Уколико јединична ћелија садржи s атома, биће $3s$ степени слободе и индекс ν ће означавати свих $3sN_3$ модова за сваку вредност \bar{Q} . За бесконачно дебелу плочу ($N_3 \rightarrow \infty$) појединачни модови више не могу да се уоче и зоне постају континуалне. То су зоне волуминозних фонона пројектованих на површину. На слици 2.10 (десно) су приказане дисперзионе криве површинских фонона за плочу од $N_3 = 1$ и $N_3 = 15$ слојева. За један слој могућа су само три акустична мода: трансверзални мод ван равни (вертикално смицање), трансверзални мод у равни (хоризонтално смицање) и лонгитудинални мод у равни. За два слоја добијају се још три оптичке гране које се антиукрштају са акустичним гранама сличних поларизација. Повећавањем броја слојева додају се по три нове оптичке фононске гране за сваки слој, тако да се већ за 15 слојева може видети јасно раздвајање површинских фононских грана (грانا Рејлијевог таласа и две гране између зона) од површински пројектованих волуминозних фонона [104, 110].

Када је дубина продирања површинских таласа много мања од дебљине плоче, модови који потичу од две површине плоче су практично дегенерисани. У плочи бесконачне дебљине две површине су независне једна од друге и фреквенције њихових површинских модова су

једнаке, што значи да се дебела плоча може заменити полубесконачним кристалом са једном површином. Само је у случају јонских кристала код којих дуготаласни лонгитудинални оптички модови носе макроскопско електрично поље (Фухс-Кливерови модови) ситуација нешто компликованија [110].



Слика 2.10. (Лево) Приказ пројектовања волуминозних фонона на површину. (Десно) Фононске дисперзионе криве површинских фонона за 1 и 15 слојева у плочи. За један слој приказана су три акустична мода која потичу од вертикалног смицања (*SV-shear vertical*), хоризонталног смицања (*SH-shear horizontal*) и лонгитудиналне (*L-longitudinal*) поларизације, а за 15 слојева виде се јасно раздвојене површинске фононске гране (грана Рејлијевог таласа, S_1 , и два мода између зона, S_2 и S_3) и површински пројектовани волуминозни фонони (густе линије) [104].

2.2.2. Плазмони

Лангмјурови таласи [111], тј. плазма осцилације су брзе осцилације густине електрона у проводном медијуму. Плазмон представља квант тих колективних осцилација електрона. Будући да су плазмони само квантизација класичних плазма осцилација, већина њихових својстава може да се добије директно из Максвелових једначина [112]. Макроскопске Максвелове једначине гласе:

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \vec{D} &= \rho_{ext}, \\
 \nabla \cdot \vec{B} &= 0, \\
 \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\
 \nabla \times \vec{H} &= \vec{J}_{ext} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}.
 \end{aligned} \tag{2.2.3}$$

Ове једначине повезују макроскопска поља ($\vec{E} \equiv \vec{E}(\vec{r}, t)$) је вектор јачине електричног поља, $\vec{D} \equiv \vec{D}(\vec{r}, t)$ је вектор електричне индукције, односно вектор диелектричног помераја, $\vec{H} \equiv \vec{H}(\vec{r}, t)$ је вектор јачине магнетног поља, $\vec{B} \equiv \vec{B}(\vec{r}, t)$ је вектор магнетне индукције) са спољашњим наелектрисањем ($\rho_{ext} \equiv \rho_{ext}(\vec{r}, t)$) и густином струје ($\vec{J}_{ext} \equiv \vec{J}_{ext}(\vec{r}, t)$). Макроскопска поља су даље повезана са векторима поларизације (\vec{P}) и магнетизације (\vec{M}):

$$\begin{aligned}\vec{D} &= \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}, \\ \vec{H} &= \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M},\end{aligned}\tag{2.2.4}$$

где је $\varepsilon_0 \approx 8,85 \cdot 10^{-12}$ F/m електрична пермитивност вакуума, а $\mu_0 \approx 4\pi \cdot 10^{-7}$ H/m је магнетна пермеабилност вакуума. У случају хомогене, изотропне и проводне средине важи да је:

$$\begin{aligned}\vec{P} &= \varepsilon_0 \chi_e \vec{E}, \\ \vec{M} &= \chi_m \vec{H} \\ \vec{J} &= \sigma \vec{E},\end{aligned}\tag{2.2.5}$$

при чему су χ_e , χ_m и σ електрична суспендибилност, магнетна суспендибилност и проводност средине, респективно. Тада конститутивне релације постају:

$$\begin{aligned}\vec{D} &= \varepsilon_0 \vec{E} + \varepsilon_0 \chi_e \vec{E} = \varepsilon_0 (1 + \chi_e) \vec{E} \Rightarrow \vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \vec{E}, \\ \vec{H} &= \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \chi_m \vec{H} \Rightarrow (1 + \chi_m) \vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} \Rightarrow \vec{H} = \frac{1}{\mu_0 \mu} \vec{B},\end{aligned}\tag{2.2.6}$$

где су $\varepsilon = 1 + \chi_e$ и $\mu = 1 + \chi_m$ релативна диелектрична пермитивност и релативна магнетна пермеабилност, респективно. У општем случају линеарне релације за \vec{D} и \vec{J} могу да се напишу као:

$$\begin{aligned}\vec{D}(\vec{r}, t) &= \varepsilon_0 \int \varepsilon(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt', \\ \vec{J}(\vec{r}, t) &= \int \sigma(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt'.\end{aligned}\tag{2.2.7}$$

Те релације говоре да вредности \vec{D} и \vec{J} на позицији \vec{r} и у тренутку t зависе од вредности \vec{E} на свим позицијама \vec{r}' у временском периоду $t < t'$ преко функција одзива $\varepsilon(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$ и $\sigma(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$. Имплицитно је претпостављено да су све посматране дужине значајно веће од растојања структурних јединица у кристалној решетки материјала, чиме је осигурана његова хомогеност, тј. импулсне функције одзива не зависе од апсолутних просторних и временских координата, већ само од њихових разлика. Фуријеовом трансформацијом претходних једначина, $\int e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{r} dt$, оне могу значајно да се упросте:

$$\begin{aligned}\vec{D}(\vec{k}, \omega) &= \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega), \\ \vec{J}(\vec{k}, \omega) &= \sigma(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega),\end{aligned}\tag{2.2.8}$$

претварајући конволуцију у множење чиме се поља разлажу на појединачне компоненте раванских таласа са таласним вектором \vec{k} и угаоном фреквенцијом ω . Такође, у Фуријеовом домену је $\partial / \partial t \rightarrow -i\omega$, тако да је веза између диелектричне функције и проводности:

$$\varepsilon(\vec{k}, \omega) = 1 + \frac{i\sigma(\vec{k}, \omega)}{\varepsilon_0 \omega}. \quad (2.2.9)$$

Сви модови пропагације таласа могу се описати дисперзионом релацијом и поларизационом функцијом. Дисперзиона релација представља функционалну везу између фреквенције таласа ω и таласног броја k . Таласне једначине у одсуству спољашње побуде, у временском и Фуријеовом домену гласи, су редом:

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \vec{E}) &= -\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{D}}{dt^2}, \\ \vec{k}(\vec{k} \cdot \vec{E}) - k^2 \vec{E} &= -\varepsilon(\vec{k}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}, \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

где је $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \approx 3 \cdot 10^8$ m/s брзина светлости у вакууму. У зависности од правца поларизације вектора електричног поља, разликују се два случаја. За трансверзалне таласе, $\vec{k} \cdot \vec{E} = 0$, добија се уопштена дисперзиона релација:

$$k^2 = \varepsilon(\vec{k}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (2.2.11)$$

док за лонгитудиналне таласе, $\vec{k} \parallel \vec{E}$, следи да је:

$$\varepsilon(\vec{k}, \omega) = 0, \quad (2.2.12)$$

што значи да се лонгитудиналне колективне осцилације могу јавити само на фреквенцијама које одговарају нулама диелектричне функције. Тако запремински плазмони, због своје лонгитудиналне природе ексцитација, не могу да интерагују са трансверзалним електромагнетним таласима, већ може да их побуди само спољашња честица. Такође, њихов распад се дешава једино путем преноса енергије таласа на енергију појединачних електрона, што је процес познат под називом Ландауово пригушење. Овај процес представља механизам слабљења таласа без сударних процеса. Тада одређене честице (оне чије су брзине скоро једнаке фазној брзини таласа) упадну у потенцијалну јаму таласа, резултујући трансфером енергије са таласа на честице [44, 113, 114]. Више о Ландауовом пригушењу биће дато на конкретном примеру графена.

Плазмони постоје у свим димензијама. Површ волуминозног материјала представља нови гранични услов за колективне плазма осцилације, што резултује стањима локализованим на површини, тј. површинским плазмонима [115]. Површински плазмони су кохерентне ексцитације слободног електронског гаса које се јављају на раздвојној површини два материјала. Електромагнетно поље тих поларизационих таласа повезано са вишком наелектрисања опада експоненцијално са повећањем удаљености од површине. За разлику од запреминских плазмона са лонгитудиналним осцилацијама електрона, површински плазмони имају трансверзалну природу, те стога могу да интерагују са фотонима [116].

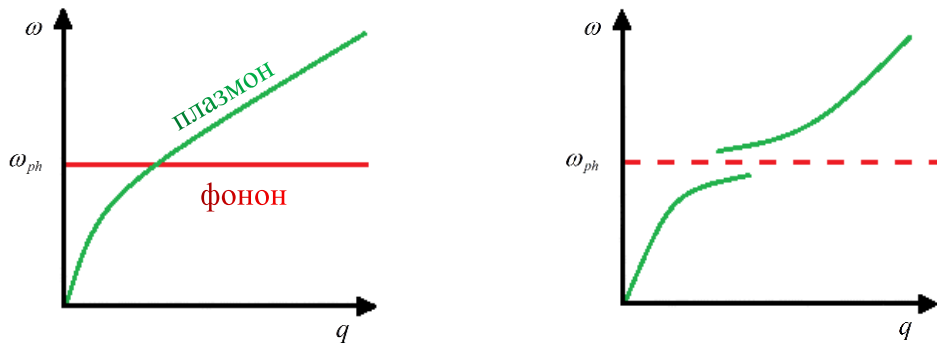
2.2.3. *Интеракција плазмона и фонона*

Материјал је поларан ако његова кристална структура садржи атоме различитих електронегативности, тј. ако су његове хемијске везе бар делом јонске. Уколико се посматра јонска кристална решетка, два суседна супротно наелектрисана јона (анјон и катјон) осцилују у противфази када се ЛО фонон креће кроз кристал. Електрично поље које стварају ти јони, слично пољу које ствара осцилујући електрични дипол, може да расеје електроне путем

дугодометне Кулонове интеракције, познате као Фролихова (*Fröhlich*) интеракција (између електрона и оптичких фонона). Интеракција између плазмона и ЛО фонона је први пут експериментално уочена 1966. године током посматрања Рамановог расејања на структурама од GaAs [39]. ТО фонони такође могу да интерагују са електронима путем краткодметног механизма званог оптички деформациони потенцијал (*optical deformation potential*). Супротно Фролиховој интеракцији, оптички деформациони потенцијал постоји и у неполярним полупроводницима као што је Si [44].

Јачина расејања Фролиховог електрона са ЛО фононом је пропорционална са $\hbar\omega_{LO}(1/\varepsilon^\infty - 1/\varepsilon^0)$ у материјалу у ком су ε^0 и ε^∞ статичка и оптичка пермитивност, респективно, док је $\hbar \approx 1,05 \cdot 10^{-34}$ Js редукована Планкова константа. Разлика $1/\varepsilon^0 - 1/\varepsilon^\infty$ је пропорционална квадрату амплитуде диполног поља које потиче само од осцилујуће јонске поларизације материјала, тј. због упаривања електрона и ЛО фонона. Тако Фролихово упаривање $F^2(q)$ описује јачину поларизационог поља [36].

Интеракција електрона и вибрација кристалне решетке значајно утиче на својства материјала. Феномен спрезања плазмона и фонона подразумева хибридизацију плазмонских модова 2Д електронског гаса са оптичким фононским модовима решетке. Утицај те хибридизације на дисперзиону релацију плазмона приказан је на слици 2.11 [87].



Слика 2.11. (Лево) Шематски приказ дисперзионе релације плазмона и фонона. (Десно) Шематски приказ дисперзионе релације хибридизације плазмона и фонона [87].

2.3. Модели диелектричних функција

Линеарне функције одзива су карактеристике чврстих стања и као такве могу да се примене на спектрални опсег од радио таласа до гама зрака, али и на анализе са честицама. Једна од основних функција одзива је електрична суцептибилност која описује поларизацију $\vec{P}(\vec{k}, \omega)$ насталу под дејством електричног поља $\vec{E}(\vec{k}, \omega)$:

$$\vec{P}(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_0 \chi_e(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega). \quad (2.3.1)$$

Још један пример функције одзива јесте диелектрична функција или релативна диелектрична пермитивност која повезује индукцију $\vec{D}(\vec{k}, \omega)$ и електрично поље $\vec{E}(\vec{k}, \omega)$:

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega). \quad (2.3.2)$$

У општем случају, $\varepsilon(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_1(\vec{k}, \omega) + i\varepsilon_2(\vec{k}, \omega)$ је комплексна функција, па је по дефиницији ($\chi_e = \varepsilon - 1$) и суцептибилност такође комплексна функција [117]. За анализу разних својстава плазмона користе се различити модели диелектричних функција и у наставку одељка ће бити приказани неки од њих.

Друдеов модел

Прва и најједноставнија апроксимација јесте Друдеов (*Drude Paul, 1863-1906*) модел у ком се претпоставља да диелектрична функција не зависи од таласног вектора у дуготаласној граници: $\varepsilon(\vec{k} = 0, \omega) = \varepsilon(\omega)$. Ова апроксимација је валидна све док је таласна дужина, нпр. упадне светлости у материјалу, значајно већа од свих карактеристичних димензија материјала, као што су величина јединичне ћелије или средња дужина слободног пута електрона. Претпостављено је да се гас слободних електрона бројне густине наелектрисања n креће преко фиксних позитивних јона, а само одређени аспекти зонске структуре су узети у обзир преко ефективне масе електрона m^* . Кретање електрона је пригушено тренутним сударима са фиксним јонима који се дешавају карактеристичном сударном фреквенцијом, односно брзином расејања дефинисаном као $\gamma = 1/\tau$, где је τ феноменолошки параметар познат као време релаксације слободног електронског гаса. Диелектрична функција у овом моделу је дата као:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (2.3.3)$$

где је $\omega_p^2 = ne^2/(\varepsilon_0 m^*)$ квадрат плазма фреквенције слободног електронског гаса [1, 113].

Апроксимација случајне фазе

Линхардова (*Lindhard Jens, 1922-1997*) диелектрична функција се користи за сложенији опис диелектричног одзива слободног електронског гаса у апроксимацији случајних фаза (*Random Phase Approximation - RPA*). Овај модел се добија квантномеханичким приступом, а његова главна претпоставка јесте да електрони реагују на потенцијал који је збир спољашњег пертурбујућег Кулоновог потенцијала и потенцијала екранирања: $V(\vec{k}, \omega) = V_C(\vec{k}, \omega) + V_s(\vec{k}, \omega)$. Потенцијал екранирања (*screening*) је резултат електронске поларизације настале динамичком прерасподелом наелектрисања као резултат деловања Кулоновог потенцијала. Дегенерисан електронски гас је описан раванским таласима чији вектори леже на Фермијевој сфери. Диелектрична функција за изотропне системе у овом моделу је:

$$\varepsilon(k, \omega) = \varepsilon_1(k, \omega) + i\varepsilon_2(k, \omega) = 1 + \frac{\chi^2}{z^2} [f_1(u, z) + if_2(u, z)], \quad (2.3.4)$$

где је $u = \omega/kv_F$, $z = k/(2k_F)$, $\chi^2 = e^2/(\pi\hbar v_F)$ је параметар густине наелектрисања, Фермијев таласни број је $k_F = (2\pi n)^{1/2}$, а $v_F = \hbar k_F/m^*$. Функције $f_1(u, z)$ и $f_2(u, z)$, за јако мале вредности фактора пригушења ($\gamma \rightarrow 0$), јесу:

$$f_1(u, z) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8z} [1 - (z-u)^2] \log \left| \frac{z-u+1}{z-u-1} \right| + \frac{1}{8z} [1 - (z+u)^2] \log \left| \frac{z+u+1}{z+u-1} \right|, \quad (2.3.5)$$

$$f_2(u, z) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} u, & \text{за } z+u < 1, \\ \frac{\pi}{8z} [1 - (z-u)^2], & \text{за } |z-u| < 1 < z+u, \\ 0, & \text{за } |z-u| > 1. \end{cases} \quad (2.3.6)$$

Плазмонски модови, тј. плазмонске дисперзионе криве представљене са ω_k , добијају се нумеричким решавањем једначине $\varepsilon_1(k, \omega) = 0$ у региону (k, ω) простора у ком је $\varepsilon_2(k, \omega) \equiv 0$, односно у региону у ком важи да је $\omega > kv_F + \hbar k^2 / (2m^*)$ [1, 113, 118].

Недостатак *RPA* диелектричних функција јесте то што претпостављају да електронске ексцитације трају бесконачно дуго и што занемарују локалне ефекте поља који настају због електронских корелација. У случају графена само једна од ових мана може квалитативно да се реши у исто време, нпр. или увођењем коначне брзине расејања $\gamma = 1/\tau$ користећи Мерминову (*Nathaniel David Mermin, 1935*) процедуру [119, 120] или користећи Хабардову (*John Hubbard, 1931-1980*) апроксимацију [121, 122] за локалне ефекте поља [83]. Увођење параметра γ води истој величини као и у претходно наведеној апроксимацији времена релаксације (*relaxation time - RT*). Мермин је предложио да судари доводе густину електрона до локалне равнотежне расподеле, односно до равнотежне расподеле са помереним хемијским потенцијалом, на такав начин да се задовољава једначина континуитета.

Са експерименталне тачке гледишта, величину γ треба сматрати феноменолошким параметром који се користи за фитовање експеримената, а који укључује различите начине на које побуђен електрон може да се релаксира у основно стање. Са теоријске стране, израчунавање γ полазећи од првих принципа је комплексан задатак који на крају треба да се слаже са експериментално добијеним вредностима. На пример, у случају графена γ зависи од унутрашњих аспеката физике графена, као што су интеракције електрон-електрон, електрон-фонон и електрон-нечистоћа, али и од спљашњих утицаја, као што су својства материјала на који је графен депонован [44].

Хидродинамички модел

Блох (*Bloch Felix, 1905-1983*) је први предложио алтернативни, хидродинамички приступ описивању колективних феномена који се дешавају у електронском гасу. Управо тај приступ је користио Ричи 1957. године када је предвидео плазма резонанције у танким фолијама. У Блоховом моделу посматра се неуниформни електронски гас окружен стационарном позадином позитивних наелектрисања, а претпоставља се да електрони могу да осцилују унутар те позадине. Позадина је описана Томас-Фермијевим моделом густине позитивног наелектрисања као $n_0^+ = n_0^+(\vec{r})$, док је електронски гас дефинисан својом густином наелектрисања $n = n(\vec{r}, t)$, брзином протока $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r}, t)$ и Фермијевим притиском $P = P(n) = \gamma n^{5/3}$, где је $\gamma = (3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 / (5m_e)$, а $m_e \approx 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg је маса електрона. Основне хидродинамичке једначине које се користе, у електростатичкој апроксимацији, јесу:

$$\text{Навије-Стоксова:} \quad \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{v} \vec{v}}{2} \right) - \vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{v}) = en \vec{\nabla} \phi - \vec{\nabla} P(n), \quad (2.3.7)$$

$$\text{Поасонова:} \quad \nabla^2 \phi = 4\pi e (n - n_0^+), \quad (2.3.8)$$

$$\text{Једначина континуитета:} \quad \frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (n \vec{v}) = 0, \quad (2.3.9)$$

где је $-e$ наелектрисање електрона, а $\phi = \phi(\vec{r}, t)$ је електростатички потенцијал [1]. Што се тиче дводимензионалних електронских структура, њих је први почео да изучава Фетер (*Alexander L. Fetter, 1937*) 1973. године [123, 124]. Његов модел подразумева да су сви електрони део јединственог флуида који је описан само са два параметра: равнотежном површинском густином наелектрисања n_0 и ефективном масом електрона m^* . Овакав приступ

је назван једнофлуидни 2Д хидродинамички модел. Међутим, тај модел је сувише једноставан и не узима у обзир различите везе које формирају валентни електрони, σ и π везе. Двофлуидна верзија 2Д хидродинамичког модела третира σ и π електроне као два класична или полукласична флуида са равнотежним густинама n_σ^0 и n_π^0 увођењем емпиријских параметара [125] или Фермијевог притиска [126] у флуидима [127].

Диелектрична функција поларног материјала

Уопштена форма комплексне диелектричне функције поларног супстрата, која зависи од фреквенције, може да се напише у облику [128]:

$$\varepsilon_{sup.}(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{j=1}^N f_j \frac{\omega_{TO_j}^2}{\omega_{TO_j}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_{TO_j}}, \quad (2.3.10)$$

где ω_{TO_j} одговара j -тој фреквенцији волуминозног трансверзалног оптичког фонона у материјалу. Параметар Γ_{TO} представља брзину расејања ТО фонона. Величина f_j карактерише снагу осцилатора и све њене вредности $f_j = \varepsilon_{(j-1)} - \varepsilon_{(j)}$ (где су $\varepsilon_{(0)} \equiv \varepsilon_s$ и $\varepsilon_{(N)} \equiv \varepsilon_\infty$ статичка и високофреквентна диелектрична константа изолатора, респективно) могу да се добију из експеримента. Она мери релативни допринос сваког мода укупном својству екранирања супстрата тако да задовољава правило суме $\sum_j f_j = \varepsilon_s - \varepsilon_\infty$.

За јединствену фононску фреквенцију, ТО фонон је повезан са одговарајућим Фухс-Кливеровим (ФК) површинским оптичким (SO - *surface optical*) фононом као $\omega_{SO} = \omega_{TO}[(1 + \varepsilon_s)/(1 + \varepsilon_\infty)]^{1/2}$. Уколико има више од једног осцилатора, тј. више од једног фононског мода и ако су ти модови добро дефинисани, претходна релација се претвара у $\omega_{SO_j} \approx \omega_{TO_j}[(1 + \varepsilon_{(j-1)})/(1 + \varepsilon_{(j)})]^{1/2}$. У општем случају, дато ω_{SO_j} је функција свих других ω_{TO_j} . Фреквенције тих ФК ексцитација, које се јављају на површини између два медијума, могу да се одреде из [129]:

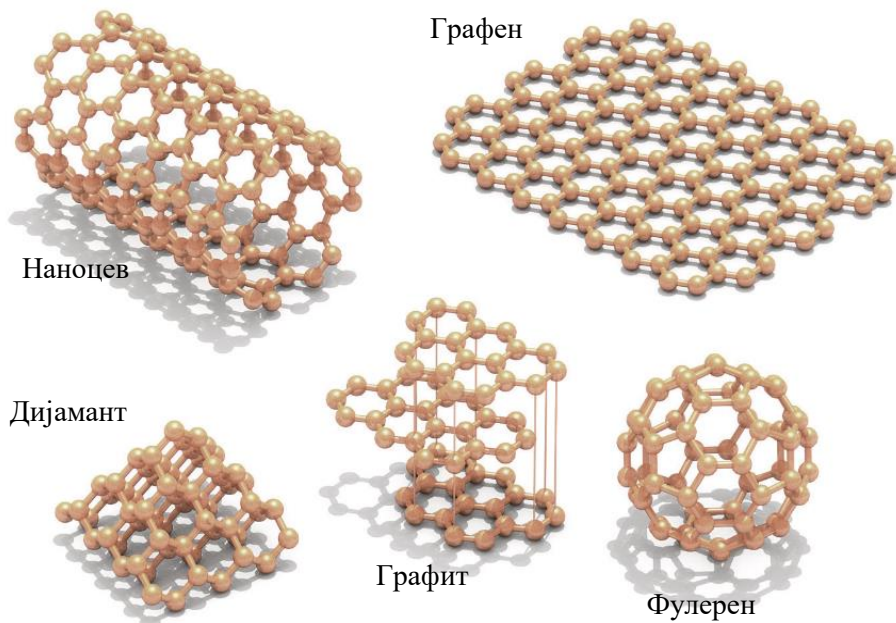
$$\varepsilon_{sup.}(\omega) + 1 = 0, \quad (2.3.11)$$

где је претпостављено да је други медијум ваздух и да нема пригушења.

Фреквенција волуминозног ЛО фонона је повезана са фреквенцијом одговарајућег ТО фонона путем Лиден-Сакс-Телерове релације [130] $\omega_{LO} = \omega_{TO}[\varepsilon_s/\varepsilon_\infty]^{1/2}$, у случају једног мода [44].

3. Графен

У природи постоје две алотропске модификације угљеника, елемента периодног система који чини основу живота на Земљи, и то су дијамант и графит. Они се састоје од мрежа sp^3 и sp^2 хибридованих атома угљеника, респективно. Концептуално постоји много других начина формирања алотропских модификација периодичним мешањем мрежа sp^3 , sp^2 и sp хибридизација, али дијамант и графит су дуго времена представљали једине познате модификације. Међутим, открићем фулерена 1985. године ситуација се променила и почела је ера синтетичких полиморфа угљеника: синтеза угљеничних наноцеви 1991. године и изоловање слоја графена 2004. године [131, 132]. Наведене алотропске модификације су приказане на слици 3.1.



Слика 3.1. Алотропске модификације угљеника [132].

Јединствена својства графена, као што су висока покретљивост носилаца наелектрисања која би у теорији могла да достигне $200\,000\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ и велика сатурациона брзина кретања електрона од око $5,5 \cdot 10^7\text{ cm/s}$, чине га одличним кандидатом за будуће примене у електроници. Чак и на собној температури носиоци наелектрисања могу да се крећу кроз графен балистички, 2000 пута брже него у силицијуму, прелазећи микрометарске раздаљине без расејања на атомима угљеника или на структурним дефектима. Један од разлога зашто је средњи слободни пут електрона у графену толико велики јесте зато што је веома тешко другим атомима да замене угљеник у његовој кристалној решетки због специфичности сигма везе. Свакако, електронска својства графена су контролисана унутрашњим и спољашњим ефектима карактеристичним за сваки појединачни систем, као што су површински процепи, тополошки дефекти; адсорбовани атоми, ваканције, наелектрисања на графену или у супстрату, велики

дефекти као што су пукотине и ивице [98]. Посебно је интересантна чињеница да покретљивост електрона остаје висока и када њихова концентрација достигне ниво који би код класичних полупроводника значио пад покретљивости носилаца због присуства великог броја атома допаната на којима се они током дрефта расејавају. Такође, графен проводи и топлоту, која се преноси хоризонтално кроз слој, што омогућава ефикасну топлотну дисипацију током рада компактних електронских компоненти, а уз то, механички је најиздржљивији познати дводимензионални материјал [132, 133].

Графен је амбиполаран, што значи да проводи струју без обзира на поларност спољашњег примењеног напона. Иако је то на први поглед непожељна појава, амбиполарност се може искористити у графенским транзисторима са ефектом поља који би служили као умножавачи фреквенције. Својство графена да проводи коначну струју и на нултом напону гејта онемогућава његову примену у логичким колима. Међутим, израдом графена у виду трака дебљине до 10 nm или погодним допирањем могуће је модификовати његову зонску структуру тако да се у њој појави одговарајући енергетски процеп [132, 134]. Атоми бора и азота су одлични кандидати за допирање графена због својих димензија које су у рангу са атомом угљеника, као и због својих акцепторских и донорских карактеристика. Графен је могуће допирати и хемијском модификацијом, нпр. помоћу NO_2 или NH_3 , али и одређени органски молекули могу бити добри кандидати за ту сврху. Уколико се графен нађе на специфичној подлози, може доћи до спонтаног допирања графена носиоцима наелектрисања из подлоге. Тако графен на подлози од SiC [135] или Pt [136] постаје *n*-допиран, односно *p*-допиран. Промена концентрације носилаца наелектрисања променом јачине електричног поља подешавањем напона на гејту може да промени Фермијев ниво у графену, али не може да отвори енергетски процеп [137].

Графенски транзистори са ефектом поља могу да се користе и као биосензори. Наиме, процесом адсорпције биомолекул се веже за површину графена електростатичким интеракцијама узрокујући промену у проводности која лако може да се детектује [30–32]. Графен може да се примени и у биомедицини захваљујући својој биокompatбилности [26–29].

Повећањем броја слојева графена, његове карактеристике се континуално мењају све док не постану нераздвојне од својства графита. Графит се састоји из слојева графена, на међусобном растојању од око 0,335 nm, повезаним slabим Ван дер Валсовим силама [138, 139]. У пракси се графеном сматрају структуре које имају до десет монослојева угљеника, док оне са више од десет слојева већ представљају графит. Слојеви графена у графиту су поређани тако да се атом угљеника из једног слоја налази изнад празног места у центру шестоугла који формирају атоми угљеника из суседног слоја, тј. поређани су у тзв. Берналовом паковању [140]. Одступања од овог паковања се постижу мењањем растојања између слојева, растезањем графена, translацијом или угаоном ротацијом [141]. Врло занимљива својства се добијају када се два слоја графена заротирају један у односу на други под одређеним дискретним вредностима „магичног” угла, чија вредност иде до $1,1^\circ$. Таква структура је први пут експериментално реализована 2018. године [142]. Добијени двослојни графен може да се понаша и као изолатор и као суперпроводник, у зависности од вредности споменутог угла [143].

У овој дисертацији под појмом графен подразумева се један раван слој графена, без структурних несавршености, атома допаната или било којих других нечистоћа.

3.1. Структура и електронска својства графена

Графен је дводимензионални материјал који се састоји из угљеникових атома распоређених у правилну хексагоналну структуру. Та структура у облику пчелињег саћа није Бравеова кристална решетка и може се поделити на две троугаоне подрешетке, означене плавим и зеленим атомима на слици 3.2 (лево). Вигнер-Зајцова ћелија графена, приказана розе бојом, може се дефинисати векторима:

$$\vec{a}_1 = \frac{a_0}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a_0}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad (3.1.1)$$

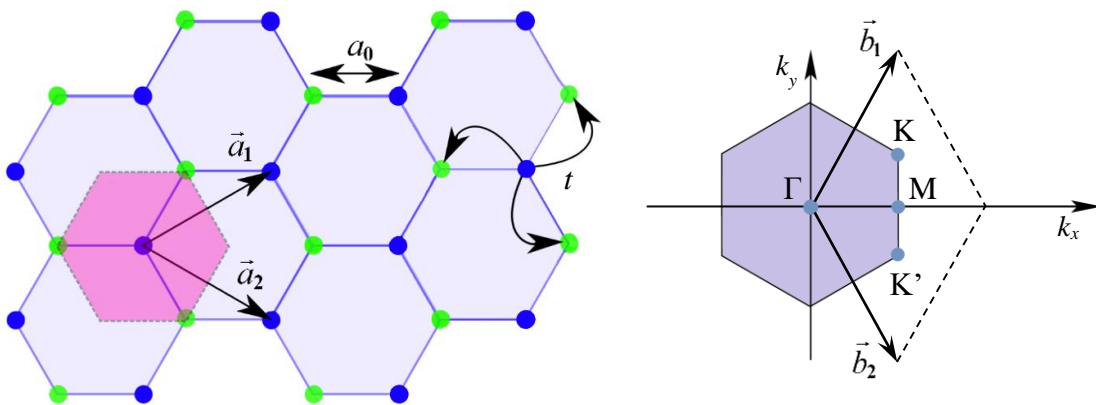
где је $a_0 = 0,142 \text{ nm}$ приближно растојање између суседних атома угљеника у равни графена. Енергија потребна електрону да „прескочи” са једног атома на најближи суседни атом, тј. са једне подрешетке на другу, јесте $t \approx 2,7 \text{ eV}$. Енергија t' је енергија потребна електрону да пређе са једног атома на суседни у оквиру исте подрешетке. Она није тачно позната, али се претпоставља да је у опсегу $0,02t \leq t' \leq 0,2t$. На слици 3.2 (десно) је приказана прва Брилуенова зона графена. У њој постоје три врсте тачака високе симетрије: Γ , K и M . Постоје два нееквивалентна скупа K тачака, K и K' , које се налазе на ћошковима Брилуенове зоне и називају се Дираковим тачкама, и три нееквивалентне M тачке које су на средини страница зоне. Тачка Γ је у центру зоне. Вектори реципрочне решетке су:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a_0}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a_0}(1, -\sqrt{3}), \quad (3.1.2)$$

док су позиције Диракових тачака означене векторима [98, 144]:

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a_0}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a_0}\left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right). \quad (3.1.3)$$

Два скупа Диракових тачака значе да графен има дегенерацију удолине од $g_v = 2$. Тачке K и K' су главне тачке од интереса када се проучавају електронска својства графена, за разлику од традиционалних полупроводника код којих је то обично Γ тачка [145].



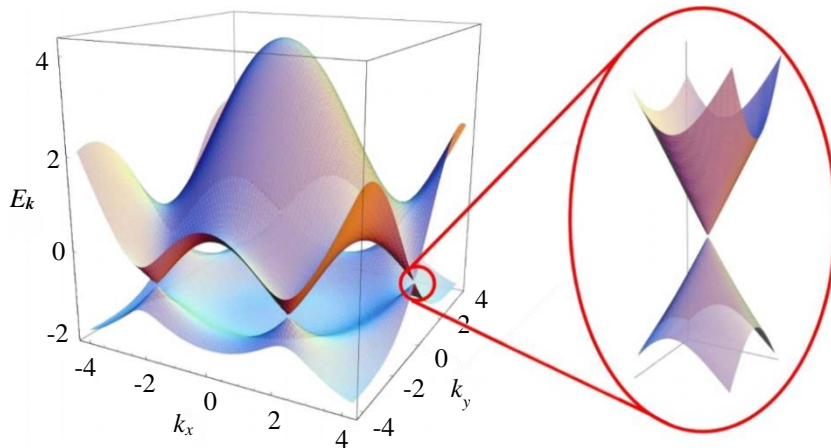
Слика 3.2. (Лево) Реална кристална решетка графена са Вигнер-Зајцовом ћелијом представљеном розе бојом. Растојање између два атома је a_0 , \vec{a}_1 и \vec{a}_2 су примитивни вектори, а параметар прескока је t [44]. (Десно) Прва Брилуенова зона графена. Примитивни вектори реципрочне решетке су \vec{b}_1 и \vec{b}_2 [98].

Електронска конфигурација угљеника је $1s^2 2s^2 2p^2$ и он има четири валентна електрона. У графену сваки угљеников атом формира σ везе са своја три суседа преко sp^2 хибридизованих орбитала насталих комбиновањем $2s$, $2p_x$ и $2p_y$ атомских орбитала. Преостали електрон

заузима $2p_z$ орбиталу која је нормална на раван графена. Ти електрони који би градили π везе се колективизују и образују проводну (π^*) и валентну (π) енергетску зону [44]. Енергетска дисперзиона зависност графена је приказана на слици 3.3. Валентна и проводна зона се додирују на шест места, у Дираковим тачкама у Брилуеновој зони, што значи да је енергетски процеп графена једнак нули. Са увећаног приказа на слици 3.3 примећује се да је дисперзиона зависност у околини К тачака линеарна. Ова апроксимација важи за енергије електрона до око 1 eV и назива се апроксимацијом Дираковог конуса. Регион линеарне дисперзије се добро описује Дираковом једначином за безмасене фермионе, што значи да је ефективна маса носилаца наелектрисања у овом региону једнака нули. Дакле, носиоци наелектрисања у графену се понашају као релативистичке честице са нултом масом мировања, код којих Фермијева брзина v_F има улогу брзине светлости [146, 147]. Фермијева брзина је $v_F = 3ta_0/(2\hbar)$, где је $\hbar = h/(2\pi)$ редукована Планкова константа. Та брзина има вредност око 10^6 m/s. Веза између енергије и таласног вектора у апроксимацији Дираковог конуса јесте:

$$E_{\pm}(\vec{k}) \approx \pm \hbar v_F |\vec{k} - \vec{K}|, \quad (3.1.4)$$

где је $\vec{k} = \vec{k}_x + \vec{k}_y$. С обзиром да је $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ каже се да су енергија и импулс линеарно сразмерни у околини К тачке. Интересантно је што се овај резултат разликује од случаја класичних полупроводника код којих је ова дисперзија квадратног облика. Уз то, Фермијева брзина не зависи од енергије или импулса, као што је уобичајено $v = \sqrt{2E/m_e}$, где је m_e маса електрона. Такође, графен испољава и својство минималне проводности зато што се понаша као електронски систем честица описан Дираковом, а не Шредингеровом једначином. Овакво понашање носилаца наелектрисања представља једно од најзанимљивијих аспеката графена и одговорно је за многе његове импресивне електронске карактеристике [98, 145, 146].



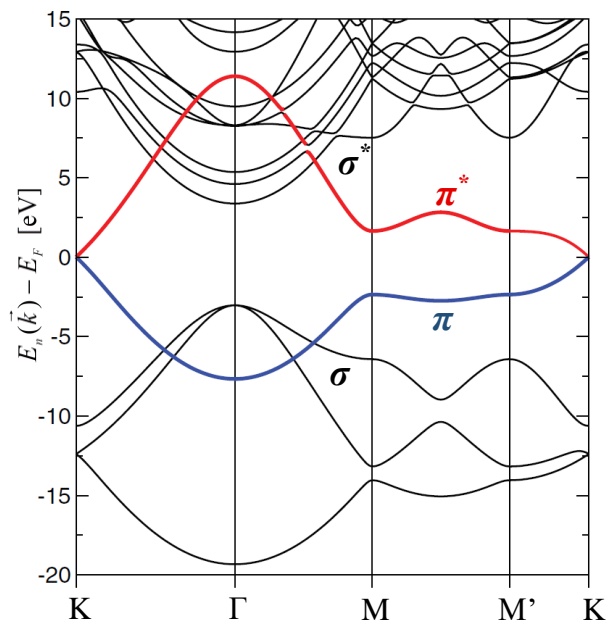
Слика 3.3. Дисперзиона зависност графена (E_k је у јединицама t , а k_x и k_y су у јединицама $10/a_0$) добијена за вредности $t = 2,7$ eV и $t' = 0,2t$. Увећан је приказ енергетске зоне у околини К тачке [98].

Фермијева енергија сопственог графена је на Дираковој енергији, што је енергија Диракове тачке. Међутим, у графенским уређајима Фермијева енергија може значајно да се разликује од Диракове енергије. Фермијев ниво је могуће подешавати променом напона гејта. При позитивном напону Фермијев ниво је у π^* зони и носиоци наелектрисања су електрони из проводне зоне, док је при негативном напону гејта Фермијев ниво у π зони, те су већински носиоци наелектрисања шупљине из валентне зоне [148]. Енергија Фермијевог нивоа се израчунава по формули:

$$E_F = \hbar k_F v_F, \quad (3.1.5)$$

где је Фермијев таласни број једнак $k_F = \sqrt{\pi n}$, а n је површинска бројна густина наелектрисања [98].

Када графен није допиран, у њему нема слободних носилаца наелектрисања, те су могући само међузонски прелази електрона. Променом концентрације носилаца наелектрисања долази до промене Фермијевог нивоа из Диракове тачке у проводну или валентну зону, чиме и унутарзонски прелази постају могући. Графен код којег Фермијев ниво није на Дираковој енергији у овој дисертацији означаваће се термином допиран графен, иако у њему нема атома допаната. На слици 3.4 је приказана зонска структура графена на којој је могуће уочити међузонске $\pi \rightarrow \pi^*$ и $\sigma \rightarrow \sigma^*$ прелазе. Зонска структура је добијена дуж линија високе симетрије КГ, ГМ, ММ' и М'К [149].



Слика 3.4. Зонска структура графена. Плава линија показује попуњену валентну зону, а црвена празну проводну зону [149].

Још пре изоловања графена предвиђало се да ће у њему постојати универзална минимална вредност балистичке проводности која износи $\sigma_{min} = (4/\pi) e^2/h$. Међутим, у првим експериментима је добијена вредност од $\sigma_{min} = 4e^2/h$. Оно што је касније показано јесте да минимална проводност уочена у експериментима није универзална, већ зависи од концентрације наелектрисаних нечистоћа [150]. Са теоријске тачке гледишта, минимална проводност графена је вредност добијена када $\omega \rightarrow 0$. Користећи Кубову формулу (*Ryogo Kubo*, 1920-1995) могуће је показати да се, уколико се тај лимес узме пре интеграције по енергијама, добија вредност минималне проводности од $\sigma_{min} = (4/\pi) e^2/h$, док је у супротном случају $\sigma_{min} = (\pi/2) e^2/h = e^2/(4\hbar) \equiv \sigma_0$ [151]. Број 4 из претходних израза означава производ дегенерација спина ($g_s = 2$) и удолине ($g_v = 2$).

Оптичка проводност (када је $q \approx 0$) графена садржи све релевантне информације које се тичу електромагнетне интеракције између графена и спољашњих стимулуса, као што су брзи електрони или електромагнетно зрачење. Она се може поделити на два доприноса: један који описује унутарзонске (*intraband*) прелазе и други који описује међузонске (*interband*):

$$\sigma_g(\omega) = \sigma_{intra}(\omega) + \sigma_{inter}(\omega). \quad (3.1.6)$$

На слици 3.5 (лево) су приказани ти прелазни у допираним графену, док су на 3.5 (десно) они дати у оквиру региона реципрочног простора. Претходни израз не узима у обзир просторну дисперзију, тј. не-локалне ефекте. У оквиру теорије линеарног одзива, користећи Кубову формулу, могуће је доћи до аналитичког израза за динамичку проводност графена:

$$\sigma_{intra}(\omega) = \frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4}{\hbar\gamma - i\hbar\omega} \left[E_F + 2k_B T \ln \left(1 + e^{-\frac{E_F}{k_B T}} \right) \right], \quad (3.1.7)$$

$$\sigma_{inter}(\omega) = \sigma_0 G(\hbar\omega/2) + i \frac{4\hbar\omega\sigma_0}{\pi} \int_0^\infty \frac{G(E) - G(\hbar\omega/2)}{(\hbar\omega)^2 - 4E^2} dE, \quad (3.1.8)$$

где је:

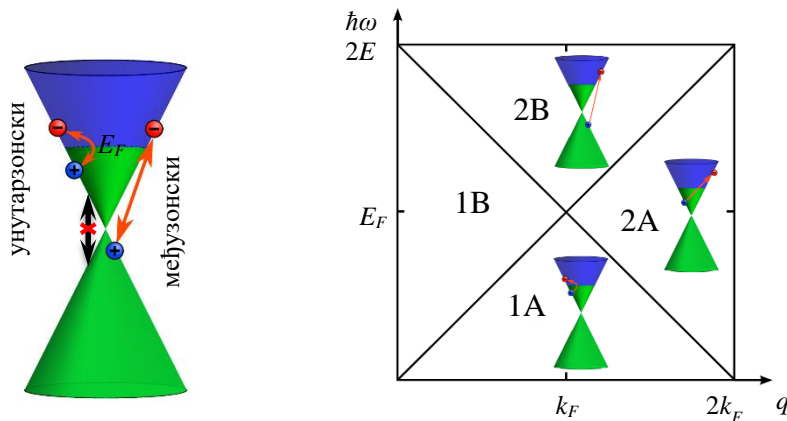
$$G(x) = \frac{\sinh\left(\frac{x}{k_B T}\right)}{\cosh\left(\frac{E_F}{k_B T}\right) + \cosh\left(\frac{x}{k_B T}\right)}, \quad (3.1.9)$$

при чему је $k_B \approx 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2 \text{kg}/(\text{s}^2 \text{K})$ Болцманова константа. Уколико важи да је $E_F \gg k_B T$ (као што је на температури апсолутне нуле), изрази за унутарзонску и међузонску проводност графена могу да се напишу као:

$$\sigma_{intra}(\omega) = \frac{\sigma_0}{\pi} \frac{4E_F}{\hbar\gamma - i\hbar\omega}, \quad (3.1.10)$$

$$\sigma_{inter}(\omega) = \sigma_0 \cdot \left\{ \begin{array}{ll} 1 + \frac{i}{\pi} \ln \left| \frac{\hbar\omega - 2E_F}{\hbar\omega + 2E_F} \right|, & \text{за } \hbar\omega \geq 2E_F, \\ \frac{i}{\pi} \ln \left| \frac{\hbar\omega - 2E_F}{\hbar\omega + 2E_F} \right|, & \text{за } \hbar\omega < 2E_F. \end{array} \right\} \quad (3.1.11)$$

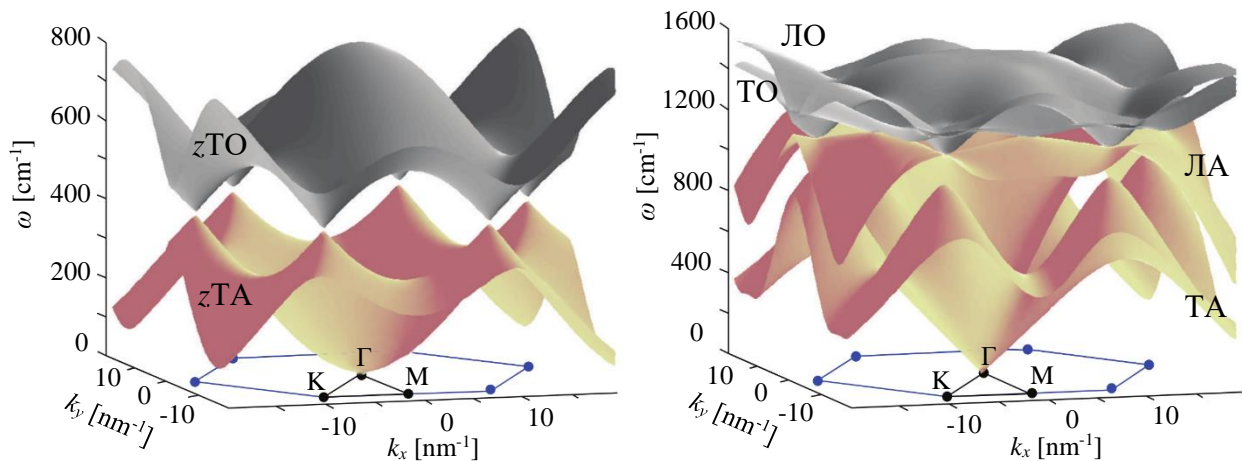
За $\hbar\omega < 2E_F$ важи Паулијев принцип искључења, па израз за међузонске прелазе има веома мали допринос укупној оптичкој проводности [44].



Слика 3.5. (Лево) Шематски приказ унутарзонских и међузонских прелазу у допираним графену. (Десно) Региони у $(q, \hbar\omega)$ простору: у 1A и 2A су унутарзонски, док су у 2B међузонски прелазу [44].

3.2. Фонони у графену

Вибрационе карактеристике графена су одговорне за његову термалну проводност, али су и кључне за разумевање оптичких својства путем фонон-фотон расејања и електронских својства која зависе од електрон-фонон расејања. Мекоћа графена је повезана са чињеницом да у њему постоје вибрациони модови ван равни, којих нема у тродимензионалним чврстим телима. На померај атома из своје равнотежне позиције утичу торзионе и лонгитудиналне силе које зависе само од релативног положаја атома. У графену, чија елементарна ћелија садржи два атома угљеника, постоји шест фононских модова: два припадају вибрацијама атома ван равни графена, тј. у правцу z – осе, и то су трансверзални акустични (zTA) и трансверзални оптички (zTO) мод; четири потичу од вибрација у равни графена и то су трансверзални акустични (TA), трансверзални оптички (TO), лонгитудинални акустични (LA) и лонгитудинални оптички (LO) мод. Трансверзални и лонгитудинални правци вибрација су одређени у односу на правац најмањег растојања угљеникових атома у графену [152]. Сматра се да вибрације атома ван равни графена не зависе од вибрација у равни, тако да је могуће добити две различите фононске дисперзије, које су и приказане на слици 3.6.



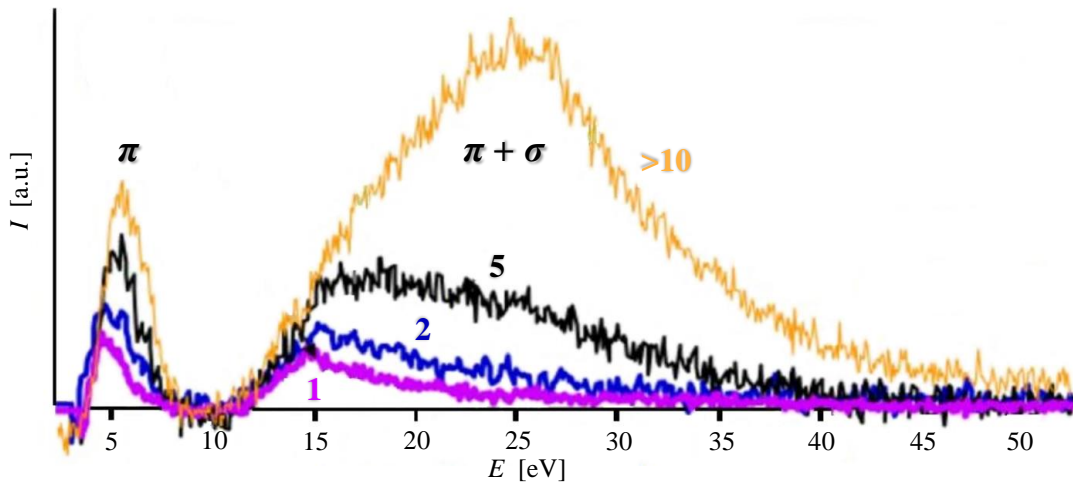
Слика 3.6. Фононска дисперзиона зависност zTO и zTA мода (лево) и LO , TO , LA и TA модова (десно) [145].

Модови zTA и zTO имају параболичну дисперзију у околини Γ тачке, што је необично за акустичне модове, а у околини K тачака показују структуру налик Дираковом конусу. Модови у равни имају очекивану линеарну дисперзију у Γ тачки. И за оптички и за акустични мод вибрација у равни трансверзални и лонгитудинални модови имају међусобно сличне дисперзије, с тим што је трансверзални мод на нижој фреквенцији. Важна последица овакве фононске дисперзионе релације јесте изузетно велика вредност брзине звука у равни графена, близу 20 km/s , која је одговорна за врло високу термалну проводност графена [145, 153].

Лонгитудинални акустични фонони имају већи електрон-фонон микроскопски пресек него остале фононске гране [145]. Упркос томе, оптички фонони имају доминантан утицај на оптичку проводност графена. Најутичајнији доприноси електрон-оптички фонон интеракцији потичу од LO и TO фонона у Γ тачки, који у њеној околину могу да се апроксимирају константном вредношћу од око 197 meV , и од TO фонона у K тачкама, који ту имају вредност од око 157 meV . Међутим, када се посматра оптичка проводност графена са и без доприноса фонона, добија се јако мала разлика, која може бити и занемарена ако је графен на поларном супстрату, чији површински фонони имају много већи учинак [154]. Због тога није неопходно узети у обзир утицај фонона из графена, како је и урађено у овој дисертацији.

3.3. Плазмони у графену

Графен и графит имају две врсте спољашњих електрона, σ и π електроне, који подржавају своје типове плазмона. Плазмони у графиту потичу од колективних експитација π валентних електрона (π плазмон на енергији 7-12 eV) и свих валентних електрона ($\pi + \sigma$ плазмон на енергији 28-33 eV). Обе врсте плазмона у графиту испољавају волуминозни и површински мод. Међутим, карактеристика танких филмова јесте нестајање волуминозног плазмонског мода, тако да остане само мод површинског плазмона. За пренос импулса који је паралелан површини графита дозвољени су само међузонски прелази који имају исту парност, тј. $\pi \rightarrow \pi^*$ и $\sigma \rightarrow \sigma^*$ прелази. Доприноси ван равни и у равни површинског мода деле енергију када производ дебљине слоја и импулса тежи нули, што значи да у графиту $\pi \rightarrow \pi^*$ прелази имају минималну, односно максималну енергију од око 5 и 7 eV, а $\sigma \rightarrow \sigma^*$ прелази енергију од око 15 и 20 eV, респективно. Плазмон π углавном потиче од $\pi \rightarrow \pi^*$ прелаза у околини М тачке Брилуенове зоне. На слици 3.7 је приказан плазмонски спектар једнослојног графена, двослојног, графена са пет и са више од десет слојева. Спектар за више од десет слојева графена веома подсећа на спектар графита: уочавају се добро познати волуминозни модови на 7 и 26 eV. Како се број слојева смањује, тако се максимуми π и $\pi + \sigma$ плазмона померају ка нижим енергијама због смањења макроскопског екранирања. За једнослојни графен максимум π мода је на 4,7 eV, док је код графита био на 7 eV. Осим тога, плазмонски спектар једнослојног графена има само $\pi + \sigma$ површински мод на 14,6 eV, а плазмон од 26 eV, који се јавља код графита, овде није присутан [86, 87].

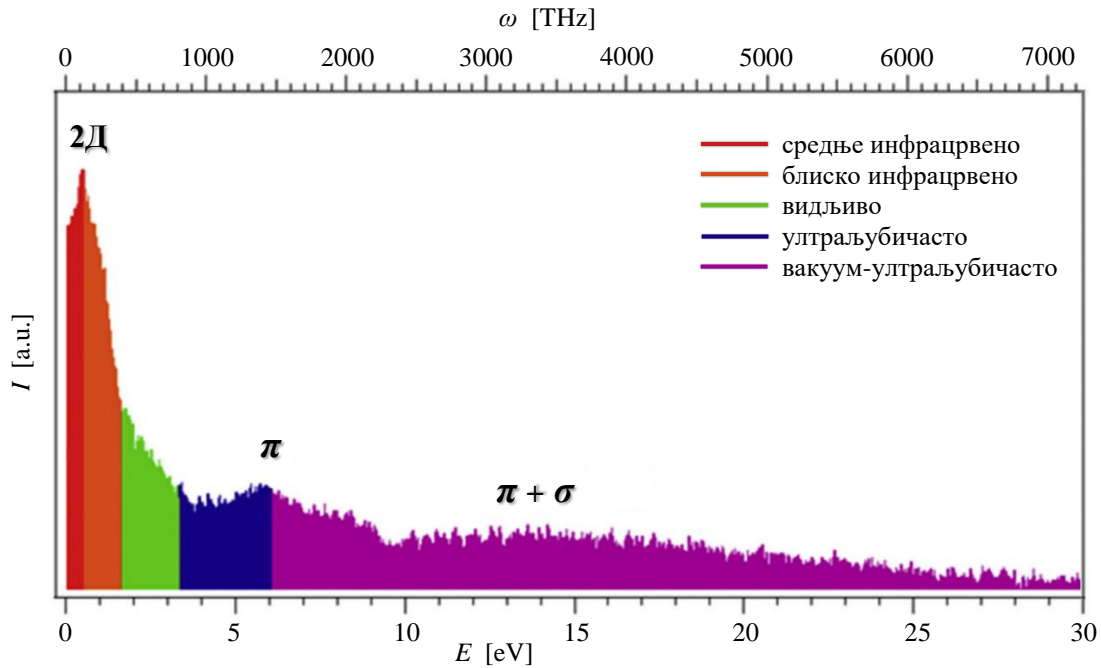


Слика 3.7. Спектар енергетских губитака електрона за један, два, пет и више од десет слојева слободног графена који показује присуство π и $\pi + \sigma$ плазмона [86].

Природа $\pi \rightarrow \pi^*$ и $\sigma \rightarrow \sigma^*$ прелаза зависи од таласног вектора $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$. За вредности таласног вектора близу нуле то су неекранирани једночестични прелази, док са порастом вредности таласног вектора добијају колективни карактер јер механизам динамичког екранирања постаје ефикаснији. У том региону постоје π и $\pi + \sigma$ плазмони, али су они пригушени због Ландауовог ефекта и појављују се као широке структуре у спектру. За још веће вредности таласног вектора колективна природа ових прелаза је потиснута и они поново постају једночестичне експитације [155].

Претходно наведени плазмони у графену (π плазмон на 4,7 eV и $\pi + \sigma$ плазмон на 14,6 eV) су објашњени помоћу спектра енергетских губитака електрона за недопирани графен. Како они потичу од међузонских прелаза електрона, јављају се и у допираном и у недопираном

графену. Међутим, у допираном графену, на енергији испод 3 eV, јавља се још један плазмон који потиче од унутарзонских прелаза, а назива се Дираков или 2Д плазмон. Присуство Дираковог плазмона је главна разлика између колективних ексцитација у допираном и недопираном графену: у допираном графену π^* зона је делимично попуњена тако да су дозвољени унутарзонски прелази који нису дозвољени у недопираном графену [156]. На слици 3.8 је приказан плазмонски спектар допираног графена на коме се виде три главне врсте плазмона које могу да се јаве у графену. Дираков плазмон је доминантан у инфрацрвеној области, док се π и $\pi + \sigma$ плазмони јављају у области ултраљубичастог зрачења [22].



Слика 3.8. Спектар енергетских губитака електрона за допирани графен на подлози од рутенијума који показује присуство 2Д, π и $\pi + \sigma$ плазмона [22].

Дугоживећи плазмони могу да постоје само у региону $1B$ са слике 3.5 (десно), где је имагинарни део 2Д поларизационе функције једнак нули. Ван те области је $\text{Im}[P(\vec{q}, \omega)] \neq 0$ (што се види на слици 3.9 (десно)) и плазмони се брзо распадају на побуђене парове електрон-шупљина, тако да зоне $1A$, $2A$ (унутарзонски $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$ прелази) и $2B$ (међузонски $\pi \leftrightarrow \pi^*$ прелази) представљају регионе Ландауовог пригушења. Стриктно говорећи, Ландауово пригушење је реверзибилан процес који се дешава када је фазна брзина електромагнетног таласа приближно једнака брзини слободног електрона. Електрони који се крећу нешто спорије од таласа се убрзавају и тиме уклањају енергију из таласа. Да би се то десило мора да буде испуњен услов $v_{\text{phase}} = \hbar\omega/q \leq v_F$. Стога, региони $1A$ и $2A$, тј. региони десно од линије $\hbar\omega = \hbar q v_F$ представљају област у којој Ландауово пригушење може да се деси. Алтернативно, плазмони могу да изгубе енергију стварајући електрон-шупљина парове. Минимална енергија пара електрон-шупљина у допираном графену је $E_{\text{e-ш}} = 2E_F - \hbar q \omega$, где је q укупан импулс пара (регион $2B$). Сходно томе, када је $\hbar\omega > 2E_F - \hbar q v_F$ и $q < k_F$ могуће је да се испуни закон одржања енергије и импулса за стварање парова електрон-шупљина на рачун енергије плазмона. Овај процес је мало другачији од Ландауовог пригушења, тј. то је само резонантна апсорпција плазмона стварањем парова електрон-шупљина. Међутим, Ландауово пригушење је стандардан термин у литератури о плазмонима у графену, за све типове унутрашњих процеса пригушења плазмона (процеси који углавном зависе од електронских својства материјала) [44].

Популаран начин да се прикаже дисперзија плазмона јесте помоћу функције губитака која се добија преко диелектричне функције система као:

$$L(q, \omega) \propto \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right], \quad (3.3.1)$$

док се диелектрична функција система у апроксимацији случајних фаза може написати као $\varepsilon^{RPA}(\vec{q}, \omega) = \varepsilon_r - v_q P(\vec{q}, \omega)$, где је $v_q = e^2 / (2\varepsilon_0 q)$ Фуријеова трансформација Кулонове интеракције. Колективне ексцитације одговарају нулама динамичке диелектричне функције, тј. одговарају решењима једначине $\varepsilon^{RPA}(\vec{q}, \omega) = 0$. Поларизациона функција се може раздвојити на реални и имагинарни део, $P(\vec{q}, \omega) = P_{re}(\vec{q}, \omega) + iP_{im}(\vec{q}, \omega)$, који се даље могу дефинисати по регионима са слике 3.5 као:

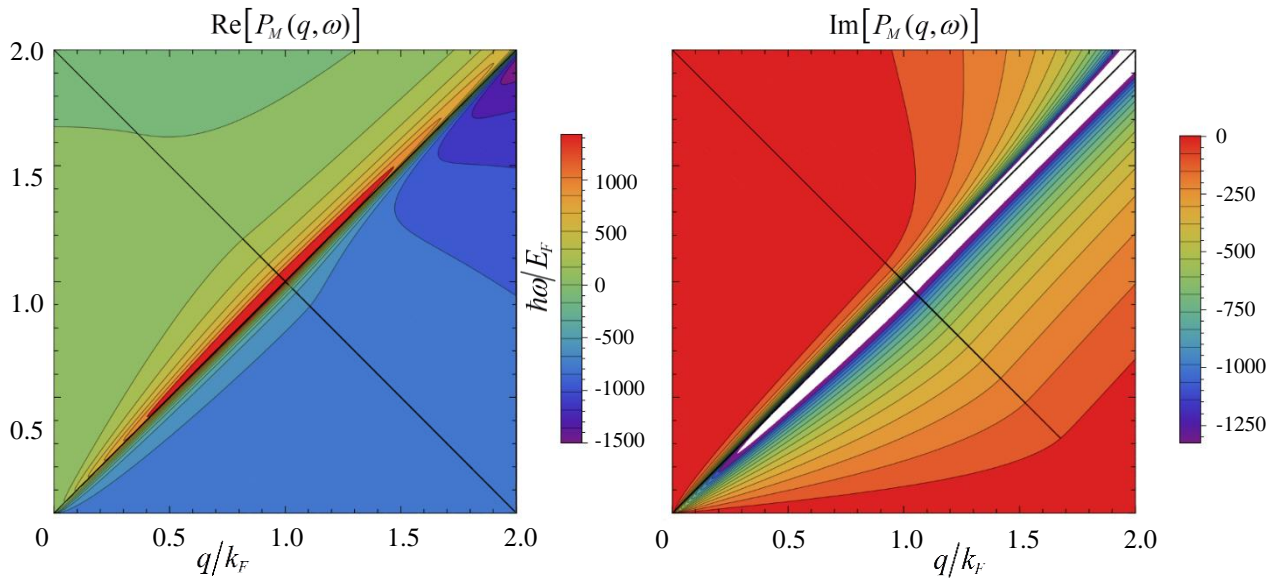
$$P_{re}(x, y) = \left\{ \begin{array}{ll} -\frac{2k_F}{\pi\hbar v_F} + \frac{k_F}{4\pi\hbar v_F} \frac{x^2}{\sqrt{y^2 - x^2}} \left[C_h\left(\frac{2+y}{x}\right) - C_h\left(\frac{2-y}{x}\right) \right], & \text{у региону } 1B, \\ -\frac{2k_F}{\pi\hbar v_F}, & \text{у региону } 1A, \\ -\frac{2k_F}{\pi\hbar v_F} + \frac{k_F}{4\pi\hbar v_F} \frac{x^2}{\sqrt{y^2 - x^2}} C_h\left(\frac{2+y}{x}\right), & \text{у региону } 2B, \\ -\frac{2k_F}{\pi\hbar v_F} + \frac{k_F}{4\pi\hbar v_F} \frac{x^2}{\sqrt{x^2 - y^2}} C\left(\frac{2-y}{x}\right), & \text{у региону } 2A, \end{array} \right\} \quad (3.3.2)$$

$$P_{im}(x, y) = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \text{у региону } 1B, \\ \frac{k_F}{4\pi\hbar v_F} \frac{x^2}{\sqrt{x^2 - y^2}} \left[C_h\left(\frac{2-y}{x}\right) - C_h\left(\frac{2+y}{x}\right) \right], & \text{у региону } 1A, \\ \frac{k_F}{4\pi\hbar v_F} \frac{x^2}{\sqrt{y^2 - x^2}} C\left(\frac{2-y}{x}\right), & \text{у региону } 2B, \\ -\frac{k_F}{4\pi\hbar v_F} \frac{x^2}{\sqrt{x^2 - y^2}} C_h\left(\frac{2+y}{x}\right), & \text{у региону } 2A, \end{array} \right\} \quad (3.3.3)$$

где су $x = q/k_F$, $y = \hbar\omega/E_F$, а помоћне функције су $C_h(a) = a(a^2 - 1)^{-1/2} - \text{arccosh}(a)$ и $C(a) = a(1 - a^2)^{-1/2} - \text{arccos}(a)$. Увођењем параметра расејања γ , тј. „Мерминизацијом” поларизационе функције, може се доћи до следећег израза:

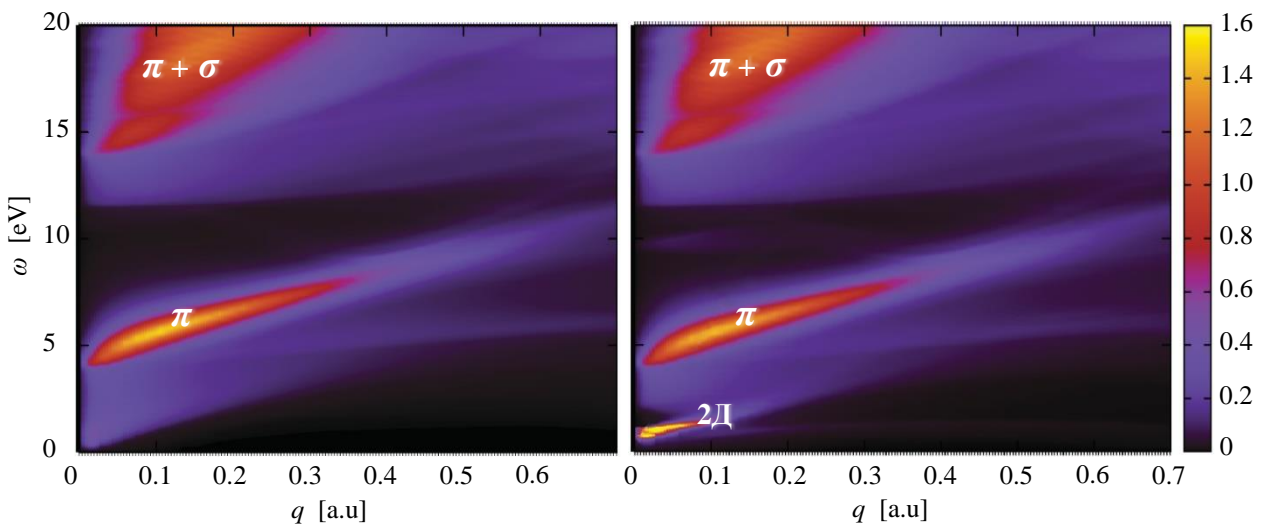
$$P_M(q, \omega) = \frac{\left(1 + \frac{i\gamma}{\omega}\right) P(q, \omega + i\gamma)}{1 + \frac{i\gamma}{\omega} \frac{P(q, \omega + i\gamma)}{P(q, 0)}}. \quad (3.3.4)$$

Такође, важи да је $\varepsilon^{RPA-RT}(q, \omega) = \varepsilon_r - v_q P_M(q, \omega)$ и $\sigma(q, \omega) = ie^2 \omega P_M(q, \omega) / q^2$. На слици 3.9 је приказана 2Д поларизациона функција у RT апроксимацији [44].



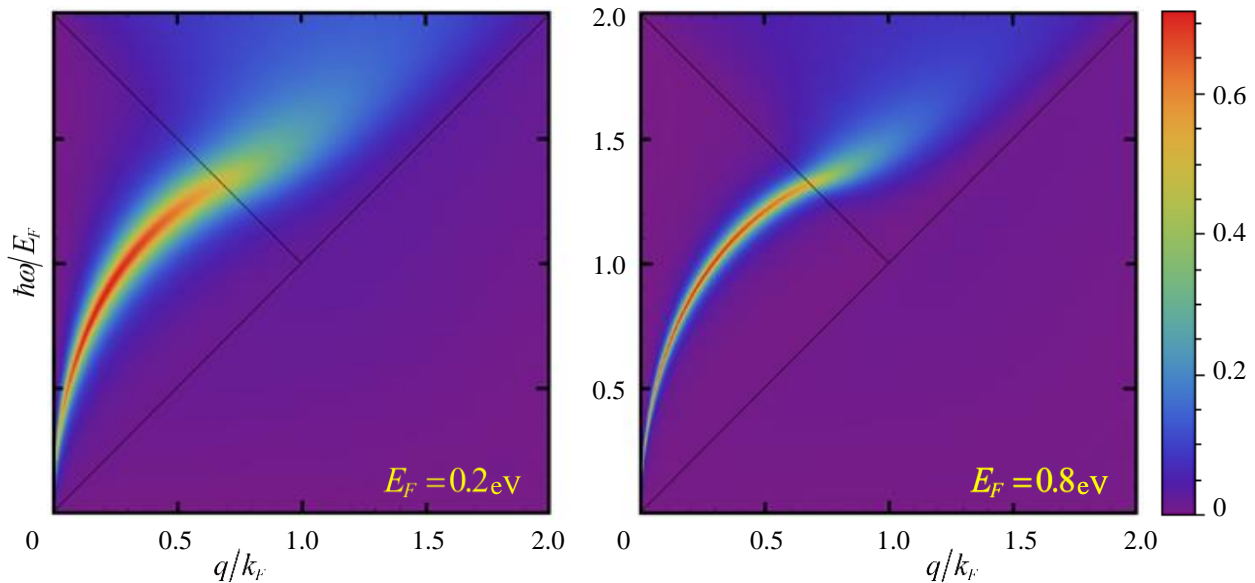
Слика 3.9. Реални (лево) и имагинарни (десно) део 2Д поларизационе функције графена у RT апроксимацији за $\hbar\gamma = 16,5 \text{ meV}$ [44].

На слици 3.10 је приказан спектар електронских ексцитација у недопираном (лево) и допираном (десно) графену (у систему у ком је $\hbar = 1$). На нижим фреквенцијама спектра недопираног графена види се тамни међузонски $\pi \rightarrow \pi^*$ електрон-шупљина континуум који се линеарно повећава. Изнад тог континуума, на ω нешто испод 5 eV и q близу нуле, тј. у Γ тачки, почиње да се види π плазмон са линеарном дисперзијом. На вишим фреквенцијама, око 14 eV , уочава се почетак веома широког $\pi + \sigma$ плазмона. Са слике 3.10 (десно) види се да допирање не утиче на високоенергетски део спектра, већ само на нискоенергетски део где се простире Дираков плазмон. Дираков плазмон може непригушено да пропагира у региону ограниченом горњом ивицом унутарзонског $\pi^* \rightarrow \pi^*$ електрон-шупљина континуума и доњом ивицом међузонског $\pi \rightarrow \pi^*$ континуума. Када дисперзиона крива Дираковог плазмона уђе у $\pi \rightarrow \pi^*$ континуум, плазмон се распада на једночестичне ексцитације због Ландауовог пригушења. У оптичкој граници, тј. када $q \rightarrow 0$, дисперзија Дираковог плазмона има облик \sqrt{q} [51, 87].



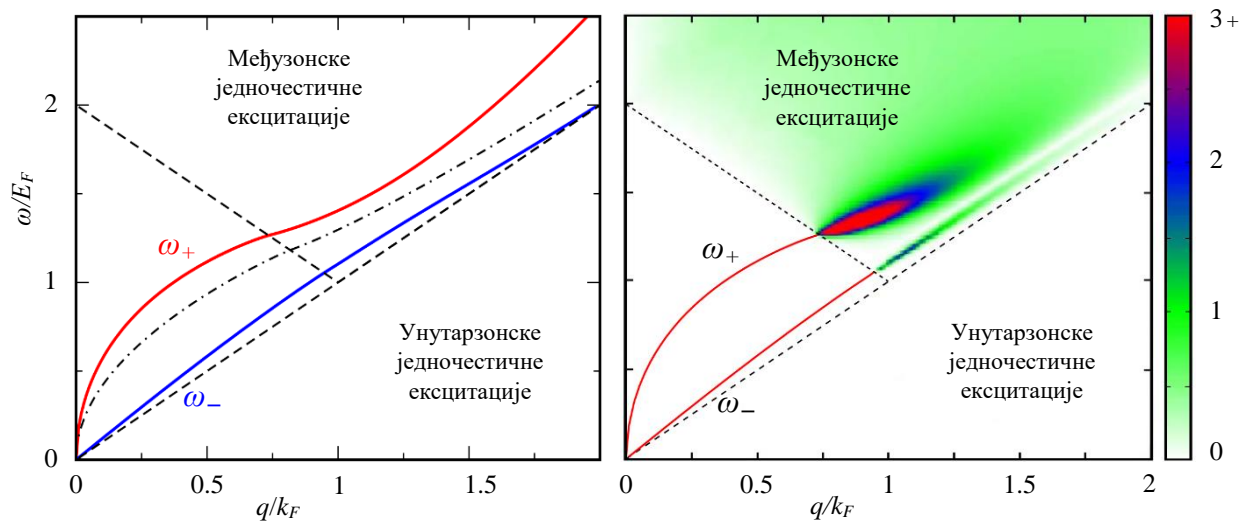
Слика 3.10. Спектар електронских ексцитација у чистом графену (лево) и у допираном графену, $E_F = 1 \text{ eV}$, (десно) [51].

Допирањем графена Фермијев ниво се удаљава од Диракове тачке чиме се ствара оптички процеп у којем постоји Дираков плазмон пошто је ту распад на електрон-шупљина парове забрањен (тзв. Мос-Бурштајнов ефекат). Максимум овог процепа је $2E_F$ за $q=0$ и зауставља се на Фермијевом вектору, тј. за $q=k_F$ за вертикалне прелазе. Дираков плазмон затим улази у област Ландауовог пригушења у којој се распршује. На слици 3.11 је приказана функција губитака допираног графена у области где доминира Дираков плазмон (лево је графен са Фермијевом енергијом од 0,2 eV, док је десно са 0,8 eV). Црним линијама су означене границе региона Ландауовог пригушења [44].



Слика 3.11. Функција губитака допираног графена, $E_F = 0,2 \text{ eV}$ (лево) и $E_F = 0,8 \text{ eV}$ (десно) за $\hbar\gamma = 16,5 \text{ meV}$. Црне линије означавају границе региона Ландауовог пригушења [44].

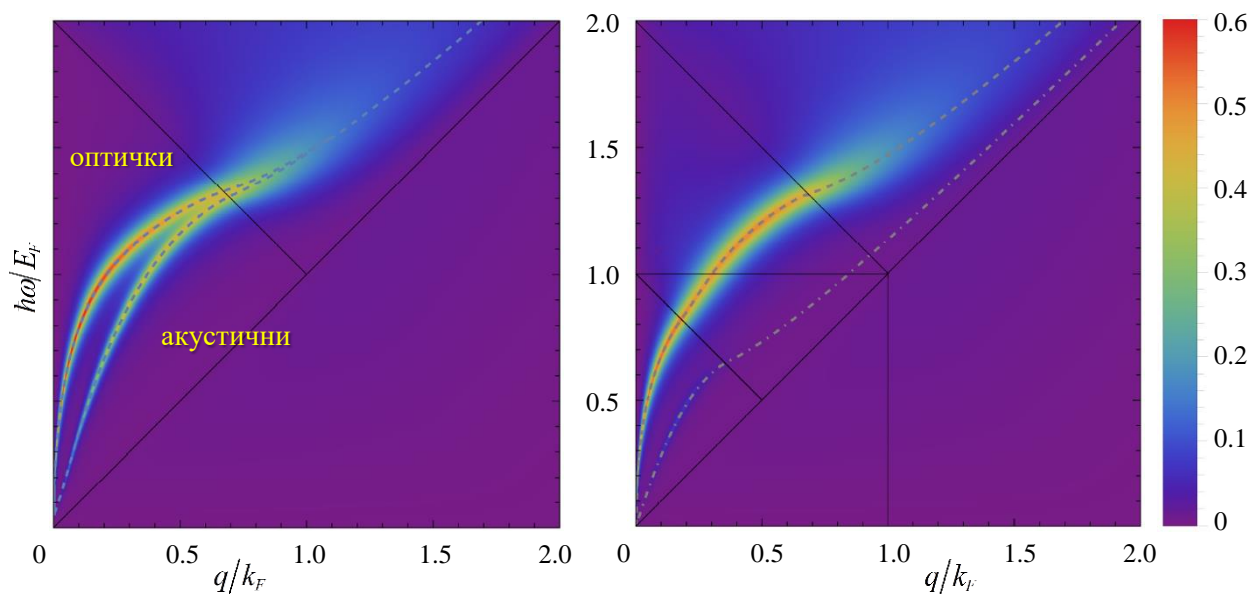
Два слоја графена се фундаментално разликују од двослојног графена зато што између њих нема међуслојног тунеловања, већ само међуслојне Кулонове интеракције. Када се два 2Д слоја нађу релативно близу један другом, њихови 2Д плазмони су упарени међуслојном Кулоновом интеракцијом која води до формирања две гране лонгитудиналних колективних ексцитација у спектру електронских ексцитација, тј. долази до појаве оптичког плазмона ($\omega_+ \sim \sqrt{q}$) и акустичног плазмона ($\omega_- \sim q$). Код оптичког плазмона флукуације густине наелектрисања осцилују у фази, а код акустичног ван фазе. На слици 3.12 је приказана дисперзиона зависност (лево) и функција губитака (десно) два слоја допираног графена (у систему у ком је $\hbar = 1$). Тачкаста испрекидана линија је дисперзиона зависност једнослојног графена и она се налази између црвене ω_+ и плаве ω_- линије. На слици је такође испрекиданим линијама означен и електрон-шупљина континуум, тј. регион једночестичних ексцитација који одређује Ландауово пригушење плазмона. Фреквенција акустичног мода ω_- се смањује у односу на мод код једнослојног графена и тежи ка горњој граници региона унутарзонских једночестичних ексцитација, тј. приближава се линији $\omega = v_F q$. Оптички мод ω_+ је померен ка вишим фреквенцијама. Плазмонски мод који уђе у регион Ландауовог пригушења се распада емитујући електрон-шупљина парове. Када би се растојање између два слоја графена повећавало фреквенција оптичког плазмона би се смањивала, а акустичног би се повећавала све док се два мода не додирну у региону колективних осцилација, тј. испод линије $\omega = 2E_F - v_F q$. За бесконачно растојање два мода више нису упарена и систем има дисперзију једнослојног графена [157].



Слика 3.12. (Лево) Дисперзионе релације два слоја графена густине допирања 10^{12} cm^{-2} на растојању од $0,2 \text{ nm}$. Црвена и плава линија означавају мод оптичког и акустичног плазмона, респективно. Тачкасто испрекидана линија представља дисперзиону релацију једнослојног графена исте густине допирања. (Десно) Функција губитака истог система. На обе слике испрекиданим линијама су оивичени региони једночестичних експитација [157].

Променом густине допирања графена, тј. када слојеви графена немају исту концентрацију слободних носилаца наелектрисања, региони једночестичних експитација се померају, али дисперзионе криве остају врло сличне претходно описаном случају. Оно што је интересантно јесте да чак и када један слој графена није допиран и у њему нема слободних носилаца, и даље се појављују два упарена плазмонска мода, тј. постоје две нуле у реалном делу диелектричне функције $\varepsilon(q, \omega)$. У том случају ω_+ мод је изнад региона унутарзонских једночестичних експитација, али ω_- мод је тачно на тој граници, тј. његова дисперзиона релација је $\omega(q) = v_F q$ [157]. На слици 3.13 су приказане функције губитака за два слоја графена са истим (лево) и различитим (десно) густинама допирања. Могу се идентификовати две јасно раздвојене плазмонске гране: једна са вишом фреквенцијом (оптичка) и једна са нижом (акустична) у односу на фреквенцију Дираковог плазмона код једнослојног графена. Уочава се да плазмони лепо прате дисперзионе релације система. Такође, примећује се да дисперзионе релације код различито допираних слојева графена не конвергирају ка истој вредности због различитих Фермијевих енергија [44].

Плазмони могу да интерагују са сопственим оптичким фононима из графена или са површинским фононима из поларног супстрата при чему настају плазмон-фонон колективне експитације [158]. Лонгитудинални плазмони (ЛП) се спрежу само са трансверзалним оптичким (ТО) фононима, док се трансверзални плазмони (ТП) спрежу само са лонгитудиналним оптичким (ЛО) фононима. Спрега ЛП-ТО је јача за већу концентрацију носилаца наелектрисања, што је супротно од ТП-ЛО везе која је поприлично слаба [159]. Тако се акустични површински плазмон спреже са z ТО и ТО фононима само у дуготаласној граници ($q_{\parallel} \sim 0$) где је фреквенција плазмона у енергетском опсегу споменутих оптичких фонона. Унутарзонски плазмон може да се спреже и са површинским оптичким фононима поларног супстрата [87].



Слика 3.13. Функција губитака два слоја графена у ваздуху са истом (лево), $E_F = 0,5$ eV, и различитом (десно), $E_{F1} = 0,4$ eV и $E_{F2} = 0,2$ eV, густином допирања. Оптички и акустични хибридни модови су добро дефинисани и прате дисперзионе релације (испрекидане линије) система. Пригушење је $\hbar\gamma = 16,5$ meV, а раздаљина између слојева графена је $0,5$ nm [44].

4. Алуминијум оксид

Алуминијум је трећи најраспрострањенији елемент у Земљиној кори, после кисеоника и силицијума, али га је тек 1808. године открио хемичар Хамфри Дејви (*Humphry Davy, 1778-1829*). Чист алуминијум се не јавља у природи, већ је хемијски везан за друге елементе и скоро увек у оксидованом стању. Кристална форма алуминијум оксида, минерал корунд, обично се јавља у форми великих кристала, а откривен је 1799. године.

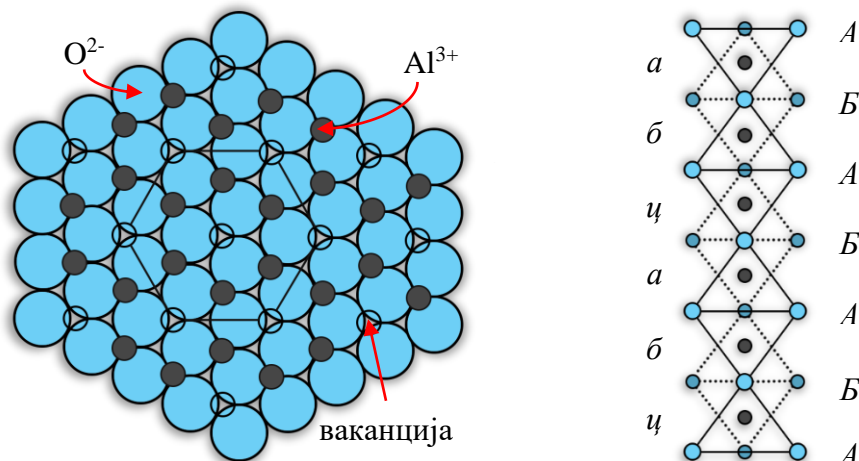
Алуминијум оксид је инертан материјал који налази примену у разним пољима. У индустрији драгог камења врло су популарне његове кристалне варијанте сафир и рубин. Због одличне биокompatбилности, у комбинацији са великом механичком чврстоћом и отпорношћу на хабање и корозију, Al_2O_3 керамика се користи у медицини за израду протеза за кукове и зубне имплантате. Војска је користи у телесним оклопима, као и за заштиту возила и авиона. У електричној и електронској индустрији користи се за изолацију високотемпературних пећи и производњу електричних изолатора, а Al_2O_3 танки филмови су битна компонента појединих микрочипова, нпр. силицијума на сафиру. Алуминијум оксид је такође и добра економска замена за индустријске дијаманте [99, 160].

4.1. Кристална структура Al_2O_3

Алуминијум(III)-оксид (Al_2O_3) је најчешћа форма оксида алуминијума. У Al_2O_3 структурама анјони кисеоника могу да формирају два типа кристалних решетки: површински центрирану кубичну и густо паковану хексагоналну. Расподела катјона у оквиру сваке групе даје различите полиморфе. Структуре засноване на површински центрираној кубичној расподели јона кисеоника укључују γ , η (кубичну), θ (моноклиничну) и δ (или тетрагоналну или орторомбичну) фазу, док структуре засноване на густо пакованој хексагоналној расподели јона кисеоника укључују α (тригоналну), κ (орторомбичну) и χ (хексагоналну) фазу. Алуминијум(III)-оксид се природно јавља у полиморфној кристалној форми као минерал корунд ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$). Корунд је једина термодинамички стабилна форма, али се у пракси често користи и $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ [161, 162]. Најпознатије варијанте корунда су сафир и рубин. Црвена боја рубина потиче од нечистоћа хрома, док је сафир плаве боје јер садржи трагове гвожђа и титана. Назив сафир се користи и за било који други корунд који није црвени рубин, тако да сафир може бити и љубичасти, наранџасти, жути, зелени, рози због примеса других елемената као што су хром, ванадијум, манган итд. [163].

Кристалну решетку $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ формирају јони Al^{3+} и O^{2-} као што је шематски приказано на слици 4.1. Анјони кисеоника густо су упаковани у шестоугаоној структури. Полупречник O^{2-} јона је 0,135 nm и у интерстицијска места између јона кисеоника могу да се сместе мањи катјони алуминијума полупречника 0,054 nm. Јони Al^{3+} испуњавају две трећине ових ваканција да би се одржала неутралност молекула. Сваки јон алуминијума је окружен са шест јона кисеоника формирајући октаедралну молекуларну геометрију. Јони алуминијума благо деформишу решетку, али не толико да би нарушавали стабилан октаедрални распоред. Цела кристална решетка се стога може посматрати као да се састоји из наизменичних слојева јона кисеоника и алуминијума. Могуће су три различите конфигурације слоја јона алуминијума у зависности од позиције ваканција. Уколико се слојеви кисеоника означе са *A* и *B*, а слојеви

алуминијума са a , b и c , комплетан структурни мотив се добија за $A-a-B-b-A-c-B-a-A-b-B-c-A$ секвенцу, тј. након шест слојева кисеоника. Самим тим, елементарна ћелија Al_2O_3 се састоји из две формулске јединице и има 10 атома. Цела кристална структура $\alpha-Al_2O_3$ има тригоналну симетрију са ромбоедарском Бравеовом решетком [163, 164].



Слика 4.1. (Лево) Шематски приказ јона алуминијума (сиви кругови) и ваканција (црне кружнице) које се налазе на слоју јона кисеоника (плави кругови). Означена је хексагонална ћелија основне равни. (Десно) Приказ распореда слојева јона O^{2-} и Al^{3+} у Al_2O_3 [163].

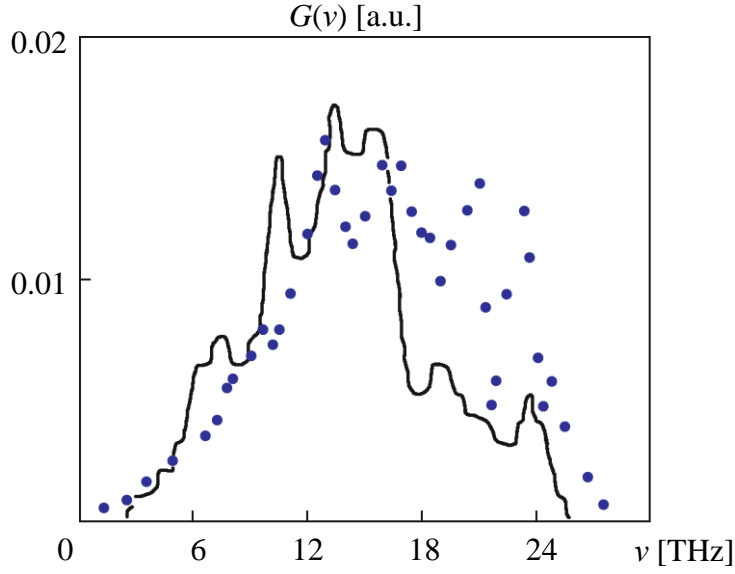
Јонска енергија везе утиче на бројна физичко-хемијска својства кристала. Везе у $\alpha-Al_2O_3$ су углавном јонске, са уделом ковалентних веза од око 20%. Доприноси енергији везе кристалне решетке, која износи 156,7 eV, потичу од електростатичких интеракција, поларизације, одбојне и Ван дер Валсове силе. Електронска зонска структура Al_2O_3 је типична јонским кристалима. Валентна зона има ширину од 13 eV, а ширина енергетског процепа је 9,5 eV, што чини Al_2O_3 изолатором [163].

4.2. Фонони у Al_2O_3

Великог утицаја на осцилациони спектар сафира имају ваканције, тако да се локална густина фонона кристала који садржи ваканције разликује од оне код савршеног кристала. Појава ваканција условљава резонантне осцилације на 5,7 THz и 22,5 THz. У табели 4.1 су дате фреквенције локализованих осцилација јона које потичу од њима најближих дефеката, тј. од анјонских ваканција и F центара (*Farbe center*). На слици 4.2 је приказано поређење израчунате укупне густине фононских стања $\alpha-Al_2O_3$ са добијеним експерименталним вредностима [163].

Табела 4.1. Фреквенције локализованих осцилација јона које потичу од њима најближих дефеката [163].

| Дефект | Јон | Фреквенција [THz] | | |
|--------------------|-------|-------------------|--------------|-----------|
| | | x - оса | y - оса | z - оса |
| Анјонска ваканција | Al(1) | 5,7; 22,5 | 6,0; 22,5 | 5,7; 22,0 |
| | Al(2) | 5,4 | 8,4 | 6,6 |
| F^+ центар | Al(1) | | 3,0; 9,6 | 8,2 |
| | Al(2) | | 2,0; 7,8; 14 | 3,3; 11,7 |
| F^- центар | Al(1) | | 8,2; 12,0 | 14,7 |
| | Al(2) | 16,0 | 14,0 | 13,0 |



Слика 4.2. Густина фононских стања у теоријски савршеном α - Al_2O_3 кристалу. Плаве тачкице означавају експерименталне вредности [163].

Диелектрична својства, тј. динамички одзив волуминозних јонских кристала у дуготаласној граници може да се одреди помоћу њихових оптичких фонона у Γ тачки. Комплекснији поларни кристали, попут Al_2O_3 , имају више оптичких фонона различитих симетрија и поларизација. Међутим, може се претпоставити да поларизација волуминозних кристала потиче углавном од ексцитација два оптичка мода који имају најјачу осцилаторну снагу [36, 109]. Оксиди танких филмова, као што су аморфни γ - Al_2O_3 , кристални γ - Al_2O_3 и кристални α - Al_2O_3 , имају спектре који су до првог реда веома слични спектру површинских фонона волуминозног α - Al_2O_3 , тако да се од њих само мало разликују [109]. Стога, у правцу нормалном на површину танког филма може се констатовати да диелектрични одзив Al_2O_3 потиче од два оптичка фононска мода, који се може написати у уопштеној Лидан-Сакс-Телеровој форми као:

$$\varepsilon_{\parallel}(\omega) = \varepsilon_{\parallel}^{\infty} \frac{(\omega_{LO2}^2 - \omega^2)(\omega_{LO1}^2 - \omega^2)}{(\omega_{TO2}^2 - \omega^2)(\omega_{TO1}^2 - \omega^2)}, \quad (4.2.1)$$

где су ω_{TO1} и ω_{TO2} прва и друга ТО угаона фреквенција, а ω_{LO1} и ω_{LO2} прва и друга ЛО угаона фреквенција. Претходна једначина може да се напише као:

$$\varepsilon_{\parallel}(\omega) = \varepsilon_{\parallel}^{\infty} + (\varepsilon_{\parallel}^i - \varepsilon_{\parallel}^{\infty}) \frac{\omega_{TO2}^2}{\omega_{TO2}^2 - \omega^2} + (\varepsilon_{\parallel}^0 - \varepsilon_{\parallel}^i) \frac{\omega_{TO1}^2}{\omega_{TO1}^2 - \omega^2}, \quad (4.2.2)$$

где су $\varepsilon_{\parallel}^0$, $\varepsilon_{\parallel}^i$ и $\varepsilon_{\parallel}^{\infty}$ статичка, средња (*intermediate*) и оптичка релативна пермитивност, респективно [93]. Поликристални α - Al_2O_3 филмови могу да се посматрају и преко изотропне просечне диелектричне функције као:

$$\varepsilon_p(\omega) = \frac{1}{3} (2\varepsilon_{\perp}(\omega) + \varepsilon_{\parallel}(\omega)), \quad (4.2.3)$$

где су нормална и паралелна компонента дефинисане као суме фреквенција осцилатора $\omega_{TO,i}$, снага осцилатора S_i и коефицијената пригушења γ_i :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \sum_{i=1}^n \frac{S_i \omega_{TO_i}^2}{\omega_{TO_i}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_i}. \quad (4.2.4)$$

У табели 4.2 су дати параметри фононских модова који важе за Al_2O_3 : фреквенције ТО и ЛО фонона, одговарајуће снаге осцилатора и коефицијенти пригушења [109].

Табела 4.2. Фреквенције ТО фонона, снаге осцилатора, коефицијенти пригушења и фреквенције ЛО фонона шест модова Al_2O_3 у Γ тачки [36, 109, 165].

| Мод | ω_{TO} [meV] | S | γ [meV] | ω_{LO} [meV] |
|--|---------------------|-----|----------------|---------------------|
| $\varepsilon_{ } - 1$ | 48,18 | 6,5 | 1,74 | 63,48 |
| $\varepsilon_{ } - 2$ | 71,41 | 1,9 | 6,82 | 107,99 |
| $\varepsilon_{ }(0) = 12,53$ $\varepsilon_{ }(i) = 7,27$ $\varepsilon_{ }(\infty) = 3,20$ | | | | |
| $\varepsilon_{\perp} - 3$ | 47,24 | 0,3 | 0,74 | 48,11 |
| $\varepsilon_{\perp} - 4$ | 54,30 | 2,8 | 0,50 | 59,52 |
| $\varepsilon_{\perp} - 5$ | 70,42 | 3,0 | 3,72 | 77,49 |
| $\varepsilon_{\perp} - 6$ | 79,29 | 0,3 | 4,84 | 111,58 |
| $\varepsilon_{\perp}(0) = 9,48$ $\varepsilon_{\perp}(\infty) = 3,08$ | | | | |

У наредном поглављу ће бити показано како се за фреквенције ФК фонона полубесконачног Al_2O_3 супстрата на којем је слој недопираног графена добијају вредности $\omega_{FK1} \approx 54 \text{ meV}$ и $\omega_{FK2} \approx 86 \text{ meV}$.

5. Моделовање система

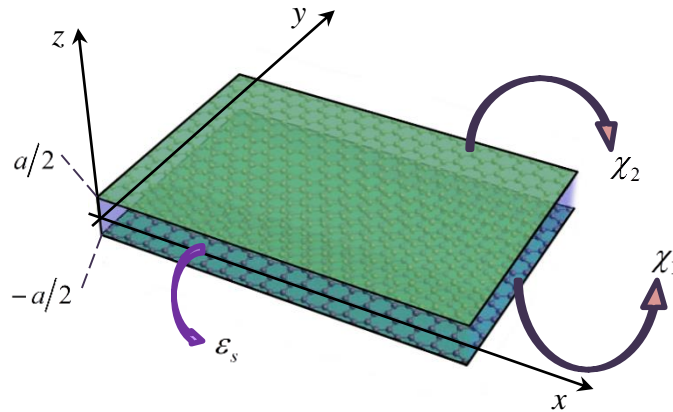
Приликом моделовања композитног система графен-изолатор-графен користи се 3Д Декартов координатни систем у ком се произвољна тачка $A(x, y, z)$ представља вектором $\vec{r} = (\vec{R}, z)$ где је $\vec{R} = (x, y)$ вектор положаја тачке у xy равни, а z је њено растојање, односно то је компонента \vec{r} нормална на ту раван. Посматрани систем је приказан на слици 5.1: два слоја графена налазе се у равнима $z_1 = -a/2$ и $z_2 = a/2$, између њих је смештен хомогени изотропни изолатор Al_2O_3 дебљине a , а цео систем се налази у вакууму или у ваздуху. Ради једноставности, сматра се да нема растојања између графена и Al_2O_3 . Слојеви графена су описани поларизационим функцијама неинтерагујућих електрона добијених на температури апсолутне нуле $\chi_1(\vec{q}, \omega)$ и $\chi_2(\vec{q}, \omega)$, респективно, а супстрат Al_2O_3 својом локалном диелектричном функцијом $\epsilon_s(\omega)$.

Јон наелектрисања Ze , где је $e > 0$ наелектрисање протона, креће се константном нерелативистичком брзином \vec{v} паралелно површини графен-изолатор-графен система, дуж x – осе, на растојању b од најближег слоја графена. Густина наелектрисања те спољашње (екстерне) наелектрисане честице у просторном и у Фуријевом домену је, респективно:

$$\rho_{ext}(\vec{R}, z, t) = Ze\delta(\vec{R} - \vec{v}t)\delta(z - (\frac{a}{2} + b)), \quad (5.0.1)$$

$$\rho_{ext}(\vec{q}, z, \omega) = 2\pi Ze\delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v})\delta(z - (\frac{a}{2} + b)), \quad (5.0.2)$$

где је $\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)} dk$ Диракова делта функција¹.



Слика 5.1. Шематски приказ система графен-изолатор-графен [44].

¹ Особине Диракове делта функције су: $\delta(x) = \delta(-x)$, $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$, $\delta(x^2 - a^2) = [\delta(x - a) + \delta(x + a)]/(2|a|)$,

$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0)$.

У овој дисертацији користи се формулација $gr_{z_1=-a/2}(E_{F1})$ – изолатор – $gr_{z_2=a/2}(E_{F2})$ што значи да се посматра систем у ком графен у равни $z_1 = -a/2$ има Фермијеву енергију $E_{F1}[\text{meV}]$, графен у равни $z_2 = a/2$ има енергију $E_{F2}[\text{meV}]$, а између њих је изолатор дебљине a . Тако у систему $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{vacuum}$ графен у равни $z_1 = -a/2$ је допиран тако да му је Фермијева енергија 200 meV и описан је поларизационом функцијом χ_1 , затим следи слој Al_2O_3 описан диелектричном функцијом ε_s , а у равни $z_2 = a/2$ нема графена, те је $\chi_2 = 0$. У систему $gr(200) - \text{vacuum} - gr(200)$ нема Al_2O_3 између слојева графена, па се користи $\varepsilon_s = 1$.

5.1. Ефективна диелектрична функција система

Укупна диелектрична функција система графен – Al_2O_3 – графен има облик [92]:

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2} \left[1 + \varepsilon_s(\omega) \coth(qa) + \frac{4\pi e^2}{q} \chi_2(\vec{q}, \omega) \right] - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_s^2(\omega) \text{cosech}^2(qa)}{1 + \varepsilon_s(\omega) \coth(qa) + \frac{4\pi e^2}{q} \chi_1(\vec{q}, \omega)}, \quad (5.1.1)$$

при чему је $q = |\vec{q}| = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$. Диелектрична функција Al_2O_3 је апроксимирана као:

$$\varepsilon_s(\omega) = \varepsilon_{ox}^\infty + (\varepsilon_{ox}^i - \varepsilon_{ox}^\infty) \frac{\omega_{TO2}^2}{\omega_{TO2}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_{TO2}} + (\varepsilon_{ox}^0 - \varepsilon_{ox}^i) \frac{\omega_{TO1}^2}{\omega_{TO1}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_{TO1}}, \quad (5.1.2)$$

где су ε_{ox}^∞ , ε_{ox}^i и ε_{ox}^0 оптичка, средња и статичка релативна пермитивност оксида алуминијума, ω_{TO1} и ω_{TO2} су његова прва и друга трансверзална оптичка кружна учестаност ($\omega_{TO1} < \omega_{TO2}$), а γ_{TO1} и γ_{TO2} су коефицијенти пригушења одговарајућих ТО фонона. Бројне вредности претходно наведених параметара су: $\varepsilon_{ox}^0 = 12,53$, $\varepsilon_{ox}^i = 7,27$, $\varepsilon_{ox}^\infty = 3,20$, $\omega_{TO1} = 48,18 \text{ meV}$, $\omega_{TO2} = 71,41 \text{ meV}$, $\gamma_{TO1} = 1,74 \text{ meV}$ и $\gamma_{TO2} = 6,82 \text{ meV}$ [93].

Функције одзива графена добијене су на два начина: методом на бази безмасених Диракових фермиона (*Massless Dirac Fermion - MDF*) и проширеним хидродинамичким моделом (*extended HydroDynamical - eHD*). *MDF* модел може да се користи у опсегу ниских учестаности, где доминира Дираков плазмон. Овај модел тачно описује и међузонске и унутарзонске прелазе електрона до инфрацрвених учестаности за типичне густине допирања графена. У опсегу високих учестаности, где ефекти допирања не долазе до изражаја, користи се израз за поларизациону функцију графена добијену у 2Д двофлуидном *eHD* моделу [68]. Добијени резултати су упоређени са онима реализованим користећи *ab initio* методу, која је описана у прилогу А.

5.1.1. *MDF* модел

MDF метод укључује примену апроксимације случајних фаза узимајући у обзир само π електронску зону графена у апроксимацији Дираковог конуса [166, 167], док су ефекти пригушења, тј. електронских судара одређени Мерминовом процедуром [77]. Мерминова поларизациона функција је тада:

$$\chi_M(q, \omega, \gamma) = \frac{\chi(q, \omega + i\gamma)}{1 - \frac{i\gamma}{\omega + i\gamma} \left[1 - \frac{\chi(q, \omega + i\gamma)}{\chi_s(q)} \right]}, \quad (5.1.3)$$

где је:

$$\chi(q, \omega + i\gamma) = \frac{g_s g_v q i}{16\hbar v_F \sqrt{z}} + \frac{g_s g_v k_F}{2\pi\hbar v_F} + \frac{g_s g_v q}{16\pi\hbar v_F \sqrt{z}} \left[F\left(\frac{\omega + i\gamma}{qv_F} + \frac{2k_F}{q}\right) - F\left(\frac{\omega + i\gamma}{qv_F} - \frac{2k_F}{q}\right) \right], \quad (5.1.4)$$

при чему је $z = \left(\frac{\omega + i\gamma}{qv_F}\right)^2 - 1$ и $F(u) = \frac{u\sqrt{z(u^2-1)}}{\sqrt{z}} - \ln\left[u\sqrt{z} + \sqrt{z(u^2-1)}\right]$, док је $\chi_s(q)$ статичка граница поларизационе функције $\chi(q, \omega + i\gamma)$ када $\omega \rightarrow 0$ и $\gamma \rightarrow 0$, односно [77]:

$$\chi_s(q) = \frac{g_s g_v k_F}{2\pi\hbar v_F} \begin{cases} 1, & q \leq 2k_F \\ 1 - \frac{1}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{2k_F}{q}\right)^2} - \frac{q}{4k_F} \arcsin\left(\frac{2k_F}{q}\right) + \frac{\pi q}{8k_F}, & q > 2k_F \end{cases}. \quad (5.1.5)$$

Ради лакших нумеричких прорачуна пожељно је користити редуковане величине, те се стога једначина (5.1.3) може написати у облику:

$$\frac{2\pi e^2}{q} \chi_M(q, \omega, \gamma) = \frac{\frac{2\pi e^2}{q} \chi(q, \omega + i\gamma)}{1 - \frac{i\gamma}{\omega + i\gamma} \left[1 - \frac{\frac{2\pi e^2}{q} \chi(q, \omega + i\gamma)}{\frac{2\pi e^2}{q} \chi_s(q)} \right]}, \quad (5.1.6)$$

односно, уколико се узме да је $S = \frac{2\pi e^2}{q} \chi$:

$$S_M = \frac{S}{1 - \frac{i\gamma}{\omega + i\gamma} \left(1 - \frac{S}{S_1} \right)}. \quad (5.1.7)$$

Ако се стави да је $C = \frac{g_s g_v e^2}{\hbar v_F}$, сходно претходним једначинама добијају се следећи изрази:

$$S = C \left\{ \frac{\pi i}{8\sqrt{z}} + \frac{k_F}{q} + \frac{1}{8\sqrt{z}} \left[F\left(\frac{\omega + i\gamma}{qv_F} + \frac{2k_F}{q}\right) - F\left(\frac{\omega + i\gamma}{qv_F} - \frac{2k_F}{q}\right) \right] \right\}, \quad (5.1.8)$$

$$S_1 = C \frac{k_F}{q} \begin{cases} 1, & q \leq 2k_F \\ 1 - \frac{1}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{2k_F}{q}\right)^2} - \frac{q}{4k_F} \arcsin\left(\frac{2k_F}{q}\right) + \frac{\pi q}{8k_F}, & q > 2k_F \end{cases}. \quad (5.1.9)$$

Да би се добиле бездимензионе јединице уведе се смене $q = Kk_0$, $\omega = \Omega q v_F$ и $\gamma = \Gamma k_0 v_F$, при чему је $k_0 = \sqrt{\pi n_0}$ Фермијев таласни број за површинску бројну густину наелектрисања од $n_0 \approx 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Фермијев таласни број за било коју површинску бројну густину наелектрисања n може да се напише као $k_F = \sqrt{\pi n} = \sqrt{\pi n_0} \sqrt{n/n_0} = k_0 \sqrt{D}$, где је $D = n/n_0$. Након увођења споменутих смена коначни изрази који се користе приликом нумеричких прорачуна поларизационе функције графена у *MDF* моделу су:

$$z = \left(\Omega + \frac{i\Gamma}{K} \right)^2 - 1, \quad (5.1.10)$$

$$S_M = \frac{S}{1 - \frac{i\Gamma}{K\Omega + i\Gamma} \left(1 - \frac{S}{S_1} \right)}, \quad (5.1.11)$$

$$S = C \left\{ \frac{\pi i}{8\sqrt{z}} + \frac{\sqrt{D}}{K} + \frac{1}{8\sqrt{z}} \left[F \left(\Omega + \frac{i\Gamma}{K} + \frac{2\sqrt{D}}{K} \right) - F \left(\Omega + \frac{i\Gamma}{K} - \frac{2\sqrt{D}}{K} \right) \right] \right\}, \quad (5.1.12)$$

$$S_1 = C \frac{\sqrt{D}}{K} \begin{cases} 1, & K \leq 2\sqrt{D} \\ 1 - \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{4D}{K^2}} - \frac{K}{4\sqrt{D}} \arcsin \left(\frac{2\sqrt{D}}{K} \right) + \frac{\pi K}{8\sqrt{D}}, & K > 2\sqrt{D} \end{cases}. \quad (5.1.13)$$

Ради правилног израчунавања функције $F(u)$ потребно је нагласити како се рачуна корен комплексног броја. Наиме, корен комплексног броја Z се дефинише као $\sqrt{Z} = e^{\frac{1}{2}\ln Z}$, где је $\ln Z = \ln|Z| + i \arg Z$, а његов аргумент, $\arg Z$, је дефинисан до целобројног умношка од 2π . Главна вредност аргумента комплексног броја, $\text{Arg} Z$, узима вредност $\arg Z$ из интервала $(-\pi, \pi]$. Међутим, корени комплексних вредности које се појављују у изразу (5.1.4) морају бити израчунати у односу на главну вредност аргумента броја z , тј. у односу на $\theta = \text{Arg} Z$, тако да $\arg Z$ узима вредности из интервала $(\theta - 2\pi, \theta]$. На основу реченог, $(z(u^2 - 1))^{-1/2} \neq z^{-1/2}(u^2 - 1)^{-1/2}$ када се ради о специфичним гранама квадратног корена [77].

Конфигурације графен-изолатор-графен система

У случају недопираног графена, $k_F = 0$, израз за поларизациону функцију графена (5.1.4) постаје:

$$\chi(q, \omega + i\gamma) = \frac{g_s g_v q i}{16\hbar v_F \sqrt{z}}, \quad (5.1.14)$$

док се за њену статичку границу на основу израза (5.1.5) добија:

$$\chi_s(q) = \frac{g_s g_v q}{16\hbar v_F}. \quad (5.1.15)$$

Тада је и $D = 0$, па се добија и $S = C\pi i / (8\sqrt{z})$ и $S_1 = C\pi/8$.

У случају $\text{Al}_2\text{O}_3 - gr(E_{F2})$ нема доњег слоја графена, тј. $\chi_1 = 0$, те је изолатор Al_2O_3 полубесконачан, односно $a \rightarrow \infty$. Тада је $\coth(qa) = 1$ и $\text{cosech}(qa) = 0$ чиме се добија да израз за диелектричну функцију целог система (5.1.1) постаје:

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2} \left[1 + \varepsilon_s(\omega) + \frac{4\pi e^2}{q} \chi_2(\vec{q}, \omega) \right]. \quad (5.1.16)$$

Када је систем симетричан, односно када су оба слоја графена допирана истом густином наелектрисања, укупна диелектрична функција може да се напише као хармонијска средина, тј. $\varepsilon = 2\varepsilon_+ \varepsilon_- / (\varepsilon_+ + \varepsilon_-)$, где ε_+ и ε_- представљају њен симетрични и антисиметрични део:

$$\varepsilon_+(q, \omega) = \frac{1}{2} \left[1 + \varepsilon_s(\omega) \tanh\left(q \frac{a}{2}\right) + \frac{4\pi e^2}{q} \chi(q, \omega) \right], \quad (5.1.17)$$

$$\varepsilon_-(q, \omega) = \frac{1}{2} \left[1 + \varepsilon_s(\omega) \coth\left(q \frac{a}{2}\right) + \frac{4\pi e^2}{q} \chi(q, \omega) \right], \quad (5.1.18)$$

респективно. У овом случају је могућа и декомпозиција функције губитака система, односно она може да се представи као аритметичка средина свог симетричног и антисиметричног дела, тј. $\text{Im}[-1/\varepsilon(q, \omega)] = \frac{1}{2} \sum_p \text{Im}[-1/\varepsilon_p(q, \omega)]$, а решења једначина $\text{Re}[\varepsilon_p(q, \omega)] = 0$ јесу по три резонантне фреквенције ω_j^p ($j=1, 2, 3$) одређене парности ($p = +, -$) [70].

Оптичка граница

Дисперзионе криве посматраних система су добијене решавањем једначине $\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 0$ при чему је узето да су сви коефицијенти пригушења једнаки нули, односно $\gamma_{TO1} = 0$, $\gamma_{TO2} = 0$ и $\gamma = 0$. Пошто се ефекти електронских судара овде не узимају у обзир, израз за Мерминову поларизациону функцију постаје једноставно $\chi_M(q, \omega, \gamma) = \chi(q, \omega)$. Поларизациона функција графена је добијена у оптичкој граници, тј. када $q \rightarrow 0$, преко оптичке проводности као:

$$\chi(q, \omega) \approx i \frac{q^2}{e^2 \omega} \sigma(\omega). \quad (5.1.19)$$

Оптичка проводност допираног графена је написана као збир доприноса унутарзонских и међузонских прелаза електрона, $\sigma(\omega) = \sigma_{intra}(\omega) + \sigma_{inter}(\omega)$, где је:

$$\sigma_{intra}(\omega) = \frac{ie^2 E_F}{\pi \hbar^2 \omega}, \quad (5.1.20)$$

$$\sigma_{inter}(\omega) = \sigma_0 \left[H(\omega - 2E_F/\hbar) - \frac{i}{\pi} \ln \left| \frac{2E_F/\hbar + \omega}{2E_F/\hbar - \omega} \right| \right], \quad (5.1.21)$$

при чему је $\sigma_0 = e^2/(4\hbar)$, а $H(x) = \int_{-\infty}^x \delta(t) dt$ је Хевисајдова (јединична одскочна) функција [68].

5.1.2. eHD модел

Поларизациона функција графена добијена у 2Д двофлуидном хидродинамичком моделу разматра међузонске прелазе σ и π електрона у графену [127, 168], али и раздваја доприносе преласка електрона из π у π^* зону у околини К и М тачака Брилуенове зоне [9]. У овој једноставној емпиријској апроксимацији π и σ електронски облаци се посматрају као два одвојена флуида који се крећу по графену, тако да се израз за оптичку проводност добија као збир нормираних доприноса појединачних флуида, односно:

$$\sigma_{eHD}(\omega) = (\sigma_D(\omega) + f \sigma_\pi(\omega)) + \sigma_\sigma(\omega), \quad (5.1.22)$$

где је $\sigma_D(\omega)$ Диракова корекција која разматра допринос нискоенергетских $\pi \rightarrow \pi^*$ прелаза у околини К тачака, а $f \in (0, 1)$ је фактор нормирања који раздваја тај допринос од доприноса $\pi \rightarrow \pi^*$ прелаза у М тачкама Брилуенове зоне. Овде је израз за проводност ν -тог флуида (где је $\nu = \pi, \sigma$) добијен у Друде-Лоренцовој форми као:

$$\sigma_\nu(\omega) = ie^2 \frac{n_\nu^0}{m_\nu^*} \frac{\omega}{\omega(\omega + i\beta_\nu) - \omega_{\nu r}^2}, \quad (5.1.23)$$

где су n_ν^0 , m_ν^* , $\omega_{\nu r}$ и β_ν равнотежна бројна густина електрона по јединици површине, ефективна маса електрона, повратна (*restoring*) фреквенција и коефицијент трења ν -тог флуида, респективно. Диракова корекција је узета као:

$$\sigma_D(\omega) = \sigma_0 \frac{\omega_c^4}{\omega_c^4 + \omega^4} \left[1 + i \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \frac{\omega}{\omega_c} \left(1 + \frac{\omega^2}{\omega_c^2} \right) \right], \quad (5.1.24)$$

где је ω_c одговарајућа гранична (*cutoff*) фреквенција испод које важи апроксимација Дираковог конуса. Фактор нормирања је изабран тако да поштује правило f -суме које осигурава да збир $\sigma_D(\omega)$ и $\sigma_\pi(\omega)$ доприноси одговара једном π електрону по атому угљеника у графену као:

$$f = 1 - \frac{\sqrt{2}}{8} \cdot \frac{m_\nu^* \omega_c}{\hbar n_{at}}, \quad (5.1.25)$$

где је n_{at} атомска густина графена, а m_ν^* је маса слободног електрона која представља ефективну масу σ и π флуида електрона [9].

Приликом моделовања спектрограма енергетских губитака електрона једнослојног и вишеслојног графена довољно је користити функцију одзива у оптичкој граници (5.1.19). Штавише, за моделовање главних пикова довољно је узети у обзир само проводност недопираног графена ($E_F = 0$), што значи да се проводност може написати као $\sigma(\omega) = \sigma_{inter}(\omega) \approx \sigma_{eHD}(\omega)$ описујући и $\pi \rightarrow \pi^*$ и $\sigma \rightarrow \sigma^*$ међузонске прелазе електрона. На пример, повратна фреквенција од $\omega_{\pi r} \sim 4$ eV описује $\pi \rightarrow \pi^*$ прелазе електрона у М тачкама Брилуенове зоне.

Бројне вредности параметара коришћене у претходним једначинама јесу: $\omega_{\pi r} = 4,19$ eV, $\omega_{\sigma r} = 14,15$ eV, $\omega_c = 3,54$ eV, $n_\pi^0 = n_{at} = 38$ nm⁻², $n_\sigma^0 = 3n_{at} = 114$ nm⁻², $\beta_\pi = 2,04$ eV и $\beta_\sigma = 2,178$ eV [68]. Треба напоменути да су бројне вредности фреквенција и коефицијената трења добијени поређењем са експерименталним *EELS* спектрима слободног графена [9].

5.2. Укупни потенцијал

За посматрану слојевиту структуру развијен је математички модел заснован на решавању Поасонове једначине методом Гринових функција [169]. Поасонова једначина за скаларни потенцијал електростатичког поља $\Phi(\vec{r})$ у запремини V чија је гранична површ S са нормалом \vec{n} јесте $\nabla \cdot [\epsilon(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r})] = -4\pi \rho_{ext}(\vec{r})$. Гринова функција, $G(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$,² је потенцијал електростатичког поља које, при задатим граничним условима, ствара непокретна честица јединичног позитивног наелектрисања, смештена у тачку са вектором положаја \vec{r}' , у тачки са вектором положаја \vec{r} . Она заправо изражава одговор система у тачки \vec{r} на побуду јединичног интензитета из \vec{r}' [170]. Решавањем система једначина:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [\epsilon(\vec{r}) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}')] &= -4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad \vec{r} \in V \\ G(\vec{r}, \vec{r}') &= 0, \quad \vec{r} \in S \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

² Ова Гринова функција зависи само од релативне позиције и времена због трансляционе инваријантности у слободном простору.

помоћу другог Гриновог идентитета³ којим се успоставља веза између $G(\vec{r}, \vec{r}')$ и $\Phi(\vec{r})$ (заменом $\varphi = \Phi(\vec{r})$ и $\psi = G(\vec{r}, \vec{r}')$), уз одговарајуће граничне услове ($\Phi(\vec{r}') = 0$ и $\partial\Phi(\vec{r}')/\partial n' = 0$ за $\vec{r}' \in S'$), за вакуум или ваздух ($\varepsilon(\vec{r}) = 1$) добија се да је [171]:

$$\Phi(\vec{r}) = \int_V \rho_{ext}(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') d^3\vec{r}'. \quad (5.2.2)$$

Гринова функција Поасонове једначине посматраног система је, у атомским јединицама, једнака екранираној Кулоновој интеракцији између тачака $z, z' \geq a/2$. Фуријеовом трансформацијом екраниране Кулонове интеракције ($G \rightarrow W$), у односу на координате паралелне графену ($\vec{R} \rightarrow \vec{q}$) и на време ($t \rightarrow \omega$) добија се израз [52, 92]:

$$W(\vec{q}, \omega, z, z') = \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z'|} + W_{ind}(\vec{q}, \omega, z, z') = \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z'|} + \frac{2\pi}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-q(z+z'-a)}, \quad (5.2.3)$$

где први сабирак представља Кулонову интеракцију, а други одговара индукованом интеракцији која настаје због поларизације графена и супстрата. Укупни (тотални) потенцијал система графен-изолатор-графен, Φ_{tot} , у (\vec{q}, ω) простору повезан је са Гриновом функцијом, W , и густином наелектрисања, ρ_{ext} , на следећи начин:

$$\Phi_{tot}(\vec{q}, z, \omega) = \int W(\vec{q}, z, z', \omega) \rho_{ext}(\vec{q}, z', \omega) dz'. \quad (5.2.4)$$

Заменом израза за густине наелектрисања из (5.0.2) у (5.2.4) добија се:

$$\begin{aligned} \Phi_{tot}(\vec{q}, z, \omega) &= \int_{z'} W(\vec{q}, z, z', \omega) \cdot 2\pi Ze \delta \left[z' - \left(b + \frac{a}{2} \right) \right] \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}) dz' = \\ &= 2\pi Ze W \left(\vec{q}, z, b + \frac{a}{2}, \omega \right) \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}). \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

За раван графена која је најближа упадној честици, тј. за $z = a/2$ добија се да је:

$$\begin{aligned} W \left(\vec{q}, \frac{a}{2}, b + \frac{a}{2}, \omega \right) &= \frac{2\pi}{q} e^{-q \left| \frac{a}{2} - \left(b + \frac{a}{2} \right) \right|} + \frac{2\pi}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-q \left(\frac{a}{2} + b + \frac{a}{2} - a \right)} = \\ &= \frac{2\pi}{q} e^{-qb} + \frac{2\pi}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-qb} = \\ &= \frac{2\pi}{q} \cdot \frac{e^{-qb}}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)}, \end{aligned} \quad (5.2.6)$$

односно да је укупни потенцијал:

$$\Phi_{tot}(\vec{q}, z, \omega) \Big|_{z=\frac{a}{2}} = (2\pi)^2 Ze \cdot \frac{e^{-qb}}{q} \cdot \frac{\delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v})}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)}. \quad (5.2.7)$$

Фуријеовом трансформацијом претходне једначине добија се:

³ $\int_V (\varphi \Delta' \psi - \psi \Delta' \varphi) d^3\vec{r}' = \oint_{S'} \left(\varphi \frac{\partial \psi}{\partial n'} - \psi \frac{\partial \varphi}{\partial n'} \right) dS'$

$$\begin{aligned}
\Phi_{\text{tot}}(\vec{R}, z, t) \Big|_{z=\frac{a}{2}} &= \frac{F}{(2\pi)^3} \iint_{\vec{q}, \omega} \Phi_{\text{tot}}(\vec{q}, z, \omega) \Big|_{z=\frac{a}{2}} e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} d\omega = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \iint_{\vec{q}, \omega} (2\pi)^2 Ze \cdot \frac{e^{-qb}}{q} \cdot \frac{\delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v})}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} d\omega = \\
&= \frac{Ze}{2\pi} \int_{\vec{q}} \frac{e^{-qb}}{q} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \vec{q} \cdot \vec{v})} e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{v} t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} = \\
&= \frac{Ze}{2\pi} \int_{\vec{q}} \frac{e^{-qb}}{q} \cdot \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \vec{q} \cdot \vec{v})} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{v} t)} d^2 \vec{q}.
\end{aligned} \tag{5.2.8}$$

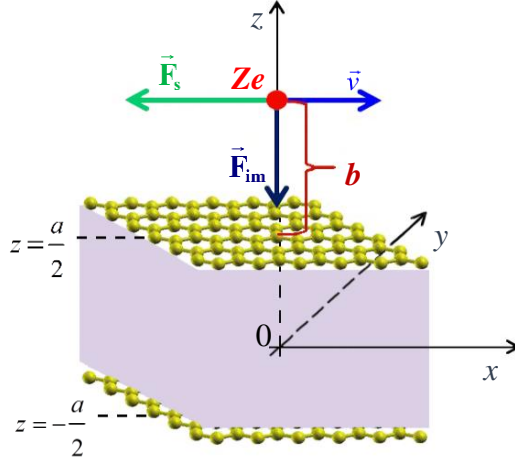
За јон који се креће дуж x -осе важи да је $\vec{v} = v\vec{e}_x$ и $\vec{R} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y$, на основу чега је $\vec{R} - \vec{v}t = (x - vt)\vec{e}_x + y\vec{e}_y$ и $\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{v}t) = q_x(x - vt) + q_y y$. Ако се узме у обзир и да је реални део од $\varepsilon(q, q_x v)$, где је $q = (q_x^2 + q_y^2)^{-1/2}$, парна функција по q_x и q_y , а да је њен имагинаран део непарна функција по q_x и парна по q_y , добија се коначан израз за укупни потенцијал (при чему је искоришћено да је интеграл непарне функције на симетричном интервалу граница једнак нули):

$$\begin{aligned}
\Phi_{\text{tot}}(x, y, \frac{a}{2}, t) &= \frac{Ze}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-qb}}{q} \cdot \frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} e^{i[q_x(x-vt) + q_y y]} dq_x dq_y = \\
&= \frac{Ze}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-qb}}{q} \cdot (f_{\text{Re}}(q_x, q_y) + i f_{\text{Im}}(q_x, q_y)) dq_x dq_y = \\
&= \frac{Ze}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-qb}}{q} \cdot f_{\text{Re}}(q_x, q_y) dq_x dq_y + i \frac{Ze}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-qb}}{q} \cdot f_{\text{Im}}(q_x, q_y) dq_x dq_y = \\
&= \frac{Ze}{2\pi} \cdot 2 \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-qb}}{q} \cdot f_{\text{Re}}(q_x, q_y) dq_x dq_y = \\
&= \frac{2Ze}{\pi} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-qb}}{q} \cdot \text{Re} \left\{ \frac{e^{i[q_x(x-vt) + q_y y]}}{\varepsilon(q, q_x v)} \right\} dq_x dq_y.
\end{aligned} \tag{5.2.9}$$

Пошто се посматра потенцијал из система који је везан за спољашњу наелектрисану честицу може се написати $\Phi_{\text{tot}}(x, y, z = a/2, t) = \Phi_{\text{tot}}(x - vt, y, z = a/2)$ [69].

5.3. Заустановка сила и сила лика

На наелектрисану честицу Ze која се креће брзином \vec{v} дуж x – осе изнад посматраног система на растојању b делујују зауставна сила (F_s – *stopping force*) и сила лика (F_{im} – *image force*), као што је приказано на слици 5.2.



Слика 5.2. Шематски приказ сила (F_s и F_{im}) које делују на спољашњу наелектрисану честицу Ze која се креће брзином v на растојању b од система графен-изолатор-графен дебљине a [95].

Посматрана зауставна сила и сила лика се дефинишу на следећи начин, респективно:

$$F_s = -Ze \left. \frac{\partial \Phi_{ind}(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=vt, y=0, z=b+\frac{a}{2}}, \quad (5.3.1)$$

$$F_{im} = -Ze \left. \frac{\partial \Phi_{ind}(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{x=vt, y=0, z=b+\frac{a}{2}}, \quad (5.3.2)$$

где је индуковани потенцијал у равни графена најближој упадној наелектрисаној честици:

$$\begin{aligned} \Phi_{ind}(\vec{q}, z, \omega) &= \int_{z'} \rho_{ext}(\vec{q}, z', \omega) W_{ind}(\vec{q}, z, z', \omega) dz' = \\ &= \int_{z'} 2\pi Ze \delta(z' - (b + \frac{a}{2})) \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}) \cdot \frac{2\pi}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-q(z+z'-a)} dz' = \\ &= \frac{(2\pi)^2 Ze}{q} \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}) \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-q(z+b-\frac{a}{2})}. \end{aligned} \quad (5.3.3)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \iint_{\vec{q}, \omega} \Phi_{ind}(\vec{q}, z, \omega) e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} d\omega = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \iint_{\vec{q}, \omega} \frac{(2\pi)^2 Ze}{q} \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}) \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-q(z+b-\frac{a}{2})} e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} d\omega = \\ &= \frac{Ze}{2\pi} \int_{\vec{q}} \frac{e^{-q(z+b-\frac{a}{2})}}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, \vec{q} \cdot \vec{v})} - 1 \right] e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{v} t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q}, \end{aligned} \quad (5.3.4)$$

ОДНОСНО:

$$\Phi_{\text{ind}}(x, y, z, t) = \frac{Ze}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-q(z+b-\frac{a}{2})}}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} - 1 \right] e^{i[q_x(x-vt)+q_y y]} dq_x dq_y. \quad (5.3.5)$$

Заменом (5.3.5) у (5.3.1) добија се коначан израз за зауставну силу:

$$\begin{aligned} F_s &= -Ze \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{Ze}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-q(z+b-\frac{a}{2})}}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} - 1 \right] e^{i[q_x(x-vt)+q_y y]} dq_x dq_y \right\} \Bigg|_{x=vt, y=0, z=b+\frac{a}{2}} = \\ &= -\frac{(Ze)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-q(b+\frac{a}{2}+b-\frac{a}{2})}}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} - 1 \right] \cdot i q_x e^{i[q_x(vt-vt)+q_y \cdot 0]} dq_x dq_y = \\ &= -i \frac{(Ze)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-2qb}}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} - 1 \right] \cdot q_x dq_x dq_y = \\ &= -i \frac{(Ze)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-2qb}}{q} \frac{q_x}{\varepsilon(q, q_x v)} dq_x dq_y + i \frac{(Ze)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-2qb}}{q} q_x dq_x dq_y = \\ &= -i \frac{(Ze)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-2qb}}{q} q_x \left[\operatorname{Re} \left(\frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} \right) + i \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} \right) \right] dq_x dq_y = \\ &= \frac{2(Ze)^2}{\pi} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{q_x e^{-2qb}}{q} \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} \right) dq_x dq_y. \end{aligned} \quad (5.3.6)$$

Аналогним поступком за силу lika се добија:

$$F_{\text{im}} = \frac{2(Ze)^2}{\pi} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} e^{-2qb} \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} - 1 \right] dq_x dq_y. \quad (5.3.7)$$

Зауоставна сила – алтернативни поступак

Алтернативно, до израза за зауоставну силу може се доћи и на следећи начин. Полазећи од израза (5.3.4) добија се да је зауоставна сила:

$$F_s = -Ze \frac{\vec{v}}{v} \cdot \left. \frac{\partial \Phi_{\text{ind}}(\vec{R}, z, t)}{\partial \vec{R}} \right|_{\vec{R}=\vec{v}t, z=b+\frac{a}{2}}, \quad (5.3.8)$$

односно добија се да је:

$$\begin{aligned} F_s &= -i \frac{(Ze)^2}{2\pi v} \iint_{\vec{q}} \frac{(\vec{q} \cdot \vec{v}) e^{-2qb}}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \vec{q} \cdot \vec{v})} - 1 \right] d^2 \vec{q} = \\ &= -i \frac{(Ze)^2}{2\pi v} \iiint_{\vec{q}, \omega} \frac{\omega e^{-2qb}}{q} \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}) d^2 \vec{q} d\omega. \end{aligned} \quad (5.3.9)$$

За вектор \vec{q} важи да је $\vec{q} = q \cos \theta \vec{e}_x + q \sin \theta \vec{e}_y$, где је θ угао који вектор \vec{q} заклапа са x -осом, а за брзину јона који се креће дуж x -осе је $\vec{v} = v \vec{e}_x$, тако да је $\vec{q} \cdot \vec{v} = qv \cos \theta$. Заменом добијеног у претходни израз добија се:

$$F_s = -i \frac{(Ze)^2}{2\pi v} \int_0^\infty e^{-2qb} dq \int_{-\infty}^{+\infty} \omega \left[\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] d\omega \int_{-\pi}^{\pi} \delta(\omega - qv \cos \theta) d\theta. \quad (5.3.10)$$

Узимајући у обзир особине делта функције важи да је $\delta(\omega - qv \cos \theta) = \delta(\cos \theta - \omega/(qv))/(qv)$, те се за интеграл добија $\frac{2}{qv} \int_0^\pi \delta(\cos \theta - \omega/(qv)) d\theta = 2/(q^2 v^2 - \omega^2)^{-1/2}$, односно за зауоставну силу:

$$\begin{aligned} F_s &= -i \frac{(Ze)^2}{\pi v} \int_{q=0}^{\infty} \int_{\omega=-qv}^{qv} e^{-2qb} \frac{\omega}{\sqrt{q^2 v^2 - \omega^2}} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} - 1 \right] d\omega dq = \\ &= -\frac{2(Ze)^2}{\pi v} \int_{q=0}^{\infty} \int_{\omega=0}^{qv} e^{-2qb} \frac{\omega}{\sqrt{q^2 v^2 - \omega^2}} \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] d\omega dq. \end{aligned} \quad (5.3.11)$$

Уколико је $qa \gg 1$ важи да је $\text{coth}(qa) \approx 1$ и $\text{cosech}(qa) \approx 0$, те се добија израз за ефективну диелектричну функцију система (5.1.16) једног слоја графена депонованог на полубесконачном супстрату. Додатно, ако се посматра режим ниских брзина упадне честице ($v < v_F$) функција одзива недопираног графена може да се апроксимира статичком границом $\chi_2 \approx q/(4v_F)$, чиме се добија:

$$\varepsilon(\omega) \approx \frac{1}{2} \left[1 + \varepsilon_s(\omega) + \frac{\pi e^2}{v_F} \right]. \quad (5.3.12)$$

Ако су коефицијенти пригушења у диелектричној функцији супстрата веома мали ($\gamma_{\text{TO1}} \approx 0$ и $\gamma_{\text{TO2}} \approx 0$), решавањем једначине $\varepsilon(\omega) = 0$ добијају се вредности екранираних ФК фонона као

$\omega_{FK1} \approx 54 \text{ meV}$ и $\omega_{FK2} \approx 86 \text{ meV}$. Функција губитака оваквог система може да се апроксимира као [172]:

$$\text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(\omega)} \right] \approx \sum_{i=1}^2 A_{FK_i} \delta(\omega - \omega_{FK_i}), \quad (5.3.13)$$

где су тежинске константе $A_{FK_i} = \pi \left| \frac{d}{d\omega} \varepsilon(\omega) \Big|_{\omega=\omega_{FK_i}} \right|$, односно $A_{FK1} \approx 1,5 \text{ meV}$ и $A_{FK2} \approx 8,8 \text{ meV}$.

Заменом последње једначине у (5.3.11) добија се аналитичка апроксимација:

$$F_s \approx -\frac{2(Ze)^2}{\pi v^2} \sum_{i=1}^2 A_{FK_i} \omega_{FK_i} K_0 \left(\frac{2b}{v} \omega_{FK_i} \right), \quad (5.3.14)$$

при чему је K_0 модификована Беселова функција другог реда⁴ [173]. Нормализацијом сабирака из претходне једначине изразом $F_0 = Z^2 e^2 / (4b^2)$ добија се једначина:

$$\bar{F}_{s,FK_i} = -\frac{2 A_{FK_i}}{\pi \omega_{FK_i}} \bar{b}_i^2 K_0(\bar{b}_i), \quad (5.3.15)$$

где је $\bar{b}_i = 2 \frac{b}{v} \omega_{FK_i}$. На основу ње зауставна сила се може поделити на компоненте које потичу од појединачних ФК фононских модова.

Уколико се функција губитака система рачуна као аритметичка средина симетричног и антисиметричног дела, могуће је зауставну силу изразити на исти начин, односно $F_s = (F_s^+ + F_s^-) / 2$, од којих се сваки сабирак даље може представити као [70]:

$$F_s^\pm = \sum_{i=1}^3 F_{s,i}^\pm. \quad (5.3.16)$$

5.4. Нумерички прорачуни

За добијање резултата у овој дисертацији написани су програмски кодови у софтверском пакету *MATLAB* (*MATrix LABoratory*) [174] и програмском језику *Fortran* (*FORmula TRANslation*) [175], а коначне слике су урађене у програму *Origin* [176].

Израз за укупни потенцијал (5.2.9) се даље може написати до форме погодне за нумеричке прорачуне као:

$$\Phi_{\text{tot}}(x, y, z = \frac{a}{2}, t) = \frac{2Ze}{\pi} \int_{q=0}^{\infty} \int_{\omega=0}^{qv} e^{-qb} \cdot \frac{\cos\left(\frac{y}{v} \cdot \sqrt{q^2 v^2 - \omega^2}\right)}{\sqrt{q^2 v^2 - \omega^2}} \cdot \left\{ \cos\left[\frac{\omega}{v}(x-vt)\right] \text{Re}\left[\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)}\right] - \sin\left[\frac{\omega}{v}(x-vt)\right] \text{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)}\right] \right\} d\omega dq, \quad (5.4.1)$$

⁴ Беселова функција је $K_n(z) = \int_0^{\infty} e^{-z \cosh(t)} \cosh(nt) dt$, где је z комплексни број за који важи $\text{Re}(z) > 0$.

односно, увођењем смена $q = Kk_0$, $\omega = \Omega q v_F = K\Omega k_0 v_F$, $x - vt = \underline{x}/k_0$, $y = \underline{y}/k_0$, $b = \underline{z}_0/k_0$ и $v = \underline{v} v_F$ добија се израз:

$$\frac{\Phi_{\text{tot}}}{\Phi_0} = \frac{2\underline{z}_0}{\pi} \int_{K=0}^{\infty} \int_{\Omega=0}^{\underline{v}} e^{-K\underline{z}_0} \cdot \frac{\cos\left[\frac{K\underline{y}}{\underline{v}} \cdot \sqrt{\underline{v}^2 - \Omega^2}\right]}{\sqrt{\underline{v}^2 - \Omega^2}} \cdot \left\{ \cos\left(\frac{K\underline{\Omega x}}{\underline{v}}\right) \operatorname{Re}\left[\frac{1}{\varepsilon(K, \Omega)}\right] - \sin\left(\frac{K\underline{\Omega x}}{\underline{v}}\right) \operatorname{Im}\left[\frac{1}{\varepsilon(K, \Omega)}\right] \right\} d\Omega dK, \quad (5.4.2)$$

при чему је $\Phi_0 = Ze/b$. Слично, за зауставну силу и силу lika могу се написати следећи изрази:

$$\frac{F_s}{F_0} = \frac{8\underline{z}_0^2}{\pi \underline{v}} \int_{K=0}^{\infty} \int_{\Omega=0}^{\underline{v}} K e^{-2K\underline{z}_0} \frac{\Omega}{\sqrt{\underline{v}^2 - \Omega^2}} \operatorname{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon(K, \Omega)}\right) d\Omega dK, \quad (5.4.3)$$

$$\frac{F_{\text{im}}}{F_0} = \frac{8\underline{z}_0^2}{\pi} \int_{K=0}^{\infty} \int_{\Omega=0}^{\underline{v}} K e^{-2K\underline{z}_0} \frac{1}{\sqrt{\underline{v}^2 - \Omega^2}} \operatorname{Re}\left[\frac{1}{\varepsilon(K, \Omega)} - 1\right] d\Omega dK, \quad (5.4.4)$$

у којима је $F_0 = (Ze)^2/(4b^2)$.

Функције губитака, $L(q, \omega) = \operatorname{Im}[-1/\varepsilon(q, \omega)]$, добијене су у пакету *MATLAB*, а време потребно за њихово реализовање је реда величине од десет секунди до неколико минута (на рачунару са процесором од 1,6 GHz са четири језгра) у зависности од броја тачака, односно резолуције слике. Укупни потенцијал је такође могуће добити у том програму. Међутим, коришћењем паралелног програмирања помоћу 20 језгара на кластеру (од могућа четири процесора од 1,7 GHz са по десет језгара) потребно је између дан и два у зависности од тачности да се добије једна крива од 200 тачака. С друге стране, коришћењем *Fortran* програмског језика (на рачунару) исте криве, али од 1000 тачака, се добију за 3 h до 6 h. Додатно, у пакету *MATLAB* потребно је „ручно” изделити домен двоструке интеграције, чиме се увећава вероватноћа потенцијалних грешака. Таква подела приликом израчунавања у *Fortran* језику није неопходна. На основу наведеног, за добијање потенцијала, зауставне силе и сила lika коришћен је *Fortran*. Поређења ради, време потребно за добијање прорачуна *ab initio* методом (на рачунару са осам процесора од 3,2 GHz) је неколико дана.

6. Резултати и дискусија

Циљ ове дисертације јесте да се утврди како хибридизација Дираковог плазмона из графена и површинских оптичких фонона из Al_2O_3 слоја, у оквиру композитних система графен-изолатор-графен, утиче на ефекат таласа у потенцијалу који узрокује упадна наелектрисана честица у слоју графена који јој је најближи, као и на зауставну силу и силу лика које делују на честицу. То је постигнуто мењањем композиције самих система и мењањем параметара који карактеришу сваки појединачни систем, односно променом дебљине Al_2O_3 слоја, коефицијента пригушења плазмона у графену, густине допирања графена, али и променом брзине упадне честице и њене удаљености од површине система. Резултати су добијени *MDF* или *eHD* моделом и упоређени су са резултатима добијеним *ab initio* методом. Међутим, да би се разумели доприноси специфичних колективних модова фонона и плазмона претходно наведеним величинама, потребно је прво анализирати функције губитака посматраних система.

Функција губитака се добија као $L(q, \omega) = \text{Im}[-1/\varepsilon(q, \omega)]$, а одговарајуће диелектричне функције су израчунате користећи *MDF* метод, узимајући да је $\hbar = 1$. Коришћени метод, како ће се показати, довољно добро описује таласни потенцијал у ниском и средњем режиму брзина упадне наелектрисане честице, док за више брзине мора да се користи *eHD* или *ab initio* модел да би се добио реалистичнији опис ефекта таласа у потенцијалу. Наиме, осим прелаза у оквиру и између π и π^* зона у облику конуса, које су укључене у *MDF* метод, *eHD* и *ab initio* функције одзива укључују прелазе између реалније обликованих π и π^* зона, али и прелазе између виших окупираних и слободних зона, као што су $\pi \leftrightarrow \sigma^*$ и $\sigma \leftrightarrow \sigma^*$. Функције губитака у овом одељку су приказане у опсегу таласних бројева $q < 0,8 \text{ nm}^{-1}$. Мањи ($0 < q < 0,08 \text{ nm}^{-1}$), односно већи ($0 < q < 8 \text{ nm}^{-1}$) опсег је додатно приказан када дискусија појединачних композитних система то захтева.

На слици 6.1 су приказане функције губитака за четири композиције система код којих је дебљина изолатора или растојање између слојева графена $a = 5 \text{ nm}$, а слојеви графена имају густину допирања од $E_F = 200 \text{ meV}$ и коефицијент пригушења плазмона $\gamma = 10 \text{ meV}$: у симетричним системима под (a) $gr(200) - vacuum - gr(200)$ и (b) $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(200)$, као и у асиметричним под (c) $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(0)$ и (d) $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - vacuum$. На свакој слици је танким белим линијама означена доња, $\omega = v_F(q - 2k_F)$, и горња, $\omega = v_F q$, ивица унутарзонских $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$ електрон-шупљина ексцитација, као и доња, $\omega = 2E_F - v_F q$, ивица међузонских $\pi \leftrightarrow \pi^*$ прелаза у апроксимацији Дираковог конуса. Танким жутиим линијама су приказане $\omega = q_x v$ праве за $v/v_F = 0,5, 2$ и 4 да би се визуализовали њихови пресеци са модовима који највише доприносе ефекту таласа у индукованом потенцијалу.

На слици 6.1(a) је приказана функција губитака симетричног $gr(200) - vacuum - gr(200)$ система. На њој се уочавају две плазмонске гране које су последица хибридизације Диракових плазмона у слојевима графена. Гранични таласни број испод којег два плазмона још увек могу да интерагују може се проценити као $q_c \sim 1/a$ зато што интеракција која проузрокује плазмонску хибридизацију опада приближно као $\sim e^{-qa}$. Дакле, за $q > q_c$ плазмони слабо интерагују и две плазмонске гране постају скоро потпуно дегенерисане. Интензитет функције губитака показује да је ова процена довољно добра јер се цепање Дираковог плазмона дешава

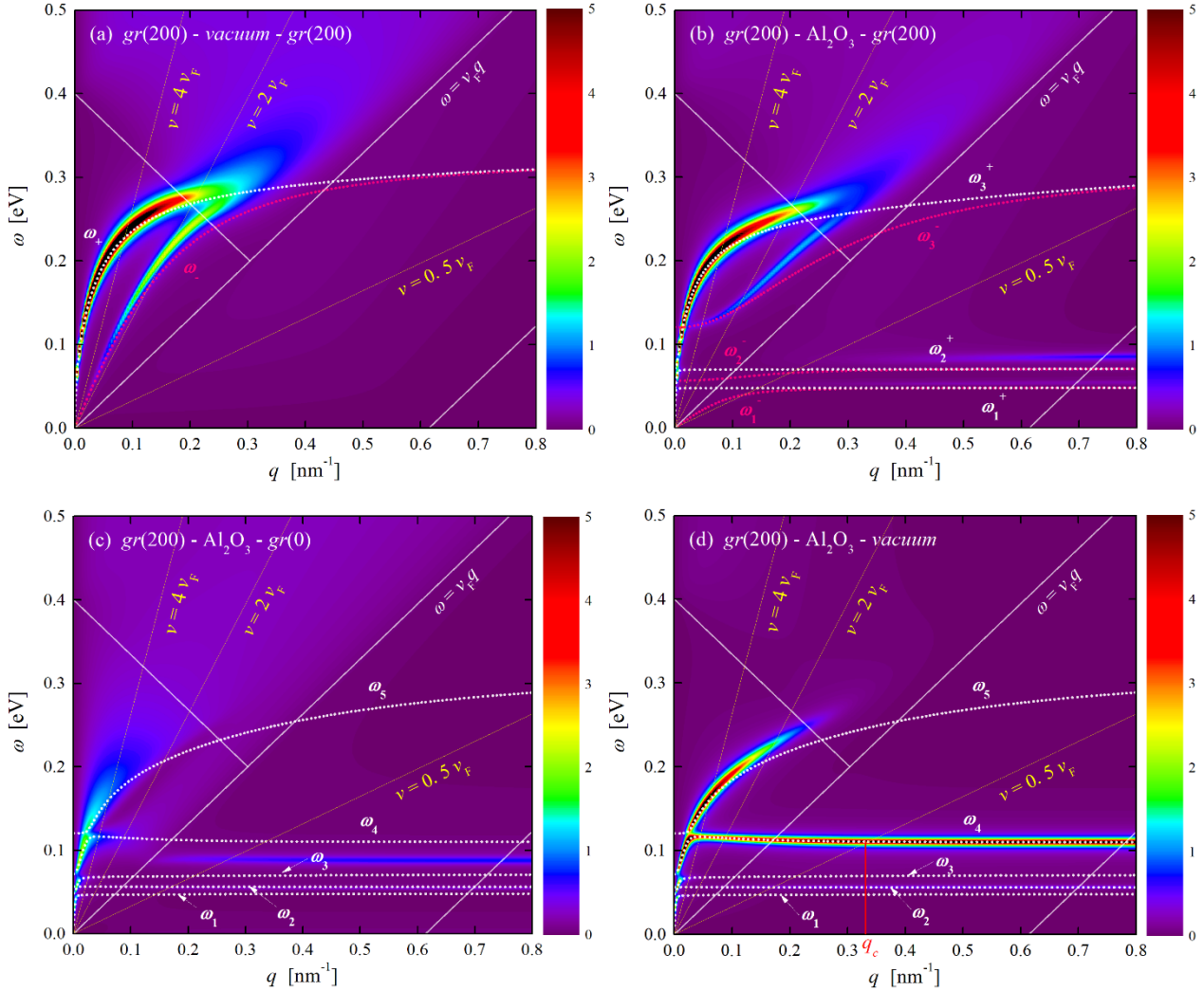
испод $q_c \sim 0,2 \text{ nm}^{-1}$, док се изнад те вредности два плазмонске гране спајају. Због симетричности посматраног система плазмонски модови могу бити класификовани као симетрични (парни) или антисиметрични (непарни). Роза и бела тачкаста линија на слици 6.1(a) показују дисперзионе релације непарне (ω_-), односно парне (ω_+) гране хибридованих Диракових плазмона који су аналитички израчунати користећи оптичку границу *MDF* модела. Слагање дисперзионих кривих линија и интензитета функције губитака добијене потпуним *MDF* моделом се погоршава за веће таласне бројеве ($q \geq 0,2 \text{ nm}^{-1}$), као што је и очекивано.

Уколико се стави изолатор између два слоја графена добија се функција губитака система $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ приказана на слици 6.1(b). С обзиром да сада сваки допиран графен подржава по један Дираков плазмон и да свака површина Al_2O_3 слоја подржава два ФК фонона, посматрани систем има укупно шест хибридованих модова. Тачкасте линије представљају дисперзионе релације тих модова које су израчунате користећи оптичку границу *MDF* модела: розе боје су три непарна мода (ω_1^- , ω_2^- и ω_3^-), а беле боје су три парна мода (ω_1^+ , ω_2^+ и ω_3^+). Шест дисперзионих кривих се веома добро слажу са интензитетима функције губитака. Две најинтензивније плазмонске гране (ω_{\pm}^{\pm}) представљају модификације хибридизације Диракових плазмона (ω_{\pm}) у високофреквентној области са слике 6.1(a) која је проузрокована присуством Al_2O_3 супстрата. Непарна грана ω_3^- се савија према коначној вредности фреквенције у дуготаласној граници ($q \rightarrow 0$) због интеракције са поларизацијом изолатора. На четири доње гране ($\omega_{1,2}^{\pm}$) се види доминантан утицај површинских фононских модова што се закључује из чињенице да они постају дегенерисани за $q \geq q_c = 0,2 \text{ nm}^{-1}$ и теже вредностима прве и друге ТО фононске фреквенције у волуминозном материјалу, односно $\omega_1^+ \approx \omega_{TO1} = 48 \text{ meV}$ и $\omega_2^+ \approx \omega_{TO2} = 71 \text{ meV}$, респективно. Две слабе хоризонталне линије које се виде доле десно на функцији губитака представљају два ФК фононска мода, која би одговарала површинским оптичким ТО модовима полубесконачног Al_2O_3 слоја прекривеног слојем графена, са поларизацијом израчунавом у статичкој краткоталасној граници.

На слици 6.1(c) је приказана функција губитака асиметричног $gr(200) - Al_2O_3 - gr(0)$ композита. У овом систему Дираков плазмон из једног слоја допираног графена и четири површинска ТО фонона са две површине Al_2O_3 изолатора се хибридују у пет модова чије су дисперзионе релације приказане белим тачкастим линијама. Поређењем са сликом 6.1(b) очигледно је да замена допираног графена недопираним јако утиче на интензитет Дираковог плазмона. Будући да недопирани графен не подржава Дираков плазмон, грана хибридизације ω_3^- видљива на слици 6.1(b) нестаје на слици 6.1(c). Такође, присуство недопираног графена практично уништи плазмонску грану ω_5 (која се појављује као ω_3^+ на слици 6.1(b)) због свог јаког Ландауовог пригушења међузонским $\pi \leftrightarrow \pi^*$ прелазима у чистом графену, у региону $\omega > v_F q$. Даље, дегенерација између четири фононске дисперзионе гране нестаје због асиметрије у допирању слојева графена, тј. њихова стања се раздвајају по енергијама, те су им вредности вертикално померене. Интензитет хоризонталних линија у функцији губитака за велике q вредности је мало јачи на слици 6.1(c) него на слици 6.1(b).

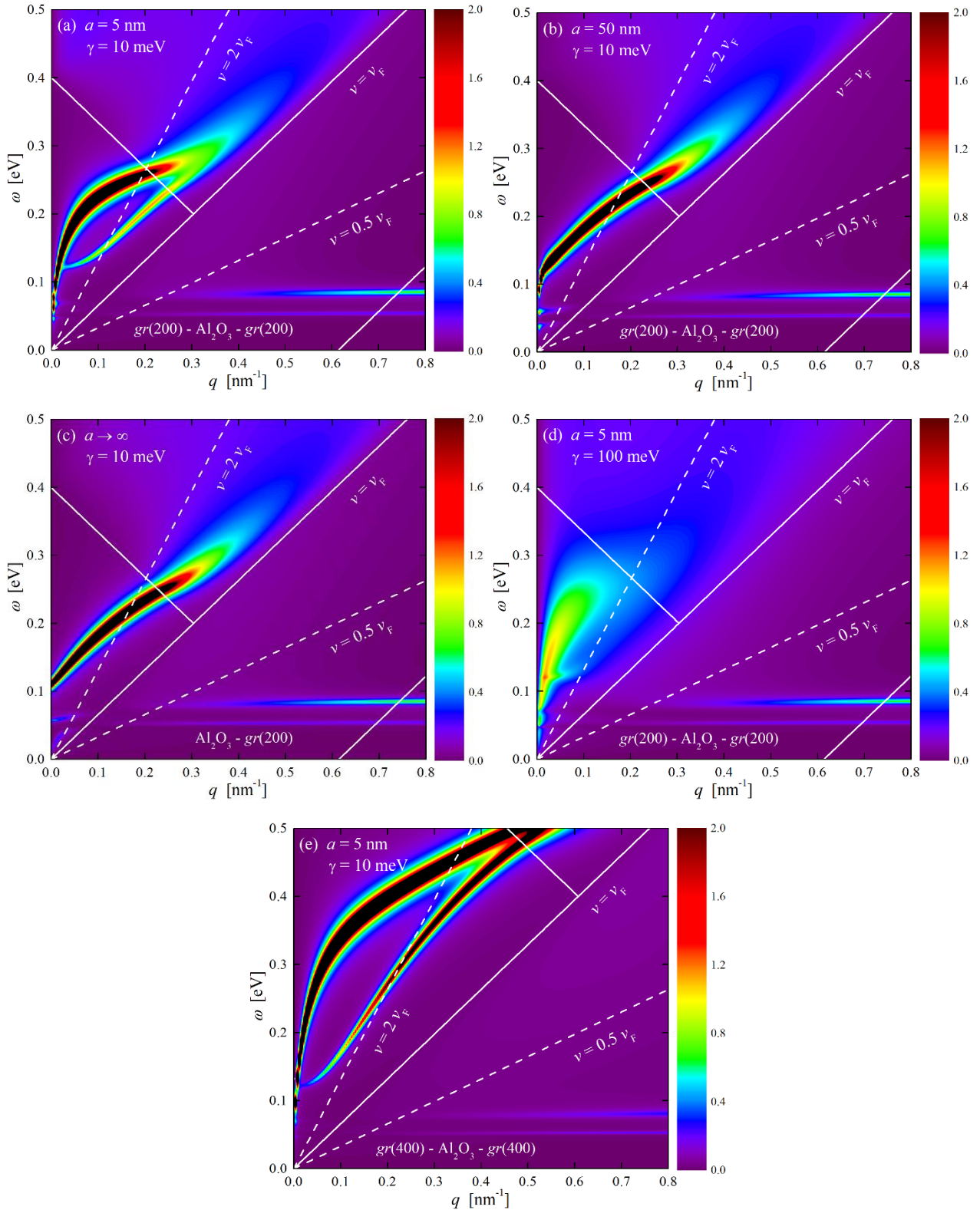
На слици 6.1(d) је приказана функција губитака $gr(200) - Al_2O_3 - vacuum$ композита. Слично као на слици 6.1(c), Дираков плазмон и четири површинска ТО фонона се хибридују у пет модова чије су дисперзионе релације означене белим тачкастим линијама. Овде треба нагласити да се уклањањем графена са горње површине изолатора драстично мења интензитет функције губитака. Прво, зато што више нема Ландауовог пригушења у области $\omega > v_F q$, Дираков плазмон ω_5 поново постаје изражен и доминантан за мање таласне бројеве,

$q \leq 0,3 \text{ nm}^{-1}$. Друго, грана површинског фонона $\omega_4 \approx 110 \text{ meV}$ постаје веома интензивна за све таласне бројеве q [68].



Слика 6.1. Функције губитака у симетричним (а) $gr(200) - vacuum - gr(200)$ и (б) $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ системима. Розе тачкасте линије представљају дисперзионе релације непарних (ω_-) плазмон-фонон модова, док беле тачкасте линије представљају дисперзионе релације парних (ω_+) модова. Даље су приказане функције губитака у асиметричним (с) $gr(200) - Al_2O_3 - gr(0)$ и (д) $gr(200) - Al_2O_3 - vacuum$ композитима. Беле тачкасте линије представљају дисперзине релације пет хибризованих плазмон-фонон модова (ω_i где је $i = 1, \dots, 5$). Функције губитака су добијене користећи *MDF* метод, а дисперзионе релације су добијене у оптичкој граници *MDF* метода. Удаљеност између слојева графена (или дебљина Al_2O_3 слоја) је $a = 5 \text{ nm}$, а густина носилаца наелектрисања у графену одговара Фермијевој енергији од 200 meV . Танке беле линије указују на доњу и горњу границу унутарзонских $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$ прелаза и на доњу границу међузонских $\pi \leftrightarrow \pi^*$ електрон-шупљина ексцитација у апроксимацији Дираковог конуса. Танке жуте линије представљају $\omega = q_x v$ праве за брзине упадне наелектрисане честице $v/v_F = 0,5, 2, 4$. На последњем панелу је обележена вредност (q_c) пресека праве $\omega = 0,5 v_F q_x$ и најинтензивније вредности функције губитака [68].

У наставку следи опис функција губитака једне изабране конфигурације композита, $gr(E_F) - Al_2O_3 - gr(E_F)$, са различитим унутрашњим параметрима: дебљина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$, $a = 50 \text{ nm}$ или $a \rightarrow \infty$; коефицијент пригушења плазмона у графену је $\gamma = 10 \text{ meV}$ или $\gamma = 100 \text{ meV}$; а густина допирања оба слоја графена, односно њихова Фермијева енергија је $E_F = 200 \text{ meV}$ или $E_F = 400 \text{ meV}$.



Слика 6.2. Функција губитака за графен- Al_2O_3 -графен композитни систем са параметрима: (a) удаљеност између два слоја графена је $a = 5 \text{ nm}$, коефицијент пригушења плазмона у оба графена је $\gamma = 10 \text{ meV}$, Фермијева енергија у оба графена је $E_F = 200 \text{ meV}$, (b) $a = 50 \text{ nm}$, $\gamma = 10 \text{ meV}$ и $E_F = 200 \text{ meV}$, (c) $a \rightarrow \infty$, $\gamma = 10 \text{ meV}$ и $E_F = 200 \text{ meV}$, (d) $a = 5 \text{ nm}$, $\gamma = 100 \text{ meV}$ и $E_F = 200 \text{ meV}$ и (e) $a = 5 \text{ nm}$, $\gamma = 10 \text{ meV}$ и $E_F = 400 \text{ meV}$. Беле линије означавају криве $\omega = 2E_F - \nu Fq$, $\omega = \nu Fq$ и $\omega = \nu F(q - 2k_F)$. Беле испрекидане линије означавају праве $\omega = 0,5\nu Fq$ и $\omega = 2\nu Fq$ [69].

На слици 6.2 су приказане функције губитака одабраног система графен – Al₂O₃ – графен са различитим параметрима који карактеришу сваки од система. Беле линије показују доњу, $\omega = v_F(q - 2k_F)$, и горњу, $\omega = v_F q$, ивицу унутарзонског континуума $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$ електроншупљина ексцитација, као и доњу ивицу, $\omega = 2E_F - v_F q$, међузонског $\pi \leftrightarrow \pi^*$ континуума. Беле испрекидане линије означавају $\omega = vq$ праве које представљају брзину упадне наелектрисане честице од $v = 0,5v_F$ и $v = 2v_F$.

На слици 6.2(a) је приказана функција губитака система са следећим параметрима: дебљина Al₂O₃ слоја је $a = 5$ nm, коефицијент пригушења плазмона у слојевима графена је $\gamma = 10$ meV и Фермијева енергија оба слоја графена је $E_F = 200$ meV. Ово је систем са слике 6.1(b) и његова функција губитака је претходно описана. Уколико се дебљина Al₂O₃ слоја повећа на $a = 50$ nm добија се систем чија је функција губитака приказана на слици 6.2(b). Овде је дебљина изолатора довољно велика тако да Диракови плазмони могу само веома слабо међусобно да интерагују, те су две плазмонске гране спојене у једну која је видљива на слици. Даљим повећавањем дебљине до бесконачности ($a \rightarrow \infty$) добија се систем који више није симетричан и цела структура се састоји од полубесконачног диелектрика са једним слојем графена на врху. Хибридизација између Дираковог плазмона и два ТО фонона је довољно јака за мале вредности q тако да се плазмонска грана савија ка коначној фреквенцији ($\omega \approx 0,11$ eV), а доња фононска грана тежи вредности нула, као што је приказано на слици 6.2(c). Овде треба напоменути да су хоризонталне линије које се виде на сликама 6.2(a–c) за вредности $q > 0,2$ nm⁻¹, а које одговарају ФК фононским модовима, независне од дебљине Al₂O₃ слоја. Враћањем на конфигурацију првог система приказаног на слици 6.2(a), у којој је дебљина Al₂O₃ слоја $a = 5$ nm и Фермијева енергија $E_F = 200$ meV, али са повећавањем коефицијента пригушења на $\gamma = 100$ meV, добија се функција губитака приказана на слици 6.2(d). Уочава се да повећање коефицијента пригушења плазмона смањује интензитете Диракових плазмона, тако да су две плазмонске гране практично уништене. На слици 6.2(e) је приказана функција губитака система у којем је дебљина Al₂O₃ слоја $a = 5$ nm, коефицијент пригушења плазмона је $\gamma = 10$ meV, али је Фермијева енергија сада $E_F = 400$ meV. Повећавањем Фермијевог енергије повећава се и област у којој су могући колективни модови, па су интензитети фононских грана слабији у односу на све претходне случајеве [69].

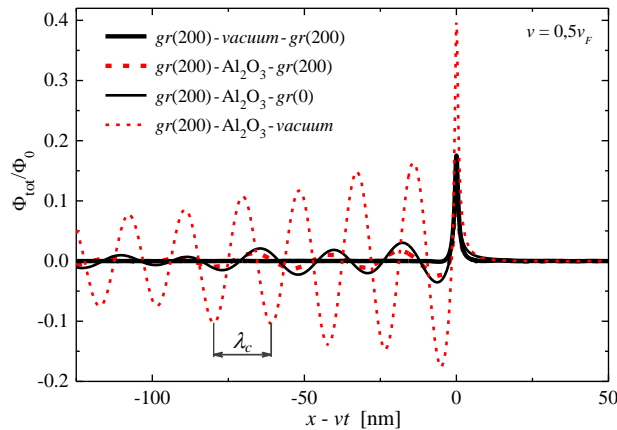
6.1. Ефекат таласа у потенцијалу

Ефекат таласа који настаје у индукованом потенцијалу када наелектрисана честица прође паралелно изнад композитног система графен-изолатор-графен прво ће се анализирати разматрањем различитих конфигурација споменутог система, а затим мењањем параметара у оквиру појединачних композита. Резултантни потенцијал је приказан у односу на покретни систем који је везан за упадну честицу, тј. за протон ($Z = 1$) и који је нормиран потенцијалом $\Phi_0 = Ze/b$. Упадна наелектрисана честица се креће брзинама које су у ниском режиму (испод v_F , односно $v = 0,5v_F$), средњем (изнад v_F , тј. $v = 2v_F$) и високом (знатно изнад v_F , односно $v = 4v_F$). Када се посматрају различите конфигурације система, параметри који их карактеришу су фиксни, односно растојање између слојева графена је $a = 5$ nm, графен је или недопиран или допиран тако да му је Фермијева енергија $E_F = 200$ meV, коефицијент пригушења плазмона је $\gamma = 10$ meV, а удаљеност упадне наелектрисане честице од система је $b = 0,5$ nm. Када је конфигурација фиксна мењају се параметри: дебљина Al₂O₃ слоја је $a = 5$ nm, $a = 50$ nm или $a \rightarrow \infty$, коефицијент пригушења плазмона у графену је $\gamma = 10$ meV или $\gamma = 100$ meV, густина допирања графена, односно његова Фермијева енергија је $E_F = 200$ meV или $E_F = 400$ meV, а удаљеност упадне честице од система је $b = 0,5$ nm или

$b = 2$ nm. Ефекат таласа се манифестује као осцилације у потенцијалу које прате протон ($x - vt < 0$).

6.1.1. Режим ниских брзина

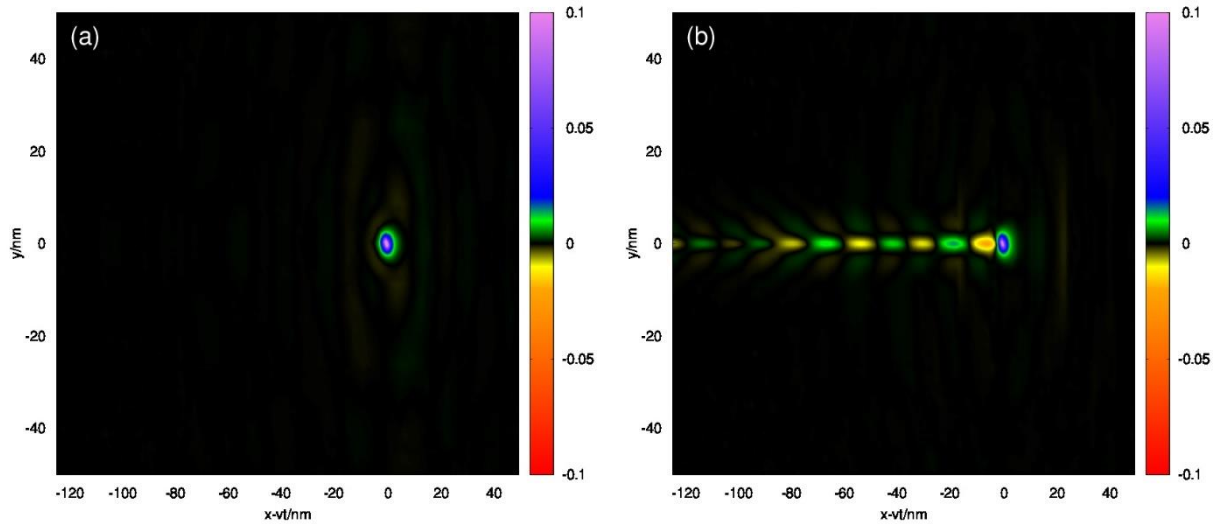
На слици 6.3 је приказан ефекат таласа у четири претходно наведене конфигурације композита када се упадна честица креће на удаљености $b = 0,5$ nm од горњег слоја графена брзином $v = 0,5v_F$, док је растојање између слојева графена $a = 5$ nm. Укупни потенцијал је приказан као функција од x за $y = 0$ и $z = a/2$ равни. Дебела црна линија показује укупни потенцијал у $gr(200) - vacuum - gr(200)$ структури и на њој се види само један оштар екстремум око позиције наелектрисане честице ($x = vt$). У овом случају упадна честица не производи таласе иза себе зато што је њена брзина испод фазне брзине два хибридоизована Диракова плазмона, као што се и види на слици 6.1(a), тј. права $v = 0,5v_F$ не сече максималне интензитете у функцији губитака посматраног система. Дебела испрекидана линија на слици 6.3 представља потенцијал када је Al_2O_3 између два слоја допираног графена, тј. у систему $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$. У овом систему права $v = 0,5v_F$ пресеца две ТО фононске гране слабог интензитета (што се види на слици 6.1(b)), те наелектрисана честица изазива релативно слабе поларизационе таласе. Танка црна линија представља потенцијал у $gr(200) - Al_2O_3 - gr(0)$ композиту. Графен најближи наелектрисаној честици више није допиран, тако да је екранирање ТО фонона слабије, што резултира јачим осцилацијама у потенцијалу. То је очигледно са слике 6.1(c) на којој се може видети да права $v = 0,5v_F$ пресеца хоризонталну фононску линију у функцији губитака која је много јача него одговарајућа фононска линија са слике 6.1(b). Танка црвена испрекидана линија показује ефекат таласа у $gr(200) - Al_2O_3 - vacuum$ структури. Сада су амплитуде ефекта таласа веће у поређењу са осталим случајевима јер се уклањањем горњег слоја графена оставља потпуно неекранирано електрично поље које побуђује површинске ТО фононе у Al_2O_3 слоју. До овог закључка се може доћи и посматрајући интензитет фононске гране ω_4 са слике 6.1(d).



Слика 6.3. Потенцијал код система $gr(200) - vacuum - gr(200)$ (дебела црна линија), $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (дебела црвена испрекидана линија), $gr(200) - Al_2O_3 - gr(0)$ (танка црна линија) и $gr(200) - Al_2O_3 - vacuum$ (танка црвена испрекидана линија). Растојање између слојева графена је $a = 5$ nm, брзина упадне наелектрисане честице је $v = 0,5v_F$ и њена удаљеност од горњег слоја графена је $b = 0,5$ nm [68].

Да би се истражила просторна расподела ефекта таласа у индукованом потенцијалу, на слици 6.4 је приказан потенцијал у $z = a/2$ равни за системе $gr(200) - vacuum - gr(200)$ и $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$, тј. за симетричне системе са и без изолатора Al_2O_3 између слојева графена. Уколико се наелектрисана честица креће изнад два слоја допираног графена, потенцијал приказан на слици 6.4(a) се састоји само од анизотропног уског екстремума који

је лоциран око $x = vt$. Уколико се слој Al_2O_3 стави између два допирана графена, потенцијал приказан на слици 6.4(b) има таласе иза упадне честице. Оно што је интересно јесте да је ефекат таласа локализован одмах иза путање упадне честице без икаквог приметног проширења. Овако уска расподела таласа изгледа да указује на ефекат таласа који доминантно потиче од фонона.



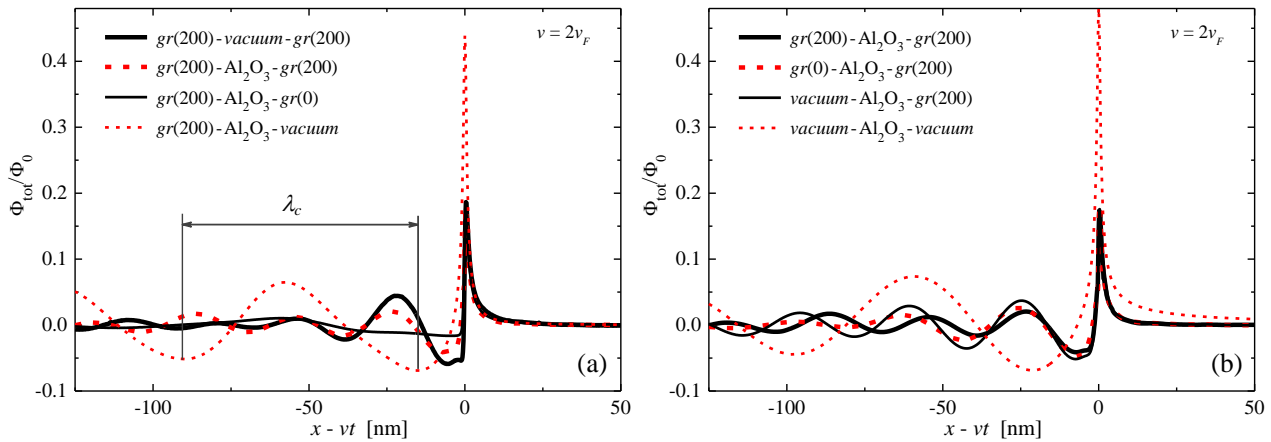
Слика 6.4. Просторна расподела ефекта таласа у потенцијалу у равни $z = a/2$ за (a) $gr(200) - vacuum - gr(200)$ и (b) $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(200)$ композите. Растојање између слојева графена је $a = 5 \text{ nm}$, брзина упадне честице је $v = 0,5v_F$ и њена удаљеност од структура је $b = 0,5 \text{ nm}$ [68].

Да се закључи, у ниском режиму брзина осцилације у потенцијалу потичу од ексцитација површинских ТО фонона, а њихова амплитуда зависи од јачине ТО фонона, односно од њиховог екранирања слојем графена. Карактеристична таласна дужина осцилација може да се одреди помоћу критичног таласног броја за који права $\omega = qv$ пресеца најинтензивнију фононску дисперзиону релацију, $\lambda_c = 2\pi/q_c$. Карактеристични таласни број q_c је означен на примеру система са слике 6.1(d) када права $v = 0,5v_F$ пресеца фононску грану ω_4 за $q_c = 0,34 \text{ nm}^{-1}$. На основу претходне једначине се добија да је $\lambda_c = 18,5 \text{ nm}$. С друге стране, таласна дужина одређена директним мерењем растојања минимума танке испрекидане црвене линије на слици 6.3 износи $\lambda_c = 18,9 \text{ nm}$. У овом режиму брзина потенцијал у равни $z = a/2$ је скоро потпуно независан од поларизације која је локализована на супротној страни структуре у равни $z = -a/2$. Стога, када се наелектрисана честица креће брзином $v < v_F$ структура може да се посматра као површина полубесконечног диелектрика, који је или слободан или прекривен слојем графена. Ово неће бити случај када је $v > v_F$, што ће бити показано у наредним одељцима.

6.1.2. Режим средњих брзина

На слици 6.5 је приказан ефекат таласа у потенцијалу код композита у којима је раздаљина између два слоја графена $a = 5 \text{ nm}$, а наелектрисана честица се креће на удаљености од $b = 0,5 \text{ nm}$ од горњег слоја графена брзином $v = 2v_F$. Прво су посматране исте конфигурације композитних система као у режиму ниских брзина. У случају два допирана графена са вакуумом између њих (дебела црна линија на слици 6.5(a)) у потенцијалу се види ефекат таласа који прати наелектрисану честицу. Те осцилације представљају поларизационе таласе који настају ексцитацијама два хибридизована Диракова плазмона, што се може видети

на слици 6.1(a) где права $v = 2v_F$ пресеца дисперзионе криве тих плазмона. Када се слој Al_2O_3 налази између два допирана графена (дебела црвена испрекидана линија), прве две осцилације у потенцијалу су благо пригушене. Ово пригушење је последица хибридације Диракових плазмона са површинским ТО фононима због које доња грана Дираковог плазмона ω_3^- има коначну вредност фреквенције за $q \rightarrow 0$. Такође, упоређивањем слика 6.1(a) и 6.1(b) види се да права $\omega = qv$ пресеца доњу грану хибридације Диракових плазмона на мањој вредности q_c на којој је интензитет овог мода мањи. Када горњи слој графена више није допиран (танка црна линија), нема осцилација које би потицале од хибридације два јака Диракова плазмона, тако да остаје веома слаб талас са поприлично великом таласном дужином. У овом случају нема плазмонске гране ω_3^- (са слике 6.1(b)), а преостали Дираков плазмон из доњег слоја графена (плазмонска грана ω_5 на слици 6.1(c)) је пригушен међузонским $\pi \leftrightarrow \pi^*$ прелазима из горњег слоја недопираног графена. Као резултат, права $v = 2v_F$ пресеца веома слаб и широк Дираков плазмон, тако да брзе осцилације нестају из ефекта таласа у потенцијалу. Додатно, недопирани графен екранира површинске ТО фононе тако да добијени ефекат таласа има велику таласну дужину. Када се потпуно уклони горњи слој графена из система, осцилације у потенцијалу постају јаче као што се и види на танкој црвеној испрекиданој линији на слици 6.5(a). У овој конфигурацији права $v = 2v_F$ пресеца јак неекраниран површински фононски мод ω_4 , али и грану Дираковог плазмона ω_5 , што се види са слике 6.1(d). Главни допринос ефекту таласа потиче од најинтензивнијих структура присутних у функцији губитака које пресеца права $v = 2v_F$, што је у овом случају грана ω_4 површинског ТО фононског мода. Наиме, таласна дужина за $q_c = 0,087 \text{ nm}^{-1}$ јесте $\lambda_c = 2\pi/q_c = 72 \text{ nm}$ и веома добро се слаже са таласном дужином $\lambda_c \approx 75 \text{ nm}$ која се добија директно са слике 6.5(a), што значи да доминантан допринос ефекту таласа у потенцијалу потиче од фонона.

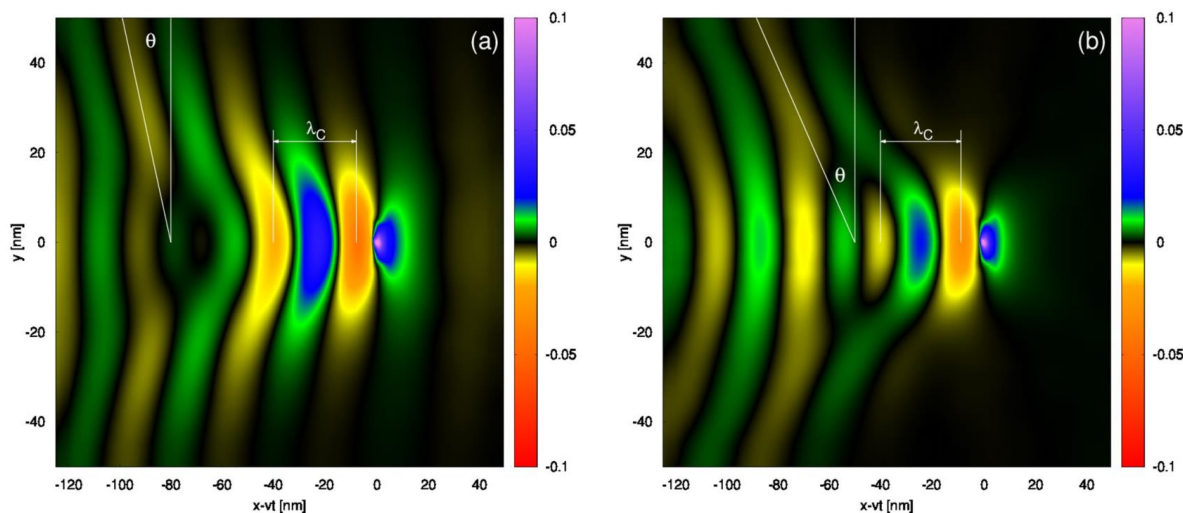


Слика 6.5. Ефекат таласа у потенцијалу у системима (a) $gr(200) - vacuum - gr(200)$ (дебела црна линија), $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(200)$ (дебела црвена испрекидана линија), $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(0)$ (танка црна линија), $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - vacuum$ (танка црвена испрекидана линија) и (b) $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(200)$ (дебела црна линија), $gr(0) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(200)$ (дебела црвена испрекидана линија), $vacuum - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(200)$ (танка црна линија), $vacuum - \text{Al}_2\text{O}_3 - vacuum$ (танка црвена испрекидана линија). Растојање између слојева графена или дељина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$, брзина упадне честице је $v = 2v_F$, а њена удаљеност је $b = 0,5 \text{ nm}$ [68].

Са слике 6.1 се види да када је брзина упадне честице $v = 2v_F$ права $\omega = qv$ пресеца све дисперзионе криве за $q < 0,2 \text{ nm}^{-1}$. С обзиром да је дељина Al_2O_3 слоја $a = 5 \text{ nm}$ и да интеракција између модова који су локализовани на супротним странама структуре зависи као $e^{-2qa} > e^{-2}$, што је довољно да омогући јаку хибридацију Диракових плазмона, потенцијал у равни $z = a/2$ зависи од конфигурације површине у равни $z = -a/2$. Да би се истражио овај аспект проблема разматране су и следеће конфигурације система приказане на слици 6.5(b):

$gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (дебела црна линија), $gr(0) - Al_2O_3 - gr(200)$ (дебела црвена испрекидана линија), $vacuum - Al_2O_3 - gr(200)$ (танка црна линија), $vacuum - Al_2O_3 - vacuum$ (танка црвена испрекидана линија). Поређењем дебелих црвених испрекиданих линија са слика 6.5(a) и 6.5(b) може се видети да се заменом доњег слоја допираног графена недопираним ефекат таласа у потенцијалу не мења драстично. Овом заменом остаје само плазмонски мод који личи на грану ω_3^+ са слике 6.1(b) и који доприноси ефекту таласа, што се огледа у благој промени фазе осцилација потенцијала у односу на случај када ефекат таласа потиче од хибридизације два Диракова плазмона. Такође, међузонски $\pi \leftrightarrow \pi^*$ прелази у недопираном графену проширују ω_3^+ плазмонски мод због Ландауовог пригушења тако да ефекат таласа постаје слабији у региону далеко иза упадне честице. Када се из равни $z = -a/2$ уклони недопирани графен међузонски $\pi \leftrightarrow \pi^*$ прелази нестају, те нема више Ландауовог пригушења Дираковог плазмона који потиче из допираног графена у равни $z = a/2$, тако да ефекат таласа постаје јачи, што се види на танкој црној линији на слици 6.5(b). Коначно, уклањањем оба слоја графена са посматране структуре остаје потпуно неекранирано електрично поље упадне честице које побуђује површинске ТО фононе (слично грани ω_4 са слике 6.1(d)). Стога су осцилације у потенцијалу јако изражене, што је приказано танком црвеном испрекиданом линијом на слици 6.5(b). Сличан ефекат се дешава када се уклони само горњи слој графена који је најближи наелектрисаној честици, као што је већ приказано танком црвеном испрекиданом линијом на слици 6.5(a).

На слици 6.6(a) је приказана просторна расподела ефекта таласа у потенцијалу у равни $z = a/2$ у $gr(200) - vacuum - gr(200)$ композиту где је раздаљина између слојева графена $a = 5$ nm, брзина упадне честице је $v = 2v_F$ и њена удаљеност од горњег слоја графена је $b = 0,5$ nm. Таласна дужина поларизационих таласа је $\lambda_c = 32$ nm, што се слаже са таласном дужином од $\lambda_c = 30$ nm добијеном једначином $\lambda_c = 2\pi/q_c$ за таласни број $q_c = 0,21$ nm⁻¹. Вредност q_c је добијена пресеком праве $v = 2v_F$ и плазмонске гране ω_+ са слике 6.1(a) што показује да ефекат таласа у овој конфигурацији потиче од парне гране ω_+ хибридизованог Дираковог плазмона. Мало одступање простирања таласа од идеалног „V” облика чини „рупа” у области око $x = -70$ nm. Ова „рупа” је вероватно последица малог доприноса непарне ω_- плазмонске гране која узрокује локалну деструктивну интерференцију са главним осцилацијама које потичу од парног ω_+ мода.

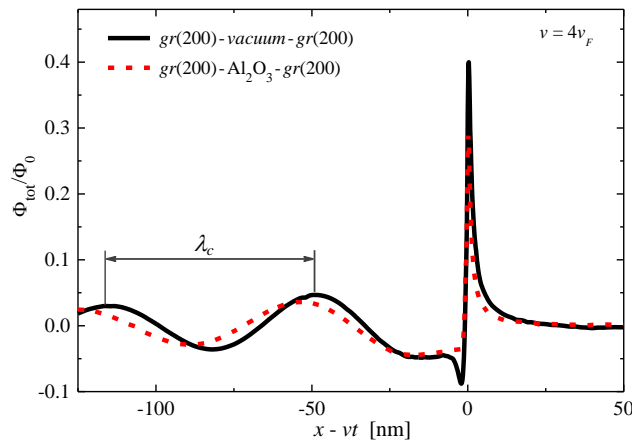


Слика 6.6. Просторна расподела ефекта таласа у потенцијалу у равни $z = a/2$ за (a) $gr(200) - vacuum - gr(200)$ и (b) $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ композите. Растојање између слојева графена је $a = 5$ nm, брзина упадне честице је $v = 2v_F$ и њена удаљеност од структура је $b = 0,5$ nm [68].

На слици 6.6(b) је приказана просторна расподела ефекта таласа у потенцијалу код $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ композита. Са слике 6.1(b) је очигледно да права $v = 2v_F$ не пресеца ниједну изражену фононску грану, тако да фонони нису одговорни за одлике таласног ефекта у потенцијалу са слике 6.6(b). У овом случају гране хибридризованих Диракових плазмона ω_3^\pm дају главни допринос овим одликама. Диелектрични слој Al_2O_3 смањује амплитуду осцилација у области одмах иза наелектрисане честице јер екранира интензитет хибридизације Диракових плазмона мењајући модове ω_\pm приказане на слици 6.1(a) у гране ω_3^\pm са слике 6.1(b). Додатно, присуство ТО фононских модова савија ω_3^- плазмонску грану ка коначној фреквенцији када $q \rightarrow 0$, тако да права $\omega = qv$ пресеца криву ω_3^- на мањој вредности q_c него што је то било у случају њеног пресека са плазмонском граном ω_- . Последице, доприноси ω_3^- гране кваре идеалан „V” облик у простору око $x = -50$ nm на другачији начин од „рупе” са слике 6.6(a) коју узрокује ω_- плазмонска грана. Такође, може се приметити са слике 6.6 да се угао θ таласног фронта облика „V” повећава када се диелектрик налази између слојева графена.

6.1.3. Режим високих брзина

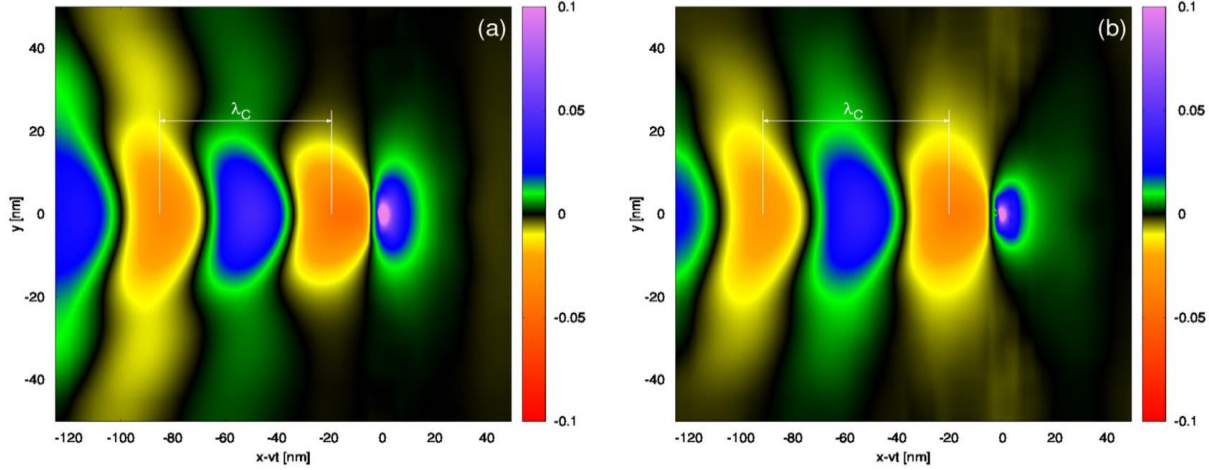
Како се брзина упадне честице даље повећава изнад Фермијеве брзине, таласни број q_c за који права $\omega = qv$ пресеца интензитете Диракових плазмона на функцији губитака се смањује, односно карактеристична таласна дужина осцилација λ_c у потенцијалу се повећава. На слици 6.7 је приказан ефекат таласа у потенцијалу код $gr(200) - vacuum - gr(200)$ (црна линија) и $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (црвена испрекидана линија) композита кад је брзина упадне честице $v = 4v_F$. Са слике 6.1(a) се види да права $v = 4v_F$ не пресеца грану ω_- , тако да једини допринос ефекту таласа потиче од плазмонског ω_+ мода. Као резултат добија се једноставан талас чија се таласна дужина добијена са слике 6.7 од $\lambda_c = 66$ nm добро слаже са дужином од $\lambda_c = 2\pi/q_c = 69$ nm за $q_c = 0,09$ nm⁻¹ за које права $v = 4v_F$ пресеца ω_+ грану, али који има уски минимум одмах иза наелектрисане честице. Када се слој изолатора убаци између слојева графена права $v = 4v_F$ пресеца и ω_3^+ и ω_3^- грану (са слике 6.1(b)), али не долази до великих промена у одликама потенцијала. Наиме, уски минимум нестаје и таласна дужина се благо повећа на $\lambda_c = 72$ nm.



Слика 6.7. Ефекат таласа у потенцијалу у системима $gr(200) - vacuum - gr(200)$ (дебела црна линија) и $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (дебела црвена испрекидана линија). Растојање између слојева графена или дебљина Al_2O_3 слоја је $a = 5$ nm, брзина упадне честице је $v = 4v_F$, а њена удаљеност је $b = 0,5$ nm [68].

На слици 6.8(a) је приказана просторна расподела ефекта таласа у потенцијалу за $gr(200) - vacuum - gr(200)$ систем. У региону $|y| \leq 20$ nm уочава се правилан „V” облик. Међутим, у региону $|y| \geq 20$ nm примећује се необичан секундарни „V” облик са већим углом

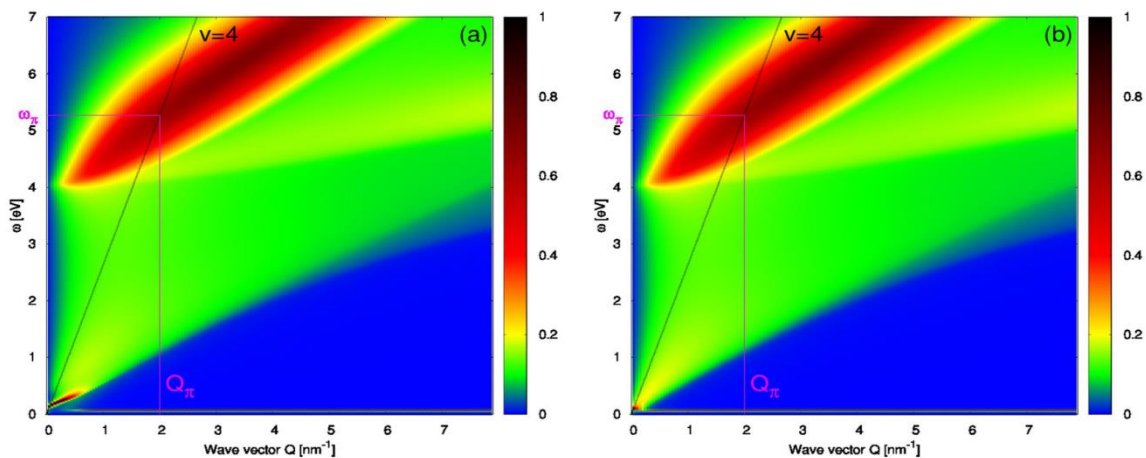
θ у односу на примарни „V” облик. Овај широки секундарни облик могао би се приписати нерезонантном доприносу ω_- плазмонске гране. На слици 6.8(b) је приказана просторна расподела посматраног композита када се слој Al_2O_3 налази између слојева графена. Мала разлика се види у региону $-40 \text{ nm} \leq x - vt \leq 0$ где је шира расподела секундарног „V” облика.



Слика 6.8. Просторна расподела ефекта таласа у потенцијалу у равни $z = a/2$ у системима (a) $gr(200) - \text{vacuum} - gr(200)$ и (b) $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(200)$. Растојање између слојева графена или дељина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$, брзина упадне честице је $v = 4v_F$, а њена удаљеност је $b = 0,5 \text{ nm}$ [68].

Потенцијал добијен *ab initio* и *eHD* моделима

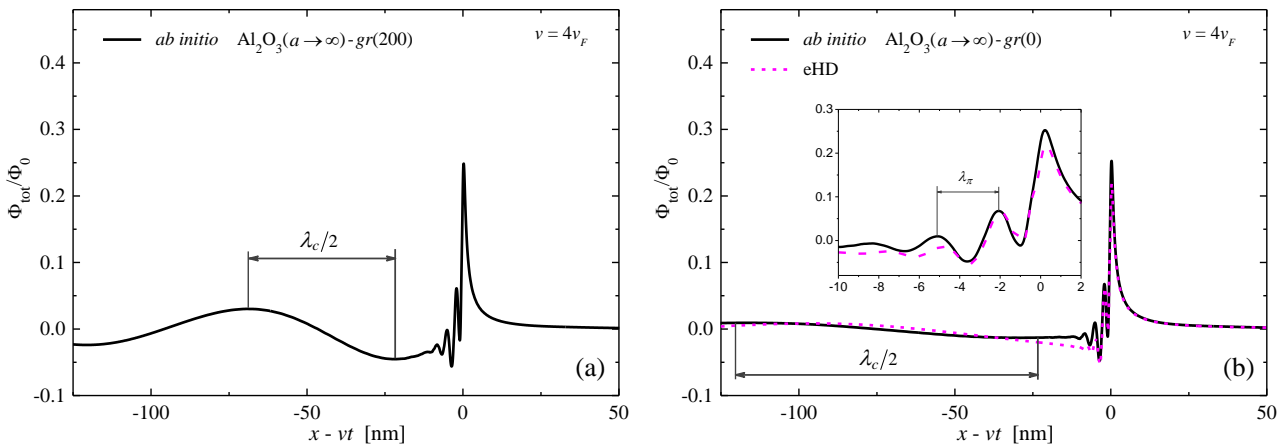
Као што је претходно показано, довољно је користити *MDF* метод када доминантне одлике ефекта таласа у потенцијалу потичу од хибридованих модова Дираковог плазмона и TO фонона у фреквенцијском опсегу од терахерца до средње инфрацрвене области. Међутим, за веће брзине упадне честице права $\omega = qv$ пресеца и високоенергетски π плазмон у графену који би могао да уведе нова обележја ефекту таласа у потенцијалу. Да би се уочила та обележја потребно је користити *ab initio* метод или, алтернативно, *eHD* модел који квалитативно описује $\pi \leftrightarrow \pi^*$ прелазе близу M тачака Брилуенове зоне, на енергији око $\omega \approx 4 \text{ eV}$. За анализу доприноса нових модова ефекту таласа посматра се полубесконачни диелектрик са једним слојем графена на врху. Такав систем може да подржи највише три плазмон-фонон хибридована мода и високоенергетски π плазмон.



Слика 6.9. Функција губитака у проширеној (q, ω) равни, добијена *ab initio* методом, за композите: (a) $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(200)$ и (b) $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(0)$. Вредности q_π и ω_π представљају таласни вектор и фреквенцију, респективно, за које права $v = 4 v_F$ пресеца центар π плазмона [68].

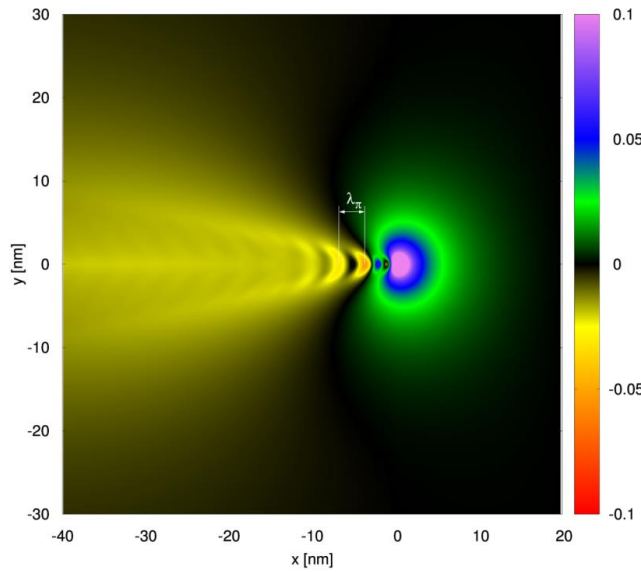
На слици 6.9 је приказана функција губитака добијена *ab initio* методом у проширеном (q, ω) простору за две конфигурације: (a) $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(200)$ и (b) $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(0)$. Функција губитака са допираним графеном има два главна плазмонска обележја: узак и интензиван нискоенергетски Дираков плазмон, који заузима јако мали део (q, ω) равни, и веома широк и снажан π плазмон. Функцијом губитака са недопираним графеном доминира π плазмон. На оба дијаграма функције губитака се уочавају нискоенергетске ТО фононске гране.

На слици 6.10 је приказан ефекат таласа у потенцијалу код (a) $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(200)$ и (b) $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(0)$ композита добијен *ab initio* методом (црне линије на оба панела) и *eHD* моделом (љубичаста испрекидана линија на десном панелу). У случају са допираним графеном виде се споре осцилације таласне дужине $\lambda_c = 92,6 \text{ nm}$ (на слици 6.10(a)) које одговарају ексцитацијама Дираковог плазмона. Осим тих спорих осцилација уочавају се и веома брзе осцилације у региону одмах иза наелектрисане честице. Исте осцилације се уочавају и на слици 6.10(b), када је допиран графен замењен недопираним, а прате их веома споре осцилације таласне дужине $\lambda_c \approx 180 \text{ nm}$, које одговарају ексцитацијама ТО фонона на малим таласним бројевима. Да би се објаснило порекло ових брзих осцилација на слици 6.10(b) је приказан увећан део потенцијала у опсегу од $-10 \text{ nm} < x - vt < 2 \text{ nm}$. Поређењем вредности $\lambda_\pi = 2\pi/q_\pi = 3,1 \text{ nm}$ за таласни број $q_\pi = 2 \text{ nm}^{-1}$, за који праве $v = 4v_F$ са слике 6.9 секу π плазмон, са таласном дужином $\lambda_\pi \approx 3 \text{ nm}$ добијеном мерењем између екстремума на слици 6.10(b), закључује се да брзе осцилације представљају обележје потенцијала које потиче од ексцитација π плазмона. Интересантно је напоменути да је помоћу једноставног *eHD* модела за оптичку проводност графена, у којем су прелази између π и π^* зона обухваћени са веома мало параметара, могуће добити врло добро слагање са *ab initio* резултатима, нарочито у региону близу упадне наелектрисане честице.



Слика 6.10. Ефекат таласа у потенцијалу код (a) $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(200)$ и (b) $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(0)$ композита добијен коришћењем *ab initio* методе (црне линије) и *eHD* модела (љубичаста испрекидана линија). Брзина наелектрисане честице је $v = 4v_F$, а њена удаљеност је $b = 0,5 \text{ nm}$ [68].

На слици 6.11 је приказана просторна расподела ефекта таласа у потенцијалу код $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(0)$ композита добијена *ab initio* методом за брзину упадне наелектрисане честице од $v = 4v_F$. Упркос дифузној позадини, која вероватно потиче од ширине π плазмона и/или проширеног континуума електрон-шупљина ексцитација за $\omega > qv_F$ са слике 6.9(b), може се приметити добро дефинисан „V” облик иза упадне честице, таласне дужине λ_π [68].

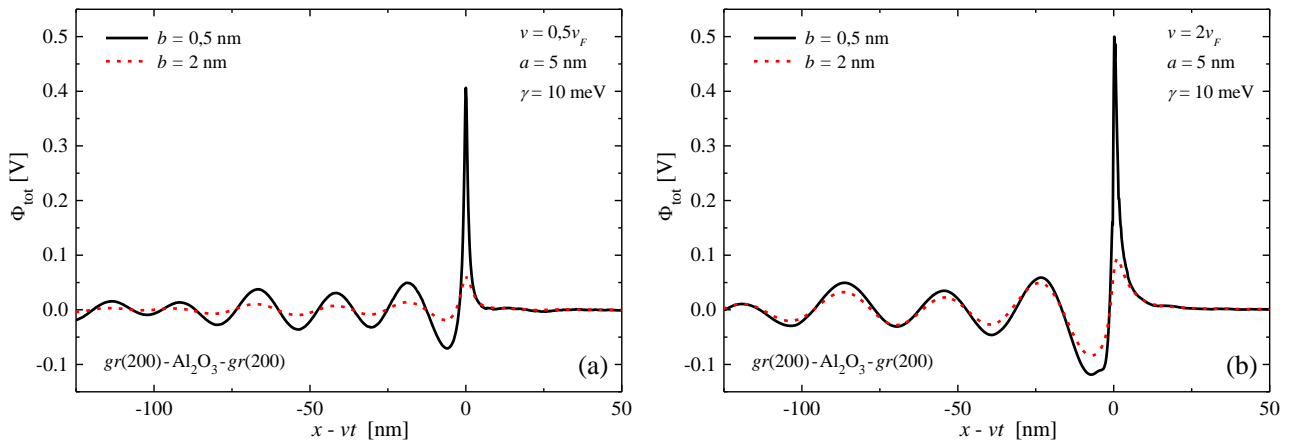


Слика 6.11. Просторна расподела ефекта таласа у равни $z = a/2$ за $\text{Al}_2\text{O}_3(a \rightarrow \infty) - gr(0)$ композит добијена *ab initio* методом. Брзина наелектрисане честице је $v = 4 v_F$, а њена удаљеност је $b = 0,5 \text{ nm}$ [68].

6.1.4. Зависност потенцијала од промене параметара система

У претходним пододељцима је показано да је за брзине упадне наелектрисане честице од $v = 0,5v_F$ и $v = 2v_F$ довољно користити само *MDF* метод, те је тако и урађено у овом пододељку. Прво су анализирани варијације спољашњег параметра, односно удаљености наелектрисане честице од графена, а затим промене унутрашњих параметара, тј. дебљине Al_2O_3 слоја, коефицијента пригушења плазмона и Фермијеве енергије у графену. Као репрезентативни примерак система графен – Al_2O_3 – графен изабран је композит са следећим унутрашњим параметрима: дебљина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$, коефицијент пригушења плазмона у графену је исти за оба слоја, $\gamma = 10 \text{ meV}$, и слојеви графена имају исту концентрацију носиоца наелектрисања, односно исту Фермијеву енергију $E_F = 200 \text{ meV}$, док је спољашњи параметар, удаљеност честице од система, $b = 0,5 \text{ nm}$.

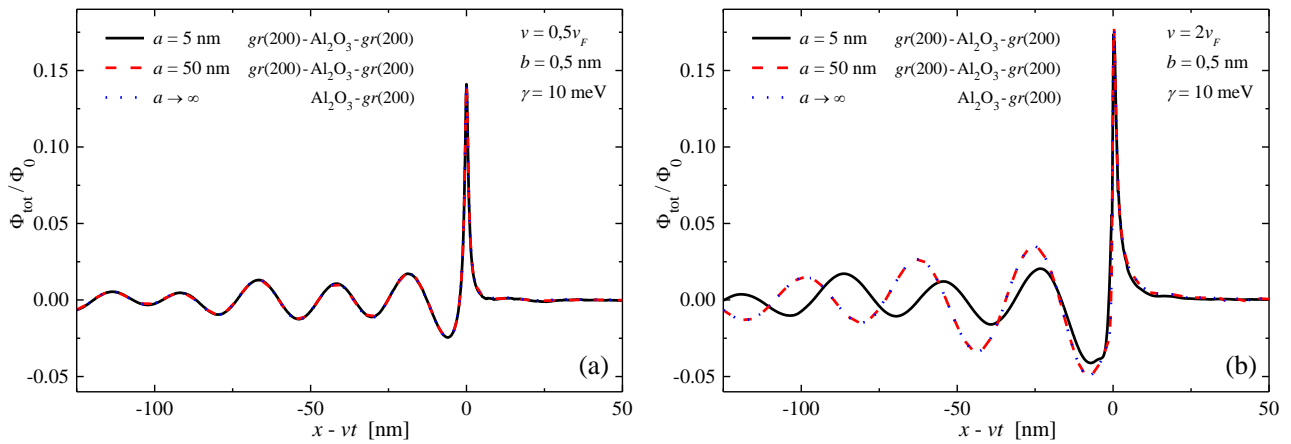
На слици 6.12 се упоређује ефекат таласа у потенцијалу за удаљености упадне честице од система $b = 0,5 \text{ nm}$ и $b = 2 \text{ nm}$, за две њене брзине (a) $v = 0,5v_F$ и (b) $v = 2v_F$. Амплитуда осцилација и висина екстремума око позиције честице ($x = vt$) се смањују са повећавањем удаљености честице од горњег слоја графена. На основу фактора e^{-qb} из једначине (5.2.9) може се закључити да повећавање вредности b узрокује смањење амплитуде ефекта таласа. Овај ефекат се боље уочава у случају када је брзина упадне честице $v = 0,5v_F$ него у случају $v = 2v_F$, зато што приликом веће брзине честице ефекат таласа потиче од ексцитација мањих таласних бројева q , те је последично ефекат мање осетљив на промену удаљености b . Генерално, екстремум је виши и осцилације су јаче у случају $v = 2v_F$, када доминантан допринос ефекта таласа потиче од хибридизованих Диракових плазмона, него у случају $v = 0,5v_F$ када *TO* фонони дају главни допринос ефекту таласа у потенцијалу. Карактеристичне таласне дужине осцилација не зависе од удаљености честице од система, а њихове бројне вредности одређене директно са слике 6.12 су $\lambda_c \approx 24 \text{ nm}$ за $v = 0,5v_F$ и $\lambda_c \approx 32 \text{ nm}$ за $v = 2v_F$.



Слика 6.12. Ефекат таласа у потенцијалу код $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ система када се упадна честица креће брзином (а) $v = 0,5 v_F$ и (б) $v = 2 v_F$. Њена удаљеност од система је $b = 0,5 \text{ nm}$ (црна линија) и $b = 2 \text{ nm}$ (црвена испрекидана линија). Дебљина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$, а коефицијент пригушења плазмона у графену је $\gamma = 10 \text{ meV}$ [69].

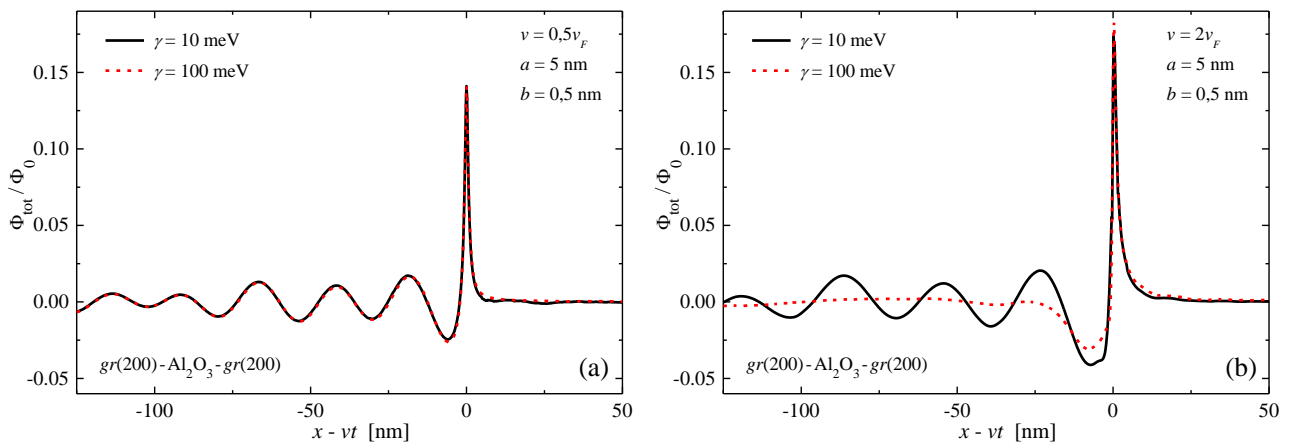
У следећим примерима спољашњи параметар је фиксиран на $b = 0,5 \text{ nm}$, а мењају се унутрашњи параметри.

На слици 6.13 је приказан ефекат таласа у потенцијалу када се наелектрисана честица креће брзинама (а) $v = 0,5 v_F$ и (б) $v = 2 v_F$, за композитне системе са три различите дебљине Al_2O_3 слоја: $a = 5 \text{ nm}$, $a = 50 \text{ nm}$ и $a \rightarrow \infty$. Коефицијент пригушења плазмона у графену је $\gamma = 10 \text{ meV}$ и Фермијева енергија је $E_F = 200 \text{ meV}$. У случају $v = 0,5 v_F$ (слика 6.13(а)) ефекат таласа је исти за све дебљине Al_2O_3 слоја. Овај резултат је и очекиван јер праве $v = 0,5 v_F$ са слика 6.2(а-с) не пресецају плазмонске гране и ефекат таласа у потенцијалу потиче од две фононске гране. Ове фононске гране имају исти интензитет у сва три случаја тако да су амплитуде осцилација у ефекту таласа једнаке. Такође, у сва три случаја праве пресецају најинтензивнију ФК фононску грану за исти критичан таласни број што значи да су карактеристичне таласне дужине осцилација једнаке, $\lambda_c \approx 24 \text{ nm}$. У случају $v = 2 v_F$ (слика 6.13(б)) ефекат таласа је исти за $a = 50 \text{ nm}$ и $a \rightarrow \infty$. Са слика 6.2(б) и 6.2(с) може се видети да су интензитети функције губитака у оба случаја исти у регионима у којима права $v = 2 v_F$ пресеца плазмонске гране, тако да су амплитуде ових осцилација једнаке. Карактеристичне таласне дужине су такође једнаке зато што права $v = 2 v_F$ пресеца плазмонску грану за исти таласни број $q_c \approx 0,17 \text{ nm}^{-1}$ дајући таласну дужину од $\lambda_c = 2\pi/q_c \approx 37 \text{ nm}$. За дебљину Al_2O_3 слоја од $a = 5 \text{ nm}$ права $v = 2 v_F$ пресеца горњу плазмонску грану, која даје доминантан допринос ефекту таласа, на нешто већој вредности критичног таласног броја. Одговарајућа карактеристична таласна дужина осцилација, добијена мерењем са слике 6.13(б), јесте $\lambda_c \approx 32 \text{ nm}$ и она је нешто мања него у случајевима када је $a = 50 \text{ nm}$ и $a \rightarrow \infty$. Додатно, амплитуде осцилација се разликују зато што у случају када је $a = 5 \text{ nm}$, дебљина Al_2O_3 слоја је довољно мала да се две плазмонске гране хибридују, док у случајевима када је $a = 50 \text{ nm}$ и $a \rightarrow \infty$ Диракови плазмони у слојевима графена могу само слабо да интерагују, тако да су две плазмонске гране спојене у једну.



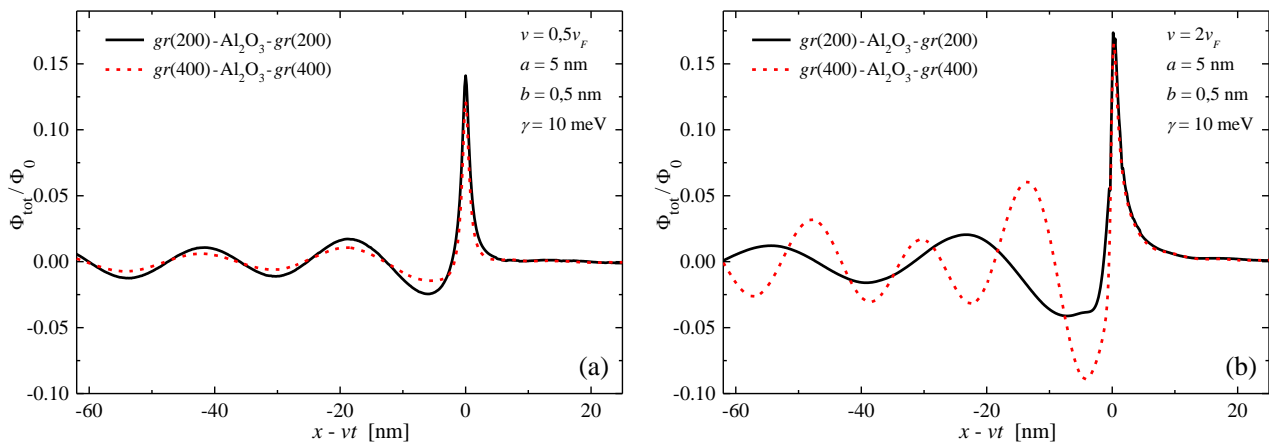
Слика 6.13. Ефекат таласа у потенцијалу код $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ система код ког је $a = 5 \text{ nm}$ (црна линија), $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ код ког је $a = 50 \text{ nm}$ (црвена испрекидана линија) и $Al_2O_3 - gr(200)$ код ког $a \rightarrow \infty$ (плава тачкаста линија), када се упадна честица креће брзином (а) $v = 0,5 v_F$ и (б) $v = 2 v_F$. Њена удаљеност од система је $b = 0,5 \text{ nm}$, а коефицијент пригушења плазмона у графену је $\gamma = 10 \text{ meV}$ [69].

На слици 6.14 је приказан ефекат таласа у потенцијалу када се наелектрисана честица креће брзинама (а) $v = 0,5 v_F$ и (б) $v = 2 v_F$, за композитне системе са две различите вредности коефицијента пригушења плазмона у слојевима графена: $\gamma = 10 \text{ meV}$ и $\gamma = 100 \text{ meV}$. Фермијева енергија у оба слоја је $E_F = 200 \text{ meV}$, а дебелина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$. Када је брзина упадне честице испод Фермијеве брзине (слика 6.14(а)) ефекат таласа потиче од фононских модова из Al_2O_3 слоја, тако да не зависи од коефицијента пригушења плазмона у графену. У овом случају права $v = 0,5 v_F$ са слика 6.2(а) и 6.2(д) пресеца интензивнију фононску грану на истим вредностима таласног броја (те су таласне дужине осцилација једнаке, $\lambda_c \approx 24 \text{ nm}$) и интензитет те фононске гране је исти у оба случаја (па су амплитуде осцилација једнаке). Међутим, ситуација се драстично мења када је брзина упадне честице већа од Фермијеве брзине у графену, што је приказано на слици 6.14(б). Када је $\gamma = 100 \text{ meV}$ Диракови плазмони су пригушени и њихове хибридлизоване гране су веома проширене (слика 6.2(д)). Како у случају када је $v = 2 v_F$ ефекат таласа примарно потиче од тих хибридлизованих Диракових плазмона, осцилације имају само један изражен минимум, одмах иза наелектрисане честице. То значи да ефекат таласа практично нестаје повећањем коефицијента пригушења плазмона када се упадна честица креће брзинама већим од Фермијеве брзине у графену.



Слика 6.14. Ефекат таласа у потенцијалу код $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ система код ког је $\gamma = 10 \text{ meV}$ (црна линија) и $\gamma = 100 \text{ meV}$ (црвена испрекидана линија), када се упадна честица креће брзином (а) $v = 0,5 v_F$ и (б) $v = 2 v_F$. Њена удаљеност од система је $b = 0,5 \text{ nm}$, а дебелина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$ [69].

На крају, анализирана је промена густине допирања графена на ефекат таласа у потенцијалу. На слици 6.15 је приказан ефекат таласа када се наелектрисана честица креће брзинама (a) $v = 0,5v_F$ и (b) $v = 2v_F$, за композитне системе са две различите вредности Фермијеве енергије: $E_F = 200 \text{ meV}$ и $E_F = 400 \text{ meV}$. Коэффициент пригушења плазмона у оба слоја графена је $\gamma = 10 \text{ meV}$, а дебљина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$. У случају када је $v = 0,5v_F$ таласне дужине осцилација у потенцијалу су једнаке за обе Фермијеве енергије. Опет, када је брзина упадне честице мања од Фермијеве брзине, ефекат таласа потиче од фонона из слоја изолатора, а права $v = 0,5v_F$ са слика функција губитака композита 6.2(a) и 6.2(e) пресеца најинтензивнију фононску грану за исте вредности таласног вектора. Међутим, сада амплитуде осцилације више нису једнаке, тј. смањују се када се Фермијева енергија повећа, јер се регион Ландауовог пригушења у унутарзонском $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$ континууму проширује и тако изазива пригушење фононских модова. Такође, може се видети да су интензитети фононских грана слабији на слици 6.2(e) него на слици 6.2(a). С друге стране, када је брзина упадне честице већа од Фермијеве брзине (слика 6.15(b)), осцилације у ефекту таласа имају различите и таласне дужине и амплитуде за различите густине допирања графена. Поређењем претходно наведених функција губитака посматраних система види се да права $v = 2v_F$ повећањем Фермијеве енергије пресеца горњу плазмонску грану на већим вредностима таласног броја, тако да је последично таласна дужина осцилација мања ($\lambda_c \approx 17 \text{ nm}$). Будући да се повећањем густине допирања графена повећава и интензитет плазмонских грана, амплитуде осцилација се исто појачавају. Стога, мењањем густине допирања графенских слојева могуће је модификовати ефекат таласа у потенцијалу и самим тим омогућити манипулацију сила које делују на упадну честицу, што ће бити показано у наредном одељку [69].



Слика 6.15. Ефекат таласа у потенцијалу код $gr(200) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(200)$ система (црна линија) и $gr(400) - \text{Al}_2\text{O}_3 - gr(400)$ система (црвена испрекидана линија), када се упадна честица креће брзином (a) $v = 0,5v_F$ и (b) $v = 2v_F$. Њена удаљеност од система је $b = 0,5 \text{ nm}$, дебљина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$ и коэффициент пригушења плазмона у слојевима графена је $\gamma = 10 \text{ meV}$ [69].

6.2. Зауоставна сила и сила лика

Када се наелектрисана честица креће паралелно изнад система графен-изолатор-графен на њу делују зауоставна сила и сила лика. Циљ у овом одељку јесте да се анализирају те силе у опсегу брзина честице до $10v_F$. Посебна пажња је посвећена ниском режиму брзина $v < v_F$, у ком се очекују докази о ексцитацијама фононских модова. Силе су добијене користећи *MDF* и *ab initio* методе, а употребљен је следећи скуп параметара: три густине допирања графена, односно три Фермијеве енергије ($E_F = 0$, $E_F = 200 \text{ meV}$ и $E_F = 1000 \text{ meV}$), две дебљине Al_2O_3 слоја ($a = 5 \text{ nm}$ и $a \rightarrow \infty$) и два растојања упадне честице од најближег слоја графена

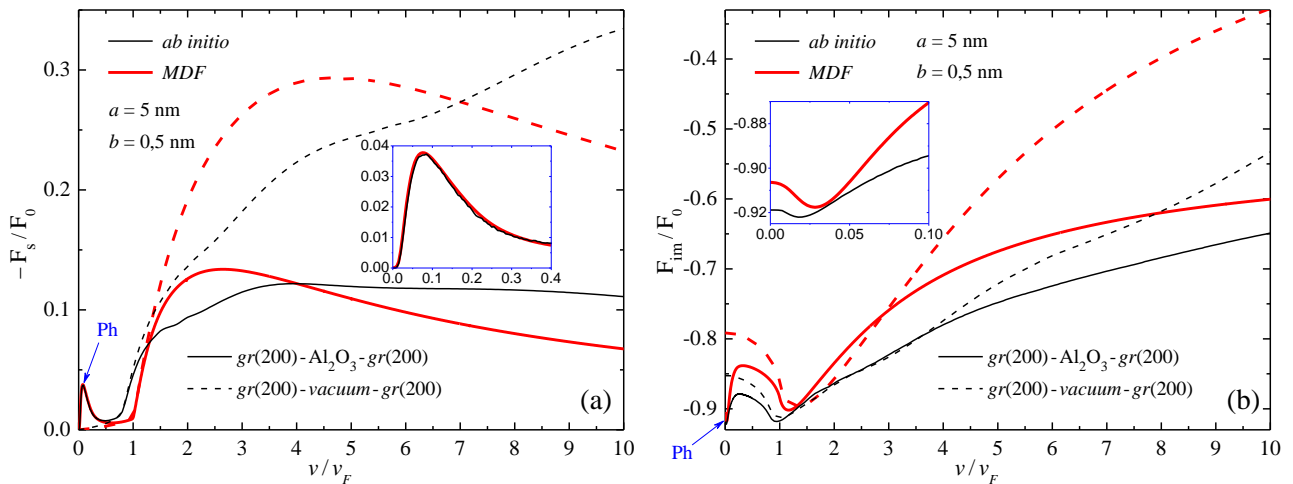
($b = 0,5 \text{ nm}$ и $b = 5 \text{ nm}$). Силе су нормализоване са $F_0 = (Ze)^2 / (4b^2)$, где је $Z = 1$ пошто је упадна честица протон.

На слици 6.16 су приказане (a) зауставна сила и (b) сила лика за систем $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (пуне линије) и $gr(200) - vacuum - gr(200)$ (испрекидане линије) добијене *MDF* моделом (дебеле црвене линије) и *ab initio* методом (танке црне линије) када је растојање између слојева графена $a = 5 \text{ nm}$, а удаљеност честице од система је $b = 0,5 \text{ nm}$. Зауставна сила добијена *MDF* моделом има широк максимум око $(2-3)v_F$ за систем са Al_2O_3 слојем и око $(4-5)v_F$ за систем без изолатора. Широки максимуми потичу од горње гране хибридованих Диракових плазмона. С друге стране, зауставна сила добијена *ab initio* методом улази у сатурацију отприлике за вредности $v \geq 4v_F$, што може да се пореди са максимумом добијеним *MDF* моделом за систем са Al_2O_3 слојем, али наставља да расте у региону изнад v_F за систем без Al_2O_3 . Ова разлика међу методама за веће брзине упадне честице може да се објасни доприносима високоенергетских међузонских прелаза електрона који су укључени у *ab initio* метод, али нису у *MDF*. Одређеније, доприноси региона у којем је $q \geq 1/(2b) = 1 \text{ nm}^{-1}$ вредностима интеграла који дефинишу зауставну силу (5.3.6) и силу лика (5.3.7) су потиснути, тако да високоенергетски међузонски прелази енергије, рецимо ω_{high} , у *ab initio* методи могу да се побуде довољно великим брзинама упадне честице, нпр. за $v \geq 2b\omega_{high}$. Ако се узме да је $\omega_{high} = 4 \text{ eV}$ (типична вредност која одговара π плазмону у графену), може се проценити да се значајнија одступања *MDF* и *ab initio* модела очекују на брзинама $v \geq 6v_F$ за $b = 0,5 \text{ nm}$.

Код обе методе, зауставне силе на брзинама већим од Фермијеве имају значајно мање амплитуде у случају са Al_2O_3 , него у случају без Al_2O_3 слоја, што указује на померај спектралних тежина ка нискоенергетским фононским хибридным модовима. На слици 6.16(a) се уочава да су амплитуде зауставних сила на брзинама мањим од Фермијеве, у случају без изолатора у систему, мале код обе методе и показују само линеаран раст са повећањем брзине због континуума међузонских ексцитација. Међутим, у присуству Al_2O_3 слоја уочава се оштар пик на брзини око $v = 0,08v_F$, што се лепо може видети на увећаном делу слике 6.16(a). Ту се може уочити и изванредно слагање *ab initio* и *MDF* методе, што показује да *MDF* одлично описује интеракцију фонона из супстрата са континуумом нискоенергетских унутарзонских електрон-шупљина ексцитација у опсегу малих брзина упадне честице. Порекло пика се може одредити на основу једначине (5.3.15), где се заменом вредности за одговарајуће параметре добија екстремум на $v \approx 0,08v_F$, чиме се потврђује да тај локални максимум доминантно потиче од ФК фононског мода са фреквенцијом $\omega_{FK2} \approx 86 \text{ meV}$. Са слике функције губитака посматраног система (слика 6.1(b)) може се закључити да ће то бити случај када је $q > 2k_F + \omega_{FK2}/v_F$. С друге стране, тај мод може бити побуђен уколико је $\omega_{FK2} < qv$. Имајући у виду да је ефективни опсег таласних бројева који дају свој допринос зауставној сили ограничен са $q \leq 1/(2b)$, може се проценити да удаљеност честице од система и њена брзина треба да испуне неједнакости:

$$\frac{1}{2b} \geq \frac{\omega_{FK2}}{v} \geq 2k_F + \frac{\omega_{FK2}}{v_F}, \quad (6.2.1)$$

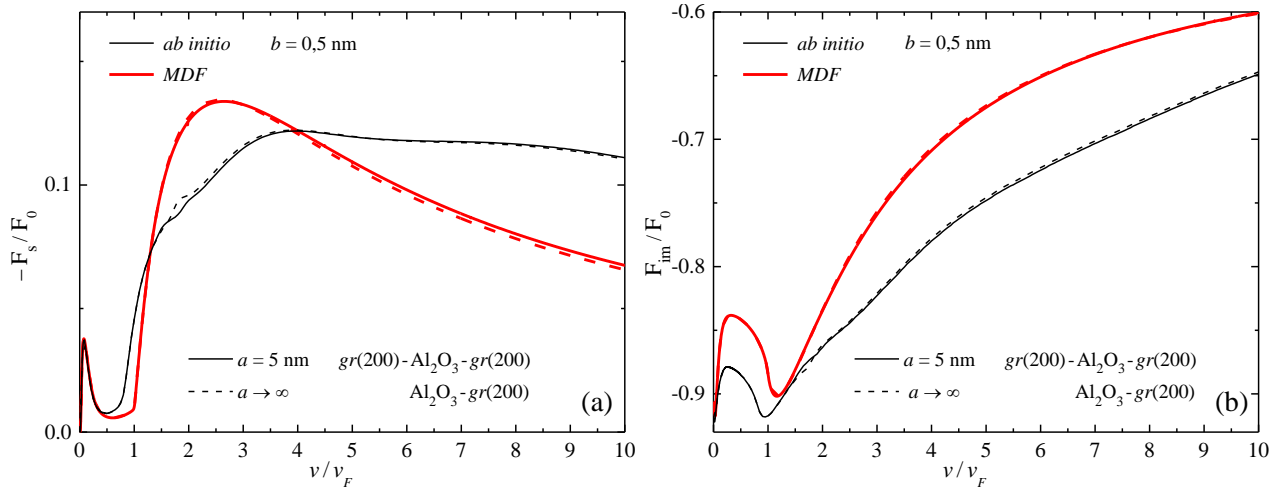
односно $b \leq 0,7 \text{ nm}$ и $v \leq 0,2v_F$ за вредност Фермијеве енергије од $E_F = 200 \text{ meV}$. Очигледно, избор $b = 0,5 \text{ nm}$ омогућава појаву пика на $v \approx 0,08v_F$, чија ширина на половини висине задовољава услов брзине коју упадна честица треба да има да би се остварила горенаведена неједнакост.



Слика 6.16. Зауствавна сила (a) и сила лика (b) у системима $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (пуне линије) и $gr(200) - vacuum - gr(200)$ (испрекидане линије) добијене *ab initio* методом (танке црне линије) и *MDF* моделом (дебеле црвене линије). Растојање између слојева графена је $a = 5 \text{ nm}$, а удаљеност упадне честице од система је $b = 0,5 \text{ nm}$ [70].

Зависност силе лика која делује на упадну честицу од њене брзине (слика 6.16(b)), у случају без изолатора, има локални минимум близу $v = v_F$ са постепеним прилазом константној вредности када $v \rightarrow 0$. Интензитет силе лика је већи код *ab initio* методе него код *MDF* за брзине $v \geq 2v_F$, са све већом разликом с порастом брзине, што би опет могло да се објасни доприносима високоенергетских међузонских прелаза који су укључени у *ab initio* метод. У случају са Al_2O_3 слојем, са повећањем брзине види се боље слагање међу методама и силе лика се приближавају константној вредности одређеној диелектричном константом изолатора ϵ_{ox}^∞ . У ниском режиму брзина (где је за зауствавну силу показано да има пик који потиче од ФК фонона), сила лика има локални минимум за брзину упадне честице око $0,02v_F < v < 0,03v_F$, који је приказан на увећаном делу слике 6.16(b). Овај минимум прати широки, асиметрични локални максимум на $v \approx 0,25v_F$ који се постепено претвара у још један локални минимум на $v = v_F$. Последње наведени минимум има исто порекло као и минимум уочен у случају без Al_2O_3 слоја. Обе криве сила лика (са и без Al_2O_3 слоја) добијене *ab initio* и *MDF* методама изгледају квалитативно слично у режиму ниских брзина, али имају мале хоризонталне и вертикалне помераје. Та разлика може се приписати граници статичког екранирања, у ком је поларизација у равни графена под јаким утицајем високоенергетских међузонских прелаза у графену, укључених у *ab initio*, али не и у *MDF* метод.

На слици 6.17 су поновљени резултати за $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ систем користећи исте параметре за удаљеност честице $b = 0,5 \text{ nm}$ и Фермијеву енергију $E_F = 200 \text{ meV}$, али је додат случај када $a \rightarrow \infty$. Добијени резултати су практично исти као и за $a = 5 \text{ nm}$, што показује да, за избор параметара са слике 6.16, првенствено за $a \gg b$, модови који потичу од поларизације са супротне површине графен- Al_2O_3 -графен нису електростатички спрегнути. Математички, то се дешава када је $qa \gg 1$, чиме је други члан једначине диелектричне функције система (5.1.1) занемарљиво мали у односу на први члан. Тада је у првом члану $\coth(qa) \approx 1$, чиме се добија $\epsilon(q, \omega)$ која представља један слој графена са поларизацијом χ_2 на супстрату диелектричне пермитивности ϵ_s . Такође, удаљеност честице од $b = 0,5 \text{ nm}$ је довољно мала, те члан e^{-2qb} израза за зауствавну силу (5.3.6) и силу лика (5.3.7) омогућава да велики опсег q бројева допринесе вредностима интеграла који се појављују у споменутим изразима. Тако се анализа сила које делују на честицу приликом њеног проласка изнад дебелог композита своди на систем који се састоји од једног слоја допираног графена на полубесkonaчном изолатору.

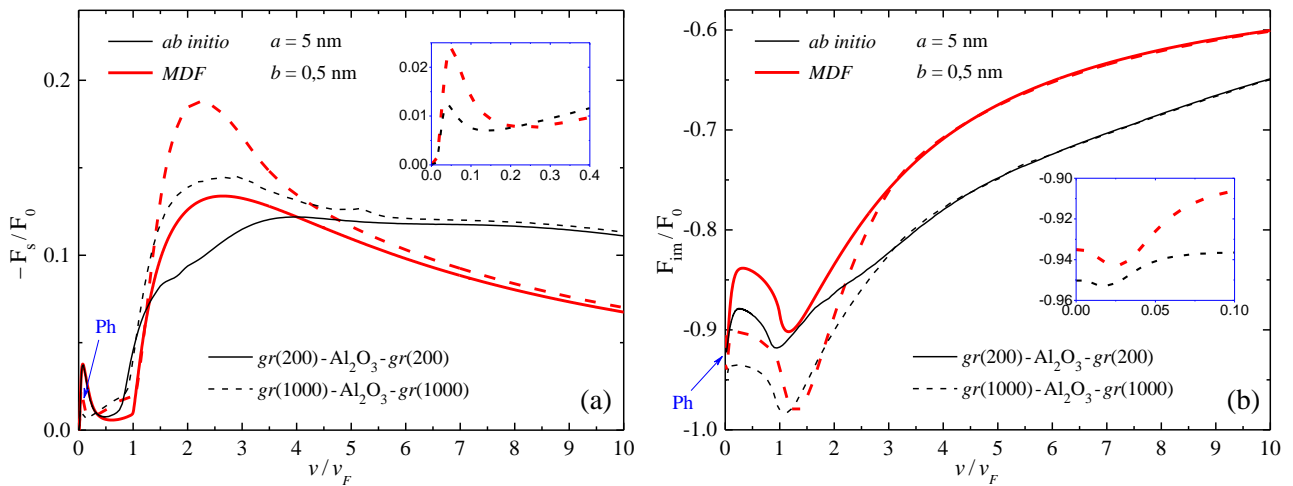


Слика 6.17. Зауствавна сила (a) и сила лика (b) у системима $gr(200) - Al_2O_3 (a = 5 \text{ nm}) - gr(200)$ (пуне линије) и $Al_2O_3 (a \rightarrow \infty) - gr(200)$ (испрекидане линије) добијене *ab initio* методом (танке црне линије) и *MDF* моделом (дебеле црвене линије). Удаљеност упадне честице од система је $b = 0,5 \text{ nm}$ [70].

Следећи параметар који је разматран јесте густина допирања графена. На слици 6.18 су приказане зауствавна сила (a) и сила лика (b) које делују на упадну честицу приликом њеног проласка изнад система $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (пуне линије) и $gr(1000) - Al_2O_3 - gr(1000)$ (испрекидане линије), добијене *ab initio* (танке црне линије) и *MDF* (дебеле црвене линије) методом. Повећање густине допирања графена има занемарљив утицај на обе силе, добијене обема методама, на брзинама већим од $(3-4)v_F$, али на брзинама, $v_F \leq v \leq (3-4)v_F$, долази до повећања интензитета обе силе. С обзиром да се за изабране вредности дебљине изолатора и удаљености честице од система очекује да два слоја графена нису електростатички спрегнута, ово повећање амплитуда може једноставно да се објасни повећањем енергије хибридног мода Диракових плазмона због повећања густине допирања графена.

У режиму ниских брзина, $v < v_F$, виде се одређене квантитативне промене у доприносима фона на из супстрата зауствавној сили. Наиме, поређењем увећаних делова на сликама 6.16(a) и 6.18(a) види се да повећање густине допирања графена смањује интензитет екстремума који проузрокују фонони и помера га ка нижим брзинама, око $v \approx (0,04 - 0,05)v_F$. Затим, тај пик се претвара у широки минимум за брзину упадне честице око $v \approx 0,1v_F$ за *ab initio* метод и око $v \approx 0,2v_F$ за *MDF* метод, чиме се уочава мала разлика у методама, која није била присутна на слици 6.16(a). Промене зауствавне силе у ниском режиму брзина могу да се посматрају и у односу на претходно наведене услове, што за Фермијеву енергију од $E_F = 1000 \text{ meV}$ даје $b \leq 0,15 \text{ nm}$ и $v \leq 0,04v_F$. Ове неједнакости указују да већа густина допирања графена није повољна за појављивање „доказа” у зауствавној сили о ексцитацијама ФК фононских модова, у форми оштрог пика на $v \ll v_F$. Иако је тај пик потиснут, након њега се види регион линеарног повећања зауствавне силе који почиње како се брзина упадне честице повећа изнад $v = 0,1v_F$ за *ab initio* метод и изнад $v = 0,2v_F$ за *MDF* метод, што указује на почетак „режима трења” који настаје због унутарзонских електрон-шупљина ексцитација у графену допираном са $E_F = 1000 \text{ meV}$.

Сличне промене су видљиве и на слици 6.18(b) за силу лика, тј. долази до повећања у интензитету силе лика на брзинама мањим од $v \leq 3v_F$ код обе методе. На увећаном делу слике се виде и мале промене у облику силе лика, у односу на увећани део слике 6.16(b) код које је било $E_F = 200 \text{ meV}$, али се минимум и даље појављује у истом опсегу брзина, $0,02v_F < v < 0,03v_F$.



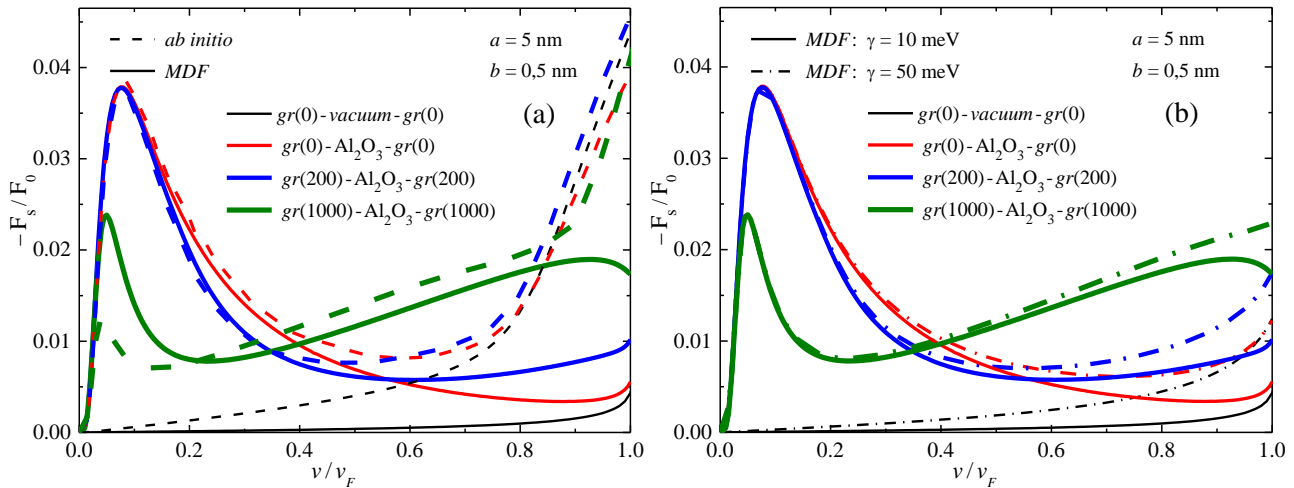
Слика 6.18. Зауствавна сила (а) и сила лика (б) у системима $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (пуне линије) и $gr(1000) - Al_2O_3 - gr(1000)$ (испрекидане линије) добијене *ab initio* методом (танке црне линије) и *MDF* моделом (дебеле црвене линије). Растојање између слојева графена је $a = 5$ nm, а удаљеност упадне честице од система је $b = 0,5$ nm [70].

На слици 6.19(a) је приказана зауствавна сила у опсегу брзина од 0 до v_F добијена *ab initio* методом (испрекидане линије) и *MDF* моделом (пуне линије), када је растојање између слојева графена $a = 5$ nm, а удаљеност упадне честице је $b = 0,5$ nm за конфигурације система $gr(0) - vacuum - gr(0)$ (црне линије), $gr(0) - Al_2O_3 - gr(0)$ (црвене линије), $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (плаве линије) и $gr(1000) - Al_2O_3 - gr(1000)$ (зелене линије). Осим конфигурације са недопираним слојевима графена без изолатора, све криве добијене *ab initio* и *MDF* методама се довољно добро слажу до брзине упадне честице од око $v \sim 0,5v_F$. Локални максимум на брзини од $v \leq 0,08v_F$ је повезан са Al_2O_3 ФК фононом више фреквенције, $\omega_{FK2} = 86$ meV, који је модификован статичким екранирањем у графену. Тај пик у региону до око $v \sim 0,2v_F$ не зависи ни од методе којом је добијен, ни од допираности графена (прелаз са недопираног графена ($E_F = 0$) на допирани ($E_F = 200$ meV)), што потврђује доминантну улогу ФК фононског мода. Криве које представљају систем у ком је Фермијева енергија графена $E_F = 1000$ meV пружају додатни увид дискусији о увећаном делу слике 6.18(a). Наиме, повећањем густине допирања графена висина пика је спуштена и његова позиција је померена на око $(0,04 - 0,05)v_F$, а прати га квазилинеарно повећање зауствавне силе у опсегу брзина $0,2v_F \leq v \leq 0,8v_F$, за обе методе. Разлике које се виде у примењеним методама када је $E_F = 1000$ meV, а које укључују висине и позиције пика, као и мали вертикални померај у квазилинеарном региону, могу бити повезане са чињеницом да се при *ab initio* прорачунима користи собна температура, док је код *MDF* то температура апсолутне нуле. Међутим, вероватније је да уочене разлике потичу од статичког екранирања фонона из Al_2O_3 слоја слојевима графена, због различитих третмана фактора пригушења плазмона у графену код посматраних метода (*MDF* модел користи Мерминову процедуру, док је *ab initio* не користи). Највећа разлика између две методе која се види на слици 6.19(a) јесте у случају недопираних слојева графена без изолатора, где је линеарно повећање зауствавне силе са порастом брзине упадне честице много веће код *ab initio*, него код *MDF* модела, што ће бити детаљније објашњено приликом дискусије слике 6.19(b).

Даље, све криве добијене *ab initio* методом нагло почињу да расту за брзине око $v > 0,8v_F$, што није случај за криве добијене *MDF* моделом. Наиме, брзина $v = v_F$ одговара прагу екситација електрон-шупљина међузонским прелазима који укључују π електронске зоне у графену, тако да је неусаглашеност међу методама вероватно резултат различитих

коэффициентата пригушења који се користе у методама. *Ab initio* метод је формулисан на собној температури и користи коефицијент пригушења унутарзонских прелаза од $\gamma_{intra} = 10 \text{ meV}$ и велики коефицијент пригушења за међузонске прелазе, $\gamma_{inter} = 50 \text{ meV}$ (прилог А), док *MDF* метод користи исти коефицијент пригушења и за унутарзонске и за међузонске прелазе, $\gamma = 10 \text{ meV}$, док су системи на температури апсолутне нуле. Због тога је испитан утицај већег коефицијента пригушења код *MDF* модела, када је $\gamma = 50 \text{ meV}$, што је приказано на слици 6.19(b). С ње се види да, заиста, повећање γ позитивно делује на слагање кривих међу методама, нарочито у случају недопираних слојева графена без изолатора. Међутим, брз, линеаран раст који се види код *ab initio* методе на брзинама $0,8v_F < v < v_F$ (испрекидане линије на слици 6.19(a)) не може се добити једноставним повећањем коефицијента пригушења плазмона код *MDF* модела. Ова велика разлика је последица и међузонских прелаза који су обухваћени *ab initio* прорачунима, али не и *MDF*, што се може видети са слике 6.1(b) за фреквенције $\hbar\omega > E_F = 200 \text{ meV}$ и таласне бројеве $q > k_F \approx 0,3 \text{ nm}^{-1}$.

На основу реченог, може се закључити да на моделовање утицаја фонона из подлоге на зауставну силу у режиму ниских брзина доста утичу детаљи одабраног модела, тј. начин третирања пригушења плазмона и температурних ефеката.

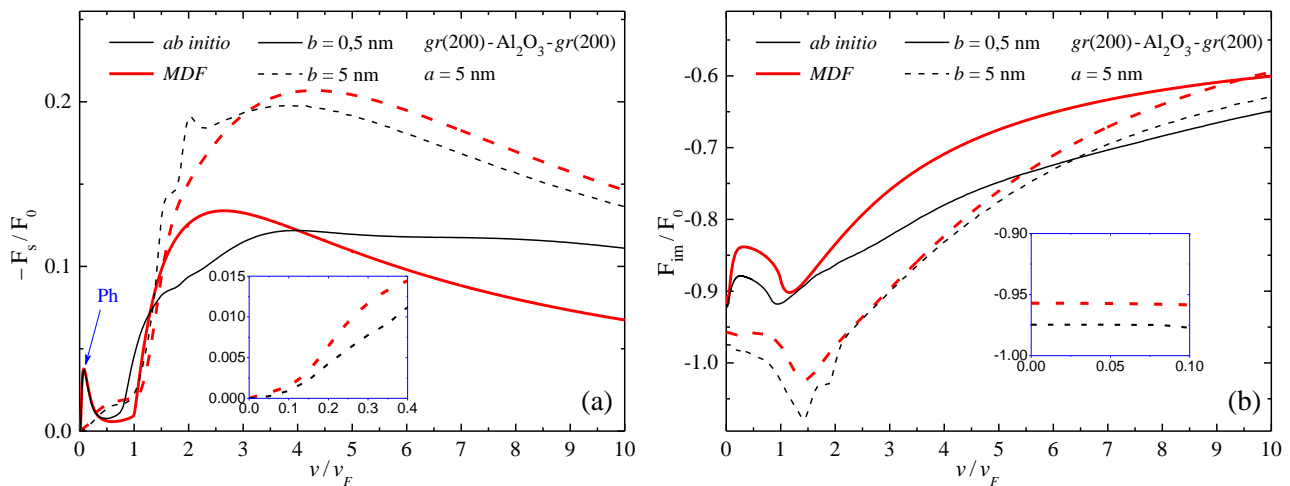


Слика 6.19. Зауставна сила у системима $gr(0) - vacuum - gr(0)$ (црне линије), $gr(0) - Al_2O_3 - gr(0)$ (црвене линије), $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ (плаве линије) и $gr(1000) - Al_2O_3 - gr(1000)$ (зелене линије) добијене *ab initio* методом (испрекидане линије) и *MDF* моделом код којег је $\gamma = 10 \text{ meV}$ (пуне линије). Растојање између слојева графена је $a = 5 \text{ nm}$, а удаљеност упадне честице од система је $b = 0,5 \text{ nm}$ (a). Зауставна сила у истим системима добијена *MDF* моделом, када је $\gamma = 10 \text{ meV}$ (пуне линије) и када је $\gamma = 50 \text{ meV}$ (испрекидане тачка-црта линије) (b) [70].

Следеће је испитиван утицај повећања удаљености наелектрисане честице од посматраних система. На слици 6.20 је приказано поређење између зауставних сила (a) и сила лика (b), добијених *ab initio* (танке црне линије) и *MDF* (дебеле црвене линије) методама, када је удаљеност честице $b = 0,5 \text{ nm}$ (пуне линије) и $b = 5 \text{ nm}$ (испрекидане линије). Фермијева енергија слојева графена је $E_F = 200 \text{ meV}$, а дебљина Al_2O_3 слоја је $a = 5 \text{ nm}$. Електростатичка спрега између супротних страна структуре више није занемарљива када је $b = a = 5 \text{ nm}$. Види се да повећање удаљености генерално побољшава слагање међу методама и код зауставне силе и код силе лика. На основу дискусије слике 6.16(a), може се очекивати побољшање у слагању метода у опсегу брзина упадне честице $v \leq 2b\omega_{high}$, који се проширује увећањем удаљености b . Међутим, постоје разлике у зауставној сили на брзини око $v = (1,5 - 2)v_F$, где *ab initio* метод испољава одређене локалне структуре, које нису видљиве у *MDF* моделу. Те структуре могу

да се припишу nedovoljnom broju tачака приликом узорковања *ab initio* функције губитака енергије у региону малих таласних вектора, за које још увек није могуће применити оптичку границу. Као резултат, нумерички добијена функција губитака енергије може бити дисконтинуална у том региону, што резултује могућим артефактима, као што су колена и мали максимум видљиви на слици зауставних сила 6.20(a), односно мали минимум и колена у истом интервалу на слици сила лика 6.20(b).

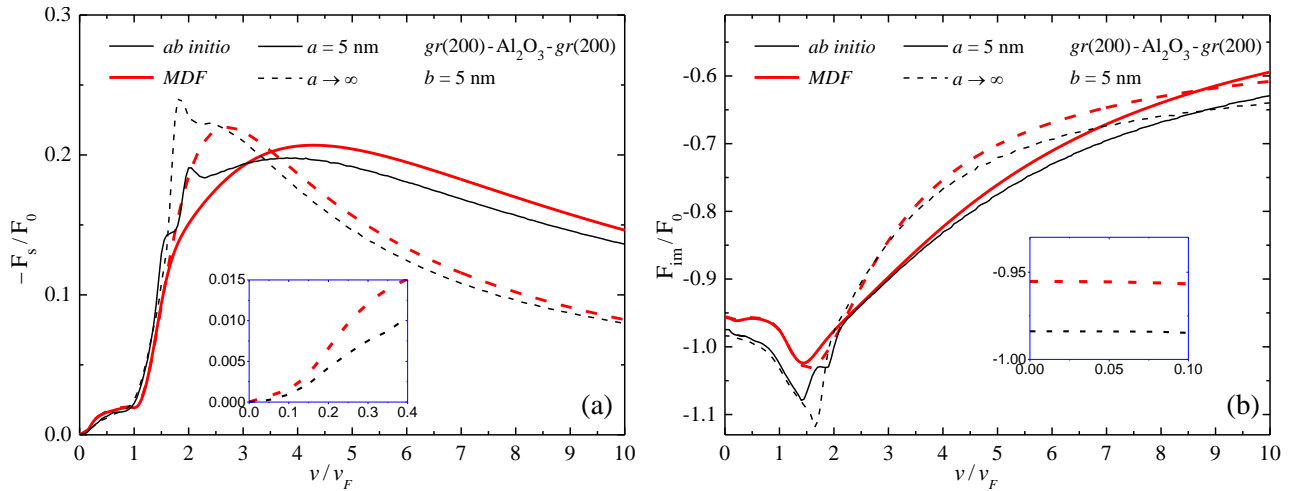
Интересантно, локални максимум у зауставној сили на брзини упадне честице око $v \approx 0,08v_F$ и одговарајући минимум у сили лика на брзини око $v \approx (0,02 - 0,03)v_F$, када је удаљеност честице $b = 0,5 \text{ nm}$ (а који се могу уочити и на увећаним деловима слике 6.16), више нису присутни када се удаљеност повећа на $b = 5 \text{ nm}$ (што је приказано на увећаним деловима слике 6.20). Ово одсуство локалних екстремума може се објаснити чињеницом да су таласни бројеви који дају доминантан утицај зауставној сили смањени на опсег $q \leq 1/(2b) = 0,1 \text{ nm}^{-1}$, чиме је било какав отисак ФК фононског мода у облику оштрог пика на брзинама честице $v \ll v_F$ редукован Ландауовим пригушењем тог мода континуумом унутарзонских електрон-шупљина ексцитација. Даље, случај када је $b = 5 \text{ nm}$ крши услов $b \leq (4k_F + 2\omega_{FK2}/v_F)^{-1} \approx 0,7 \text{ nm}$, те се на слици 6.20(a), уместо оштрог фононски индукованог пика, уочава нелинеарно понашање зауставне силе у опсегу брзина $0 < v < v_F$. То понашање би се могло описати као веома широк пик фононског порекла, суперпониран на линеаран део зауставне силе који потиче од унутарзонских електрон-шупљина ексцитација. Из једначине (5.3.14) види се да се пик у зауставној сили налази на брзини упадне честице која зависи од њене удаљености од система као $v_{p,FKi} \approx 1,29b\omega_{FKi}$, на основу чега се за $b = 5 \text{ nm}$ добија $v_{p,FK1} \approx 0,53v_F$ и $v_{p,FK2} \approx 0,84v_F$. Али, као што је претходно споменуто, због смањења релевантних таласних бројева долази до повећања Ландауовог пригушења, те су два пика веома проширена и спојена, дајући изглед платоа у опсегу брзина $0,5v_F \leq v \leq v_F$. Сличне промене се уочавају и на слици 6.20(b), где је сила лика апроксимативно константна на брзинама упадне честице $v \leq 0,1v_F$.



Слика 6.20. Зауставна сила (a) и сила лика (b) у систему $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ у ком је удаљеност упадне честице $b = 0,5 \text{ nm}$ (пуне линије) и $b = 5 \text{ nm}$ (испрекидане линије) добијене *ab initio* методом (танке црне линије) и *MDF* моделом (дебеле црвене линије). Растојање између слојева графена је $a = 5 \text{ nm}$ [70].

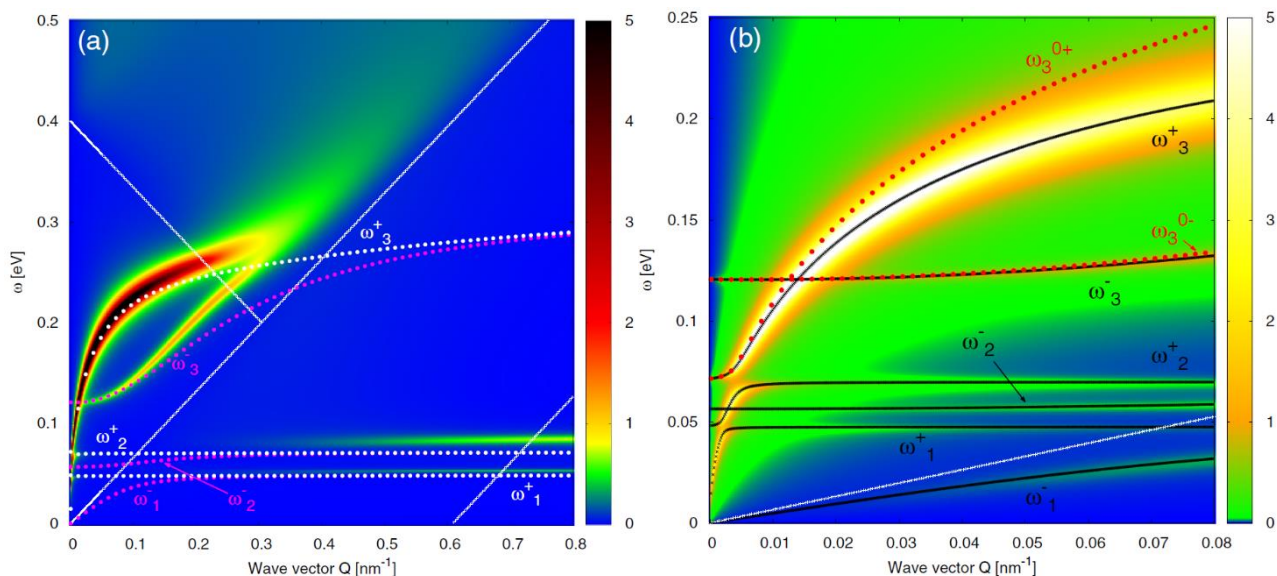
Остаје још да се анализира утицај дебљине Al_2O_3 слоја, само када је удаљеност упадне честице од система $b = 5 \text{ nm}$. На слици 6.21 су приказане зауставна сила (a) и сила лика (b) система у ком је $a = 5 \text{ nm}$ (пуне линије) и $a \rightarrow \infty$ (испрекидане линије), добијене *ab initio* методом (танке црне линије) и *MDF* моделом (дебеле црвене линије). Фермијева енергија у

слојевима графена је $E_F = 200 \text{ meV}$. Као што је било у претходном случају, повећање удаљености честице на $b = 5 \text{ nm}$ побољшава слагање међу методама и када $a \rightarrow \infty$, проширивањем опсега брзина $v \leq 2b\omega_{high}$, у ком високоенергетски међузонски прелази електрона у графену не утичу на зауставну силу. С друге стране, постоји разлика између *ab initio* и *MDF* модела код силе lika у форми константног вертикалног помераја на веома малим брзинама честице, која се види на увећаним деловима слика 6.21(b) и 6.20(b). Ово неслагање би опет могло да се објасни разликама у методама при третирању високоенергетских међузонских прелаза, као и у процедурама које се односе на ефекте пригушења.



Слика 6.21. Зауставна сила (a) и сила lika (b) у системима $gr(200) - Al_2O_3 (a = 5 \text{ nm}) - gr(200)$ (пуне линије) и $Al_2O_3 (a \rightarrow \infty) - gr(200)$ (испрекидане линије) добијене *ab initio* методом (танке црне линије) и *MDF* моделом (дебеле црвене линије). Удаљеност упадне честице од система је $b = 5 \text{ nm}$ [70].

Такође, ова слика показује ефекат електростатичке спреге између две површине, која је занемарљива на слици 6.17 где је удаљеност честице била $b = 0,5 \text{ nm}$ за исте вредности дебљине изолатора. Наиме, на слици 6.21(a) се види да је ефекат електростатичког спрезања код зауставне силе јак на брзинама упадне честице $v \geq 1,5v_F$, док се код силе lika на слици 6.21(b) не види утицај повећања дебљине изолатора за брзине $v \leq 1,5v_F$. Стога, може се закључити да у ниском режиму брзина, где се очекује јака интеракција између плазмона и фонона, структура графен – Al_2O_3 – графен може да се третира као један слој графена постављен на полубесконачном супстрату, чак и када је $b \sim a$. До истог закључка може се доћи и посматрањем функције губитака са слике 6.1(b), а која је поновљена на слици 6.22(a), док је за $q < 0,08 \text{ nm}^{-1}$ приказана на слици 6.22(b). Дисперзионе криве три симетрична мода ($\omega_{1,2,3}^+$) се брзо мењају у осегу таласних бројева $q < 0,01 \text{ nm}^{-1}$ због серије антиукрштања, док три антисиметрична мода ($\omega_{1,2,3}^-$) генерално имају слабију дисперзију на тим таласним дужинама. Како се таласни број повећава, модови највише енергије (ω_3^\pm) са слике 6.22(b) попримају плазмонски карактер и настављају да прате плазмонске дисперзионе релације (ω_3^\pm) са слике 6.22(a). У исто време, дисперзионе релације два пара модова ниже енергије (симетрични $\omega_{1,2}^+$ и антисиметрични $\omega_{1,2}^-$) задржавају свој фононски карактер и повећањем таласног броја улазе у регион унутарзонских електрон-шупљина ексцитација, у којем скоро постану дегенерисани ($\omega_{1,2}^- \rightarrow \omega_{1,2}^+$) и пролазе кроз атенуацију због Ландауовог пригушења. Ипак, даљим порастом q достижу енергије два ФК фонона са Al_2O_3 површи ($\omega_{1,2}^+ \rightarrow \omega_{FK1,2}$), где су екранирани слојевима графена.



Слика 6.22. Функција губитака у систему $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ у ком је дебљина Al_2O_3 слоја $a = 5$ nm са дисперзионим кривим за симетричне (ω_i^+ где је $i = 1, 2, 3$) и антисиметричне (ω_i^- где је $i = 1, 2, 3$) хибридне моделе фононског ($i = 1, 2$) и плазмонског ($i = 3$) типа у два опсега таласних дужина: (а) $q < 0,8$ nm⁻¹ и (б) $q < 0,08$ nm⁻¹. Црвене тачкасте линије показују дисперзионе релације добијене Друдеовим моделом [92].

С обзиром да удаљеност честице b смањује опсег релевантних таласних бројева као $q \leq 1/(2b)$, док њена брзина v контролише који регион (q, ω) простора доприноси зауставној сили ($\omega < qv$) и сили лика ($\omega > qv$), а на основу декомпозиције функције губитака, могуће је одредити доприносе различитих модела поменутих силама. Тако је тежина антисиметричног мода плазмонског типа много мања него тежина одговарајућег симетричног мода, за брзине честице $v \geq v_F$, за системе са изолатором и без њега. С друге стране, тежине симетричних фононских модела су веће него тежине антисиметричних на великим брзинама, док обрнуто важи како се смањује брзина упадне честице. На основу реченог, зауставном силом у ниском режиму брзина доминирају антисиметрични фононски модела $gr(200) - Al_2O_3 - gr(200)$ система, који имају више антиукрштања у опсегу таласних бројева $q \leq 0,1$ nm⁻¹, а који квалитативно личе на антиукрштања који се дешавају у композиту $Al_2O_3(a \rightarrow \infty) - gr(200)$ [70].

7. Закључак

Графен је једнослојни материјал који се интензивно проучава од свог механичког издвајања из графита 2004. године. Он је биокompatибилан, флексибилан, има високу топлотну и електричну проводност, те као такав има велику потенцијалну употребу у електроници, плазмоници, фотоници, биомедицини. За сада, скоро двадесет година након изоловања, можда највећи допринос графена јесте теоријске природе, односно он је отворио пут синтези и анализи других дводимензионалних материјала, као што су молибден дисулфид (MoS_2), фосфорен, борофен, антимонен итд.

У овој дисертацији је изучавана хибридикација плазмона из графена и фонона из супстрата, Al_2O_3 слоја, посматрањем интеракције јона са графен-изолатор-графен композитним системима. Другим речима, изучавани су ефекат таласа у потенцијалу који се јавља у површини композита најближој упадној наелектрисаној честици, као и зауставна сила и сила лика које делују на споменуто честицу. Поларизационе функције које се користе при израчунавању наведених величина су добијене на два начина: методом на бази безмасених Диракових фермиона (*MDF*) и проширеним хидродинамичким моделом (*eHD*), док су резултати упоређени са онима добијеним *ab initio* методом.

Констатовано је да се ефекат таласа у потенцијалу добијен *MDF* моделом врло добро слаже са резултатима добијеним *ab initio* методом у режиму ниских и средњих брзина упадне честице (брзине испод и изнад Фермијеве брзине у графену, респективно), док је у режиму високих брзина (брзине знатно изнад Фермијеве) потребно користити *eHD* модел у случају композита са недопираним графеном. Показано је да у режиму ниских брзина ефекат таласа потиче углавном од ексцитација трансверзалних оптичких (ТО) фонона са површине диелектрика ближе честици, које су пригушене када се на Al_2O_3 слоју налази графен, док је просторна расподела ефекта таласа уско локализована око линије паралелне путањи упадне честице. За средње брзине, хибридикација Дираковог плазмона са ТО фононима са супротне површине изолатора даје главни допринос ефекту таласа, који се јавља у карактеристичном „V” облику и који у просторној расподели има одређене локализоване аномалије у форми „рупа” због деструктивне интерференције међу хибридованим модовима. У режиму високих брзина, осим спорих осцилација које потичу од хибридованих модова Дираковог плазмона и ТО фонона, у потенцијалу одмах иза наелектрисане честице се јављају и брзе осцилације које настају ексцитацијом високоенергетског π плазмона у графену. Варирањем спољашњих и унутрашњих параметара посматраног система демонстрирано је да се амплитуда осцилација у потенцијалу смањује повећавањем удаљености честице од система и да је ова појава израженија када је брзина упадне честице мања од Фермијеве. Мењање дебљине Al_2O_3 слоја нема утицаја на ефекат таласа у режиму ниских брзина, док у режиму средњих брзина смањење дебљине изолатора умањује и таласну дужину осцилација и амплитуде прве две осцилације које се налазе одмах иза наелектрисане честице. Промена коефицијента пригушења плазмона нема утицаја у режиму ниских брзина, а у режиму средњих брзина његово повећање доста пригушује амплитуде осцилација. Спуштање Фермијеве енергије графена повећава амплитуду осцилација у ниском режиму, док у средњем режиму брзина смањује амплитуду, а повећава таласну дужину осцилација.

Резултати добијени за зауставну силу су показали да се *MDF* модел добро слаже са *ab initio* методом у опсегу брзина (v) и удаљености (b) упадне наелектрисане честице од система који задовољавају релацију $v \leq 2b\omega_{high}$, где $\omega_{high} \approx 4 \text{ eV}$ представља типичну енергију високоенергетских међузонских прелаза електрона. Они су укључени у *ab initio*, али не и у *MDF* модел, што представља главни разлог неслагања међу методама и приликом рачунања силе лика. Такође, *MDF* модел код прорачуна зауставне силе одлично описује интеракцију фононских модова и унутарзонских електрон-шупљина ексцитација на брзинама честице мањим од Фермијеве брзине (v_F) у графену, али је моделовање у том опсегу осетљиво на третман ефеката температуре и пригушења плазмона. Установљено је да се у режиму ниских брзина зауставна сила у случају без Al_2O_3 слоја линеарно повећава са брзином упадне честице, док се у присуству Al_2O_3 слоја уочава оштар пик у зауставној сили (или уски минимум у сили лика) на веома малим брзинама $v \ll v_F$, који потиче од ТО фононског мода. Даље, у присуству изолатора, на брзинама већим од Фермијеве, максималне вредности зауставних сила се смањују и померају ка мањим брзинама. Када се концентрација носилаца наелектрисања у графену значајно повећа, локални екстремум зауставне силе у режиму ниских брзина, односно пик који примарно потиче од ТО фонона, се пригушује и благо помера ка нижим брзинама. Зауставна сила се у том случају линеарно повећава како брзина јона достиже вредност Фермијеве брзине. Уколико је дебљина изолатора много већа од удаљености честице од система, електростатичка спрега између модова са супротних површина графен-изолатор-графен структуре је слаба, те посматране силе имају обележја композита који се састоји од једног слоја графена на полубесконачном супстрату. Како се растојање честице увећа, тако да је реда величине дебљине Al_2O_3 слоја, оштар пик у зауставној сили на $v \ll v_F$ нестаје и она у режиму ниских брзина показује нелинеарну зависност од брзине упадне честице.

Истраживање урађено у овој тези доприноси фундаменталном разумевању ефеката који се јављају приликом интеракције јона са графен-изолатор-графен композитним системима. Међутим, добијени резултати могу бити од интереса и при проучавању расејања наелектрисаних честица са површина, под малим углом, као и у случају спектроскопије енергетских губитака електрона слојевитих структура које садрже графен користећи снап електрона који се креће изнад њихових површина, без трансмисије и рефлексије.

Литература

1. Arista NR, Gervasoni JL, Segui ST, et al (2019) *Plasmon excitation by charged particles in solids, surfaces, and nanostructures: Following the trail of R.H. Ritchie*. In: Elsevier. Academic Press Inc., pp 271–317
2. Ritchie RH (1957) *Plasma Losses by Fast Electrons in Thin Films*. Physical Review 106:874
3. Basov DN, Fogler MM, García De Abajo FJ (2016) *Polaritons in van der Waals materials*. Science 354:195
4. West PR, Ishii S, Naik G V., et al (2010) *Searching for better plasmonic materials*. Laser and Photonics Reviews 4:795–808
5. Low T, Avouris P (2014) *Graphene plasmonics for terahertz to mid-infrared applications*. ACS Nano 8:1086–1101
6. Novoselov KS, Geim AK, Morozov S V., et al (2004) *Electric field effect in atomically thin carbon films*. Science 306:666–669
7. Kaydashev V, Khlebtsov B, Miakonkikh A, et al (2021) *Excitation of localized graphene plasmons by aperiodic self-assembled arrays of metallic antennas*. Nanotechnology 32:035201
8. Lyon K, Mowbray DJ, Mišković ZL (2020) *Conductivity models for electron energy loss spectroscopy of graphene in a scanning transmission electron microscope with high energy resolution*. Ultramicroscopy 214:113012
9. Djordjević T, Radović I, Despoja V, et al (2018) *Analytical modeling of electron energy loss spectroscopy of graphene: Ab initio study versus extended hydrodynamic model*. Ultramicroscopy 184:134–142
10. Mišković ZL, Moshayedi M, Rivas MRP, et al (2023) *Modeling of the interband transitions in the optical conductivity of doped two-dimensional materials in the terahertz to the infrared frequency range: the case studies of graphene and phosphorene*. Radiation Effects and Defects in Solids 178:54–71
11. Pantaleón PA, Jimeno-Pozo A, Sainz-Cruz H, et al (2023) *Superconductivity and correlated phases in non-twisted bilayer and trilayer graphene*. Nature Reviews Physics 5:304–315
12. Rafiee E, Negahdari R (2023) *Cancer Cell Detection Biosensor Based on Graphene-Plasmonic Split Square-Ring-Shaped Nanostructure*. Plasmonics 18:431–440
13. Wu Z, Xu Z (2023) *Understanding and probing of sub-femtometer resolutions utilizing acoustic plasmon resonances in graphene-dielectric-metal hybrid-structures*. Optics and Laser Technology 162:109305
14. Marušić L, Kalinić A, Radović I, et al (2022) *Resolving the Mechanism of Acoustic Plasmon Instability in Graphene Doped by Alkali Metals*. International Journal of Molecular Sciences 23:4770
15. Despoja V, Jakovac J, Golenić N, Marušić L (2020) *Bias-controlled plasmon switching in*

- lithium-doped graphene on dielectric model Al₂O₃ substrate.* npj 2D Materials and Applications 4:19
16. Despoja V, Radović I, Politano A, Mišković ZL (2020) *Insights on the Excitation Spectrum of Graphene Contacted with a Pt Skin.* Nanomaterials 10:703
 17. Zhang N, Jiang X, Fan J, et al (2019) *Experimental observed plasmon near-field response in isolated suspended graphene resonators.* Nanotechnology 30:505201
 18. Fan Y, Shen NH, Zhang F, et al (2019) *Graphene Plasmonics: A Platform for 2D Optics.* Advanced Optical Materials 7:1800537
 19. Despoja V, Novko D, Lončarić I, et al (2019) *Strong acoustic plasmons in chemically doped graphene induced by a nearby metal surface.* Physical Review B 100:195401
 20. Politano A, Yu HK, Farías D, Chiarello G (2018) *Multiple acoustic surface plasmons in graphene/Cu(111) contacts.* Physical Review B 97:035414
 21. Politano A, Radović I, Borka D, et al (2017) *Dispersion and damping of the interband π plasmon in graphene grown on Cu(111) foils.* Carbon 114:70–76
 22. Politano A, Radović I, Borka D, et al (2016) *Interband plasmons in supported graphene on metal substrates: Theory and experiments.* Carbon 96:91–97
 23. Jablan M, Buljan H, Soljačić M (2009) *Plasmonics in graphene at infrared frequencies.* Physical Review B 80:245435
 24. Bonaccorso F, Sun Z, Hasan T, Ferrari AC (2010) *Graphene photonics and optoelectronics.* Nature Photonics 4:611
 25. Vakil A, Engheta N (2011) *Transformation optics using graphene.* Science 332:1291–1294
 26. Song S, Shen H, Wang Y, et al (2020) *Biomedical application of graphene: From drug delivery, tumor therapy, to theranostics.* Colloids and Surfaces B: Biointerfaces 185:110596
 27. Gupta BD, Pathak A, Semwal V (2019) *Carbon-based nanomaterials for plasmonic sensors: A review.* Sensors 19:3536
 28. Maiti D, Tong X, Mou X, Yang K (2019) *Carbon-Based Nanomaterials for Biomedical Applications: A Recent Study.* Frontiers in Pharmacology 9:1401
 29. Omar NAS, Fen YW, Saleviter S, et al (2019) *Development of a graphene-based surface plasmon resonance optical sensor chip for potential biomedical application.* Materials 12:1928
 30. Li Z, Zhang W, Xing F (2019) *Graphene Optical Biosensors.* International journal of molecular sciences 20:2461
 31. Dash S, Patnaik A (2021) *Impact of silicon-based substrates on graphene THz antenna.* Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures 126:114479
 32. Novodchuk I, Bajcsy M, Yavuz M (2021) *Graphene-based field effect transistor biosensors for breast cancer detection: A review on biosensing strategies.* Carbon 172:431–453
 33. Yan H, Li X, Chandra B, et al (2012) *Tunable infrared plasmonic devices using graphene/insulator stacks.* Nature Nanotechnology 7:330–334
 34. Gomez-Diaz JS, Moldovan C, Capdevila S, et al (2015) *Self-biased reconfigurable graphene stacks for terahertz plasmonics.* Nature Communications 6:6334

35. Francescato Y, Giannini V, Yang J, et al (2014) *Graphene Sandwiches as a Platform for Broadband Molecular Spectroscopy*. ACS Photonics 1:437–443
36. Fischetti M V., Neumayer DA, Cartier EA (2001) *Effective electron mobility in Si inversion layers in metal-oxide-semiconductor systems with a high- κ insulator: The role of remote phonon scattering*. Journal of Applied Physics 90:4587–4608
37. Yan H, Low T, Zhu W, et al (2013) *Damping pathways of mid-infrared plasmons in graphene nanostructures*. Nature Photonics 7:394–399
38. Marinković T, Radović I, Borka D, Mišković ZL (2015) *Probing the plasmon-phonon hybridization in supported graphene by externally moving charged particles*. Plasmonics 10:1741–1749
39. Mooradian A, Wright GB (1966) *Observation of the interaction of plasmons with longitudinal optical phonons in GaAs*. Physical Review Letters 16:999–1001
40. Liu Y, Willis RF (2010) *Plasmon-phonon strongly coupled mode in epitaxial graphene*. Physical Review B 81:081406(R)
41. Koch RJ, Seyller T, Schaefer JA (2010) *Strong phonon-plasmon coupled modes in the graphene/silicon carbide heterosystem*. Physical Review B 82:201413(R)
42. Liu Y, Willis RF, Emtsev K V., Seyller T (2008) *Plasmon dispersion and damping in electrically isolated two-dimensional charge sheets*. Physical Review B 78:201403(R)
43. Luxmoore IJ, Gan CH, Liu PQ, et al (2014) *Strong Coupling in the Far-Infrared between Graphene Plasmons and the Surface Optical Phonons of Silicon Dioxide*. ACS Photonics 1:1151–1155
44. Gonçalves PAD, Peres NMR (2016) *An Introduction to Graphene Plasmonics*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore
45. García de Abajo FJ, Echenique PM (1992) *Wake potential in the vicinity of a surface*. Physical Review B 46:2663–2675
46. Mowbray DJ, Mišković ZL, Goodman FO, Wang YN (2004) *Wake effect in interactions of fast ions with carbon nanotubes*. Physics Letters A 329:94–99
47. Neelavathi VN, Ritchie RH, Brandt W (1974) *Bound electron states in the wake of swift ions in solids*. Physical Review Letters 33:302–305
48. Brandt W, Ratkowski A, Ritchie RH (1974) *Energy loss of swift proton clusters in solids*. Physical Review Letters 33:1325–1328
49. Wang YN, Ma TC (1995) *Wake potential of a charged particle in a strongly coupled two-dimensional electron gas*. Physical Review B 52:16395–16399
50. Radović I, Borka D, Mišković ZL (2011) *Wake effect in doped graphene due to moving external charge*. Physics Letters A 375:3720–3725
51. Despoja V, Dekanić K, Šunjić M, Marušić L (2012) *Ab initio study of energy loss and wake potential in the vicinity of a graphene monolayer*. Physical Review B 86:165419
52. Radović I, Borka D, Mišković ZL (2012) *Dynamic polarization of graphene by external correlated charges*. Physical Review B 86:125442
53. Radović I, Borka D, Mišković ZL (2013) *Wake effect in interactions of dipolar molecules with*

doped graphene. Physics Letters A 377:2614–2620

54. Shi X, Lin X, Gao F, et al (2015) *Caustic graphene plasmons with Kelvin angle*. Physical Review B 92:081404
55. Chaves AJ, Peres NMR, Smirnov G, Asger Mortensen N (2017) *Hydrodynamic model approach to the formation of plasmonic wakes in graphene*. Physical Review B 96:195438
56. Kolomeisky EB, Straley JP (2018) *Kelvin-Mach Wake in a Two-Dimensional Fermi Sea*. Physical Review Letters 120:226801
57. Radović I, Borka Jovanović V, Borka D, Mišković ZL (2012) *Interactions of slowly moving charges with graphene: The role of substrate phonons*. In: Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. pp 165–168
58. Marinković T, Radović I, Borka D, Mišković ZL (2015) *Wake effect in the interaction of slow correlated charges with supported graphene due to plasmon-phonon hybridization*. Physics Letters A 379:377–381
59. Winter H (2002) *Collisions of atoms and ions with surfaces under grazing incidence*. Physics Reports 367:387–582
60. Crozier PA (2017) *Vibrational and valence aloof beam EELS: A potential tool for nondestructive characterization of nanoparticle surfaces*. Ultramicroscopy 180:104–114
61. Niu J, Jun Shin Y, Lee Y, et al (2012) *Graphene induced tunability of the surface plasmon resonance*. Applied Physics Letters 100:061116
62. Liu M, Yin X, Zhang X (2012) *Double-layer graphene optical modulator*. Nano Letters 12:1482–1485
63. Xiao B, Sun R, Xie Z, Wang X (2015) *A terahertz modulator based on double-layer graphene*. Optoelectronics and Advanced Materials, Rapid Communications 9:692–695
64. Shirdel M, Mansouri-Birjandi MA (2020) *A broadband graphene modulator based on plasmonic valley-slot waveguide*. Optical and Quantum Electronics 52:36
65. Shiga K, Komiyama T, Fuse Y, et al (2020) *Electrical transport properties of gate tunable graphene lateral tunnel diodes*. Japanese Journal of Applied Physics 59:SIID03
66. Rahmati M, Mozafari M (2019) *Biocompatibility of alumina-based biomaterials—A review*. Journal of Cellular Physiology 234:3321–3335
67. Denes E, Barrière G, Poli E, Lévêque G (2018) *Alumina biocompatibility*. Journal of Long-Term Effects of Medical Implants 28:9–13
68. Despoja V, Radović I, Karbunar L, et al (2019) *Wake potential in graphene-insulator-graphene composite systems*. Physical Review B 100:035443
69. Kalinić A, Radović I, Karbunar L, et al (2021) *Wake effect in interactions of ions with graphene-sapphire-graphene composite system*. Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures 126:114447
70. Kalinić A, Despoja V, Radović I, et al (2022) *Stopping and image forces acting on a charged particle moving near a graphene- Al_2O_3 -graphene heterostructure*. Physical Review B 106:115430
71. Borka D, Radović I, Mišković ZL (2011) *Dynamic polarization of graphene by moving*

- external charges: Comparison with 2D electron gas.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 269:1225–1228
72. Li CZ, Wang YN, Song YH, Mišković ZL (2014) *Interactions of charged particle beams with double-layered two-dimensional quantum electron gases.* Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics 378:1626–1631
 73. Segui S, Gervasoni JL, Arista NR, Mišković ZL (2021) *Oscillator model applied to 2D materials: Energy loss of relativistic charged particles.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 490:18–24
 74. Radović I, Hadžievski L, Bibić N, Mišković ZL (2007) *Dynamic-polarization forces on fast ions and molecules moving over supported graphene.* Physical Review A 76:042901
 75. Zuloaga J, Mišković ZL, Goodman FO (2007) *Energy loss and deflection of fast ions under glancing incidence upon a graphene sheet.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 256:162–166
 76. Radović I, Hadžievski L, Mišković ZL (2008) *Polarization of supported graphene by slowly moving charges.* Physical Review B 77:075428
 77. Allison KF, Borka D, Radović I, et al (2009) *Dynamic polarization of graphene by moving external charges: Random phase approximation.* Physical Review B 80:195405
 78. Bai XJ, Zhang YY, Mišković ZL, et al (2021) *The Effects of Pseudomagnetic Fields on Plasmon–Phonon Hybridization in Supported Graphene Probed by a Moving Charged Particle.* Plasmonics 16:1089–1098
 79. He XL, Zhang YY, Mišković ZL, et al (2020) *Interactions of moving charge with supported graphene in the presence of strain-induced pseudomagnetic field.* European Physical Journal D 74:18
 80. Li CZ, Na SR, Jian YY, et al (2019) *Interactions of the external charged particle beams with double-layer two-dimensional electron gases separated by insulating medium.* Radiation Effects and Defects in Solids 174:19–30
 81. Radović I, Hadžievski L, Bibić N, Mišković ZL (2009) *Non-linear effects in the forces acting on fast charged particles passing over two-dimensional electron gas.* Materials Chemistry and Physics 118:293–297
 82. Radović I, Borka D (2010) *Interactions of fast charged particles with supported two-dimensional electron gas: One-fluid model.* Physics Letters A 374:1527–1533
 83. Allison KF, Mišković ZL (2010) *Friction force on slow charges moving over supported graphene.* Nanotechnology 21:134017
 84. Stéphan O, Taverna D, Kociak M, et al (2002) *Dielectric response of isolated carbon nanotubes investigated by spatially resolved electron energy-loss spectroscopy: From multiwalled to single-walled nanotubes.* Physical Review B 66:155422
 85. Kramberger C, Hambach R, Giorgetti C, et al (2008) *Linear plasmon dispersion in single-wall carbon nanotubes and the collective excitation spectrum of graphene.* Physical Review Letters 100:196803
 86. Eberlein T, Bangert U, Nair RR, et al (2008) *Plasmon spectroscopy of free-standing graphene films.* Physical Review B 77:233406

87. Politano A, Chiarello G (2014) *Plasmon modes in graphene: Status and prospect*. *Nanoscale* 6:10927–10940
88. Borisov AG, Mertens A, Winter H, Kazansky AK (1999) *Evidence for the stopping of slow ions by excitations of optical phonons in insulators*. *Physical Review Letters* 83:5378–5381
89. Villette J, Borisov AG, Khemliche H, et al (2000) *Subsurface-channeling-like energy loss structure of the skipping motion on an ionic crystal*. *Physical Review Letters* 85:3137–3140
90. Lucas AA, Šunjić M, Benedek G (2013) *Multiple excitation of Fuchs-Kliewer phonons by Ne⁺ ions back-scattered by the LiF(100) surface at grazing incidence*. *Journal of Physics Condensed Matter* 25:355009
91. Lucas AA, Šunjić M, Benedek G, Echenique PM (2014) *Quantum ricochets: Surface capture, release and energy loss of fast ions hitting a polar surface at grazing incidence*. *New Journal of Physics* 16:063015
92. Despoja V, Djordjević T, Karbunar L, et al (2017) *Ab initio study of the electron energy loss function in a graphene-sapphire-graphene composite system*. *Physical Review B* 96:075433
93. Ong ZY, Fischetti M V. (2012) *Theory of interfacial plasmon-phonon scattering in supported graphene*. *Physical Review B* 86:165422
94. Hohenberg P, Kohn W (1964) *Inhomogeneous electron gas*. *Physical Review* 136:B864–B871
95. Kalinić A, Radović I, Karbunar L, et al (2020) *Interactions of ions with graphene-sapphire-graphene composite system: Stopping force and image force*. In: *Publications of the Astronomical Observatory of Belgrade* 99. pp 97–100
96. Rayleigh, Lord (1885) *On waves propagated along the plane surface of an elastic solid*. *Proceedings of the London Mathematical Society* s1-17:4–11
97. Kress W, De Wette FW (1991) *Surface Phonons*. New York: Springer-Verlag
98. Castro Neto AH, Guinea F, Peres NMR, et al (2009) *The electronic properties of graphene*. *Reviews of Modern Physics* 81:109–162
99. Balać I, Bugarski B, Ćosić I, et al (2010) *Biomaterijali*. Institut tehničkih nauka Srpske akademije nauka i umetnosti
100. Raković D (1995) *Fizičke osnove i karakteristike elektrotehničkih materijala*. Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu
101. Jenkins SJ (2020) *Crystallography of Surfaces*. In: Rocca M, Rahman TS, Vattuone L (eds) *Springer Handbook of Surface Science*. Springer, Cham, pp 99–118
102. Mayer D (2007) *Crystal_structure*. https://en.wikipedia.org/wiki/Crystal_structure. Accessed 18 Jun 2021
103. Dugdale SB (2016) *Life on the edge: a beginner's guide to the Fermi surface*. *Physica Scripta* 91:053009
104. Benedek G, Bernasconi M, Campi D, et al (2020) *Surface Phonons: Theoretical Methods and Results*. In: Rocca M, Rahman TS, Vattuone L (eds) *Springer Handbook of Surface Science*. Springer, Cham, pp 737–782
105. Novotny L (2010) *Strong coupling, energy splitting, and level crossings: A classical perspective*. *American Journal of Physics* 78:1199–1202

106. Wallis RF (1994) *Surface phonons: theoretical developments*. Surface Science 299–300:612–627
107. Fuchs R, Kliewer KL (1965) *Optical modes of vibration in an ionic crystal slab*. Physical Review 140:A2076
108. Sahoo P, Tyagi KA, Raj B, Dhara S (2011) *Surface Optical Modes in Semiconductor Nanowires*. In: Hashim AA (ed) Nanowires - Implementations and Applications. IntechOpen, London, pp 2–26
109. Frederick BG, Apai G, Rhodin TN (1991) *Surface phonons in thin aluminum oxide films: Thickness, beam-energy, and symmetry-mixing effects*. Physical Review B 44:1880–1890
110. Benedek G, Toennies JP (2018) *The physics of surface phonons*. In: Atomic Scale Dynamics at Surfaces. Springer Nature, pp 57–101
111. Tonks L, Langmuir I (1929) *Oscillations in Ionized Gases*. Physical Review 33:195–210
112. Maxwell JC (1865) *A dynamical theory of the electromagnetic field*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London 155:459–512
113. Maier SA (2007) Plasmonics: Fundamentals and applications. Springer Science & Business Media
114. Bittencourt JA (2004) Fundamentals of plasma physics, Third Edit. Springer Science & Business Media, New York
115. Pfnür H, Tegenkamp C, Vattuone L (2020) *Plasmons in One and Two Dimensions*. In: Rocca M, Rahman TS, Vattuone L (eds) Springer Handbook of Surface Science. Springer, Cham, pp 557–584
116. Rocca M (2020) *Surface Plasmons and Plasmonics*. In: Rocca M, Rahman TS, Vattuone L (eds) Springer Handbook of Surface Science. Springer, Cham, pp 531–556
117. Kuzmany H (1998) *The Dielectric Function*. In: Solid-State Spectroscopy. Springer, pp 101–120
118. Lindhard J (1954) *On the properties of a gas of charged particles*. Matematisk-fysiske Meddelelser 28:1–57
119. Mermin ND (1970) *Lindhard dielectric function in the relaxation-time approximation*. Physical Review B 1:2362–2363
120. Qaiumzadeh A, Arabchi N, Asgari R (2008) *Quasiparticle properties of graphene in the presence of disorder*. Solid State Communications 147:172–177
121. Hubbard J (1963) *Electron correlations in narrow energy bands*. Proceedings of the Royal Society of London Series A Mathematical and Physical Sciences 276:238–257
122. Adam S, Hwang EH, Rossi E, Das Sarma S (2009) *Theory of charged impurity scattering in two-dimensional graphene*. Solid State Communications 149:1072–1079
123. Fetter AL (1973) *Electrodynamics of a layered electron gas. I. Single layer*. Annals of Physics 81:367–393
124. Fetter AL (1974) *Electrodynamics of a layered electron gas. II. Periodic array*. Annals of Physics 88:1–25
125. Barton G, Eberlein C (1991) *Plasma spectroscopy proposed for C60 and C70*. The Journal of

Chemical Physics 95:1512–1517

126. Mowbray DJ, Mišković ZL, Goodman FO, Wang YN (2004) *Interactions of fast ions with carbon nanotubes: Two-fluid model*. Physical Review B 70:195418
127. Mowbray DJ, Segui S, Gervasoni JL, et al (2010) *Plasmon excitations on a single-wall carbon nanotube by external charges: Two-dimensional two-fluid hydrodynamic model*. Physical Review B 82:035405
128. Ashcroft NW, Mermin ND (1976) Solid State Physics, College. Harcourt, Inc.
129. Mönch W (2001) Semiconductor surfaces and interfaces, Third edit. Springer
130. Lyddane RH, Sachs RG, Teller E (1941) *On the polar vibrations of alkali halides*. Physical Review 59:673–676
131. Hirsch A (2010) *The era of carbon allotropes*. Nature Materials 9:868–871
132. Sinitskii A, Tour J (2010) *Graphene electronics, unzipped*. IEEE Spectrum 47:28–33
133. Peng SA, Jin Z, Ma P, et al (2015) *The sheet resistance of graphene under contact and its effect on the derived specific contact resistivity*. Carbon 82:500–505
134. Schwierz F (2010) *Graphene transistors*. Nature Nanotechnology 5:487–496
135. Varchon F, Feng R, Hass J, et al (2007) *Electronic structure of epitaxial graphene layers on SiC: Effect of the substrate*. Physical Review Letters 99:126805
136. Sutter P, Sadowski JT, Sutter E (2009) *Graphene on Pt(111): Growth and substrate interaction*. Physical Review B 80:245411
137. Guo B, Fang L, Zhang B, Gong JR (2011) *Graphene Doping: A Review*. Insciences Journal 1:80–89
138. Wallace PR (1947) *The Band Theory of Graphite*. Physical Review 71:622–634
139. Lee JK, Lee SC, Ahn JP, et al (2008) *The growth of AA graphite on (111) diamond*. Journal of Chemical Physics 129:234709
140. Bernal JD (1924) *The structure of graphite*. Proceedings of the Royal Society of London Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 106:749–773
141. Mogera U, Kulkarni GU (2020) *A new twist in graphene research: Twisted graphene*. Carbon 156:470–487
142. Cao Y, Fatemi V, Demir A, et al (2018) *Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices*. Nature 556:80–84
143. Sun Z, Hu YH (2020) *How Magical Is Magic-Angle Graphene?* Matter 2:1106–1114
144. Guinea F, Low T (2010) *Band structure and gaps of triangular graphene superlattices*. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 368:5391–5402
145. Cooper DR, D’Anjou B, Ghattamaneni N, et al (2012) *Experimental Review of Graphene*. ISRN Condensed Matter Physics 2012:501686
146. Novoselov KS, Geim AK, Morozov S V., et al (2005) *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*. Nature 438:197–200
147. Zhang Y, Tan YW, Stormer HL, Kim P (2005) *Experimental observation of the quantum Hall*

- effect and Berry's phase in graphene.* Nature 438:201–204
148. Geim AK, Novoselov KS (2007) *The rise of graphene.* Nature Materials 6:183–191
 149. Despoja V, Novko D, Dekanić K, et al (2013) *Two-dimensional and π plasmon spectra in pristine and doped graphene.* Physical Review B 87:075447
 150. Adam S, Hwang EH, Galitski VM, Das Sarma S (2007) *A self-consistent theory for graphene transport.* Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 104:18392–18397
 151. Ziegler K (2007) *Minimal conductivity of graphene: Nonuniversal values from the Kubo formula.* Physical Review B 75:233407
 152. Malard LM, Pimenta MA, Dresselhaus G, Dresselhaus MS (2009) *Raman spectroscopy in graphene.* Physics Reports 473:51–87
 153. Falkovsky LA (2007) *Phonon dispersion in graphene.* Journal of Experimental and Theoretical Physics 105:397–403
 154. Scharf B, Perebeinos V, Fabian J, Avouris P (2013) *Effects of optical and surface polar phonons on the optical conductivity of doped graphene.* Physical Review B 87:035414
 155. Novko D, Despoja V, Šunjić M (2015) *Changing character of electronic transitions in graphene: From single-particle excitations to plasmons.* Physical Review B 91:195407
 156. Luo X, Qiu T, Lu W, Ni Z (2013) *Plasmons in graphene: Recent progress and applications.* Materials Science and Engineering R: Reports 74:351–376
 157. Hwang EH, Das Sarma S (2009) *Plasmon modes of spatially separated double-layer graphene.* Physical Review B 80:205405
 158. Jablan M, Soljačić M, Buljan H (2013) *Plasmons in graphene: Fundamental properties and potential applications.* Proceedings of the IEEE 101:1689–1704
 159. Jablan M, Soljačić M, Buljan H (2011) *Unconventional plasmon-phonon coupling in graphene.* Physical Review B 83:161409(R)
 160. Ruys A (2018) *Alumina ceramics: Biomedical and clinical applications.* Woodhead Publishing
 161. Levin I, Brandon D (1998) *Metastable alumina polymorphs: Crystal structures and transition sequences.* Journal of the American Ceramic Society 81:1995–2012
 162. Kumar E, Bhatnagar A, Hogland W, et al (2014) *Interaction of anionic pollutants with Al-based adsorbents in aqueous media - A review.* Chemical Engineering Journal 241:443–456
 163. Dobrovinskaya ER, Lytvynov LA, Pishchik V (2009) *Sapphire: material, manufacturing, applications.* Springer Science & Business Media
 164. Wefers K, Misra C (1987) *Oxides and Hydroxides of Aluminum.* Alcoa Laboratories 19:1–92
 165. Liehr M, Thiry PA, Pireaux JJ, Caudano R (1984) *High resolution electron energy loss spectroscopy of an anisotropic insulator surface: A test for the dielectric theory.* Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films 2:1079–1082
 166. Wunsch B, Stauber T, Sols F, Guinea F (2006) *Dynamical polarization of graphene at finite doping.* New Journal of Physics 8:318

167. Hwang EH, Das Sarma S (2007) *Dielectric function, screening, and plasmons in two-dimensional graphene*. Physical Review B 75:205418
168. Borka Jovanović V, Radović I, Borka D, Mišković ZL (2011) *High-energy plasmon spectroscopy of freestanding multilayer graphene*. Physical Review B 84:155416
169. Djordjević T, Karbunar L, Despoja V, et al (2016) *Plasmon-phonon hybridization in layered structures including graphene*. Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases 154–157
170. Milić B (2002) *Meksvelova elektrodinamika*. Studentski trg, Beograd
171. Schwinger J, DeRaad LLJ, Milton KA, Tsai W (1998) *Classical Electrodynamics*. Perseus books
172. Preciado Rivas MR, Moshayedi M, Mišković ZL (2021) *On the role of the energy loss function in the image force on a charge moving over supported graphene*. Journal of Applied Physics 130:173103
173. Kalinić A, Radović I, Karbunar L, et al (2022) *Analytical expression for stopping force acting on a slow charged particle moving parallel to a thick graphene-sapphire-graphene structure*. In: Publications of the Astronomical Observatory of Belgrade 102. pp 117–120
174. *MATLAB - MathWorks*. <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>. Accessed 24 May 2023
175. Lee J, Backus J, Ryckman G (1981) *FORTTRAN Session*. History of Programming Languages 25–74
176. *OriginLab - Origin and OriginPro - Data Analysis and Graphing Software*. <https://www.originlab.com/>. Accessed 24 May 2023

Прилог А. *Ab initio* метод

Први део *ab initio* прорачуна се састоји у одређивању Кон-Шам (*Kohn-Sham*) основног стања једног слоја графена, као и одговарајућих таласних функција $\phi_{n\vec{k}}(\rho, z)$ и енергија $E_n(\vec{k})$. У том рачуну за константу јединичне ћелије графена коришћена је експериментално добијена вредност $a_g = 0,245$ nm, док је за растојање између периодичних реплика слојева графена узета вредност од $L = 5a_g$. Помоћу теорије функционала густине (*Density Functional Theory – DFT*) рачунају се Кон-Шамове таласне функције и енергије користећи програм за самоусаглашено поље раванског таласа (*Plane-Wave Self-Consistent Field – PWSCF*) у оквиру *QUANTUM ESPRESSO* пакета. За добијање основног стања густине електрона узета је $21 \times 21 \times 1$ Монкхорст-Пакова (*Monkhorst-Pack*) мрежа К тачака прве Брилуенове зоне, са граничном енергијом од $50 \text{ Ry} \approx 680 \text{ eV}$.

Други део прорачуна јесте одређивање функције одзива неинтерагујућих електрона и оптичке проводности. За два слоја графена који се налазе у равнима $z_{1,2} = \mp a/2$ могу се написати следеће функције одзива:

$$\chi_l^0(\vec{q}, \omega, z, z') = \chi_l^0(\vec{q}, \omega) \delta(z - z_l) \delta(z' - z_l), \quad l = 1, 2, \quad (9.0.1)$$

где су функције $\chi_{1,2}^0(\vec{q}, \omega)$ добијене *ab initio* методом, тј. на основу првих принципа као:

$$\chi_l^0(\vec{q}, \omega) = L \chi_{\vec{k}=0, \vec{k}'=0}^{0,l}(\vec{q}, \omega), \quad l = 1, 2, \quad (9.0.2)$$

при чему је 3Д Фуријеова трансформација функције одзива неинтерагујућих електрона дата као:

$$\chi_{\vec{k}, \vec{k}'}^{0,l}(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{\Omega} \sum_{\vec{k} \in S} \sum_{n, m} \frac{f_n^l(\vec{k}) - f_m^l(\vec{k} + \vec{q})}{\hbar \omega + i\gamma + E_n(\vec{k}) - E_m(\vec{k} + \vec{q})} \cdot \rho_{n\vec{k}, m\vec{k} + \vec{q}}(\vec{K}) \cdot \rho_{n\vec{k}, m\vec{k} + \vec{q}}^*(\vec{K}'), \quad l = 1, 2. \quad (9.0.3)$$

Ферми-Диракова расподела на температури T из (9.0.3) јесте $f_n^l(\vec{k}) = 1 / (e^{(E_{n\vec{k}} - E_f^l) / (k_B T)} + 1)$, а густине наелектрисања имају форму:

$$\rho_{n\vec{k}, m\vec{k} + \vec{q}}(\vec{K}) = \int_{\Omega} e^{-i(\vec{q} + \vec{K}) \cdot \vec{r}} \cdot \phi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \cdot \phi_{m\vec{k} + \vec{q}}(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (9.0.4)$$

Развој таласне функције раванског таласа из (9.0.4) је у форми:

$$\phi_{n\vec{k}}(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k} \cdot \rho} \sum_{\vec{K}} C_{n\vec{k}}(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}, \quad (9.0.5)$$

где су коефицијенти $C_{n\vec{k}}$ добијени самоусаглашеним решавањем Кон-Шам апроксимације локалне густине наелектрисања. У претходним једначинама $\vec{K} = (\vec{K}_{\parallel}, K_z)$ је 3Д вектор реципрочне решетке, $\vec{r} = (\rho, z)$ је 3Д вектор положаја, а интеграција из (9.0.4) се врши преко јединичне запремине $\Omega = S \times L$, при чему је S јединична површина Брилуенове зоне.

Оптичка проводност графена се рачуна као $\sigma^l(\omega) = \sigma_{intra}^l(\omega) + \sigma_{inter}^l(\omega)$, $l = 1, 2$, где је унутарзонска, или Друдеова проводност дата као:

$$\sigma_{intra}^l(\omega) = \frac{in_l}{\omega + i\gamma_{intra}}, \quad (9.0.6)$$

при чему n_l представља ефективни број носиоца наелектрисања⁵:

$$n_l = -\frac{2}{\Omega} \sum_{\vec{k}, n} \frac{\partial f_n^l(\vec{k})}{\partial E_n(\vec{k})} \Big|_{j_{n\vec{k}, n\vec{k}}^x(\vec{K}=0)}^2. \quad (9.0.7)$$

Међузона проводност је дата као:

$$\sigma_{inter}^l(\omega) = -\frac{2i}{\omega\Omega} \cdot \sum_{\vec{k}, n \neq m} \frac{\hbar\omega}{E_n(\vec{k}) - E_m(\vec{k})} \cdot \frac{f_n^l(\vec{k}) - f_m^l(\vec{k})}{\hbar\omega + i\gamma_{inter} + E_n(\vec{k}) - E_m(\vec{k})} \cdot j_{n\vec{k}, m\vec{k}}^x(\vec{K}=0) \left[j_{n\vec{k}, m\vec{k}}^x(\vec{K}'=0) \right]^*, \quad (9.0.8)$$

при чему су густине струје:

$$j_{n\vec{k}, m\vec{k}+\vec{q}}^\mu(\vec{K}) = \int_{\Omega} e^{-i(\vec{q}+\vec{K})\cdot\vec{r}} j_{n\vec{k}, m\vec{k}+\vec{q}}^\mu(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (9.0.9)$$

где је:

$$j_{n\vec{k}, m\vec{k}+\vec{q}}^\mu(\vec{r}) = \frac{\hbar e}{2im_e} \left\{ \phi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \partial_\mu \phi_{m\vec{k}+\vec{q}}(\vec{r}) - \left[\partial_\mu \phi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \right] \phi_{m\vec{k}+\vec{q}}(\vec{r}) \right\}. \quad (9.0.10)$$

Да би се постигла боља резолуција у дуготаласном лимесу ($q \rightarrow 0$) и на ниским енергијама ($\omega \rightarrow 0$), функције одзива и проводност су добијене из таласних функција $\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ и енергија $E_n(\vec{k})$ израчунатих за $601 \times 601 \times 1$ Монкхорст-Пакову мрежу, што одговара $361\,801$ К тачки у првој Брилуеновој зони. Сумирање је извршено за преко 30 (n, m) зона, а у прорачунима су коришћене две вредности параметра пригушења: $\gamma_{intra} = 10$ meV за прелазе у оквиру истих зона ($n \leftrightarrow n$) и $\gamma_{inter} = 50$ meV за прелазе између различитих зона ($n \leftrightarrow m$).

Оптичка граница се користи да би се тачно узели у обзир доприноси ФК фонона. Наиме, због веома ниске енергије ФК фонона (~ 50 meV), њихове интеракције са Дираковим плазмоном се дешавају на малим таласним бројевима, реда величине $q = 0,01$ nm⁻¹. Међутим, чак и за веома густу К мрежу, као што је $601 \times 601 \times 1$, минимални таласни број који може да се досегне је $q = 0,049$ nm⁻¹, што је веће од таласног броја на којем долази до антиукрштања између фононске и плазмонске гране, због чега се и употребљава оптички лимес [68].

⁵ Претпоставља се да је проводност изотропна у (x, y) равни, те x означава да се посматра само xx компонента дијагоналног тензора проводности, док је $\mu = \{x, y\}$.

Биографија аутора

Ана Калинић је рођена 2. 12. 1993. године у Београду. Завршила је Основну школу „Деспот Стефан Лазаревић” у Београду и Шесту београдску гимназију као носилац Вукове дипломе. Електротехнички факултет Универзитета у Београду уписала је 2012. године. Дипломирала је на одсеку за Физичку електронику, смер Биомедицински и еколошки инжењеринг 2016. године са просечном оценом 9,13. Дипломски рад под називом „Дволанчани прекиди ДНК и дицентрични хромозоми настали дејством зрачења” одбранила је у септембру 2016. године са оценом 10. Дипломске академске – мастер студије на Електротехничком факултету у Београду, на Модулу за биомедицинско и еколошко инжењерство уписала је у октобру 2016. године. Положила је све испите са просечном оценом 10,00 и у септембру 2017. године је одбранила мастер рад под називом „Карактеризација радијационо синтетисаних хидрогел нанокompозита”. Исте године уписује докторске академске студије на Електротехничком факултету у Београду, модул Нуклеарна, медицинска и еколошка техника. До краја школске 2018/2019. године положила је све испите са просечном оценом 10,00 и испунила све обавезе предвиђене студијским програмом скупивши предвиђених 120 ЕСПБ.

Од 1. 1. 2018. године запослена је у Лабораторији за атомску физику Института за нуклеарне науке „Винча”. Била је учесник билатералног пројекта између Републике Србије и Републике Хрватске под називом „Теоријско истраживање интеракција јона са графеном и графен/изолатор/графен композитима”. У јуну 2018. године била је учесник Летње школе у Бечу у склопу *COST* акције под називом „*Multi-Functional Nano-Carbon Composite Materials Network*”. Током прве половине 2019. године држала је лабораторијске вежбе из предмета Техничка физика II на Технолошко-металуршком факултету Универзитета у Београду.

Изјава о ауторству

Име и презиме аутора: Ана Калинић

Број индекса: 5018/2017

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Интеракција јона са графен-изолатор-графен

композитним системима

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да дисертација у целини ни у деловима није била предложена за стицање друге дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршила ауторска права и користила интелектуалну својину других лица.

У Београду, _____

Потпис аутора

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора: Ана Калинић

Број индекса: 5018/2017

Студијски програм: Електротехника и рачунарство

Наслов рада: Интеракција јона са графен-изолатор-графен композитним системима

Ментор: проф. др Јован Цветић

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предала ради похрањивања у **Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског назива доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

У Београду, _____

Потпис аутора

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић” да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Интеракција јона са графен-изолатор-графен композитним системима

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предала сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду и доступну у отвореном приступу могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (*Creative Commons*) за коју сам се одлучила.

1. Ауторство (*CC BY*)
2. Ауторство – некомерцијално (*CC BY-NC*)
3. Ауторство – некомерцијално – без прерада (*CC BY-NC-ND*)
- ④ Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима (*CC BY-NC-SA*)
5. Ауторство – без прерада (*CC BY-ND*)
6. Ауторство – делити под истим условима (*CC BY-SA*)

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци.

Кратак опис лиценци је саставни део ове изјаве).

У Београду, _____

Потпис аутора

1. **Ауторство.** Дозвољаваће умножаваће, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.

2. **Ауторство – некомерцијално.** Дозвољаваће умножаваће, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.

3. **Ауторство – некомерцијално – без прерада.** Дозвољаваће умножаваће, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.

4. **Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима.** Дозвољаваће умножаваће, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.

5. **Ауторство – без прерада.** Дозвољаваће умножаваће, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.

6. **Ауторство – делити под истим условима.** Дозвољаваће умножаваће, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.