

Универзитет у Београду  
Физички факултет

Тијана И. Ђорђевић

**Теоријски модели плазмона у графену при  
интеракцији са наелектрисаним честицама**

докторска дисертација

Београд, 2021

University of Belgrade  
Faculty of Physics

Tijana I. Đorđević

**Theoretical models of plasmons in graphene  
interacting with charged particles**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2021

# Комисија за одбрану докторске дисертације

Ментор:

др Иван Радовић

научни саветник

Институт за нуклеарне науке „Винча“

Чланови комисије:

проф. др Иванка Милошевић

редовни професор Физичког факултета

Универзитет у Београду

доц. др Зоран Поповић

доцент Физичког факултета

Универзитет у Београду

Датум одбране: 08.06.2021

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

Огромну захвалност дугујем свом ментору, др Ивану Радовићу, научном саветнику Института за нуклеарне науке „Винча“, који је предложио тему докторске дисертације, непосредно руководио њеном израдом и несебично пружао помоћ при сваком кораку током израде ове тезе. Такође, велику захвалност дугујем и проф. др Зорану Мишковићу, редовном професору на Департману за примењену математику Универзитета Вотерлу (*Department of Applied Mathematics, University of Waterloo*) у Канади, на великој помоћи у виду многобројних сугестија и корисних савета.

Доц. др Виту Деспоји, вишем научном сараднику Института за физику у Загребу захваљујем се на добијању *ab initio* резултата. Др Душку Борки, научном саветнику Института за нуклеарне науке „Винча“ и др Лазару Карбунару, доценту на Рачунарском факултету Универзитета Унион, овим путем се захваљујем на помоћи при добијању нумеричких резултата.

Проф. др Иванки Милошевић, редовном професору Физичког факултета Универзитета у Београду, као и доценту др Зорану Поповићу на истом факултету, се захваљујем на прегледу и оцени ове тезе.

Колегама др Дејану Пјевићу, научном сараднику и Ани Калинић, истраживачу приправнику, који су обоје запослени у Институту за нуклеарне науке „Винча“, захваљујем се на моралном подстреку при писању тезе.

Неизмерну подршку током израде ове тезе су ми дали др Сузана Петровић, научни саветник Института за нуклеарне науке „Винча“ и садашњи руководилац пројекта на коме сам ангажована, као и његов бивши руководилац др Давор Перушко, виши научни сарадник у пензији, и све остале колеге из лабораторије и на томе сам им захвална.

## Сажетак

Како би разумели ефекте који се јављају приликом интеракције наелектрисаних честица са слојевитим структурама које садрже графен, развили смо теоријски модел заснован на решавању *Poisson*-ове једначине коришћењем *Green*-ових функција.

Упадни јон се може искористити за испитивање хибридизације између *Dirac*-овог плазмона у графену и површинских оптичких фонона  $\text{SiO}_2$ , што смо показали уз помоћ формализма диелектричног одзива. Поменута хибридизација омогућава побуђивање плазмон-фонон мода при брзинама нижим од *Fermi*-јеве брзине графена, јако зависи од густине допирања графена и доводи до израженог ефекта таласа у индукованом потенцијалу. Такође, утиче и на зауставну силу и силу лика које делују на јон.

Коришћењем проводности графена израчунате у оквиру проширеног хидродинамичког модела у дуготаласном лимиту и локалној форми, извели смо аналитички израз за густину вероватноће енергијских губитака електрона. Закључили смо да постоји доста добро слагање наших израчунатих резултата за реални и имагинарни део оптичке проводности графена са резултатима добијеним *ab initio* методом, као и резултата за густину вероватноће које смо поредили са *ab initio* резултатима и експерименталним подацима за спектроскопију енергијских губитака електрона (*EELS*) из три независна експеримента. Такође, пронашли смо да начин уклањања тзв. *zero loss* пика из експерименталних *EELS* података доста утиче на њихово слагање са теоријским моделом.

Извели смо функцију енергијских губитака електрона за систем графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен коришћењем функције одзива графена, добијене помоћу безмасених *Dirac*-ових фермиона у оквиру апроксимације случајних фаза. Поређењем израчунатих резултата са резултатима добијеним *ab initio* методом, пронашли смо доста добро слагање за одређене вредности таласног броја.

Кључне речи: графен, графен-изолатор-графен, плазмон-фонон хибридизација, апроксимација случајних фаза, проширени хидродинамички модел.

**Научна област:** Физика.

**Ужа научна област:** Квантна, математичка и нанофизика.

**UDK број:** 53.538.9 (043.3).

# Abstract

In order to understand interactions of charged particles with layered structures containing graphene, we developed theoretical model based on solving *Poisson* equation using *Green's* function theory.

Incident charged particle may be used to probe the hybridization between Dirac plasmon in graphene and the surface optical phonon modes in a  $\text{SiO}_2$ , as we found using dielectric response formalism. This hybridization makes possible to excite plasmon-phonon mode at the speeds lower than graphene's *Fermi* speed, highly depends on the doping density of graphene and gives rise to the strong wake pattern in the induced potential, and affects stopping and image forces that act on charged particle.

Using the conductivity of graphene obtained by the extended hydrodynamic model in the long wave length limit and local form, we derived an analytical expression of the probability density for the electron energy loss. Comparing the obtained results for real and imaginary parts of the optical conductivity in graphene with those obtained by *ab initio* method, and also the results for probability density with both *ab initio* results and experimental electron energy loss spectroscopy (*EELS*) data from three independent experiments, we found very good agreement. In addition, we found that the way of subtracting zero loss peak from experimental *EELS* data strongly affects their agreement with theoretical model.

We derived the electron energy loss function in a graphene- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -graphene composite system by using the response function of graphene, acquired by method based on massless Dirac fermions (*MDF*) within the random phase approximation (*RPA*). Comparing our obtained results with those obtained by *ab initio* method, we found good agreement for certain wave number values.

**Key words:** graphene, graphene-insulator-graphene, plasmon-phonon hybridization, random phase approximation, extended hydrodynamic model.

**Scientific field:** Physics.

**Field of scientific specialization:** Quantum, mathematical and nanophysics.

**UDC number:** 53.538.9 (043.3).

## Садржај

1. Увод .....	1
2. Плазмони у графену.....	4
2.1. Електронска структура графена .....	4
2.2. Високоенергијски и нискоенергијски плазмони .....	7
2.2.1. $\pi$ и $\pi+\sigma$ плазмони .....	8
2.2.2. <i>Dirac</i> -ов (2D) плазмон.....	9
2.3. <i>Fuchs-Kliewer</i> -ови фонони у изолаторским слојевима који окружују графен .....	10
2.4. Ефекат таласа.....	11
3. Математички модел заснован на решавању <i>Poisson</i> -ове једначине методом <i>Green</i> -ових функција .....	12
3.1. <i>Poisson</i> -ова једначина .....	12
3.2. Конструкција <i>Poisson</i> -овог граничног проблема.....	12
3.3. Транслациона инваријантност и 2D <i>Fourier</i> -ов трансформ .....	14
3.4. Диференцијалне једначине за компоненте Гринове функције.....	15
3.5. Услови на граници две супстанцијалне средине за ФТ ГФ .....	18
3.6. <i>Dyson-Schwinger</i> -ова једначина за слојевиту структуру са графеном.....	19
3.7. Израчунавање <i>Green</i> -ове функције у случају двослојне и трослојне структуре .....	22
3.7.1. Компоненте <i>Green</i> -ове функције у случају двослојне структуре која не садржи графен.....	22
3.7.2. <i>Green</i> -ова функција за двослојну структуру са укљученим слојем графена .....	23
3.7.3. <i>Green</i> -ова функција у случају трослојне структуре без графена .....	25
3.7.4. <i>Green</i> -ова функција у случају трослојне структуре у коју су укључена два слоја графена.....	29
4. Теоријско моделовање <i>EELS</i> спектра .....	34
4.1. Израчунавање енергијских губитака и густине вероватноће за губитак енергије .....	34
4.2. Проширени хидродинамички модел .....	40
5. Резултати .....	44
5.1. Интеракција јона са графеном на полубесконачној изолаторској подлози .....	44
5.1.1. Физичке величине које описују интеракцију јона са графеном на подлози.....	44
5.1.2. Функција енергијских губитака система графен/ $\text{SiO}_2$ .....	48
5.1.3. Укупни електростатички потенцијал у равни графена.....	50
5.1.4. Зауоставна сила и сила лика у зависности од брзине протона .....	53
5.2. Испитивање плазмон-фонон хибридизације у систему графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен .....	57
5.2.1. Диелектрична функција система графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен .....	57
5.2.2. Дисперзионе релације.....	58
5.2.3. Поређење <i>EELS</i> спектра.....	60

5.3. Поређење различитих теоријских модела са доступним експериментално добијеним EELS спектрима .....	68
5.3.1. Оптичка проводност графена $\sigma(\omega)$ .....	68
5.3.2. Густина вероватноће у функцији енергијских губитака .....	69
5.3.3. Улога <i>Dirac</i> -ове проводности на нижим енергијама EELS спектра.....	72
5.3.4. Високоенергијски репови у EELS спектру .....	74
6. Закључак.....	77
7. Додаци .....	80
7.1. Извођење <i>Poisson</i> -ове једначине .....	80
7.2. Електростатички гранични услови.....	82
7.3. Поларизациона функција графена.....	84
8. Референце.....	85



# 1. Увод

Угљеник представља импресиван хемијски елемент који улази у састав великог броја органских једињења захваљујући великој флексибилности хемијских веза. Такође се јавља у више алотропских модификација [1] од којих су најпознатије дијамант и графит а у скорије време су откривене алотропске модификације нижих димензија као што су фулерени (1985. године) и угљеничне наноцеве (1991. године). Истраживачка група под вођством *Andre Geim*-а и *Konstantin Novoselov*-а је 2004. године поступком механичке ексфолијације графита изоловала дводимензиони (2D) облик угљеника назван графен [2] за чије су откриће награђени Нобеловом наградом 2010. године.

Графен се може сматрати 2D градивним елементом угљеничних материјала других димензија и представља први изоловани 2D материјал. Умотавањем графена добијамо 0D фулерен, савијањем 1D наноцев а слагањем 3D графит (тзв. високо оријентисан пиролитички графит)[3]. Наиме, комад графита се састоји из гомиле слојева графена наслаганих један на други који су међусобно повезани slabим *Van der Waals*-овим силама.

Понашање електрона у графену (можда би правилније било назвати их „носиоцима електричног наелектрисања“) наликује понашању релативистичких честица [4] што чини графен јединственим у односу на друге материјале у природи и подесним за испитивање разних релативистичких ефеката.

Површински плазмони (кратко плазмони) представљају колективна електронска побуђења која се крећу дуж границе диелектрик/метал [5]. Карактерише их висока локализованост таласног пакета у проводном делу која се описује фактором сажимања (представља однос таласне дужине слободног електромагнетног таласа и плазмона). Код 2D плазмона фактор сажимања износи између 100 и 400, па при истој учестаности таласна дужина плазмона буде толико пута краћа од таласне дужине електромагнетног таласа који их је побудио, што доводи до великог појачавања поља (које може бити и неколико редова величине јаче од упадног поља) излазећи из опсега конвенционалне оптике [6,7]. У случају графена, предвиђа се да фактор сажимања иде до вредности 300, што је значајно веће од његове вредности у случају нпр. сребра, где је фактор сажимања мањи од 20 [5]. Примена плазмона у графену зависи и од њихове дужине простирања која је ограничена расипањем енергије на фундаменталне процесе као што су диелектрични губици и електрон-фонон интеракције [8]. Дужина простирања плазмона у графену је већа од оне у металима [9,10].

Једна од најкориснијих особина графена је могућност прилично лаког подешавања *Fermi*-јевог нивоа додавањем спољашњих носилаца наелектрисања. Када се узме у обзир и чињеница да графен подржава електронске побуде јако широког спектра (од терахерц (*THz*) до видљивих учестаности [11]), графен постаје јако атрактиван за примене у разним областима плазмонице [12,13,22–24,14–21].

У уређајима на бази графена широку примену налазе изолаторски слојеви сачињени од  $\text{SiO}_2$  који могу да се ефикасно примене при контролисању *Fermi*-јевог нивоа графена применом спољашњег напона, као и захваљујући оптичким фононима  $\text{SiO}_2$  који се налазе на погодним учестаностима [25–27].

Поред подлоге од  $\text{SiO}_2$ , испитивани су плазмони у графену на разним другим подлогама као што су нпр.  $\text{SiC}$  [28–30], затим на металним подлогама [31] од којих ћемо поменути  $\text{Pt}(111)$ ,  $\text{Ru}(0001)$  и  $\text{Ni}(111)$  [32] и  $\text{Cu}(111)$  [33].

Поред једнослојног графена, такође су интересантне и структуре које садрже два слоја графена (*double-layer*) као и двослојни (*bilayer*) графен. Код двослојног графена није могуће независно контролисати спољашње потенцијале, односно густине допирања пошто је растојање између слојева јако мало ( $3.35 \text{ \AA}$ ). Овде вреди поменути да двослојни графен привлачи посебну пажњу истраживача последњих година. Наиме, показано је да када се два слоја графена поставе један на други тако да је горња решетка графена заротирана у односу на доњу под одређеним углом, долази до формирања тзв. супер решетке. Својства овако добијеног двослојног графена јако зависе од поменутог угла [34] па добијена структура може да се понаша као изолатор, или, што је још интересантније, суперпроводник [35,36].

За разлику од двослојног графена, између два слоја графена је могуће уметнути изолаторски слој. У таквој структури постоји могућност повезивања независних електрода на слојеве графена којима ће се одвојено контролисати густине допирања на слојевима. Један од примера овакве структуре је „сендвич“ структура облика графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен, која је већ нашла примену као оптички модулатор [37] у коме дебљина  $\text{Al}_2\text{O}_3$  слоја износи  $5 \text{ nm}$ .

Једна од најчешће коришћених експерименталних техника за проучавање електронских и плазмонских особина материјала, међу којима је и графен, јесте спектроскопија енергијског губитка електрона (*EELS – Electron Energy Loss Spectroscopy*) [38]. Теоријски модели спектра добијених *EELS* методом за системе који садрже један или више слојева графена се активно развијају последњих година [32,39–45].

Главну тему овог рада представља проучавање ефеката који се јављају при интеракцији наелектрисаних честица са графеном на полубесконечној изолаторској подлози од  $\text{SiO}_2$ , као и са два слоја графена између којих се налази танак изолаторски слој (претходно поменуто „сендвич“ структура графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен). Други правац истраживања ове тезе представља теоријско (аналитичко) моделовање *EELS* спектра, као и поређење теоријских модела са доступним експериментално добијеним *EELS* спектрима.

У овој тези се бавимо нерелативистичким ефектима до којих долази при интеракцији наелектрисане честице са графеном, док је пример испитивања релативистичких ефеката при интеракцији наелектрисаних честица са графеном дат у [46].

После увода (глава 1), у глави 2 ове тезе дат је кратак преглед основних физичко-хемијских особина графена и високоенергијских и нискоенергијских плазмона у графену, као и опис *Fuchs-Kliewer*-ових фонона у поларним изолаторским слојевима и ефекта таласа. У глави 3 је развијен математички модел који служи за описивање *Coulomb*-ових интеракција унутар вишеслојних структура које садрже један или два слоја графена, заснован на решавању *Poisson*-ове једначине методом *Green*-ових функција.

У глави 4 је представљен теоријски (аналитички) модел *EELS* спектра за случај интеракције наелектрисане честице са „слободним“ графеном. Изведени су изрази за енергијски губитак наелектрисане честице, као и израз за густину вероватноће за губитак енергије (поглавље 4.1). У поглављу 4.2 је представљен проширени (*extended*) хидродинамички (eHD) модел.

Комплетни резултати су приказани у глави 5. Резултати интеракције јона са графеном на полубесконечној изолаторској подлози су представљени у поглављу 5.1. Изведене су физичке величине које описују интеракцију јона са графеном на подлози, и то укупни потенцијал, зауставна сила и сила lika (параграф 5.1.1). Добијени резултати за функцију енергијских губитака система графен/ $\text{SiO}_2$  су приказани у параграфу 5.1.2, док су резултати за укупни

електростатички потенцијал у равни графена представљени у параграфу 5.1.3, односно за зауставну силу и силу лика у параграфу 5.1.4.

Поглавље 5.2 садржи резултате везане за испитивање плазмон-фонон хибридизације у систему графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен. Изведена је диелектрична функција система графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен применом методе *Green*-ових функција (параграф 5.2.1). Такође су изведене и дисперзионе релације (параграф 5.2.2). Поређени су *EELS* спектри система које смо добили у апроксимацији случајних фаза (*RPA* – *Random Phase Approximation*) у оквиру које су нискоенергијске побуде електрона у  $\pi$  зони апроксимиране безмасеним *Dirac*-овим фермионима (тј. *MDF*(*Massless Dirac Fermions*)-*RPA* метод) са дисперзионим кривама које су израчунате коришћењем *MDF-RPA* метода у оптичком лимиту као и *Drude*-овог модела. Добијени резултати су поређени са резултатима које је наш сарадник доц. др Vito Despoја израчунао користећи *ab initio RPA* метод.

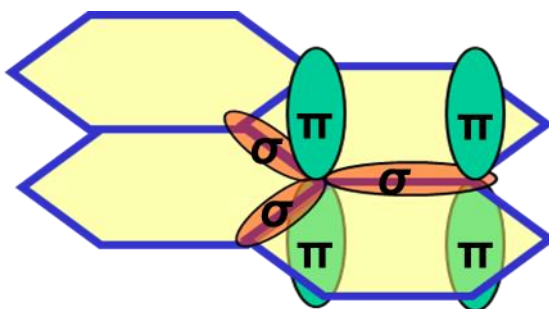
У поглављу 5.3 су представљени резултати добијени у оквиру *eHD* модела. Добијени резултати су поређени са резултатима које је доц. др Vito Despoја израчунао користећи *ab initio* метод и са експериментално добијеним *EELS* спектрима из [47–49]. У параграфу 5.3.1 су приказани оптичка проводност графена и број валентних електрона који учествују у побудама у функцији енергијских губитака, добијени у оквиру *eHD* модела као и резултати добијени *ab initio* методом. Теоријски резултати за густину вероватноће у функцији енергијских губитака су поређени са доступним експериментално добијеним *EELS* спектрима у параграфу 5.3.2. Улога *Dirac*-ове проводности на нижим енергијама *EELS* спектра је размотрена у параграфу 5.3.3, а високоенергијски репови у *EELS* спектру у параграфу 5.3.4.

У глави 6 су дати закључци. У глави 7 се налазе додаци, а у глави 8 списак коришћене литературе.

## 2. Плазмони у графену

### 2.1. Електронска структура графена

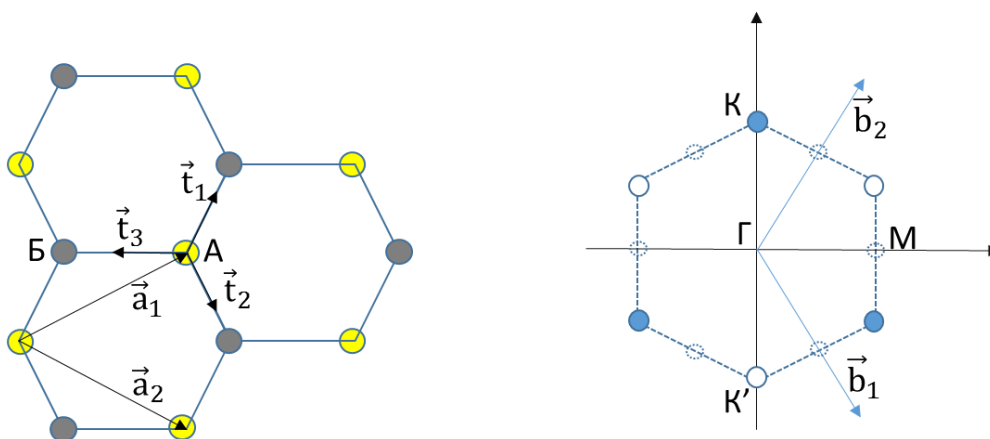
Графеном називамо слој сачињен од атома угљеника у равни, густо пакованих у 2D решетку налик на пчелиње саће (*honeycomb lattice*)[50]. Код појединачног атома угљеника у графену долази до  $sp^2$  хибридизације (орбитале  $2s$ ,  $2p_x$  и  $2p_y$  се хибридизују и формирају тригоналну структуру унутар  $(x,y)$  равни). Ова хибридизација омогућује сваком атому угљеника да се веже ковалентним  $\sigma$  везама са остала три суседна атома формирајући хексагоналну решетку (слика 2.1).



Слика 2.1: Шематски приказ  $\sigma$  и  $\pi$  веза у графену.

Слободне  $2p_z$  (или  $\pi$ ) орбитале су оријентисане нормално на раван у којој се налазе атоми угљеника. Сваки атом угљеника има по једну  $\pi$  орбиталу и свака од њих садржи по један тзв.  $\pi$  електрон па су услед дегенерације спина ове орбитале полупопуњене.  $\pi$  електрони су у графену делокализовани и формирају две зоне: валентну  $\pi$  зону и проводну  $\pi^*$  зону.

Кристална решетка графена је формирана од 2D хексагоналних решетки. Садржи два атома угљеника у примитивној ћелији (слика 2.2 лево). Растојање између најближих атома у графену износи  $1.42 \text{ \AA}$  [51].



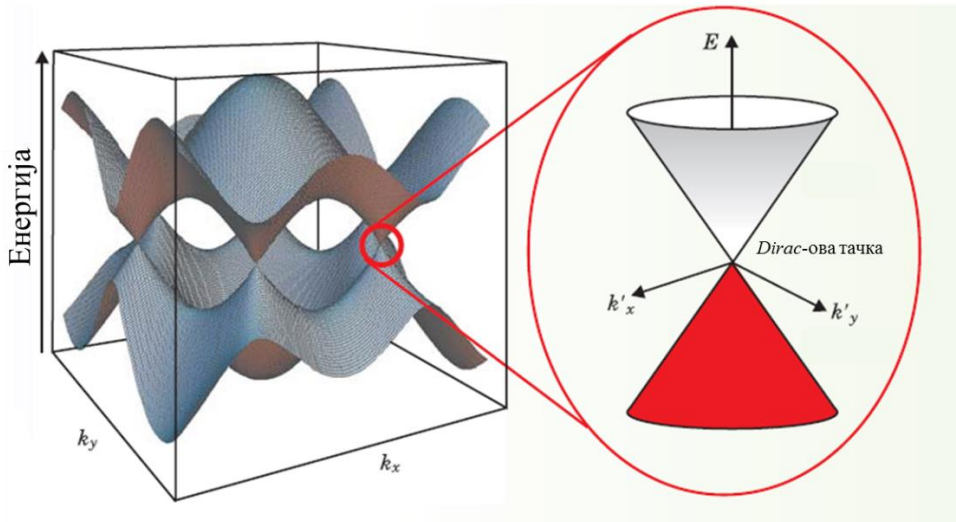
Слика 2.2: (Лево) Кристална структура графена. Примитивну ћелију чине два атома, А и Б. *Bravais*-ова решетка је формирана понављањем структуре јединичне ћелије коришћењем вектора  $\vec{a}_1$  и  $\vec{a}_2$ . Положај најближих суседа атома А је одређен векторима  $\vec{t}_1$ ,  $\vec{t}_2$  и  $\vec{t}_3$ . (Десно) Прва *Brillouin*-ова зона графена са означеним тачкама високе симетрије. Вектори  $\vec{b}_1$  и  $\vec{b}_2$  означавају реципрочне векторе решетки. Прилагођено из [3].

На слици 2.2 десно је приказана реципрочна решетка графена са означеним тачкама високе симетрије. У *Brillouin*-овој зони графена постоје три врсте ових тачака:  $\Gamma$ ,  $K$ , и  $M$  [52]. Тачка  $\Gamma$  означава центар *Brillouin*-ове зоне. Тачке  $M$  се налазе на срединама ивица и постоје три нееквивалентне (што значи да нису повезане транслацијом за реципрочне векторе решетке). У тачки  $M$  долази до прелаза у ултраљубичастој (*UV*) области електромагнетног спектра.

У недопираном графену нема слободних носилаца наелектрисања. У њему је валентна зона, пошто је ниже енергије, потпуно попуњена док је проводна зона потпуно празна. Проводна и валентна зона се додирују у  $K$  тачкама које се називају и *Dirac*-овим, има их шест, и налазе се у теменима *Brillouin*-ове зоне графена. Од тих шест  $K$  тачака две су нееквивалентне,  $K$  и  $K'$  (слика 2.2 десно). У њима је *Fermi*-јева енергија једнака нули, а у њиховој близини је веза између енергије и импулса линеарна (видети израз (2.2) у наставку текста) и енергијска дисперзија је представљена *Dirac*-овим конусом [53]. Координате тачака  $K$  и  $K'$  у реципрочној решетки су [3]:

$$\begin{aligned} K &= \frac{2\pi}{3a} \left( 1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \\ K' &= \frac{2\pi}{3a} \left( 1, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

где је  $a$  растојање између суседних атома угљеника.



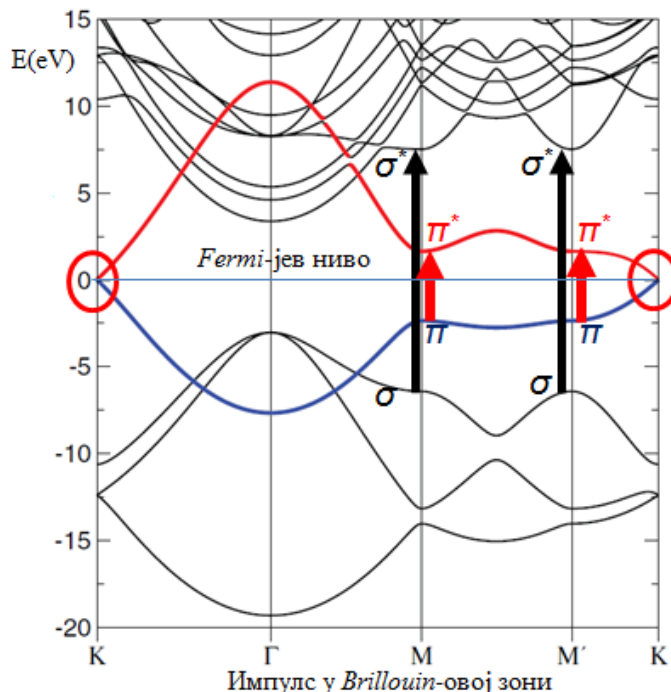
**Слика 2.3:** Модел енергијске дисперзије графена добијен методом јаке везе. Увеличано је приказан *Dirac*-ов конус [54].

У околини *Dirac*-ове тачке веза између енергије и импулса може да се напише у облику [55]:

$$E(k) = \pm \hbar v_F |\vec{k}| \quad (2.2)$$

Овде је  $v_F$  *Fermi*-јева брзина,  $\hbar$  је редукована *Planck*-ова константа а  $|\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . Експериментално је добијено да *Fermi*-јева брзина у графену износи  $v_F \approx 10^6 \text{ ms}^{-1} \approx c/300$  (где је  $c$  брзина светлости у вакууму) [56].

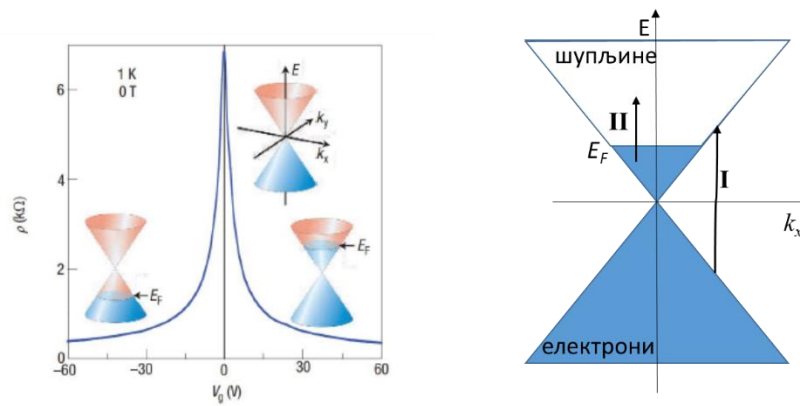
Један од метода који се користе за описивање  $\sigma$  електрона у графену је тзв. *ab initio* метод. Зонска структура недопираног графена добијена применом овог метода је приказана на слици 2.4. Пошто у овом случају нема слободних носилаца наелектрисања, *Dirac*-ове тачке означавају *Fermi*-јев ниво и нису могући унутарзонски (*intraband*), већ само међузонски (*interband*) прелази означени на слици 2.4.



**Слика 2.4:** Зонска структура недопираног графена. Плавом бојом је означена попуњена  $\pi$  зона а црвеном празна  $\pi^*$  зона. Стрелице означавају могуће међузонске прелази (прилагођено из [57]).

Поменути међузонски прелази се могу сматрати одговорним за готово константну апсорпцију у случају недопираног графена која износи  $\alpha \approx 2.3\%$  где је  $\alpha$  константа fine структуре [38].

У случају допираног графена ниво *Fermi*-јеве енергије се налази изнад или испод *Dirac*-ове тачке у зависности од тога да ли се ради о *p*-допираном или *n*-допираном графену (слика 2.5 лево). У зависности од врсте допирања валентна или проводна зона су сада делимично попуњене па су могући и унутарзонски прелази. Пример *n*-допираног графена је приказан на слици 2.5 десно. Када додамо носиоце наелектрисања (електроне) у проводну зону (*n*-допирани графен), *Fermi*-јева енергија расте (слика 2.5 десно). Допирање се може извршити такође уклањањем валентних електрона (*p*-допирани графен) и у овом случају се шупљине у валентној зони понашају као безмасене *Dirac*-ове честице.



**Слика 2.5:** (Лево) Приказ промене вредности  $E_F$  приликом промене напона  $gate$ -а  $V_g$ . У случају позитивног  $V_g$  је  $E_F > 0$ , ( $n$ -допиран графен), а у случају негативног  $V_g$  је  $E_F < 0$ , ( $p$ -допиран графен). (Десно) Шематски приказ међузонских (I) и унутарзонских (II) прелаза у  $n$ -допираном графену.

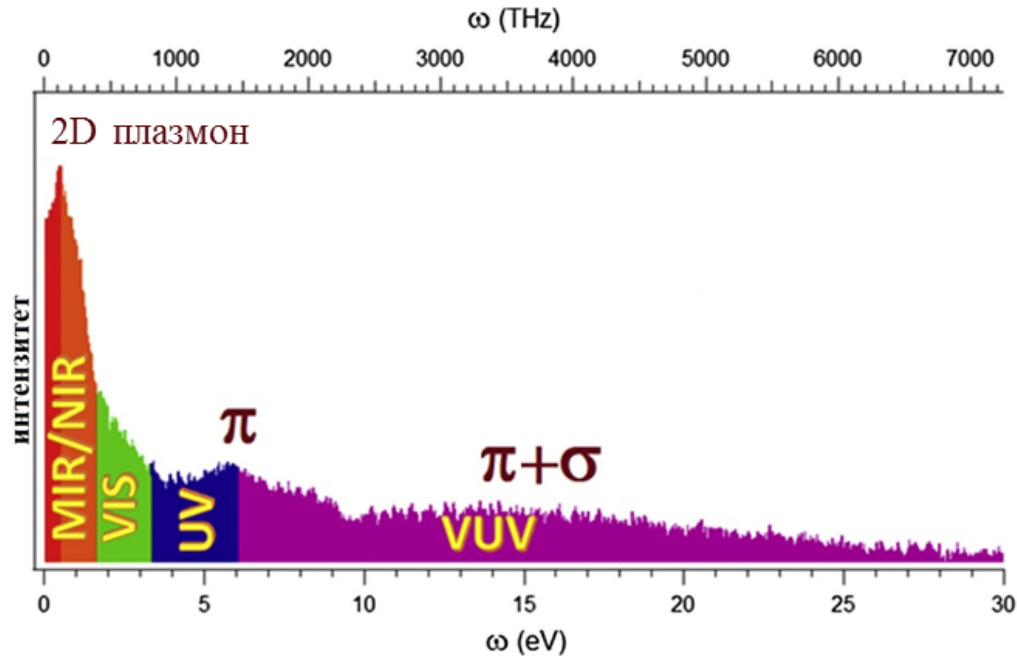
Експериментално, допирање графена (било електронима или шупљинама) се врши најчешће уз помоћ спољашњег напона  $gate$ -а. Овом методом је могуће допирати графен тако да  $Fermi$ -јева енергија износи чак 1 eV (што одговара густини носилаца наелектрисања од  $n = 75 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  пошто важи  $E_F = \hbar v_F k_F$  и где је  $Fermi$ -јев импулс  $k_F = \sqrt{\pi n}$  ).

Овде ћемо напоменути да може доћи и до спонтаног допирања графена, без примене спољашњег напона  $gate$ -а [11]. На пример, у случају графена на подлози од SiC графен постаје  $n$ -допиран услед преноса наелектрисања са подлоге [58], док је на подлози од Pt(111)  $p$ -допиран [59].

## 2.2. Високоенергијски и нискоенергијски плазмони

Плазмонима у графену називамо колективне осцилације електрона у односу на фиксирану позитивно наелектрисану решетку сачињену од атома угљеника. Ове осцилације су могуће пошто је привлачна сила решетке довољно слаба, па се електрони крећу слободно и формирају електронски облак који интерагује са спољашњим пољем. У зависности од енергије, плазмоне у графену можемо да поделимо у две групе. У прву спадају високоенергијски  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмони који се јављају на енергијама већим од 3 eV, а у другу  $Dirac$ -ов или 2D нискоенергијски плазмон на енергијама нижим од 3 eV [60].

На слици 2.6 је дат пример снимљеног спектра енергијског губитка електрона у графену на подлози од Ru(0001). Спектар је снимљен методом спектроскопије енергијског губитка електрона ( $EELS$ ) у широком опсегу енергија. Овде видимо да је у инфрацрвеној области ( $IR$ ) доминантан  $Dirac$ -ов плазмон док су на ултраљубичастим ( $UV$ ) учестаностима доминантни  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмони.



Слика 2.6: Пример 2D,  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмона снимљених у широком спектру енергија у систему графен/Ru(0001) (прилагођено из [32]).

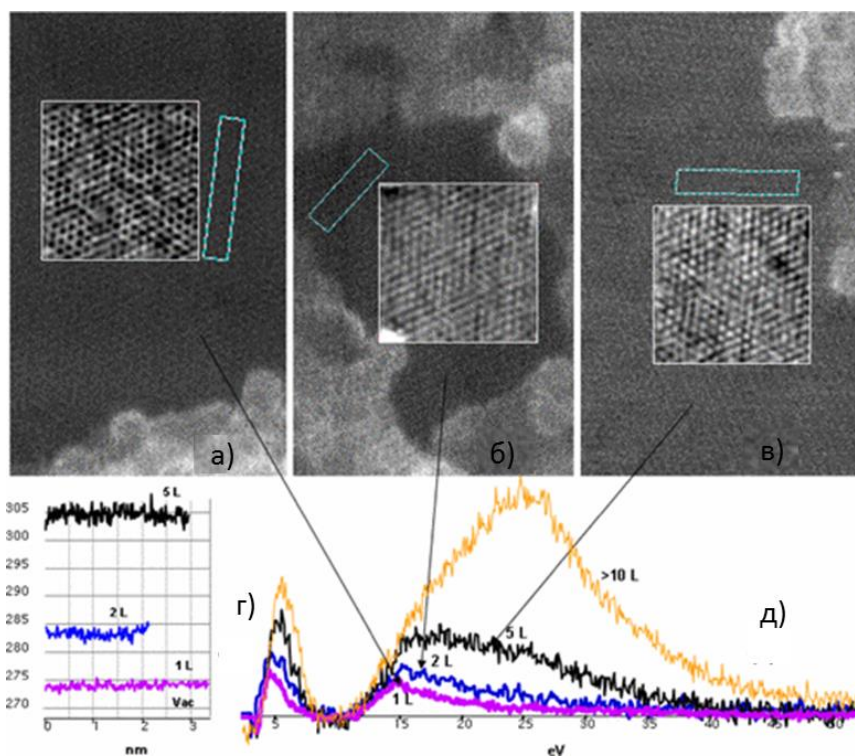
### 2.2.1. $\pi$ и $\pi+\sigma$ плазмони

У ексцитацијама до којих долази при динамичкој поларизацији графена на високим учестаностима доминирају високоенергијски међузонски прелази, независно од тога да ли је у питању допирани графен или не.

На сликама 2.7 а), б) и в) приказане су слике једног, два и пет слојева графена, респективно, добијене HAADF STEM методом (*High-Angle Annular Dark-Field Scanning Transmission Electron Microscopy*). На слици 2.7 г) дат је приказ дебљине једног, два и пет слојева графена. На слици 2.7 д) приказан је спектар измерен EELS методом за један, два, пет и више од десет слојева графена. У случају једнослојног графена примећено је да се јављају два одвојена максимума, на 4.7 и 14.6 eV и приписани су тзв.  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмону (слика 2.7 д) за један слој (1L)). Поменуте плазмонске моде су померене у односу на одговарајуће у комадном графиту [61]. Овде је приметно да долази до померања максимума који припадају  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмону са повећањем броја слојева графена. До овог померања долази услед повећања и екранирања и *Coulomb*-ове интеракције између слојева са порастом њиховог броја. За  $N>10$  слојева,  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  пикови се јављају на енергијама карактеристичним за графит (7-12 eV и 27-33 eV, респективно [11]).

Овде ћемо поменути и да постоје различита тумачења природе прелаза  $\pi \rightarrow \pi^*$  и  $\sigma \rightarrow \sigma^*$  у литератури. Прво је показано да поменути прелази представљају једночестичне ексцитације [47]. Наиме, показано је да реални део диелектричне функције слободног графена не пролази кроз нулу ни у једном од прелаза  $\pi \rightarrow \pi^*$  и  $\sigma \rightarrow \sigma^*$ , док имагинарни део диелектричне функције графена није довољно мали како би било могуће постојање колективних ексцитација. Супротно претходним тврдњама, аутори у [42] тврде да  $\pi \rightarrow \pi^*$  и  $\sigma \rightarrow \sigma^*$  међузонски прелази мењају карактер у зависности од таласног вектора  $q$ . За мале вредности ( $q \approx 0$ ) у питању су једночестична побуђења. Како расте  $q$  јављају се колективна побуђења (плазмони), док се за довољно велике вредности  $q$  опет јављају једночестична побуђења.





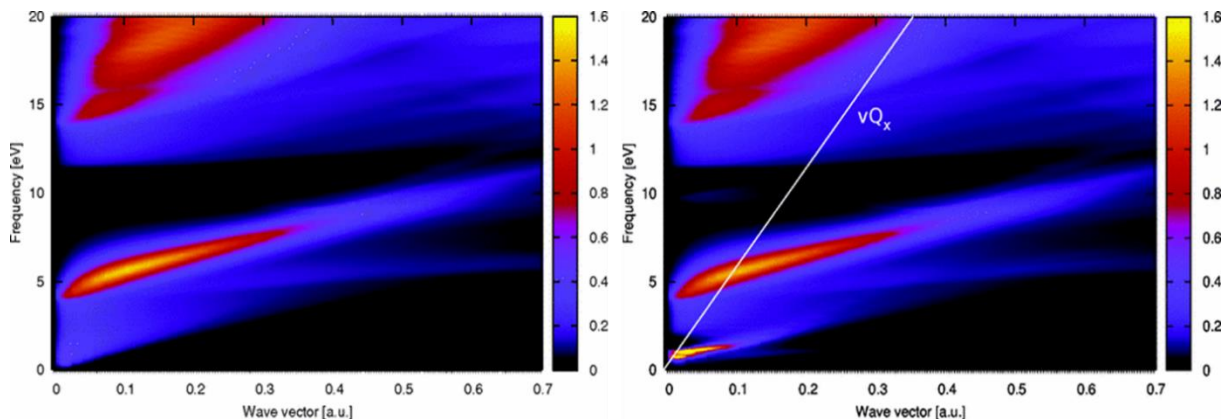
**Слика 2.7** (прилагођена из [49]): а), б) и в) слике једног, два и пет слојева графена добијене HAADF STEM методом (*High-Angle Annular Dark-Field Scanning Transmission Electron Microscopy*), г) приказ дебљина једног, два и пет слојева графена д) спектар измерен EELS методом за један, два, пет и више од десет слојева графена.

Са друге стране, у свом теоријском раду, [41], *Nazarov* тврди да слој графена треба посматрати не као 2D слој нулте дебљине већ као 2D слој дебљине атома, тзв. квази 2D слој. Оваквим приступом је показао да у истом опсегу енергија у графену постоје и  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмони као и једночестични међузонски  $\pi \rightarrow \pi^*$  и  $\sigma \rightarrow \sigma^*$  прелази.

### 2.2.2. *Dirac*-ов (2D) плазмон

У допираном графену, поред међузонских прелаза могући су и унутарзонски једночестични прелази као и унутарзонске колективне осцилације носилаца наелектрисања које се често називају *Dirac*-овим или 2D плазмонима [11,57]. Резонантне учестаности *Dirac*-ових плазмона у графену се налазе у области између THz и блиске инфрацрвене (NIR) области [26,27,62].

На слици 2.8 је приказан спектар и интензитет електронских побуда добијен *ab initio* методом у слободном графену (лево) као и у графену допираном до  $E_F = 1$  eV (десно) [63]. На нижим учестаностима на слици 2.8 лево се може видети континуум међузонских једночестичних прелаза  $\pi \rightarrow \pi^*$  ширине од око 4 eV на чијој горњој граници је јасно видљив  $\pi$  плазмон који почиње на око 4.3 eV. Са друге стране, у случају допираног графена на слици 2.8 десно се јасно види постојање *Dirac*-овог плазмона на ниским енергијама и за мале вредности таласног вектора (од 0 па до 0.1 а.у.) ког нема у недопираном случају. Континуум међузонских једночестичних прелаза  $\pi \rightarrow \pi^*$  је у овом случају померен ка вишим енергијама и сад постоји



**Слика 2.8:** (Лево) Спектар и интензитет електронских побуда у слободном графену. (Десно) Спектар и интензитет електронских побуда у графену допираном до  $E_F=1$  eV, бела линија означава учестаности и таласне векторе мода које може да побуди наелектрисање које се креће брзином  $\vec{v}$  паралелно површини графена.

тамна област која раздваја овај континуум од *Dirac*-овог плазмона. У оба случаја на слици 2.8 је јасно видљив  $\pi+\sigma$  плазмон који почиње на око 14 eV. Такође се да приметити да допирање графена не утиче на његов спектар.

Већ поменуто релативно лако подешавање нивоа *Fermi*-јеве енергије отвара огромне могућности за контролисање *Dirac*-овог плазмона, тачније његове енергијске дисперзије [60,64] и чини га важним за примене у плазмоници[5,11,38,65–67].

### 2.3. *Fuchs-Kliwer*-ови фонони у изолаторским слојевима који окружују графен

Слободни графен карактерише јако висока покретљивост електрона за коју је показано да може да износи и до  $200\,000\text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  [68]. Ипак, у реалним апликацијама графен је често окружен поларним изолаторским материјалима [26,69], као што су нпр.  $\text{SiO}_2$  [27] и  $\text{Al}_2\text{O}_3$  [69], и долази до смањења покретљивости носилаца наелектрисања и до реда величине [68]. До промене у електронским транспортним особинама у графену долази услед разних пертурбација које потичу од изолатора, као што су *Fuchs-Kliwer*-ови (*FK*) фонони, односно површински оптички фононски модови у области учестаности које су од интереса за технолошку примену [70].

Поменути *FK* фононски модови могу да интерагују са плазмонима у графену на више начина. Они представљају ефикасно средство за пригушење *Dirac*-ових плазмона [25,71]. Такође, може доћи и до јаке хибридизације *FK* фонона у изолатору са *Dirac*-овим плазмом у слоју графена [27] услед које долази до значајних промена у дисперзији колективних модова у графену што значајно утиче на примену плазмонских уређаја заснованих на графен-изолаторским слојевима.

До интеракције плазмона у графену са *FK* фононима долази услед временски зависног електричног поља које производе фонони и чија је учестаност  $\omega_f$ . Ово поље приморава електроне да осцилују на учестаности фонона. У случају када је ова учестаност нижа од сопствене учестаности плазмона ( $\omega_p$ ), тј.  $\omega_f < \omega_p$ , електрони могу да одговоре на побуду екранирањем електричног поља *FK* фонона. У другом случају, када је  $\omega_f > \omega_p$ , електрони у графену не могу да прате осцилације *FK* фонона па ни да екранирају њихово електрично поље већ је могуће да дође и до антиекранирања [72].

Треба напоменути да изолаторски слој сачињен од  $\text{SiO}_2$  подржава два *FK* фононска мода на учестаностима око 56 и 138 meV, док изолаторски слој сачињен од  $\text{Al}_2\text{O}_3$  подржава два *FK* фононска мода на учестаностима око 56 и 110 meV.

## 2.4. Ефекат таласа

Приликом проласка наелектрисане честице, која се креће брзином већом од *Fermi*-јеве, поред чврстог тела долази до појаве динамичког екранирања и ефекта таласа (тзв. *wake effect*), тј. анизотропних осцилација у индукованом потенцијалу који прати честицу. До појаве ефекта таласа долази када брзина упадне честице достигне фазну брзину колективних побуда у мети [73,74] па се његова појава сматра знаком да је дошло до поменутих побуда. Теоријски, ефекат таласа је први пут проучаван 1974. године [75], када је предвиђено његово јављање.

Када су у питању 2D проводни материјали, ефекат таласа је проучаван теоријски први пут код 2D електронског гаса [76], а затим и у неколико студија о ефекту таласа код угљеничних наноструктура, укључујући угљеничне наноцеви [77] и графен [63,78–81]. У случају графена, ефекат таласа је проучаван у случају интеракција јона и тачкастих дипола са „слободним“ графеном. Брзина упадне честице мора да буде већа од *Fermi*-јеве брзине у графену  $v_F$  како би се јавио ефекат таласа пошто при тим брзинама долази до побуђења *Dirac*-овог плазмона.

Приликом хибридизације *Dirac*-овог плазмона са оптичким фононима у графену долази до промене дисперзије колективних модова па је у овој тези посебно испитивано да ли у том случају долази до појаве ефекта таласа и за брзине мање од прага за појаву ефекта.

### 3. Математички модел заснован на решавању Poisson-ове једначине методом Green-ових функција

Како би разумели ефекте који се јављају при интеракцији наелектрисаних честица са вишеслојним структурама које садрже графен у овој глави развијамо математички модел заснован на решавању Poisson-ове једначине методом Green-ових функција. Извођење Poisson-ове једначине из Maxwell-ових једначина је дато у додатку 7.1. У изразима који следе користимо Gauss-ов систем јединица, узимамо да је редукована Planck-ова константа  $\hbar = 1$  (осим ако другачије није наглашено), а наелектрисање протона означавамо са  $e > 0$ .

#### 3.1. Poisson-ова једначина

Poisson-ова једначина за скаларни потенцијал електростатичког поља  $\Phi(\vec{r})$  у запремини  $V$  чија је гранична површ  $S$  са нормалом  $\vec{n}$ , у општем случају има облик:

$$\nabla \cdot [\varepsilon(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r})] = -4\pi \rho_{ext}(\vec{r}) \quad (3.1)$$

Овде је  $\rho_{ext}(\vec{r})$  густина спољашњег наелектрисања (извор електростатичког поља) а  $\varepsilon(\vec{r})$  диелектрична функција чија је зависност од вектора положаја  $\vec{r}$  повезана са променама диелектричних особина слојевите структуре коју посматрамо.

Једначина (3.1) има једнозначно решење уколико задовољава један од следећих граничних услова на граничној површи  $S$  области  $V$  [82,83]:

- 1) *Dirichlet*-ов гранични услов: унапред је познат потенцијал  $\Phi(\vec{r})$  за  $\forall \vec{r} \in S$
- 2) *Neumann*-ов гранични услов: унапред је познат извод потенцијала у правцу нормале  $\vec{n}$  на  $S$ , тј.  $\frac{\partial \Phi(\vec{r})}{\partial n} \equiv \vec{n} \cdot \nabla \Phi(\vec{r})$ .

Поред наведених граничних услова на граничној површи  $S$  потребно је познавати и све дисконтинуитете потенцијала и извода потенцијала унутар области  $V$ . У вишеслојним структурама диелектрика, које су од интереса у примени графена, често различити материјали окупирају различите области простора које су раздвојене граничним површима. Тада, при преласку из једне области у другу, диелектрична функција  $\varepsilon(\vec{r})$  има прекид прве врсте на самој граничној површи која раздваја те две области. Пошто решавамо Poisson-ову једначину (3.1) за све тачке  $\vec{r}$  у 3D простору, потребно је да одредимо понашање електростатичког потенцијала на граници две средине где долази до скока диелектричне функције  $\varepsilon(\vec{r})$ . То постижемо укључивањем у модел електростатичких граничних услова који следе из Maxwell-ових једначина. Поменути гранични услови су описани и наведени у додатку 7.2.

#### 3.2. Конструкција Poisson-овог граничног проблема

Сада решавамо Poisson-ову једначину за електростатички потенцијал  $\Phi(\vec{r})$  у области  $V$  која задовољава *Dirichlet*-ове граничне услове на затвореној површи  $S$ :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\varepsilon(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r})) = -4\pi \rho_{ext}(\vec{r}), \vec{r} \in V \\ \Phi(\vec{r}) = \text{познат}, \vec{r} \in S \end{cases} \quad (3.2)$$

где је  $\vec{r} = (x, y, z)$  вектор положаја а  $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$  диференцијални оператор у 3D *Descartes*-овом координатном систему. Код примене на слојевите структуре које проучавамо вредност потенцијала је или унапред позната на површи  $S$ , или узима вредност нула када  $\|\vec{r}\| \rightarrow \infty$ . Овако постављена, једначина (3.2) је парцијална диференцијална нехомогена једначина другог реда, елиптичког типа. За њено решавање користимо метод *Green*-ових функција ( $\Gamma\Phi$ ) [82]. Овај метод има много предности у односу на остале методе решавања диференцијалних једначина као што је нпр. сепарација варијабли, а посебно је погодан за решавање услова на граници две средине са различитим диелектричним особинама.

Потребно је да одредимо  $\Gamma\Phi$ ,  $G(\vec{r}, \vec{r}')$ , као функцију  $\vec{r} = (x, y, z)$  решавајући једначину аналогну једначини (3.2) у којој је густина наелектрисања  $\rho_{ext}(\vec{r})$  замењена са густином јединичног наелектрисања постављеног у некој произвољној фиксној тачки извора  $\vec{r}' = (x', y', z')$  и наметањем хомогене верзије граничних услова примењених у једначини (3.2):

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\varepsilon(\vec{r}) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}')) = -4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \vec{r} \in V \\ G(\vec{r}, \vec{r}') = 0, \vec{r} \in S \end{cases} \quad (3.3)$$

Овде је  $\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z')$  и представља *Dirac*-ову делта функцију у 3D.

Да би успоставили везу између  $\Gamma\Phi$  за дати електростатички проблем  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  и решења *Poisson*-ове једначине за електростатички потенцијал  $\Phi(\vec{r})$  користимо други *Green*-ов идентитет [82,83]:

$$\int_V [\varphi \Delta' \psi - \psi \Delta' \varphi] d^3 \vec{r}' = \oint_{S'} \left( \varphi \frac{\partial \psi}{\partial n'} - \psi \frac{\partial \varphi}{\partial n'} \right) dS' \quad (3.4)$$

Ако ставимо да је  $\varphi = \Phi(\vec{r}')$  и  $\psi = G(\vec{r}, \vec{r}')$  израз (3.4) постаје:

$$\int_V [\Phi(\vec{r}') \Delta' G(\vec{r}, \vec{r}') - G(\vec{r}, \vec{r}') \Delta' \Phi(\vec{r}')] d^3 \vec{r}' = \oint_{S'} \left( \Phi(\vec{r}') \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial n'} - G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \Phi(\vec{r}')}{\partial n'} \right) dS' \quad (3.5)$$

У случају вакуума или ваздуха ( $\varepsilon(\vec{r}) = 1$ ) на основу израза (3.2) и (3.3) имамо да је  $\Delta' \Phi(\vec{r}') = -4\pi \rho_{ext}(\vec{r}')$  и  $\Delta' G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi \delta(\vec{r}' - \vec{r})$ . Заменом ових израза у израз (3.5), и сређивањем, добија се:

$$\Phi(\vec{r}) = \int_V \rho_{ext}(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') d^3 \vec{r}' + \frac{1}{4\pi} \oint_{S'} \left[ G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \Phi(\vec{r}')}{\partial n'} - \Phi(\vec{r}') \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial n'} \right] dS' \quad (3.6)$$

Резултат (3.6) добија врло једноставну форму ако гранични услови за *Poisson*-ову једначину гласе  $\Phi(\vec{r}')=0$  или  $\partial\Phi(\vec{r}')/\partial n'=0$  за  $\vec{r}' \in S'$  што се јако често среће у пракси. По дефиницији,  $\Gamma\Phi$  такође мора да задовољава исте граничне услове, па је површински интеграл у (3.6) једнак нули, чиме се та релација своди на:

$$\Phi(\vec{r}) = \int_V \rho_{ext}(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') d^3\vec{r}' \quad (3.7)$$

Код решавања једначине (3.3) највише проблема задаје зависност  $\varepsilon$  од  $\vec{r}$ . У специјалном случају бесконачно великог хомогеног региона  $V$  у коме је  $\varepsilon = const$ ,  $\Gamma\Phi$  се лако добија из једначине (3.3) и гласи:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{\varepsilon} \frac{1}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} \quad (3.8)$$

користећи 3D *Fourier* – ов трансформ у односу на  $\vec{r}$ .

У општем случају када је  $\varepsilon(\vec{r})$  дефинисана као део-по-део непрекидна функција у коначној области  $V$  постоји више начина за решавање (3.3), као што су : метод ликова, метод својствених вредности и остали [84]. Пошто се у тези бавимо искључиво слојевитим структурама,  $\Gamma\Phi$  израчунавамо користећи специјалну особину таквих структура: транслациону инваријантност у смеровима паралелним са  $(x, y)$  равни у *Descartes*-овом координатном систему. Ова особина нам омогућава да применимо 2D *Fourier*-ову трансформацију ( $\Phi_T$ ) у односу на  $(x, y)$  раван и *Poisson*-ову једначину сведемо на систем обичних диференцијалних једначина (ОДЈ).

### 3.3. Транслациона инваријантност и 2D *Fourier*–ов трансформ

Слојевите структуре посматрамо узимајући у обзир неколико претпоставки. Прва је да су слојеви распоређени тако да је између њих оштра граница паралелна  $(x, y)$  равни 3D *Descartes*-овог координатног система који користимо. Слојеве ћемо означити са  $j=1,2,3,\dots$ , а одговарајуће диелектричне константе са  $\varepsilon_j$ . Поред тога, претпостављамо да се диелектричне особине материјала не мењају дуж слоја (у  $(x, y)$  равни) већ само дуж  $z$  осе. У том случају можемо да дефинишемо диелектричну функцију система диелектричних слојева као  $\varepsilon(z) = \varepsilon_j$  када је  $z \in I_j$  где  $I_j$  заузима интервал на  $z$  оси који заузима  $j$ -ти слој. Ове претпоставке нам отварају две могућности. Прва је да нам је омогућено да редукујемо 3D парцијалну диференцијалну једначину на обичну диференцијалну једначину користећи 2D  $\Phi_T$  у односу на  $x$  и  $y$  осу. Друга је да домен поменуте диференцијалне једначине сада можемо да поделимо на интервале  $I_j$  дуж  $z$  осе и једначину решавамо у сваком појединачно.

Када се диелектричне особине слојевите структуре мењају искључиво дуж  $z$  осе, једначину (3.3) можемо да напишемо у облику:

$$\nabla \cdot (\varepsilon(z) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}')) = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (3.9)$$

Погодно је написати  $\vec{r} = (\vec{R}, z)$  где је  $\vec{R} = (x, y)$  2D вектор положаја у  $(x, y)$  равни. Када посматрамо десну страну једначине (3.9) видимо да једина зависност од  $\vec{R} = (x, y)$  долази из  $\delta(x-x')\delta(y-y') = \delta(\vec{R}-\vec{R}')$ . Ово нам сугерише да  $\Gamma\Phi$ , која је једина функција која зависи од  $\vec{R} = (x, y)$  са леве стране мора такође да зависи од разлике  $\vec{R}-\vec{R}'$ . Можемо да закључимо да трансляциона инваријантност у 2D намеће захтев да  $\Gamma\Phi$  мора да буде облика  $G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{R}-\vec{R}'; z, z')$ .

Сада можемо да применимо 2D ФТ на  $\Phi(\vec{R}, z)$  и  $G(\vec{R}-\vec{R}'; z, z')$  у односу на  $(x, y)$  раван и да уведемо одговарајући вектор  $\vec{q} = (q_x, q_y)$ . Прво ћемо изразити  $\Gamma\Phi$  преко њеног 2D ФТ,  $\tilde{G}(\vec{q}; z, z')$ , као:

$$G(\vec{R}-\vec{R}'; z, z') = \int \frac{d^2\vec{q}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}-\vec{R}')} \tilde{G}(\vec{q}; z, z') \quad (3.10)$$

Даље, електростатички потенцијал можемо да изразимо преко 2D ФТ,  $\tilde{\Phi}(\vec{q}, z)$ , као:

$$\Phi(\vec{R}, z) = \int \frac{d^2\vec{q}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \tilde{\Phi}(\vec{q}, z) \quad (3.11)$$

Заменом (3.10) у (3.7) можемо да изразимо електростатички потенцијал преко 2D ФТ  $\Gamma\Phi$ ,  $\tilde{G}(\vec{q}; z, z')$ , и 2D ФТ спољашње густине наелектрисања,  $\tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z)$ , као:

$$\Phi(\vec{R}, z) = \int \frac{d^2\vec{q}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \int dz' \tilde{G}(\vec{q}; z, z') \tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z') \quad (3.12)$$

при чему смо користили да је:

$$\tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z') = \int \rho_{ext}(\vec{R}', z') e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}'} d^2\vec{R}' \quad (3.13)$$

### 3.4. Диференцијалне једначине за компоненте Гринове функције

Раније смо дефинисали диелектричну функцију као  $\varepsilon(z) = \varepsilon_j$  када  $z \in I_j$  где  $I_j$  означава интервал на  $z$  оси који заузима  $j$ -ти слој. Електростатички потенцијал такође можемо да дефинишемо као део-по-део непрекидну функцију,  $\Phi(\vec{r}) = \Phi_j(\vec{r})$  када  $z \in I_j$ , као и њему одговарајућу  $\Gamma\Phi$ ,  $G(\vec{r}, \vec{r}') = G_j(\vec{r}, \vec{r}')$  када  $z \in I_j$ , који сада задовољавају следеће једначине које следе из (3.2) и (3.3):

$$\nabla^2 \Phi_j(\vec{r}) = -\frac{4\pi}{\varepsilon_j} \rho_{ext}(\vec{r}), \quad z \in I_j \quad (3.14)$$

$$\nabla^2 G_j(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{4\pi}{\varepsilon_j} \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad z \in I_j \quad (3.15)$$

за  $j=1,2,3,\dots$

Како би пронашли ОДЈ за 2D ФТ сваке  $\Gamma\Phi$  ( $G_j(\vec{r}, \vec{r}') = G_j(\vec{R} - \vec{R}'; z, z')$ ) као функцију  $z$  координате, применили смо 2D ФТ у односу на  $\vec{R}$  у једначини за  $\Gamma\Phi$  (3.15). Искористили смо то да је  $\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{R} - \vec{R}')\delta(z - z')$  и поставили  $\vec{R}' = 0$  због транслационе инваријантности система. Добијене једначине су облика:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{G}_j(\vec{q}; z, z') - q^2 \tilde{G}_j(\vec{q}; z, z') = -\frac{4\pi}{\varepsilon_j} \delta(z - z') \quad (3.16)$$

где је  $q = \|\vec{q}\| = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ . На овај начин је 3D парцијална ДЈ (3.3) постала систем ОДЈ другог реда за ФТ  $\Gamma\Phi$  чије су компоненте  $\tilde{G}_j(\vec{q}; z, z')$  за  $j=1,2,3,\dots$ , где су  $q$  и  $z'$  параметри.

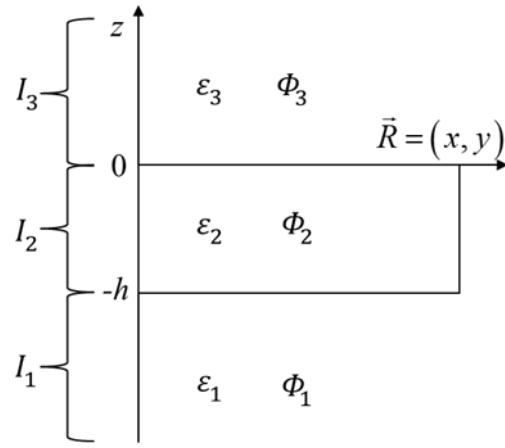
У конкретном случају посматрамо трослојну структуру приказану на слици 3.1 [85,86] где диелектрични слојеви окупирају интервале дуж  $z$  осе дефинисане на следећи начин:  $I_1 = (-\infty, -h]$ ,  $I_2 = [-h, 0]$  и  $I_3 = [0, +\infty)$  са одговарајућим диелектричним константама:  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  и  $\varepsilon_3$ , респективно. Коначно, укупни ФТ  $\Gamma\Phi$  може да се добије у виду решења диференцијалне једначине (3.16) у интервалима  $I_1, I_2$  и  $I_3$ :

$$\tilde{G}(\vec{q}; z, z') = \begin{cases} \tilde{G}_1(\vec{q}; z, z'), & z \in I_1 \\ \tilde{G}_2(\vec{q}; z, z'), & z \in I_2 \\ \tilde{G}_3(\vec{q}; z, z'), & z \in I_3 \end{cases} \quad (3.17)$$

Приликом решавања једначине (3.16), положај тачке извора  $z'$  у делта функцији на десној страни утиче на нехомогени део једначине па је важно познавати у ком слоју се налази тачка извора. Овде је погодно увести други индекс  $k$  у горњи ФТ  $\Gamma\Phi$ , који онда постаје тензор другог реда,  $\tilde{G}_{jk}(z, z')$ . Индекс  $j$  одговара положају тачке посматрања,  $z \in I_j$ , а индекс  $k$  положају тачке извора,  $z \in I_k$ , где су  $j, k = 1, 2, 3$ . Сада, девет компоненти ФТ  $\Gamma\Phi$  налазимо као решења система ОДЈ написаних у компактној форми на следећи начин:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{G}_{jk}(\vec{q}; z, z') - q^2 \tilde{G}_{jk}(\vec{q}; z, z') = -\frac{4\pi}{\varepsilon_j} \delta_{jk} \delta(z - z'), \quad z \in I_j \wedge z' \in I_k \quad (3.18)$$





**Слика 3.1:** Шематски приказ трослојне структуре.

где је  $\delta_{jk}$  *Kronecker*-ова делта и  $j, k = 1, 2, 3$ . Када су познате све компоненте ФТ ГФ, ФТ електростатичког потенцијала (односно ФТ решења једначине (3.14)) на основу израза (3.11) и (3.12) можемо да напишемо у 2D ФТ простору као део-по-део непрекидну функцију:

$$\tilde{\Phi}_j(\vec{q}, z) = \sum_{k=1}^3 \int_{I_k} \tilde{G}_{jk}(\vec{q}; z, z') \tilde{\rho}_k^{ext}(\vec{q}, z') dz' \quad (3.19)$$

Овде је  $\tilde{\rho}_k^{ext}(\vec{q}, z')$  део спољашњег наелектрисања које по дефиницији припада интервалу  $z \in I_k$ .

Такође ћемо укратко продискутовати особину *Maxwell*-ове симетрије ГФ [87], која може да се изрази као  $G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r}', \vec{r})$  (компоненте ГФ су симетричне). Можемо да приметимо да коефицијенти ГФ,  $\tilde{G}_{jk}$ , који представљају решења једначине (3.18), зависе једино од модула  $q = \|\vec{q}\|$  вектора  $\vec{q}$  тако да важи  $\tilde{G}_{jk}(\vec{q}; z, z') = \tilde{G}_{jk}(q; z, z')$ . Тада из једначине (3.10) следи  $G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\|\vec{R} - \vec{R}'\|; z, z')$  што значи да ГФ зависи само од модула разлике вектора  $\vec{R} - \vec{R}'$  а не и од његовог смера. Ова особина нам говори да су диелектрични слојеви изотропни у  $(x, y)$  равни. Пошто можемо да напишемо:

$$G(\|\vec{R} - \vec{R}'\|; z, z') = G(\|\vec{R}' - \vec{R}\|; z, z') \quad (3.20)$$

особина *Maxwell*-ове симетрије имплицира да такође мора да важи  $\tilde{G}_{jk}(q; z, z') = \tilde{G}_{kj}(q; z', z)$ . Последња једнакост може да се интуитивно опише ако размотримо физичку интерпретацију ГФ:  $G(q; z, z')$  је одговор система у тачки  $z$  на јединично наелектрисање у тачки  $z'$  и ако заменимо места тачке посматрања и тачке извора добијамо исту вредност. Захваљујући овој особини симетрије потребно нам је да пронађемо само шест компоненти тензора  $\tilde{G}_{jk}(q; z, z')$ .

Како би поједноставили нотацију, од сада ће се зависност од  $q$  подразумевати у ФТ ГФ и неће бити написана експлицитно у овој глави тезе. Опет ћемо је писати у наредним главама.

### 3.5. Услови на граници две супстанцијалне средине за ФТ ГФ

Сада ћемо продискутовати услове које мора да задовољава ОДЈ за компоненте ФТ ГФ (3.18) на граници две средине. Ови услови следе из одговарајућих електростатичких граничних услова за електростатички потенцијал  $\Phi(\vec{r})$  пошто ГФ  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  у суштини представља електростатички потенцијал који потиче од јединичног наелектрисања у тачки  $\vec{r}'$ .

#### Понашање *Green*-ових функција у бесконачности

Из услова наметнутих у једначини (3.3) где ГФ тежи нули у случају када  $\|\vec{r}\| \rightarrow \infty$ , следе услови за понашање у бесконачности ФТ ГФ (која представља решења (3.18)):

$$\begin{cases} \tilde{G}_{1k}(-\infty, z') = 0, & k = 1, 2, 3 \\ \tilde{G}_{3k}(\infty, z') = 0, & k = 1, 2, 3 \end{cases} \quad (3.21)$$

#### Непрекидност на граници две средине

Потребно је да електростатички потенцијал буде непрекидна функција, па свака два решења скупа једначина (3.18) која припадају суседним интервалима морају да се поклапају у граничним тачкама  $z = -h$  на граници  $I_1/I_2$  и  $z = 0$  на граници  $I_2/I_3$ , што нам намеће следеће услове:

$$\begin{cases} \tilde{G}_{1k}(-h, z') = \tilde{G}_{2k}(-h, z'), & k = 1, 2, 3 \\ \tilde{G}_{2k}(0, z') = \tilde{G}_{3k}(0, z'), & k = 1, 2, 3 \end{cases} \quad (3.22)$$

#### Скок потенцијала на граници две средине

У нашем моделу диелектрична функција  $\varepsilon(z)$  има коначан скок на границама интервала  $I_1/I_2$  и  $I_2/I_3$ . Електростатички услови за скок извода ГФ у правцу нормале у  $z = -h$  и  $z = 0$  гласе (видети додатак 7.2):

$$\begin{cases} \varepsilon_1 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{1k}(z, z') \Big|_{z=-h} = \varepsilon_2 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{2k}(z, z') \Big|_{z=-h}, & k = 1, 2, 3. \\ \varepsilon_2 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{2k}(z, z') \Big|_{z=0} = \varepsilon_3 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{3k}(z, z') \Big|_{z=0}, & k = 1, 2, 3. \end{cases} \quad (3.23)$$

## Услови за непрекидност и скок потенцијала за дијагоналне елементе *Green*-ових функција

Када и  $z$  и  $z'$  припадају истом интервалу  $I_j$ , погодно је дефинисати две компоненте одговарајућег дијагоналног елемента ФТ ГФ [87] као:

$$\tilde{G}_{jj}(z, z') = \begin{cases} \tilde{G}_{jj}^<(z, z'), & z \leq z', \\ \tilde{G}_{jj}^>(z, z'), & z \geq z', \end{cases} \quad (3.24)$$

које морају да задовољавају услове континуитета и скока у  $z = z'$  :

$$\begin{cases} \tilde{G}_{jj}^<(z', z') = \tilde{G}_{jj}^>(z', z'), & j = 1, 2, 3. \\ \left. \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{jj}^>(z, z') \right|_{z=z'} - \left. \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{jj}^<(z, z') \right|_{z=z'} = -\frac{4\pi}{\varepsilon_j}, & j = 1, 2, 3. \end{cases} \quad (3.25)$$

### 3.6. *Dyson-Schwinger*-ова једначина за слојевиту структуру са графеном

Графен је 2D материјал дебљине само једног атома угљеника (реда величине  $\sim \text{\AA}$ ), чији носиоци наелектрисања могу да се окарактерису површинском густином наелектрисања  $\sigma_g$ , тј. бројем јединичних наелектрисања по јединици површине графена. Стога, при проучавању интеракције графена са електростатичким пољем, можемо да претпоставимо да је графен инфинитезимално танак слој који представља границу између два региона и на којој долази до скока нормалних компоненти вектора јачине електричног поља од  $4\pi\sigma_g$  према једначини (7.20) датој у додатку 7.2.

Претпостављамо да се један слој графена налази у равни која је паралелна границама између различитих диелектрика у слојевитој структури ( $z = z_g$ ) у *Descartes*-овом координатном систему и где је  $\vec{r} = (\vec{R}, z)$ . Површинска густина наелектрисања на графену  $\sigma_g(\vec{R}, t)$  је у општем случају функција 2D вектора положаја  $\vec{R} = (x, y)$  и времена  $t$ . Као што смо већ урадили у претходном случају, применићемо ФТ у односу на  $\vec{R}$  и  $t$  како би добили густину наелектрисања графена у ФТ простору као  $\tilde{\sigma}_g(\vec{q}, \omega)$ . Овде напомињемо да је „слободни графен“ (који се не налази у електричном пољу) електронеутралан, и тада је  $\sigma_g(\vec{r}, t) = 0$ . У случају када је слој графена окружен временски зависним електричним потенцијалом (чији је ФТ  $\tilde{\Phi}(\vec{q}, z, \omega)$ ), носиоци наелектрисања у графену су поларизовани потенцијалом који у равни графена има вредност  $\tilde{\Phi}(\vec{q}, z_g, \omega)$ . Према теорији линеарног одзива за графен, веза између површинске густине наелектрисања графена и вредности електростатичког потенцијала на површини графена, изражена у ФТ простору, је облика:

$$\tilde{\sigma}_g(\vec{q}, \omega) = -e^2 \chi(\vec{q}, \omega) \tilde{\Phi}(\vec{q}, z_g, \omega) \quad (3.26)$$

где је  $\epsilon$  наелектрисање електрона а  $\chi(\vec{q}, \omega)$  такозвана поларизациона функција графена која се може израчунати коришћењем различитих микроскопских модела кретања носилаца наелектрисања у графену [88].

Сада ћемо показати како се у присуству графена модификују претходни гранични услови за електростатички потенцијал. Претпостављамо да област  $z < z_g$  испод графена карактеришу диелектрична константа  $\epsilon_1$  и потенцијал  $\tilde{\Phi}_1(\vec{q}, z, \omega)$ , док је област  $z > z_g$  изнад графена окарактерисана са  $\epsilon_2$  и  $\tilde{\Phi}_2(\vec{q}, z, \omega)$ . Овде треба приметити да чак и у случају када су диелектричне константе једнаке,  $\epsilon_1 = \epsilon_2$ , изрази за електростатичке потенцијале  $\tilde{\Phi}_1$  и  $\tilde{\Phi}_2$  могу да се разликују услед присуства коначне густине наелектрисања на графену. Може се показати да електростатички услов за скок извода потенцијала у правцу нормале гласи (видети израз (7.22) у додатку 7.2 где стављамо  $\sigma = \sigma_g(\vec{q}, \omega)$  и користимо израз (3.26)):

$$\epsilon_1 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{\Phi}_1(\vec{q}, z_g, \omega) - \epsilon_2 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{\Phi}_2(\vec{q}, z_g, \omega) = -4\pi e^2 \chi(\vec{q}, \omega) \tilde{\Phi}(\vec{q}, z_g, \omega) \quad (3.27)$$

где је  $\tilde{\Phi}(\vec{q}, z_g, \omega) \equiv \tilde{\Phi}_1(\vec{q}, z_g, \omega) = \tilde{\Phi}_2(\vec{q}, z_g, \omega)$  услед непрекидности потенцијала. У претходним поглављима било је речи о ГФ у случају слојевите структуре без графена. Чињеница да можемо да посматрамо слој графена као инфинитезимално танак може да се искористи при примени *Dyson-Schwinger*-ове једначине за израчунавање ГФ  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  за слојевиту структуру са графеном у случају када нам је позната ГФ  $G^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}')$  за ту исту структуру без графена.

Прво посматрамо *Poisson*-ову једначину за слојевиту структуру у општем случају и узимамо да је примењен 2D ФТ у односу на  $\vec{R}$ . Уколико је  $\tilde{L}_z$  линеарни оператор за ову једначину у ФТ простору, тада *Poisson*-ова једначина за ФТ електростатичког потенцијала  $\tilde{\Phi}(z)$  за спољашње наелектрисање произвољне густине  $\tilde{\rho}_{ext}(z)$  гласи:

$$\tilde{L}_z \tilde{\Phi}(z) = -4\pi \tilde{\rho}_{ext}(z) \quad (3.28)$$

где смо изоставили зависност од  $\vec{q}$  и нагласили да  $\tilde{L}_z$  делује само на  $z$  координату у потенцијалу. Одговарајући ФТ ГФ за претходну једначину задовољава једначину облика:

$$\tilde{L}_z \tilde{G}^{(0)}(z, z') = -4\pi \delta(z - z') \quad (3.29)$$

Претпостављамо да је решење претходне „непертурбоване“ једначине (3.29) познато тако да решење једначине (3.28) може да се напише као:

$$\tilde{\Phi}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}^{(0)}(z, z'') \tilde{\rho}_{ext}(z'') dz'' \quad (3.30)$$

Сада, уколико постоји пертурбација система која може бити описана оператором  $\tilde{V}(z)$ , можемо да дефинишемо нови оператор  $\tilde{O}_z = \tilde{L}_z + \tilde{V}(z)$ . *Poisson*-ова једначина за такву „пертурбовану“ структуру гласи:

$$\check{O}_z \check{\Phi}(z) = -4\pi \check{\rho}_{ext}(z) \quad (3.31)$$

Желимо да одредимо одговарајући „пертурбован“ ФТ ГФ  $\check{G}(z, z')$  који мора да задовољава једначину:

$$\check{O}_z \check{G}(z, z') = -4\pi \delta(z - z') \quad (3.32)$$

Можемо да изразимо  $\check{G}(z, z')$  преко  $\check{G}^{(0)}(z, z')$  и  $\check{V}(z)$  преписујући једначину (3.32) на следећи начин:

$$\begin{aligned} \check{L}_z \check{G}(z, z') &= -\check{V}(z) \check{G}(z, z') - 4\pi \delta(z - z') \\ &= -4\pi \left[ \frac{1}{4\pi} \check{V}(z) \check{G}(z, z') + \delta(z - z') \right] \\ &= -4\pi \check{\rho}_{ext}^*(z, z') \end{aligned} \quad (3.33)$$

где смо у последњем кораку дефинисали ефективну густину спољашњег наелектрисања  $\check{\rho}_{ext}^*(z, z')$  која зависи само од  $z'$ . Тада, ако се осврнемо на једначину (3.28), можемо да посматрамо  $\check{G}(z, z')$  као потенцијал „непертурбоване“ структуре који је индукован спољашњим наелектрисањем густине  $\check{\rho}_{ext}^*(z, z')$  и може да се изрази у интегралној форми користећи једначину (3.30):

$$\begin{aligned} \check{G}(z, z') &= \int_{-\infty}^{\infty} \check{G}^{(0)}(z, z'') \check{\rho}_{ext}^*(z'', z') dz'' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \check{G}^{(0)}(z, z'') \left[ \frac{1}{4\pi} \check{V}(z'') \check{G}(z'', z') + \delta(z'' - z') \right] dz'' \\ &= \check{G}^{(0)}(z, z') + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \check{G}^{(0)}(z, z'') \check{V}(z'') \check{G}(z'', z') dz'' \end{aligned} \quad (3.34)$$

Изједначавајући леву страну са последњим редом у једначини (3.34) добијамо интегралну једначину, тзв. *Dyson-Schwinger*-ова једначина, за непознату ГФ  $\check{G}(z, z')$  која укључује познате функције  $\check{G}^{(0)}(z, z')$  и  $\check{V}(z)$ . Ова једначина има широку примену у математичкој физици. У специјалном случају, када до пертурбације система долази укључивањем  $N$  слојева графена (који се налазе у равнима  $z = z_n$ ), пертурбација система је дефинисана на следећи начин:

$$\check{V}(z) = -4\pi e^2 \sum_{n=1}^N \chi_n \delta(z - z_n) \quad (3.35)$$

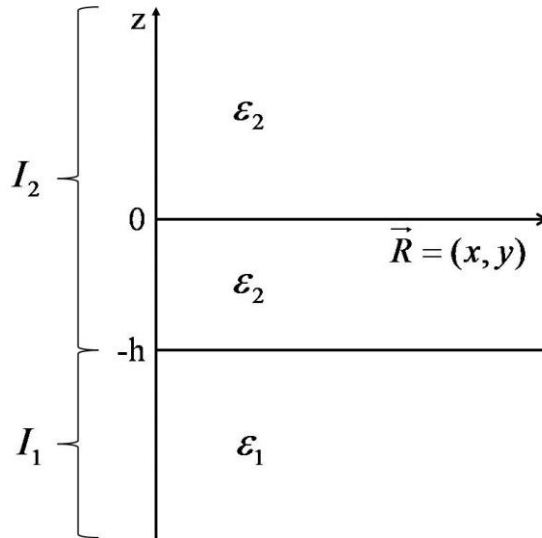
где је  $\chi_n \equiv \chi_n(\vec{q}, \omega)$  поларизациона функција  $n$ -тог слоја графена.

### 3.7. Израчунавање *Green*-ове функције у случају двослојне и трослојне структуре

У овом поглављу је примењен претходно описан математички модел на конкретне слојевите структуре. Прво је израчуната ГФ за најпростији случај, двослојну структуру без графена (приказану на слици 3.2).

#### 3.7.1. Компоненте *Green*-ове функције у случају двослојне структуре која не садржи графен

Посматрамо једноставан систем приказан на слици 3.2 који се састоји из два полубесконачна региона са диелектричним функцијама  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ , који окупирају интервале  $I_1 = (-\infty, -h]$  и  $I_2 = [-h, \infty)$ , тим редом. Овај систем користимо при испитивању интеракција јона са графеном (смештеним у  $z = 0$  равни) испод кога се, на растојању  $h$ , налази полубесконачна подлога. У случајевима који су нам од интереса, тачка извора се увек налази у интервалу  $I_2$  тако да је потребно да израчунамо компоненте ФТ ГФ за  $z' \in I_2$ , (тј.  $\tilde{G}_{12}^{(0)}$  и  $\tilde{G}_{22}^{(0)}$ ).



Слика 3.2: Шематски приказ двослојне структуре без присуства графена

Примењујући услове (3.21) - (3.23) на горњу структуру добијамо да у бесконачности за компоненте ГФ важи:

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{12}^{(0)}(-\infty, z') &= 0 \\ \tilde{G}_{22}^{(0)}(+\infty, z') &= 0\end{aligned}\tag{3.36}$$

а у  $z = -h$ :

$$\tilde{G}_{12}^{(0)}(-h, z') = \tilde{G}_{22}^{(0)}(-h, z')\tag{3.37}$$

$$\epsilon_1 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{12}^{(0)}(z, z') \Big|_{z=-h} = \epsilon_2 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{22}^{(0)}(z, z') \Big|_{z=-h}\tag{3.38}$$

Компоненте Гринове функције  $G_{12}^{(0)}$  и  $G_{22}^{(0)}$  (као решења система ОДЈ датих изразом (3.18) ) можемо да напишемо у облику:

$$\tilde{G}_{12}^{(0)}(z, z') = Ae^{qz} + Be^{-qz} \quad (3.39)$$

$$\tilde{G}_{22}^{(0)}(z, z') = Ce^{qz} + De^{-qz} + \frac{2\pi}{q\varepsilon_2} e^{-q|z-z'|} \quad (3.40)$$

где су  $A, B, C$  и  $D$  коефицијенти које треба одредити.

Као последицу граничних услова (3.36), у изразу (3.39) можемо да ставимо  $B = 0$ , а у изразу (3.40)  $C = 0$ . Такође, узимамо да је  $\varepsilon_2 = 1$  (област  $[-h, \infty)$  је вакуум или ваздух). Заменом израза (3.39) и (3.40) у (3.37) и (3.38) и решавањем добијеног система једначина израчунате су вредности коефицијената  $A$  и  $D$  :

$$A = \frac{4\pi}{q[\varepsilon_s(\omega) + 1]} e^{-qz'} \quad (3.41)$$

$$D = -\frac{2\pi}{q} e^{-qz'} \frac{\varepsilon_s(\omega) - 1}{\varepsilon_s(\omega) + 1} e^{-2qh}$$

Диелектричну функцију посматраног система можемо да представимо у облику [40,79,89]:

$$\varepsilon_{bg}(q, \omega) = \left[ 1 - \frac{\varepsilon_s(\omega) - 1}{\varepsilon_s(\omega) + 1} e^{-2qh} \right]^{-1} \quad (3.42)$$

где је  $\varepsilon_s(\omega)$  диелектрична функција супстрата и у овом случају је  $\varepsilon_1 = \varepsilon_s(\omega)$ .

Користећи изразе (3.39) - (3.42) коначно добијамо:

$$\tilde{G}_{12}^{(0)}(z, z') = \frac{4\pi}{q[\varepsilon_s(\omega) + 1]} e^{q(z-z')}$$

$$\tilde{G}_{22}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z'|} + \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon_{bg}(q, \omega)} - 1 \right] e^{-q(z+z')} \quad (3.43)$$

### 3.7.2. Green-ова функција за двослојну структуру са укљученим слојем графена

Сада у систем са слике 3.2 укључујемо слој графена у равни  $z_g = 0$  користећи *Dyson-Schwinger*-ову једначину (3.34). У овом случају је  $N = 1$  у једначини (3.35), па пертурбација система има облик:

$$\check{V}(z) = -4\pi e^2 \chi(q, \omega) \delta(z - z_g) \quad (3.44)$$

Заменом (3.44) у (3.34) добијамо *Dyson-Schwinger*-ову једначину за један слој графена укључен у двослојну структуру:

$$\tilde{G}(z, z') = \tilde{G}^{(0)}(z, z') - e^2 \chi(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z, z_g) \tilde{G}(z_g, z') \quad (3.45)$$

Сменом  $z = z_g$  у (3.45) добијамо:

$$\tilde{G}(z_g, z') = \tilde{G}^{(0)}(z_g, z') - e^2 \chi(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_g, z_g) \tilde{G}(z_g, z') \quad (3.46)$$

одакле је сада могуће изразити  $\tilde{G}(z_g, z')$  и чијом заменом у (3.45) добијамо ФТ ГФ са укљученим слојем графена преко сада већ познате ГФ за слојевиту структуру без графена, на следећи начин:

$$\tilde{G}(z, z') = \tilde{G}^{(0)}(z, z') - \frac{e^2 \chi(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z, z_g) \tilde{G}^{(0)}(z_g, z')}{1 + e^2 \chi(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_g, z_g)} \quad (3.47)$$

Како је  $z_g = 0$ :

$$\tilde{G}(z, z') = \tilde{G}^{(0)}(z, z') - \frac{e^2 \chi(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z, 0) \tilde{G}^{(0)}(0, z')}{1 + e^2 \chi(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(0, 0)} \quad (3.48)$$

Нас занима област  $z > 0$  и  $z' > 0$  (посматраћемо наелектрисану честицу која се креће изнад површине графена смештеног у  $z = 0$  равни):

$$\tilde{G}^{(0)}(z, z') = \tilde{G}_{22}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z'|} + \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon_{bg}(q, \omega)} - 1 \right] e^{-q(z+z')} \quad (3.49)$$

$$\begin{cases} \tilde{G}^{(0)}(z, 0) = \frac{2\pi}{q} e^{-qz} \frac{1}{\varepsilon_{bg}(q, \omega)} \\ \tilde{G}^{(0)}(0, z') = \frac{2\pi}{q} e^{-qz'} \frac{1}{\varepsilon_{bg}(q, \omega)} \\ \tilde{G}^{(0)}(0, 0) = \frac{2\pi}{q} \frac{1}{\varepsilon_{bg}(q, \omega)} \end{cases} \quad (3.50)$$

Диелектричну функцију система можемо да представимо преко диелектричне функције система без графена,  $\varepsilon_{bg}(q, \omega)$ , и поларизационе функције слоја графена  $\chi(q, \omega)$  која представља поларизациону функцију неинтерагујућих  $\pi$  електрона у слободном графену и коју рачунамо *RPA* методом [62,90–92]:

$$\varepsilon(q, \omega) = \varepsilon_{bg}(q, \omega) + \frac{2\pi e^2}{q} \chi(q, \omega) \quad (3.51)$$

Коришћењем претходног израза и заменом (3.49) и (3.50) у (3.48), добијамо израз за ГФ система:

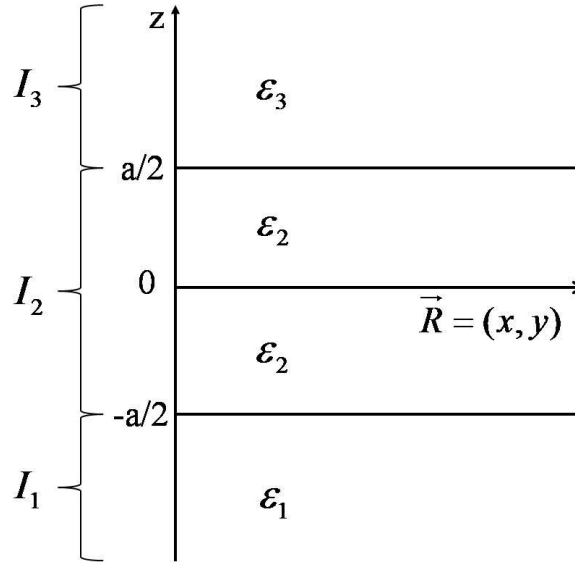
$$\tilde{G}(z, z') = \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z'|} + \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} - 1 \right] e^{-q(z+z')} \quad (3.52)$$



где први члан представља *Coulomb*-ову ГФ  $\tilde{G}_c(z, z')$  а други члан одговара индукованој ГФ,  $\tilde{G}_{ind}(z, z')$ .

### 3.7.3. *Green*-ова функција у случају трослојне структуре без графена

Посматрамо систем приказан на слици 3.3 који се састоји из три региона са диелектричним функцијама  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  и  $\varepsilon_3$  који окупирају интервале:  $I_1 = (-\infty, -a/2]$ ,  $I_2 = [-a/2, a/2]$  и  $I_3 = [a/2, +\infty)$ , тим редом. Овај систем користимо у случају два слоја графена (смештеним у  $z = -a/2$  и  $z = a/2$  равнима) између којих се налази изолаторски слој дебљине  $a$ . Овде, ради једноставности, узимамо да је растојање између слојева графена и изолатора једнако нули.



Слика 3.3: Шематски приказ трослојне структуре без присуства графена

Рачунамо компоненте ФТ ГФ  $\tilde{G}_{jk}^{(0)}(z, z')$  за које важи да  $z \in I_j$  и  $z' \in I_k$  за  $j, k = 1, 2, 3$ . Примењујући услове (3.21) - (3.25), на сличан начин као у претходном случају добијамо да за понашање компоненти ГФ важи следеће:

- у бесконачности једнаке су нули

$$\tilde{G}_{1k}^{(0)}(-\infty, z') = 0, \quad k = 1, 2, 3 \quad (3.53)$$

$$\tilde{G}_{3k}^{(0)}(+\infty, z') = 0, \quad k = 1, 2, 3 \quad (3.54)$$

- на граници две средине су непрекидне

$$\tilde{G}_{1k}^{(0)}\left(-\frac{a}{2}, z'\right) = \tilde{G}_{2k}^{(0)}\left(-\frac{a}{2}, z'\right), \quad k = 1, 2, 3 \quad (3.55)$$

$$\tilde{G}_{2k}^{(0)}\left(\frac{a}{2}, z'\right) = \tilde{G}_{3k}^{(0)}\left(\frac{a}{2}, z'\right), \quad k = 1, 2, 3 \quad (3.56)$$

3. на граници две средине њихови изводи имају скок

$$\varepsilon_1 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{1k}^{(0)}(z, z') \Big|_{z=-\frac{a}{2}} = \varepsilon_2 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{2k}^{(0)}(z, z') \Big|_{z=-\frac{a}{2}} \quad k = 1, 2, 3 \quad (3.57)$$

$$\varepsilon_2 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{2k}^{(0)}(z, z') \Big|_{z=\frac{a}{2}} = \varepsilon_3 \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{3k}^{(0)}(z, z') \Big|_{z=\frac{a}{2}} \quad k = 1, 2, 3 \quad (3.58)$$

У случају  $z, z' \in I_j$  компоненте ГФ дефинишемо на следећи начин:

$$\tilde{G}_{jj}^{(0)}(z, z') = \begin{cases} \tilde{G}_{jj}^<(z, z'), & z \leq z' \\ \tilde{G}_{jj}^>(z, z'), & z \geq z' \end{cases} \quad (3.59)$$

У случају  $z = z'$  компоненте ГФ (3.59) су непрекидне:

$$\tilde{G}_{jj}^<(z, z') \Big|_{z=z'} = \tilde{G}_{jj}^>(z, z') \Big|_{z=z'}, \quad j = 1, 2, 3 \quad (3.60)$$

а њихови изводи трпе скок:

$$\frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{jj}^>(z, z') \Big|_{z=z'} - \frac{\partial}{\partial z} \tilde{G}_{jj}^<(z, z') \Big|_{z=z'} = -\frac{4\pi}{\varepsilon_j}, \quad j = 1, 2, 3 \quad (3.61)$$

**Случај**  $z' \in I_1$  ( $k = 1$ ):

$$\tilde{G}_{11}^<(z, z') = Ae^{qz} \quad (3.62)$$

$$\tilde{G}_{11}^>(z, z') = Be^{qz} + Ce^{-qz} \quad (3.63)$$

$$\tilde{G}_{21}^{(0)}(z, z') = De^{qz} + Ee^{-qz} \quad (3.64)$$

$$\tilde{G}_{31}^{(0)}(z, z') = Fe^{-qz} \quad (3.65)$$

Заменом (3.62) и (3.63) у (3.60) као и у (3.61), заменом (3.63) и (3.64) у (3.55) и (3.57), као и заменом (3.64) и (3.65) у (3.56) и (3.58) добијамо нехомогени систем од шест алгебарских једначина. Решавањем датог система добијамо компоненте ГФ:

$$\tilde{G}_{11}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q\varepsilon_1} \left[ e^{-q|z-z'|} + \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)e^{-2qa}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)e^{-2qa}} e^{q(z+z'+a)} \right] \quad (3.66)$$

$$\tilde{G}_{21}^{(0)}(z, z') = \frac{4\pi}{q} \frac{(\varepsilon_3 + \varepsilon_2)e^{q(z'-z)} - (\varepsilon_3 - \varepsilon_2)e^{q(z+z'-a)}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)e^{-2qa}} \quad (3.67)$$

$$\tilde{G}_{31}^{(0)}(z, z') = \frac{8\pi\varepsilon_2}{q} \frac{e^{q(z'-z)}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)e^{-2qa}} \quad (3.68)$$

У случају  $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 1$  (вакуум или ваздух),  $\varepsilon_2 = \varepsilon_s(\omega)$  (диелектрична функција изолаторског слоја) претходни изрази постају:

$$\tilde{G}_{11}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} \left[ e^{-q|z-z'|} + \frac{1 - \varepsilon_s^2(\omega) - (1 - \varepsilon_s^2(\omega))e^{-2qa}}{(1 + \varepsilon_s(\omega))^2 - (1 - \varepsilon_s(\omega))^2} e^{-2qa} e^{q(z+z'+a)} \right] \quad (3.69)$$

$$\tilde{G}_{21}^{(0)}(z, z') = \frac{4\pi}{q} \frac{(1 + \varepsilon_s(\omega))e^{q(z'-z)} - (1 - \varepsilon_s(\omega))e^{q(z+z'-a)}}{(1 + \varepsilon_s(\omega))^2 - (1 - \varepsilon_s(\omega))^2} e^{-2qa} \quad (3.70)$$

$$\tilde{G}_{31}^{(0)}(z, z') = \frac{8\pi\varepsilon_s(\omega)}{q} \frac{e^{q(z'-z)}}{(1 + \varepsilon_s(\omega))^2 - (1 - \varepsilon_s(\omega))^2} e^{-2qa} \quad (3.71)$$

Ако искористимо да је:

$$\sinh(qa) = \frac{e^{qa} - e^{-qa}}{2}, \quad \cosh(qa) = \frac{e^{qa} + e^{-qa}}{2} \quad (3.72)$$

изрази (3.69) - (3.71) постају:

$$\tilde{G}_{11}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} \left[ e^{-q|z-z'|} + \frac{1 - \varepsilon_s^2(\omega)}{P(q, \omega)} e^{q(z+z'+a)} \right] \quad (3.73)$$

$$\tilde{G}_{21}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} \frac{(1 + \varepsilon_s(\omega))e^{q(z'-z+a)} - (1 - \varepsilon_s(\omega))e^{q(z+z')}}{P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.74)$$

$$\tilde{G}_{31}^{(0)}(z, z') = \frac{4\pi\varepsilon_s(\omega)}{q} \frac{e^{q(z'-z+a)}}{P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.75)$$

при чему је:

$$P(q, \omega) = 1 + 2\varepsilon_s(\omega) \coth(qa) + \varepsilon_s^2(\omega) \quad (3.76)$$

**Случај**  $z' \in I_2$  ( $k=2$ ):

$$\tilde{G}_{12}^{(0)}(z, z') = Ae^{qz} \quad (3.77)$$

$$\tilde{G}_{22}^{<}(z, z') = Be^{qz} + Ce^{-qz} \quad (3.78)$$

$$\tilde{G}_{22}^{>}(z, z') = De^{qz} + Ee^{-qz} \quad (3.79)$$

$$\tilde{G}_{32}^{(0)}(z, z') = Fe^{-qz} \quad (3.80)$$

где су А, В, С, D, Е и F коефицијенти које треба одредити.

Заменом (3.77) и (3.78) у (3.55) и (3.57), заменом (3.78) и (3.79) у (3.60) као и у (3.61), као и заменом (3.79) и (3.80) у (3.56) и (3.58) добијамо нехомогени систем од шест алгебарских једначина. Решавањем датог система добијамо компоненте ГФ:

$$\tilde{G}_{12}^{(0)}(z, z') = \frac{4\pi}{q} \frac{(\varepsilon_3 + \varepsilon_2)e^{q(z-z')} - (\varepsilon_3 - \varepsilon_2)e^{q(z+z'-a)}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)} e^{-2qa} \quad (3.81)$$

$$\tilde{G}_{22}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q\varepsilon_2} \left[ e^{-q|z-z'|} + \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) \left[ e^{q(z-z'-2a)} + e^{-q(z-z'+2a)} \right]}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) e^{-2qa}} \right. \\ \left. - \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) e^{q(z+z'-a)} + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) e^{-q(z+z'+a)}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) e^{-2qa}} \right] \quad (3.82)$$

$$\tilde{G}_{32}^{(0)}(z, z') = \frac{4\pi}{q} \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) e^{q(z'-z)} - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) e^{-q(z+z'+a)}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) e^{-2qa}} \quad (3.83)$$

У случају  $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 1, \varepsilon_2 = \varepsilon_s(\omega)$ , претходни изрази постају:

$$\tilde{G}_{12}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} \frac{(1 + \varepsilon_s(\omega)) e^{q(z-z'+a)} - (1 - \varepsilon_s(\omega)) e^{q(z+z')}}{P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.84)$$

$$\tilde{G}_{22}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q\varepsilon_s(\omega)} \left[ e^{-q|z-z'|} + \frac{(1 - \varepsilon_s(\omega))^2 \left[ e^{q(z-z'-a)} + e^{-q(z-z'+a)} \right]}{2P(q, \omega) \sinh(qa)} \right. \\ \left. - \frac{(1 - \varepsilon_s^2(\omega)) \left[ e^{q(z'+z)} + e^{-q(z'+z)} \right]}{2P(q, \omega) \sinh(qa)} \right] \quad (3.85)$$

$$\tilde{G}_{32}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} \frac{(1 + \varepsilon_s(\omega)) e^{q(z'-z+a)} - (1 - \varepsilon_s(\omega)) e^{-q(z+z')}}{P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.86)$$

**Случај**  $z' \in I_3$  ( $k=3$ ):

$$\tilde{G}_{13}^{(0)}(z, z') = Ae^{qz} \quad (3.87)$$

$$\tilde{G}_{23}^{(0)}(z, z') = Be^{qz} + Ce^{-qz} \quad (3.88)$$

$$\tilde{G}_{33}^{<}(z, z') = De^{qz} + Ee^{-qz} \quad (3.89)$$

$$G_{33}^{>}(z, z') = Fe^{-qz} \quad (3.90)$$

где су  $A, B, C, D, E$  и  $F$  коефицијенти које треба одредити.

Заменом (3.87) и (3.88) у (3.55) и (3.57), заменом (3.88) и (3.89) у (3.56) као и у (3.58), као и заменом (3.89) и (3.90) у (3.60) и (3.61) добијамо нехомогени систем од 6 алгебарских једначина. Решавањем датог система добијамо компоненте ГФ:

$$\tilde{G}_{13}^{(0)}(z, z') = \frac{8\pi\varepsilon_2}{q} \frac{e^{q(z-z')}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) e^{-2qa}} \quad (3.91)$$

$$\tilde{G}_{23}^{(0)}(z, z') = \frac{4\pi}{q} \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) e^{q(z-z')} - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) e^{-q(z+z'+a)}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) e^{-2qa}} \quad (3.92)$$

$$\tilde{G}_{33}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q\varepsilon_3} \left[ e^{-q|z-z'|} + \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) e^{-2qa}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_3 + \varepsilon_2) - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\varepsilon_3 - \varepsilon_2) e^{-2qa}} e^{-q(z+z'-a)} \right] \quad (3.93)$$

У случају када је  $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 1$  и  $\varepsilon_2 = \varepsilon_s(\omega)$  претходни изрази постају:

$$\tilde{G}_{13}^{(0)}(z, z') = \frac{4\pi\varepsilon_s(\omega)}{q} \frac{e^{q(z-z'+a)}}{P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.94)$$

$$\tilde{G}_{23}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi(1 + \varepsilon_s(\omega))e^{q(z-z'+a)} - (1 - \varepsilon_s(\omega))e^{-q(z+z')}}{q P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.95)$$

$$\tilde{G}_{33}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} \left[ e^{-q|z-z'|} + \frac{1 - \varepsilon_s^2(\omega)}{P(q, \omega)} e^{-q(z+z'-a)} \right] \quad (3.96)$$

### 3.7.4. Green-ова функција у случају трослојне структуре у коју су укључена два слоја графена

Посматрамо структуру приказану на слици 3.3 и укључујемо по један слој графена у  $z = z_1$  и  $z = z_2$  равни чије су поларизационе функције  $\chi_1(q, \omega)$  и  $\chi_2(q, \omega)$ , респективно. У овом случају *Dyson-Schwinger*-ова једначина (3.34) и пертурбација  $\tilde{V}(z)$  (израз (3.35)) гласе:

$$\tilde{G}(z, z') = \tilde{G}^{(0)}(z, z') + \frac{1}{4\pi} \int \tilde{G}^{(0)}(z, z'') \tilde{V}(z'') \tilde{G}(z'', z') dz'' \quad (3.97)$$

$$\tilde{V}(z'') = \tilde{V}_1(z'') + \tilde{V}_2(z'') = -4\pi e^2 \left[ \chi_1(q, \omega) \delta(z'' - z_1) + \chi_2(q, \omega) \delta(z'' - z_2) \right] \quad (3.98)$$

Заменом (3.98) у (3.97) добијамо:

$$\tilde{G}(z, z') = \tilde{G}^{(0)}(z, z') - e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z, z_1) \tilde{G}(z_1, z') - e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z, z_2) \tilde{G}(z_2, z') \quad (3.99)$$

Сменом  $z = z_1$  у (3.99) добијамо:

$$\tilde{G}(z_1, z') = \tilde{G}^{(0)}(z_1, z') - e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_1, z_1) \tilde{G}(z_1, z') - e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_1, z_2) \tilde{G}(z_2, z') \quad (3.100)$$

Сменом  $z = z_2$  у (3.99) добијамо:

$$\tilde{G}(z_2, z') = \tilde{G}^{(0)}(z_2, z') - e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z_1) \tilde{G}(z_1, z') - e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z_2) \tilde{G}(z_2, z') \quad (3.101)$$

Једначине (3.100) и (3.101) чине систем једначина. Детерминанта система је:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 + e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_1, z_1) & e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_1, z_2) \\ e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z_1) & 1 + e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z_2) \end{vmatrix} \quad (3.102)$$

У нашем случају је  $z_1 = -\frac{a}{2}$  и  $z_2 = \frac{a}{2}$ . На основу израза (3.73) (или (3.74), или (3.84), или (3.85)) може се показати да је:

$$\tilde{G}^{(0)}\left(-\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}\right) = \frac{4\pi R(q, \omega)}{q P(q, \omega)} \quad (3.103)$$

где је:

$$R(q, \omega) = 1 + \varepsilon_s(\omega) \coth(qa) \quad (3.104)$$

На основу израза (3.85) (или (3.86), или (3.95), или (3.96)) може се показати да је:

$$\tilde{G}^{(0)}\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) = \frac{4\pi R(q, \omega)}{q P(q, \omega)} \quad (3.105)$$

На основу израза (3.84) (или (3.85), или (3.94), или (3.95)) може се показати:

$$\tilde{G}^{(0)}\left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) = \frac{4\pi \varepsilon_s(\omega)}{q P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.106)$$

На основу израза (3.74) (или (3.75), или (3.85), или (3.86)) може се показати да важи:

$$\tilde{G}^{(0)}\left(\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}\right) = \frac{4\pi \varepsilon_s(\omega)}{q P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.107)$$

Заменом (3.103), (3.105)-(3.107) у (3.102):

$$\Delta = \left(1 + \frac{2\pi e^2}{q} \chi_1(q, \omega) \frac{2R(q, \omega)}{P(q, \omega)}\right) \left(1 + \frac{2\pi e^2}{q} \chi_2(q, \omega) \frac{2R(q, \omega)}{P(q, \omega)}\right) - \frac{2\pi e^2}{q} \chi_1(q, \omega) \frac{2\pi e^2}{q} \chi_2(q, \omega) \frac{4\varepsilon_s^2(\omega)}{P^2(q, \omega) \sinh^2(qa)} \quad (3.108)$$

Нека је

$$S_i(q, \omega) = \frac{2\pi e^2}{q} \chi_i(q, \omega), i = 1, 2 \quad (3.109)$$

Тада израз (3.108) добија облик:

$$\Delta = \frac{(P(q, \omega) + 2R(q, \omega)S_1(q, \omega))(P(q, \omega) + 2R(q, \omega)S_2(q, \omega)) - 4\varepsilon_s^2(\omega) \frac{S_1(q, \omega)S_2(q, \omega)}{\sinh^2(qa)}}{P^2(q, \omega)} \quad (3.110)$$

Може се показати, сређивањем израза (3.110) и коришћењем израза (3.76) и (3.104), да се добија:

$$\Delta = \frac{P(q, \omega) + 2R(q, \omega)(S_1(q, \omega) + S_2(q, \omega)) + 4S_1(q, \omega)S_2(q, \omega)}{P(q, \omega)} \quad (3.111)$$

Настављамо са решавањем система једначина (3.100) и (3.101).

$$\tilde{G}(z_1, z') = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \tilde{G}^{(0)}(z_1, z') & e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_1, z_2) \\ \tilde{G}^{(0)}(z_2, z') & 1 + e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z_2) \end{vmatrix} \Rightarrow \quad (3.112)$$

$$\tilde{G}(z_1, z') = \frac{1}{\Delta} \left\{ \tilde{G}^{(0)}(z_1, z') [1 + e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z_2)] - e^2 \chi_2(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z') \tilde{G}^{(0)}(z_1, z_2) \right\} \quad (3.113)$$

Претпоставићемо да је  $z' \in I_3$ . У том случају, на основу израза (3.94) (или (3.95)) може се показати да је:

$$\tilde{G}^{(0)}\left(-\frac{a}{2}, z'\right) = \frac{4\pi}{q} \frac{\varepsilon_s(\omega)}{P(q, \omega) \sinh(qa)} e^{q\left(\frac{a}{2} - z'\right)} \quad (3.114)$$

На основу израза (3.95) (или (3.96)) може се показати да је:

$$\tilde{G}^{(0)}\left(\frac{a}{2}, z'\right) = \frac{4\pi}{q} \frac{R(q, \omega)}{P(q, \omega)} e^{q\left(\frac{a}{2} - z'\right)} \quad (3.115)$$

Заменом израза (3.105), (3.106), (3.114) и (3.115) у (3.113):

$$\tilde{G}(z_1, z') = \frac{1}{\Delta} \frac{4\pi}{q} \frac{\varepsilon_s(\omega)}{P(q, \omega) \sinh(qa)} e^{q\left(\frac{a}{2} - z'\right)} \quad (3.116)$$

Заменом израза (3.111) у (3.116):

$$\tilde{G}(z_1, z') = \frac{4\pi}{q} \frac{\varepsilon_s(\omega)}{\sinh(qa)} \frac{1}{P(q, \omega) + 2R(q, \omega)(S_1(q, \omega) + S_2(q, \omega)) + 4S_1(q, \omega)S_2(q, \omega)} e^{q\left(\frac{a}{2} - z'\right)} \quad (3.117)$$

Настављамо са решавањем система једначина (3.100) и (3.101).

$$\tilde{G}(z_2, z') = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} 1 + e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_1, z_1) & \tilde{G}^{(0)}(z_1, z') \\ e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z_1) & \tilde{G}^{(0)}(z_2, z') \end{vmatrix} \Rightarrow \quad (3.118)$$

$$\tilde{G}(z_2, z') = \frac{1}{\Delta} \left\{ \tilde{G}^{(0)}(z_2, z') [1 + e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_1, z_1)] - e^2 \chi_1(q, \omega) \tilde{G}^{(0)}(z_2, z_1) \tilde{G}^{(0)}(z_1, z') \right\} \quad (3.119)$$

Заменом израза (3.103), (3.107), (3.114) и (3.115) у (3.119):

$$\tilde{G}(z_2, z') = \frac{1}{\Delta} \frac{4\pi}{q} \frac{R(q, \omega) + 2S_1(q, \omega)}{P(q, \omega)} e^{q\left(\frac{a}{2} - z'\right)} \quad (3.120)$$

Заменом израза (3.111) у (3.120):

$$\tilde{G}(z_2, z') = \frac{4\pi}{q} \frac{R(q, \omega) + 2S_1(q, \omega)}{P(q, \omega) + 2R(q, \omega)(S_1(q, \omega) + S_2(q, \omega)) + 4S_1(q, \omega)S_2(q, \omega)} e^{q\left(\frac{a}{2} - z'\right)} \quad (3.121)$$

Враћамо се на израз (3.99). У случају  $z, z' \in I_3$ , на основу израза (3.96) имамо да је:

$$\tilde{G}^{(0)}(z, z') \equiv \tilde{G}_{33}^{(0)}(z, z') = \frac{2\pi}{q} \left[ e^{-q|z-z'|} + \frac{1 - \varepsilon_s^2(\omega)}{P(q, \omega)} e^{-q(z+z'-a)} \right] \quad (3.122)$$

На основу израза (3.75) (или (3.86)) може се показати да је:

$$\tilde{G}^{(0)}\left(z, -\frac{a}{2}\right) = \frac{4\pi}{q} \frac{\varepsilon_s(\omega) e^{q\left(\frac{a}{2} - z\right)}}{P(q, \omega) \sinh(qa)} \quad (3.123)$$

На основу израза (3.86) (или (3.96)) може се показати да је:

$$\tilde{G}^{(0)}\left(z, \frac{a}{2}\right) = \frac{4\pi}{q} \frac{R(q, \omega)}{P(q, \omega)} e^{q\left(\frac{a}{2} - z\right)} \quad (3.124)$$

Заменом израза (3.117), (3.121)-(3.124) у (3.99):

$$\begin{aligned} \tilde{G}(z, z') &= \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z'|} \\ &+ \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1 - \varepsilon_s^2(\omega)}{P(q, \omega)} - \frac{\left( \frac{4S_1(q, \omega)\varepsilon_s^2(\omega)}{P(q, \omega)\sinh^2(qa)} + \frac{4R(q, \omega)S_2(q, \omega)}{P(q, \omega)} (R(q, \omega) + 2S_1(q, \omega)) \right)}{P(q, \omega) + 2R(q, \omega)(S_1(q, \omega) + S_2(q, \omega)) + 4S_1(q, \omega)S_2(q, \omega)} \right] e^{-q(z+z'-a)} \end{aligned} \quad (3.125)$$

Користећи (3.76) и (3.104) може се показати да важи:

$$\frac{1 - \varepsilon_s^2(\omega)}{P(q, \omega)} = \frac{2R(q, \omega)}{P(q, \omega)} - 1 \quad (3.126)$$

$$P(q, \omega) = R^2(q, \omega) - \varepsilon_s^2(q, \omega) \operatorname{cosech}^2(qa) \quad (3.127)$$

при чему је  $\operatorname{cosech}(qa) = \frac{1}{\sinh(qa)}$ . Заменом (3.126) и (3.127) у (3.125) добијамо:



$$\tilde{G}(z, z') = \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z'|} + \frac{2\pi}{q} \left[ \left( \frac{1}{2} (R(q, \omega) + 2S_2(q, \omega)) - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_s^2(\omega) \operatorname{cosech}^2(qa)}{R(q, \omega) + 2S_1(q, \omega)} \right)^{-1} - 1 \right] e^{-q(z+z'-a)} \quad (3.128)$$

Први члан у претходном изразу представља  $\tilde{G}_c(z, z')$ , *Coulomb*-ову ГФ, а други члан је индукована ГФ  $\tilde{G}_{ind}(z, z')$ .

## 4. Теоријско моделовање *EELS* спектра

У овој глави ћемо представити теоријски (аналитички) модел *EELS* спектра. У типичном *EELS* експерименту сноп електрона интерагује са метом и при томе губи део енергије на побуђивање плазмона у мети. Посматрамо случај у коме сноп електрона пролази кроз „слободни“ графен. Енергије снопа електрона које се јављају у експериментима са којима поредимо наш модел су реда величине од неколико десетина keV ( нпр. 40 keV у [48], 60 keV у [47] и 100 keV у [49] ) тако да занемарујемо губитак импулса упадних електрона и сматрамо да је путања електрона праволинијска. Такође су занемарени релативистички ефекти [93,94]. Овде ћемо извести изразе за енергијски губитак  $E_{loss}$  наелектрисане честице (електрона), као и израз за густину вероватноће за губитак енергије,  $P(\omega)$ . Као и у претходној глави овде користимо *Descartes*-ов координатни систем у коме је  $\vec{r} = (\vec{R}, z)$  вектор положаја честице. Посматрамо слој графена који се налази у равни  $z = 0$ .

### 4.1. Израчунавање енергијских губитака и густине вероватноће за губитак енергије

При кретању наелектрисане честице у електростатичком пољу дуж неке трајекторије  $\vec{r}(t)$  брзином  $\vec{v}(t)$  наелектрисану честицу делује индукована сила  $\vec{F}_{ind}$  која при томе изврши рад који се дефинише као  $E_{loss}$ . Представља се у следећем облику [95]:

$$E_{loss} = - \int_{-\infty}^{\infty} \vec{F}_{ind}(\vec{R}, z, t) \cdot \vec{v}(t) dt \quad (4.1)$$

Овде  $\vec{F}_{ind}$  представља динамичку поларизациону силу која делује на наелектрисану честицу густине наелектрисања  $\rho_{ext}(\vec{R}, z, t)$  и дата је следећим изразом [96]:

$$\vec{F}_{ind}(\vec{R}, z, t) = \int \rho_{ext}(\vec{R}, z, t) \vec{E}_{ind}(\vec{R}, z, t) d^2\vec{R} dz \quad (4.2)$$

где је индуковано електрично поље  $\vec{E}_{ind}$  изражено преко индукованог потенцијала:

$$\vec{E}_{ind}(\vec{R}, z, t) = -\nabla\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) \quad (4.3)$$

Густину тачкастог наелектрисања  $Ze$  које пролази кроз површину графена можемо да напишемо у следећем облику:

$$\rho_{ext}(\vec{R}, z, t) = Ze\delta(\vec{R} - \vec{v}_{\parallel}t)\delta(z - v_{\perp}|t|) \quad (4.4)$$

где је  $\vec{v}_{\parallel}$  компонента брзине честице паралелна слоју графена а  $v_{\perp}$  компонента нормална на раван графенског слоја.

Заменом израза (4.4) и (4.3) у израз (4.2) добија се:

$$\vec{F}_{ind}(\vec{R}, z, t) = -Ze \nabla \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) \Big|_{\vec{R}=\vec{v}_{\parallel}t, z=v_{\perp}|t|} \quad (4.5)$$

Сменом израза (4.5) у (4.1) добијамо да је:

$$E_{loss} = Ze \int_{-\infty}^{\infty} \vec{v}(t) \cdot \nabla \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) \Big|_{\vec{R}=\vec{v}_{\parallel}t, z=v_{\perp}|t|} dt \quad (4.6)$$

Како би применили правило извода сложене функције (тзв. *chain rule*:  $\frac{d}{dt} = \vec{v}(t) \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial t}$ ), десној страни израза (4.6) додајемо подесно изабрану нулу и тиме добијамо следећи израз:

$$E_{loss} = Ze \int_{-\infty}^{\infty} \left( \vec{v}(t) \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial t} \right) \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) \Big|_{\vec{R}=\vec{v}_{\parallel}t, z=v_{\perp}|t|} dt - Ze \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)}{\partial t} \Big|_{\vec{R}=\vec{v}_{\parallel}t, z=v_{\perp}|t|} dt \quad (4.7)$$

Ако узмемо да важи  $\Phi_{ind} \rightarrow 0$  када  $t \rightarrow \pm\infty$ , израз (4.7) постаје:

$$E_{loss} = -Ze \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)}{\partial t} \Big|_{\vec{R}=\vec{v}_{\parallel}t, z=v_{\perp}|t|} dt \quad (4.8)$$

Како би добили погодан облик  $\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)$  за израчунавање  $E_{loss}$  полазимо од дефиниције укупног скаларног потенцијала  $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$  који делује на наелектрисану честицу у електростатичком пољу графена.  $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$  потиче од спољашњег и од индукованог наелектрисања и представља збир спољашњег  $\Phi_{ext}(\vec{R}, z, t)$  и индукованог потенцијала  $\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)$ :

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) + \Phi_{ext}(\vec{R}, z, t) \quad (4.9)$$

Аналогно изразу (3.7),  $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$  можемо да изразимо преко временски зависне ГФ система на следећи начин:

$$\Phi_{tot}(\vec{r}, t) = \int_V \int_{-\infty}^t \rho(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}', t-t') d^3\vec{r}' dt' \quad (4.10)$$

где  $t$  представља тренутак у коме се посматра потенцијал  $\Phi$ , док је  $t'$  произвољни тренутак у прошлости, тј.  $t' < t$ .

Даље, аналогно изразу (3.12),  $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$  изражавамо преко ФТ ГФ и ФТ спољашњег наелектрисања:

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \tilde{G}(\vec{q}, z, z', \omega) \tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z', \omega) e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} d\omega dz' \quad (4.11)$$

где је 2D ФТ спољашњег наелектрисања:

$$\tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z', \omega) = \int \rho_{ext}(\vec{R}, z', t') e^{i(\omega t' - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{R} dt' \quad (4.12)$$

Аналогно једначини (4.11), можемо да изразимо  $\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)$  преко ФТ индуковане ГФ у следећем облику:

$$\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \tilde{G}_{ind}(\vec{q}, z, z', \omega) \tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z', \omega) e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} d\omega dz' \quad (4.13)$$

Заменом (4.4) у (4.12) добијамо 2D ФТ спољашњег наелектрисања у нашем случају:

$$\tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z', \omega) = Ze \int_{-\infty}^{\infty} \delta(z' - v_{\perp} |t'|) e^{i(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})t'} dt' \quad (4.14)$$

Заменом (4.14) у (4.13) добијамо:

$$\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) = \frac{Ze}{(2\pi)^3} \int e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}_{ind}(\vec{q}, z, v_{\perp} |t'|, \omega) e^{i(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})t'} dt' \quad (4.15)$$

Из (3.52) следи да индукована ГФ има облик :

$$\tilde{G}_{ind}(\vec{q}, z, v_{\perp} |t'|, \omega) = \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-q(z + v_{\perp} |t'|)} \quad (4.16)$$

У претходној једначини важи да у случају слободног графена 2D ФТ диелектричне функције има облик:

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{2\pi e^2}{q} \chi(\vec{q}, \omega) \quad (4.17)$$

Заменом (4.16) у (4.15) добијамо:

$$\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) = \frac{Ze}{(2\pi)^2} \int \frac{1}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-qz} e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2 \vec{q} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{-qv_{\perp} |t'|} e^{i(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})t'} dt' \quad (4.18)$$

Може се показати да је:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-qv_{\perp} |t'|} e^{i(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})t'} dt' = K(q, \omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel}) \quad (4.19)$$

где је:

$$K(q, \omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel}) = \frac{2qv_{\perp}}{(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})^2 + (qv_{\perp})^2} \quad (4.20)$$

Заменом (4.19) у (4.18) добијамо:

$$\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) = \frac{Ze}{(2\pi)^2} \int \frac{K(q, \omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-qz} e^{-i(\omega - \vec{q} \cdot \vec{R})t} d^2\vec{q} d\omega \quad (4.21)$$

Парцијални извод по времену потенцијала  $\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)$  у случају  $\vec{R} = \vec{v}_{\parallel}t$  и  $z = v_{\perp}|t|$  сада има облик:

$$\left. \frac{\partial \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)}{\partial t} \right|_{\vec{R}=\vec{v}_{\parallel}t, z=v_{\perp}|t|} = -\frac{iZe}{(2\pi)^2} \int \frac{\omega K(q, \omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] e^{-qv_{\perp}|t|} e^{-i(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})t} d^2\vec{q} d\omega \quad (4.22)$$

Заменом (4.22) у (4.8) добијамо:

$$E_{loss} = \frac{i(Ze)^2}{(2\pi)^2} \int \frac{\omega K(q, \omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] d^2\vec{q} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{-qv_{\perp}|t|} e^{-i(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})t} dt \quad (4.23)$$

У претходном изразу се јавља интеграл по времену за чију вредност се може показати да је једнака изразу (4.20), тј. важи:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-qv_{\perp}|t|} e^{-i(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})t} dt = K(q, \omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel}) \quad (4.24)$$

Заменом (4.24) у (4.23) добијамо:

$$E_{loss} = \frac{i(Ze)^2}{(2\pi)^2} \int \frac{\omega K^2(q, \omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 \right] d^2\vec{q} d\omega \quad (4.25)$$

Енергијски губитак наелектрисане честице можемо да изразимо преко густине вероватноће за губитак енергије  $P(\omega)$  на следећи начин [93]:

$$E_{loss} = \int_0^{\infty} \omega P(\omega) d\omega \quad (4.26)$$

Диелектрична функција која се јавља у изразу (4.25) има следеће особине симетрије: реални део  $\text{Re}(\varepsilon(\vec{q}, \omega))$  је паран по  $\omega$ , док је имагинарни део  $\text{Im}(\varepsilon(\vec{q}, \omega))$  непарна функција по  $\omega$ . Коришћењем ових особина и поређењем израза (4.25) и (4.26) добијамо израз за густину вероватноће за губитак енергије (у нашем случају је  $Z = -1$  јер је у питању електрон):

$$P(\omega) = \frac{e^2}{2\pi^2} \int \frac{K^2(q, \omega - \vec{q} \cdot \vec{v}_{\parallel})}{q} \text{Im} \left[ -\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} \right] d^2\vec{q} \quad (4.27)$$

У резултатима ове тезе у поглављу 5.3 биће директно поређена густина вероватноће за губитак енергије са експериментално добијеним *EELS* спектрима [47,49] који су добијени у случају када се сноп електрона креће у правцу нормалном на површину графена. У том случају важи да је  $\vec{v}_{\parallel} = \vec{0}$  а такође узимамо у обзир и изотропност поларизабилности графена, тј.:  $\chi(\vec{q}, \omega) = \chi(q, \omega)$ . Заменом ове две једнакости у једначине (4.20) и (4.27) добијамо:

$$P(\omega) = \frac{4e^2}{\pi v_{\perp}^2} \int_0^{q_c} \frac{q^2}{\left(q^2 + \left(\frac{\omega}{v_{\perp}}\right)^2\right)^2} \text{Im} \left[ -\frac{1}{1 + \frac{2\pi e^2}{q} \chi(q, \omega)} \right] dq \quad (4.28)$$

где је  $q_c = k_0 \beta$  максимум расејаног импулса упадног електрона сакупљеног у равни, док је  $k_0$  укупни импулс а  $\beta$  полуугао расејања.

У дуготаласном (оптичком) лимиту ( $q \rightarrow 0$ ), поларизациону функцију графена можемо да изразимо преко проводности графена  $\sigma(\omega)$  на следећи начин:

$$\chi(q, \omega) \approx i \frac{q^2}{e^2 \omega} \sigma(\omega) \quad (4.29)$$

Заменом (4.29) у (4.28) добијамо следећи израз:

$$P(\omega) = \frac{4e^2}{\pi \omega^2} \int_0^{q_c} \frac{\left(\frac{qv_{\perp}}{\omega}\right)^2}{\left(\left(\frac{qv_{\perp}}{\omega}\right)^2 + 1\right)^2} \text{Im} \left[ -\frac{1}{1 + \frac{1}{B} \frac{qv_{\perp}}{\omega}} \right] dq \quad (4.30)$$

где је:

$$B \equiv -i \frac{v_{\perp}}{2\pi\sigma(\omega)} \quad (4.31)$$

Увођењем погодне смене ( $x = \frac{qv_{\perp}}{\omega}$ ) израз (4.30) постаје:

$$P(\omega) = -\frac{4e^2}{\pi \omega v_{\perp}} \text{Im} \int_0^{\frac{q_c v_{\perp}}{\omega}} \frac{x^2 B}{(x^2 + 1)^2 (B + x)} dx \quad (4.32)$$

Коришћењем *Newton-Leibniz*-ове формуле ( $\int_a^b f(x) dx = F(x) \Big|_a^b = F(b) - F(a)$ ) претходни израз добија облик:

$$P(\omega) = -\frac{4e^2}{\pi\omega v_{\perp}} \operatorname{Im} \left[ F\left(\frac{q_c v_{\perp}}{\omega}\right) - F(0) \right] \quad (4.33)$$

где је:

$$\begin{aligned} F(x) &= \int \frac{x^2 B}{(x^2 + 1)^2 (B + x)} dx \\ &= -B \frac{xB + 1}{2(x^2 + 1)(B^2 + 1)} + \frac{B^2 (B^2 - 1) \arctan(x)}{2(B^2 + 1)^2} + \frac{B^3}{(B^2 + 1)^2} \left( \ln(B + x) - \frac{1}{2} \ln(x^2 + 1) \right) \end{aligned} \quad (4.34)$$

Овде треба напоменути да у одређеним експерименталним поставкама [47,49]  $q_c$  узима вредност довољно велику тако да се не мења коначна вредност  $P(\omega)$  ни када узмемо да  $q_c$  тежи бесконачности. Разлог овоме је то да кинематички фактор  $K^2(q, \omega)$  у (4.27) има максимум на  $q = \frac{\omega}{v_{\perp}} \ll q_c$ . У случају када  $q_c \rightarrow \infty$ :

$$F(\infty) = \frac{\pi B^2 (B^2 - 1)}{4 (B^2 + 1)^2} \quad (4.35)$$

док у случају када  $q_c \rightarrow 0$  важи:

$$F(0) = \frac{2B^2 \ln(B) - B^2 - 1}{2(B^2 + 1)^2} B \quad (4.36)$$

Користећи (4.35) и (4.36) можемо да апроксимирамо  $P(\omega)$  дату изразом (4.33) на следећи начин:

$$P(\omega) = -\frac{e^2}{\pi\omega v_{\perp}} \operatorname{Im} \left[ B \frac{\pi B (B^2 - 1) - 4B^2 \ln(B) + 2(B^2 + 1)}{(B^2 + 1)^2} \right] \quad (4.37)$$

У резултатима ове тезе ће бити такође поређена густина вероватноће за губитак енергије са експериментално добијеним импулсно разложеним (*momentum resolved*) *EELS* спектрима слободног графена [48]. У овом случају се сноп електрона креће у правцу нормалном на површину графена и спектри су добијени коришћењем правоугаоне апертуре  $\mathfrak{R}$  која скупља све електроне расејане у  $\vec{q} = (q_x, q_y)$  равни у околини неког средњег таласног вектора  $\vec{q}$  у смеру  $q_x$  осе [48]. У том случају важи да је  $\vec{v}_{\parallel} = \vec{0}$ , чијом заменом у изразе (4.27) и (4.20) и коришћењем израза (4.17) и (4.29) добијамо:

$$\begin{aligned}
P(\bar{q}, \omega) &= \frac{2e^2}{\pi^2 v_{\perp}^2} \int_{\text{Br}} \frac{q}{\left[ q^2 + \left( \frac{\omega}{v_{\perp}} \right)^2 \right]^2} \text{Im} \left[ -\frac{1}{1 + 2\pi i \frac{q}{\omega} \sigma(\omega)} \right] d^2 \bar{q} \\
&= \frac{2e^2}{\pi^2 v_{\perp}^2} \int_{\bar{q} - \frac{\Delta q_x}{2}}^{\bar{q} + \frac{\Delta q_x}{2}} dq_x \int_{-\frac{\Delta q_y}{2}}^{\frac{\Delta q_y}{2}} \frac{\sqrt{q_x^2 + q_y^2}}{\left[ q_x^2 + q_y^2 + \left( \frac{\omega}{v_{\perp}} \right)^2 \right]^2} \text{Im} \left[ -\frac{1}{1 + 2\pi i \frac{\sigma(\omega)}{\omega} \sqrt{q_x^2 + q_y^2}} \right] dq_y
\end{aligned} \tag{4.38}$$

где смо узели да важи  $\Delta q_x = 0.1 \text{ \AA}^{-1}$  и  $\Delta q_y = 0.25 \text{ \AA}^{-1}$  [48].

Овде ћемо напоменути да  $P(\omega)$  добијена у изразима (4.37) и (4.38) зависи од произвољног облика  $\sigma(\omega)$  у оптичком лимиту (оптичка проводност). У резултатима ове тезе ћемо користити оптичку проводност добијену eHD моделом (проширени хидродинамички модел) као и оптичку проводност коју је наш сарадник доц. др Vito Desroја израчунао користећи *ab initio* метод.

## 4.2. Проширени хидродинамички модел

За описивање међузонских прелаза  $\sigma$  и  $\pi$  електрона у графену може да се користи 2D двофлуидни хидродинамички (HD) модел. У њему се посматрају два одвојена 2D флуида,  $\sigma$  флуид и  $\pi$  флуид, „слепљена“ на површини графена. У [93] је коришћен модел слојевитог електронског гаса за описивање вишеслојног графена, при чему је поларизациона функција једног слоја графена описана 2D двофлуидним HD моделом. Резултати добијени поменутиим моделом се доста добро слажу са експериментално добијеним *EELS* спектрима [49] за  $N < 10$  слојева графена у околини енергија на којима се налазе  $\pi$  и  $\pi + \sigma$  плазмони. За енергијске губитке ниже од  $\approx 3 \text{ eV}$  не постоје експериментални подаци у [49] што може да се сматра последицом уклањања тзв. *zero loss* пика, у даљем тексту *ZL* пик. Такође, у оваквом 2D HD моделу нису урачунати физички ефекти нискоенергијских побуда у графену [93].

Са друге стране, недавно је урађено неколико *EELS* експеримената у којима су измерени спектри где се види да постоји нагли скок у спектру са падом енергије испод  $3 \text{ eV}$  и након уклањања *ZL* пика [47,48,97]. Овде се може поставити питање да ли нискоенергијски међузонски прелази  $\pi$  електрона у слободном графену дају видљив допринос нискоенергијском *EELS* спектру. Како би одговорили на ово питање, у оквиру теоријског моделовања високоенергијских  $\pi$  и  $\pi + \sigma$  плазмона, формулисаћемо eHD модел у коме је укључена тзв. *Dirac* – ова корекција. Додавањем ове корекције у модел укључујемо нискоенергијски допринос међузонских прелаза  $\pi$  електрона графена на начин сагласан са апроксимацијом *Dirac* – овог конуса у околини *K* тачке *Brillouin*-ове зоне.

Коришћење функције одзива графена у оптичком лимиту представља одличну апроксимацију [47] која може да се употреби у аналитичком моделовању *EELS* спектра у којима је снап електрона под нормалним упадним углом и за мале углове сакупљања. Узимајући претходно у обзир, овде смо предложили аналитички израз за оптичку проводност графена у оквиру eHD модела који зависи од неколико слободних параметара који су одређени директним поређењем са оптичком проводношћу добијеном *ab initio* методом.



Како би израчунали поларизациону функцију графена  $\chi(q, \omega)$ , користили смо 2D двофлуидни HD модел представљен у [95]. У њему посматрамо одвојено доприносе  $\sigma$  и  $\pi$  флуида. У том случају важи  $\chi(q, \omega) = \chi_\sigma(q, \omega) + \chi_\pi(q, \omega)$ , где је:

$$\chi_\nu(q, \omega) = \frac{\frac{n_\nu^0 q^2}{m_\nu^*}}{s_\nu^2 q^2 + \omega_{\nu r}^2 - \omega(\omega + i\gamma_\nu)} \quad (4.39)$$

где су  $n_\nu^0, m_\nu^*, s_\nu, \omega_{\nu r}$  и  $\gamma_\nu$  равнотежна површинска бројна густина електрона, маса електрона, акустична брзина, повратна учестаност, и коефицијент трења у  $\nu$ -том флуиду (где је  $\nu = \sigma, \pi$ ) респективно. Такође, повратне учестаности  $\omega_{\sigma r}$  и  $\omega_{\pi r}$  су повезане са  $\sigma \rightarrow \sigma^*$  и  $\pi \rightarrow \pi^*$  међузонским прелазима, респективно. Наш сарадник доц. др Vito Despoја је користећи *ab initio* метод [57] показао да су ови прелази доминантни код *EELS* спектра графена у оптичком лимиту, доводећи до појаве два максимума на енергијама  $\omega_{\sigma r} \approx 14$  eV и  $\omega_{\pi r} \approx 4$  eV. Ови максимуми одговарају енергијским процепима у тачкама високе симетрије *Brillouin*-ове зоне које се налазе даље од К тачке. Ширина поменутих максимума се може описати феноменолошки користећи хидродинамички модел подесним избором коефицијената трења  $\gamma_\sigma$  и  $\gamma_\pi$ . Са друге стране, акустичне брзине  $s_\sigma$  и  $s_\pi$  потичу из *Thomas-Fermi-Dirac*-ових интеракција у HD моделу [95]. Проводност графена у дуготаласном лимиту може да се напише на следећи начин:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &\equiv -ie^2 \omega \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\chi(q, \omega)}{q^2} \\ &= -ie^2 \omega \left[ \frac{\frac{n_\sigma^0}{m_\sigma^*}}{\omega_{\sigma r}^2 - \omega(\omega + i\gamma_\sigma)} + \frac{\frac{n_\pi^0}{m_\pi^*}}{\omega_{\pi r}^2 - \omega(\omega + i\gamma_\pi)} \right] \end{aligned} \quad (4.40)$$

Овакав облик проводности графена представља добру апроксимацију за учестаности веће од  $\omega_c$ , која је мања од енергијског процепа  $\omega_{\pi r}$  између  $\pi$  и  $\pi^*$  зоне у М тачки *Brillouin*-ове зоне. Сада желимо да проширимо поменути хидродинамички модел укључивањем ниско енергијских  $\pi \rightarrow \pi^*$  међузонских прелаза у околини К тачке *Brillouin*-ове зоне за слободни графен. Како би то урадили, прво množимо део проводности из (4.40) повезан са максимумом  $\pi$  електрона са емпиријским фактором  $f$  ( $0 < f < 1$ ), што умањује висину овог пика. Даље, у израз (4.40) додајемо корекцију  $\sigma_D(\omega)$  која описује међузонске  $\pi \rightarrow \pi^*$  прелазае у околини К тачке у апроксимацији *Dirac*-овог конуса. Укупна оптичка проводност слободног графена у сада проширеном хидродинамичком моделу (eHD) може да се напише на следећи начин:

$$\sigma_{eHD}(\omega) = \sigma_D(\omega) - ie^2 \omega \left[ \frac{\frac{n_\sigma^0}{m_\sigma^*}}{\omega_{\sigma r}^2 - \omega(\omega + i\gamma_\sigma)} + f \frac{\frac{n_\pi^0}{m_\pi^*}}{\omega_{\pi r}^2 - \omega(\omega + i\gamma_\pi)} \right] \quad (4.41)$$

Реални део проводности  $\sigma_D(\omega)$  је одабран тако да задовољава услов [98]:

$$\operatorname{Re}[\sigma_D(\omega \rightarrow 0)] = \frac{e^2}{4\hbar} \quad (4.42)$$

и узимамо га у облику:

$$\operatorname{Re}[\sigma_D(\omega)] = \frac{e^2}{4\hbar} \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_c}\right)^4} \quad (4.43)$$

где смо  $\omega_c$  посматрали као параметар, испод чије вредности важи апроксимација *Dirac*-овог конуса. Имагинарни део проводности, тј.  $\operatorname{Im}[\sigma_D(\omega)]$ , се може добити из (4.43) уз помоћ *Kramers-Kronig*-ових дисперзионих релација [82]. Наиме, уколико посматрамо комплексну функцију  $f(\omega) = f_1(\omega) + i f_2(\omega)$  (где су  $f_{1/2}(\omega)$  реалне функције зависне од  $\omega$ ), *Kramers-Kronig*-ове релације повезују реални и имагинарни део функције  $f(\omega)$  на следећи начин:  $f_1(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{P.V.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_2(x)}{x - \omega} dx$  и  $f_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{P.V.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_1(x)}{x - \omega} dx$ , где је P.V. (*Principal Value*) тзв. главна вредност интеграла.

У изразу (4.43), зависност од четвртог степена учестаности је изабрана донекле произвољно, највише како би се повезала вредност *Dirac*-овог члана (4.42) и *Drude-Lorentz*-овог максимума у околини  $\omega = \omega_{\pi r}$  у изразу (4.40). Већ смо поменули да се гранична учестаност  $\omega_c$  може посматрати као параметар подешавања, што такође важи и за фактор  $f$ .

Како би установили које физичке релације повезују различите параметре модела, пожељно је проверити да ли модел задовољава одређене физичке законе одржања, као што је нпр. такозвано правило  $f$  суме, које описује очување броја електрона који учествују у побуђивању. Правило  $f$  суме за 2D проводност  $\sigma(\omega)$  слободног графена можемо написати у облику [99]:

$$\int_0^{\infty} \operatorname{Re}[\sigma_{eHD}(\omega)] d\omega = \frac{\pi e^2}{2m_e} n_{at} N_e \quad (4.44)$$

где је  $N_e = N_{\sigma} + N_{\pi} = 4$  укупни број валентних електрона по атому угљеника. Треба нагласити да изједначавањем  $m_v^*$  ( $v = \sigma, \pi$ ) са масом слободног електрона  $m_e$ , специфични облик *Drude-Lorentz*-ове проводности у изразу (4.40) осигурава да доприноси  $\sigma$  и  $\pi$  плазмона дају  $N_{\sigma} = 3$  и  $N_{\pi} = 1$  са десне стране израза (4.44), независно од вредности осталих параметара, тј.  $n_v^0, \omega_{vr}$  и  $\gamma_v$ .

Сада можемо да у (4.44) поставимо да важи  $N_e = N_{\pi} = 1$  како би добили везу између параметара  $f$  и  $\omega_c$  узимајући у обзир само допринос који  $\pi$  електрони дају проводности у eHD моделу (једнака је збиру првог и трећег члана у изразу (4.41)). Даље, у израз (4.44) замењујемо први члан израза (4.41) изражен преко (4.43), као и трећи члан израза (4.41) у коме смо поставили  $m_{\pi} = m_e$ . На овај начин добијамо следеће:

$$f = 1 - \frac{\omega_c m_e \sqrt{2}}{8\hbar n_{at}} \quad (4.45)$$

Овако добијена вредност параметра  $f \in [0,1]$  описује део  $\pi$  електрона који учествују у  $\pi \rightarrow \pi^*$  међузонским прелазима у околини М тачке, док је део  $\pi$  електрона који учествују у  $\pi \rightarrow \pi^*$  међузонским прелазима у околини К тачке *Brillouin*-ове зоне представљен са  $1 - f = \omega_c m_e \sqrt{2} / (8\hbar n_{at})$ .

Полазећи од правила f суме (4.44) можемо да дефинишемо и број валентних електрона који учествују у побудама на енергијама до  $\omega'$  на следећи начин:

$$N_e(\omega') = \frac{2m_e}{\pi e^2 n_{at}} \int_0^{\omega'} \text{Re}[\sigma(\omega)] d\omega \quad (4.46)$$

Напоменућемо да у изразу (4.46) фигурише  $\sigma(\omega)$  у оптичком лимиту у општем облику, што нам омогућава поређење резултата које је наш сарадник доц. др Vito Despoја добио користећи *ab initio RPA* методу са проводношћу коју смо израчунали у eHD моделу и која има облик:

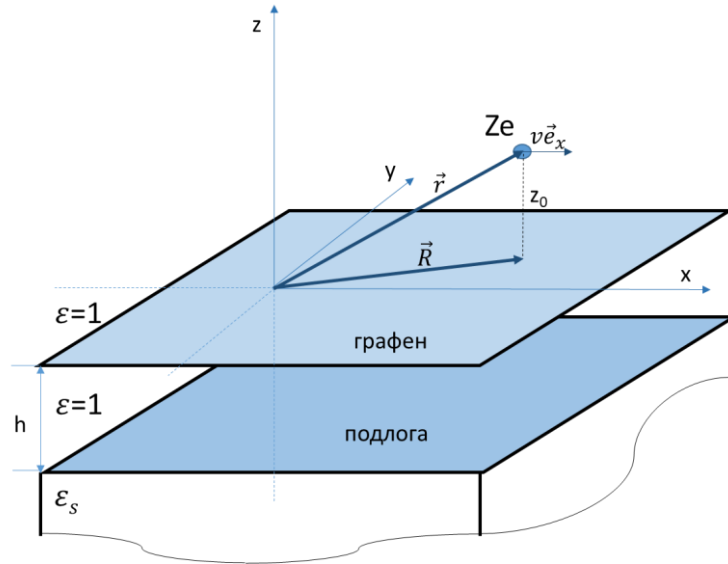
$$\sigma_{eHD}(\omega) = e^2 \left[ \frac{1}{4\hbar} \frac{\omega_c^4}{\omega_c^4 + \omega^4} + i \frac{\omega}{m_e} \left( \frac{\omega_c^2 + \omega^2}{\omega_c^4 + \omega^4} \frac{\omega_c m_e \sqrt{2}}{8\hbar} - \frac{n_\sigma^0}{\omega_{\sigma r}^2 - \omega(\omega + i\gamma_\sigma)} - \left( 1 - \frac{\omega_c m_e \sqrt{2}}{8\pi\hbar n_{at}} \right) \frac{n_\pi^0}{\omega_{\pi r}^2 - \omega(\omega + i\gamma_\pi)} \right) \right] \quad (4.47)$$

Горњи израз описује само међузонске прелазе електрона у недопираном графену.

## 5. Резултати

### 5.1. Интеракција јона са графеном на полубесконечној изолаторској подлози

Посматрамо јон наелектрисања  $Ze$  који се креће паралелно површини графена у смеру  $x$ -осе брзином  $\vec{v} = v\vec{e}_x$  (слика 5.1) на растојању  $z_0$  од графена. Графен се налази на растојању  $h$  од подлоге.



**Слика 5.1:** Шематски приказ јона који се креће брзином  $\vec{v}$  паралелно површини графена који се налази на растојању  $h$  од подлоге.

#### 5.1.1. Физичке величине које описују интеракцију јона са графеном на подлози

Како би смо описали физичке појаве до којих долази у овом случају, прво ћемо дефинисати величине које карактеришу интеракцију јона са графеном на подлози. То су укупни потенцијал, као и зауставна сила и сила лика које представљају компоненте динамичке поларизационе силе.

Укупни скаларни потенцијал  $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$  потиче од спољашњег и од индукованог наелектрисања и представља збир спољашњег  $\Phi_{ext}(\vec{R}, z, t)$  и индукованог потенцијала  $\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)$ :

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) + \Phi_{ext}(\vec{R}, z, t) \quad (5.1)$$

Аналогно изразу (3.7),  $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$  можемо да изразимо преко временски зависне ГФ система на следећи начин:

$$\Phi_{tot}(\vec{r}, t) = \int_V \int_{-\infty}^t \rho_{ext}(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}', t-t') d^3\vec{r}' dt' \quad (5.2)$$

где  $t$  представља тренутак у коме се посматра потенцијал  $\Phi$ , док је  $t'$  произвољни тренутак у прошлости, тј.  $t' < t$ .

Даље, аналогно изразу (3.12),  $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$  изражавамо преко ФТ ГФ и ФТ спољашњег наелектрисања:

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \tilde{G}(\vec{q}, z, z', \omega) \tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z', \omega) e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2\vec{q} d\omega dz' \quad (5.3)$$

где је 2D ФТ спољашњег наелектрисања:

$$\tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z', \omega) = \int \rho_{ext}(\vec{R}, z', t) e^{i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{R})} d^2\vec{R} dt \quad (5.4)$$

Густина наелектрисања у случају јона има облик:

$$\rho_{ext}(\vec{R}, z', t) = Ze \delta(\vec{R} - \vec{v}t) \delta(z' - z_0) \quad (5.5)$$

Заменом (5.5) у (5.4) добијамо ФТ густине наелектрисања јона:

$$\tilde{\rho}_{ext}(\vec{q}, z', \omega) = 2\pi Ze \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}) \delta(z' - z_0) \quad (5.6)$$

Заменом (5.6) у (5.3) добијамо:

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \frac{Ze}{(2\pi)^2} \int \tilde{G}(\vec{q}, z, z_0, \vec{q} \cdot \vec{v}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{v}t)} d^2\vec{q} \quad (5.7)$$

Из једначине (3.52) добијамо ФТ ГФ:

$$\tilde{G}(\vec{q}, z, z_0, \vec{q} \cdot \vec{v}) = \frac{2\pi}{q} e^{-q|z-z_0|} + \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, \vec{q} \cdot \vec{v})} - 1 \right] e^{-q(z+z_0)} \quad (5.8)$$

Сада замењујемо (5.8) у (5.7) и добијамо:

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \frac{Ze}{2\pi} \int \frac{1}{q} \left[ e^{-q|z-z_0|} + \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, \vec{q} \cdot \vec{v})} - 1 \right] e^{-q(z+z_0)} \right] e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{v}t)} d^2\vec{q} \quad (5.9)$$

У  $z = 0$  укупни потенцијал има облик:

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) \Big|_{z=0} = \frac{Ze}{2\pi} \int \frac{e^{-qz_0}}{q} \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{v}t)}}{\varepsilon(q, \vec{q} \cdot \vec{v})} d^2\vec{q} \quad (5.10)$$

Претходни израз можемо да напишемо и у следећем облику:

$$\Phi_{tot}(x, y, z, t)|_{z=0} = \frac{2Ze}{\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{e^{-qz_0}}{q} \operatorname{Re} \left[ \frac{e^{i(q_x(x-vt)+q_y y)}}{\varepsilon(q, q_x v)} \right] dq_x dq_y \quad (5.11)$$

Динамичка поларизациона сила која делује на наелектрисану честицу густине наелектрисања  $\rho_{ext}(\vec{R}, z, t)$  има облик:

$$\vec{F}_{ind} = \int \rho_{ext}(\vec{R}, z, t) \vec{E}_{ind}(\vec{R}, z, t) d^2 \vec{R} dz \quad (5.12)$$

где је индуковано електрично поље изражено преко индукованог потенцијала  $\Phi_{ind}$ :

$$\vec{E}_{ind}(\vec{R}, z, t) = -\nabla \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) \quad (5.13)$$

Заменом једначина (5.5) и (5.13) у једначину (5.12) добијамо динамичку поларизациону силу у случају јона:

$$\vec{F}_{ind} = -Ze \nabla \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) \Big|_{\vec{R}=\vec{v}t, z=z_0} \quad (5.14)$$

Заустановом силом називамо дисипативни део динамичке поларизационе силе. Она се директно супротставља кретању наелектрисаних честица и има важну улогу при проучавању енергијских губитака. Може се изразити у општем случају на следећи начин:

$$F_s = \frac{\vec{v} \cdot \vec{F}_{ind}}{v} \quad (5.15)$$

док у нашем случају има облик:

$$F_s = -Ze \frac{\partial \Phi_{ind}(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x=vt, y=0, z=z_0} \quad (5.16)$$

Сила лика настоји да савије путању јона ка површини графена и у општем случају има облик:

$$F_{im} = \vec{F}_{ind} \cdot \vec{e}_z \quad (5.17)$$

док је у нашем случају облика:

$$F_{im} = -Ze \frac{\partial \Phi_{ind}(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{x=vt, y=0, z=z_0} \quad (5.18)$$

Да би добили облик индукованог потенцијала погодан за израчунавање зауставне силе и силе лика, изразићемо га преко ФТ индуковане ГФ аналогно једначини (5.7) у облику:

$$\Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) = \frac{Ze}{(2\pi)^2} \int \tilde{G}_{ind}(\vec{q}, z, z_0, \vec{q} \cdot \vec{v}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{v}t)} d^2 \vec{q} \quad (5.19)$$

Из (3.52) следи да индукована ГФ има облик :

$$\tilde{G}_{ind}(\vec{q}, z, z_0, \vec{q} \cdot \vec{v}) = \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, \vec{q} \cdot \vec{v})} - 1 \right] e^{-q(z+z_0)} \quad (5.20)$$

Заменом (5.20) у (5.19) добијамо индуковани потенцијал у области изнад графена ( $z \geq 0$ ):

$$\Phi_{ind}(x, y, z, t) = \frac{Ze}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} - 1 \right] \frac{e^{-q(z+z_0)}}{q} e^{i(q_x(x-vt)+q_y y)} dq_x dq_y \quad (5.21)$$

где је  $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ .

Зауоставну силу,  $F_s$ , сада рачунамо заменом (5.21) у (5.16) и добијамо израз:

$$F_s = -\frac{i(Ze)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} - 1 \right] \frac{e^{-2qz_0}}{q} q_x dq_x dq_y \quad (5.22)$$

Подинтегрална функција  $[1/\varepsilon(q, q_x v) - 1]$  има следеће особине: реални део  $\text{Re}[1/\varepsilon(q, q_x v) - 1]$  је паран по  $q_x$  и  $q_y$ , док је имагинарни део  $\text{Im}[1/\varepsilon(q, q_x v)]$  непарна функција по  $q_x$  и  $q_y$ . Применом поменутих особина добијамо  $F_s$  у погодном облику:

$$F_s = \frac{2(Ze)^2}{\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \text{Im} \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} \right] \frac{e^{-2qz_0}}{q} q_x dq_x dq_y \quad (5.23)$$

Силу лика,  $F_{im}$ , добијамо заменом (5.21) у (5.18):

$$F_{im} = \frac{(Ze)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} e^{-2qz_0} dq_x dq_y \quad (5.24)$$

Користећи претходно наведене особине подинтегралне функције добијамо израз за  $F_{im}$  :

$$F_{im} = \frac{2(Ze)^2}{\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \text{Re} \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, q_x v)} - 1 \right] e^{-2qz_0} dq_x dq_y \quad (5.25)$$

Диелектрична функција система је дата једначином (3.51) где је коришћена поларизациона функција  $\chi(q, \omega)$  која је израчуната RPA методом, дата у додатку 7.3 и описана једначином (7.23) у којој је занемарено пригушење, тј.  $\gamma \rightarrow 0$ . Диелектрична функција система без додатог слоја графена  $\varepsilon_{bg}(q, \omega)$  је представљена једначином (3.42).

У локалној апроксимацији (тј. занемарујући просторну дисперзију супстрата), за материјал који подржава два оптичка фононска мода, диелектрична функција полубесконачне подлоге сачињене од SiO<sub>2</sub> супстрата се може написати у следећем облику [100]:

$$\varepsilon_s^{SiO_2}(\omega) = \varepsilon_{ox}^\infty + (\varepsilon_{ox}^i - \varepsilon_{ox}^\infty) \frac{\omega_{TO2}^2}{\omega_{TO2}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_{TO2}} + (\varepsilon_{ox}^0 - \varepsilon_{ox}^i) \frac{\omega_{TO1}^2}{\omega_{TO1}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_{TO1}} \quad (5.26)$$

где су  $\varepsilon_{ox}^\infty$ ,  $\varepsilon_{ox}^i$ , и  $\varepsilon_{ox}^0$  оптичка, средња, и статичка пермитивност,  $\omega_{TO1}$  и  $\omega_{TO2}$  су прва и друга трансверзална оптичка (ТО) угаона учестаност (при чему је  $\omega_{TO1} < \omega_{TO2}$ ), а  $\gamma_{TO1}$  и  $\gamma_{TO2}$  су фактори пригушења одговарајућих ТО фонона.

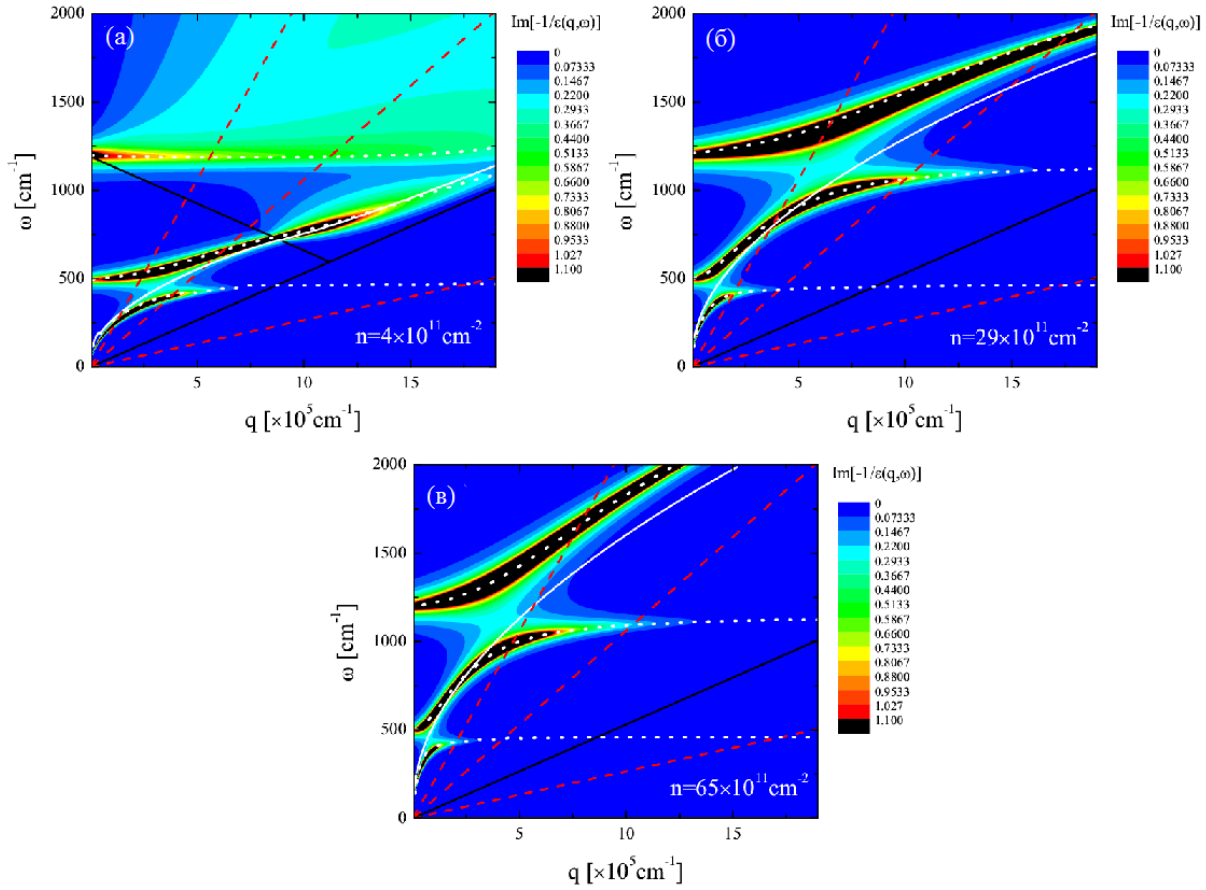
Овде су коришћени следећи параметри:  $\varepsilon_{ox}^0 = 3.9$ ,  $\varepsilon_{ox}^i = 3.05$ ,  $\varepsilon_{ox}^\infty = 2.5$ ,  $\omega_{TO1} = 55.6 \text{ meV}$  ( $448.4 \text{ cm}^{-1}$ ),  $\omega_{TO2} = 138.1 \text{ meV}$  ( $1113.9 \text{ cm}^{-1}$ ),  $\gamma_{TO1} = 5.368 \text{ meV}$  и  $\gamma_{TO2} = 8.947 \text{ meV}$  [70]. Користили смо да растојање између подлоге и графена износи  $h = 4 \text{ \AA}$  [101]. Графен је спонтано  $p$ -допиран наелектрисањем густине  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  услед преноса наелектрисања са подлоге [27] и ова вредност је коришћена као основна у моделу. Такође, продискутоваћемо резултате добијене за густине допирања  $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  и  $n = 65 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  које су такође испитиване у [27].

### 5.1.2. Функција енергијских губитака система графен/SiO<sub>2</sub>

На слици 5.2 је приказана функција енергијских губитака  $\text{Im}[-1/\varepsilon(q, \omega)]$  система графен/SiO<sub>2</sub> у зависности од учестаности (енергије)  $\omega$  и таласног броја  $q$ . Резултати су приказани за три различите густине наелектрисања  $n$  како би представили ефекте допирања графена на плазмон-фонон хибридизацију.

Електрони из  $\pi$  зоне графена се могу побудити на три начина у зависности од енергије побуде. У области енергија  $\omega/v_F > \max(q, 2k_F - q)$ , где је  $k_F = \sqrt{\pi n}$  Fermi-јев таласни број у допираном графену, долази до међузонских једночестичних прелаза, док у области  $q > \omega/v_F > \max(q - 2k_F, 0)$  долази до унутарзонских једночестичних прелаза. Део граница ових области је приказан на слици 5.2 црном пуном линијом и очекивано је да долази до пригушења колективних побуда у овим областима услед јаког Landau-овог пригушења [62]. Са друге стране, добро дефинисани колективни модови могу да се јаве само у области  $q < \omega/v_F < 2k_F - q$  за  $q < k_F$ . У случају статичког супстрата, када важи  $\varepsilon_s(0) = \varepsilon_{ox}^0$ , може се јасно видети Dirac-ов плазмон означен непрекидном белом линијом на сликама 5.2 а), б) и в).





**Слика 5.2:** Функција енергијских губитака  $\text{Im}[-1/\varepsilon(q, \omega)]$  система графен/SiO<sub>2</sub> у зависности од учестаности (енергије)  $\omega$  и таласног броја  $q$  [102]. Резултати су приказани за три различите густине наелектрисања  $n$ : а)  $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , б)  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , в)  $n = 65 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Непрекидна бела линија представља дисперзиону криву *Dirac*-овог плазмона у графену на статичком супстрату док тачкасте беле линије означавају локалне максимуме функције енергијског губитка и представљају дисперзионе криве хибридоизованих плазмон-фонон модова. Пуне црне линије означавају криве  $\omega = v_F(2k_F - q)$  (види се само на слици а)) и  $\omega = v_F q$ . Црвене испрекидане линије означавају криве  $\omega = 0.5v_F q$ ,  $\omega = 2v_F q$  и  $\omega = 4v_F q$ .

*Dirac*-ов плазмон може да се опише дисперзионом релацијом карактеристичном за 2D плазмоне на великим таласним дужинама:

$$\omega_p(q) = \sqrt{\frac{2e^2 v_F k_F q}{\varepsilon_{bg}^0}} \quad (5.27)$$

где је  $\varepsilon_{bg}^0 = (\varepsilon_{ox}^0 + 1)/2$ .

Такође, на слици 5.2 испрекидане црвене линије означавају горњу границу резонантног кинематичког услова  $0 \leq \omega \leq qv$ . Приказане су три резонантне границе за следеће брзине упадних честица:  $v = 0.5v_F$ ,  $2v_F$  и  $4v_F$ . Сада је јасно да се овај плазмонски мод може побудити једино када

се наелектрисана честица креће брзином  $v > v_F$  (крива *Dirac*-овог плазмона у случају статичког супстрата се налази изнад границе  $\omega = qv_F$  за унутарзонске једночестичне прелазе).

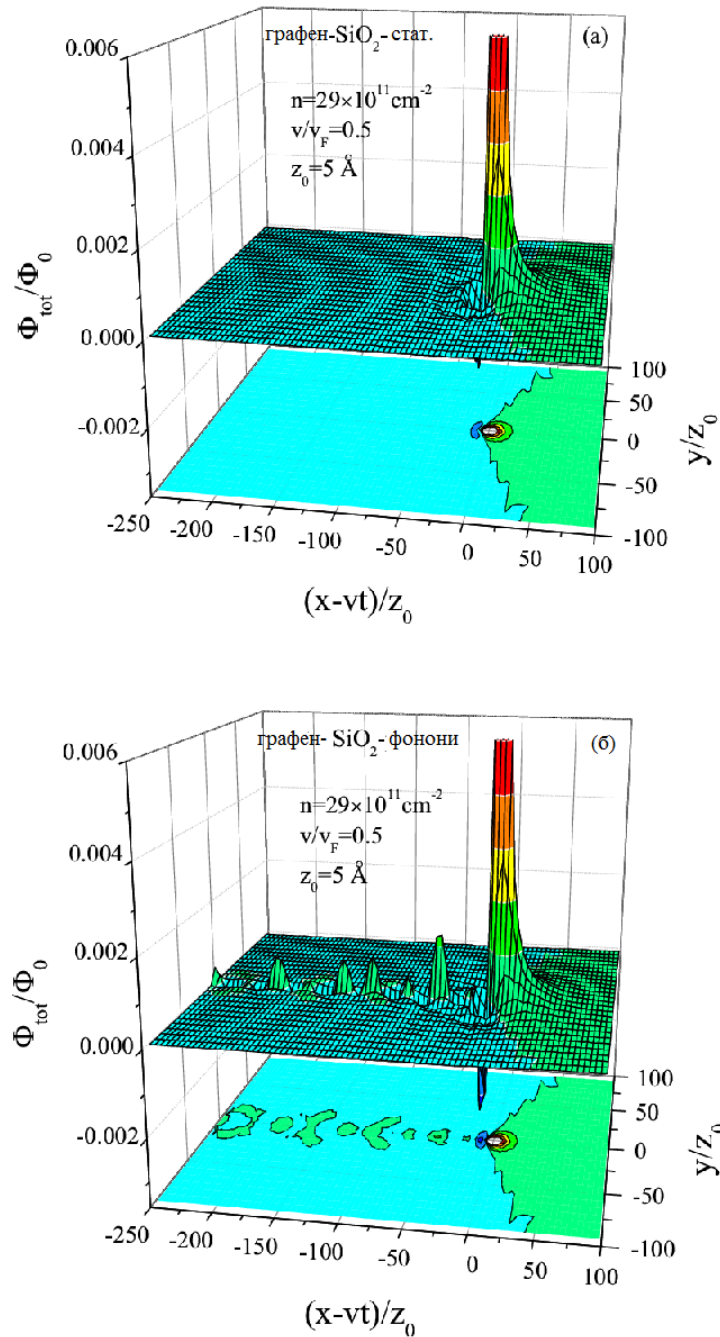
Међутим, у случају недисперзивног супстрата, када су укључена два фононска мода (на учестаностима  $\omega_{TO1}$  и  $\omega_{TO2}$ ) у диелектричну функцију супстрата преко једначине (5.26), долази до хибридизације *Dirac*-овог плазмона и фононских модова и њиховог цепања на три гране означене тачкастим линијама на слици 5.2.

У случају све три густине допирања (слике 5.2 а), б) и в)) може се видети да се у зони у којој нема *Landau*-овог пригушења налазе две гране које су настале цепањем хибридизованог *Dirac*-овог плазмона и фононског мода  $\omega_{TO1}$ . Оне се могу побудити честицама које се крећу брзинама  $v=2v_F$  или  $v=4v_F$ , пошто се поменуће гране у сва три случаја секу са линијама које одговарају датим брзинама. Са повећањем густине наелектрисуња обе гране се померају ка већим учестаностима. Цепању *Dirac*-овог плазмона и фононског мода  $\omega_{TO2}$  одговара горња грана и она се на слици 5.2 а) у потпуности налази у зони једночестичних међузонских прелаза и знатно је проширена услед интензивног *Landau*-овог пригушења, а на сликама 5.2 б) и в) налази се у зони у којој нема *Landau*-овог пригушења.

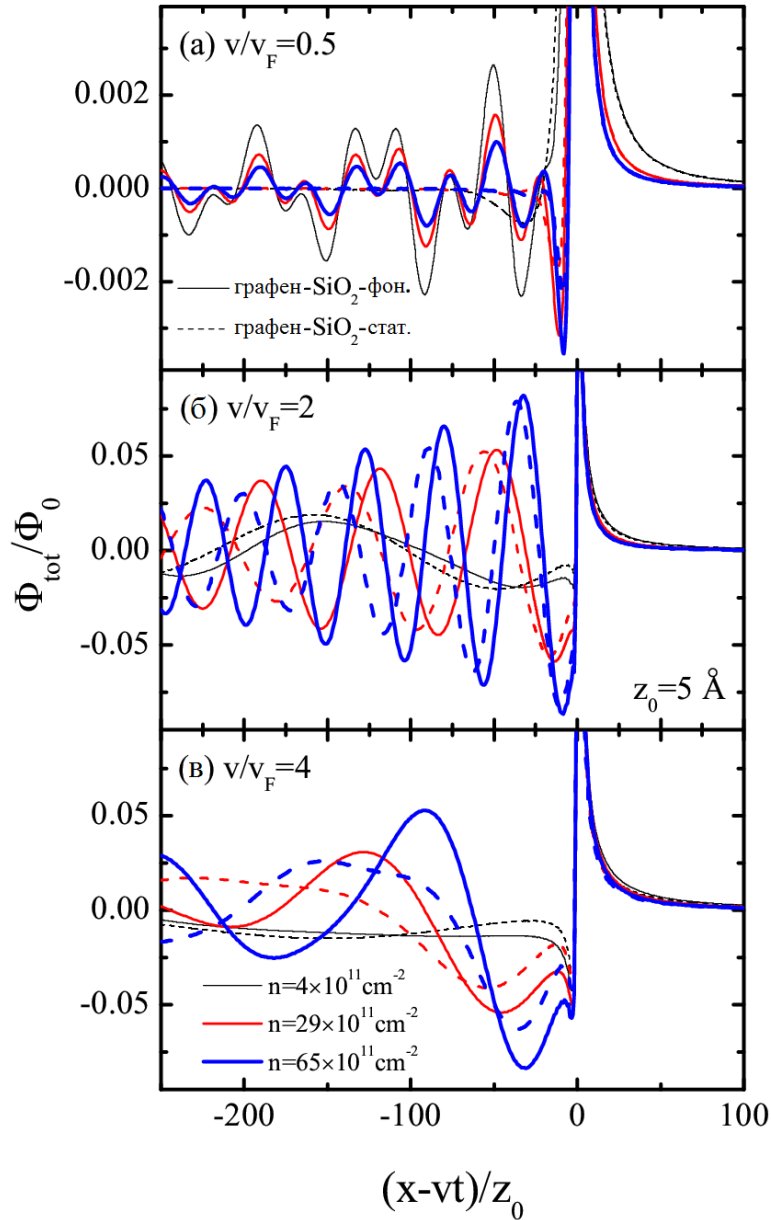
Овде вреди поменути да у сва три случаја на слици 5.2 доња грана која одговара цепању хибридизованог *Dirac*-овог плазмона и фононског мода  $\omega_{TO1}$ , улази у зону једночестичних унутарзонских прелаза када достигне тзв. критични таласни број  $q_c \approx \omega_{TO1}/v_F \approx 8 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ . Може се приметити да је фазна брзина поменуће гране  $\omega/q < v_F$  када важи  $q > q_c$  и може се побудити пројектилом брзине  $v = 0.5v_F$ . Ова брзина је мања од *Fermi*-јеве брзине која је неопходна да би се побудио *Dirac*-ов плазмон у случају статичког супстрата.

### 5.1.3. Укупни електростатички потенцијал у равни графена

Како би боље описали механизам побуђивања претходно поменутог хибридизованог плазмон-фонон мода брзином која је испод  $v_F$ , на слици 5.3 је приказан укупни електростатички потенцијал у равни графена ( $z = 0$ ) који потиче од протона који се креће дуж  $x$ -осе брзином  $v = 0.5v_F$  на растојању  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  изнад графена допираног наелектрисуњем густине  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Графен је спонтано допиран до ове густине наелектрисуња услед преноса наелектрисуња са подлоге сачињене од  $\text{SiO}_2$  [27]. На слици 5.3 а) је приказан укупни електростатички потенцијал у случају статичког супстрата. Са слике се види да је поменути потенцијал асиметричног облика и доста кратког домета услед ефикасног екранирања од стране носилаца наелектрисуња у графену и без побуђивања колективних модова. На слици 5.3 б) је приказан случај супстрата који подржава два оптичка фононска мода. Овде се јасно види да је дошло до ефекта таласа у виду осцилација потенцијала иза протона ( $x < vt$ ) услед хибридизације *Dirac*-овог плазмона и фонона супстрата учестаности  $\omega_{TO1}$ . Овај потенцијал сада има знатно већи домет него у претходном случају и ограничен је на релативно уску област у смеру  $y$ -осе под правим углом у односу на путању протона.



**Слика 5.3:** Просторна расподела укупног електростатичког потенцијала  $\Phi_{tot}$  [102] у равни графена (нормализован са  $\Phi_0 = Ze/z_0$ ) као функција  $x-vt$  и  $y$  (оба нормализована са  $z_0$ ) у области у којој се јавља ефекат таласа изазван протоном ( $Z=1$ ) који се креће дуж  $x$ -осе брзином  $v=0.5v_F$  на растојању  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  изнад графена који је допиран наелектрисањем густине  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Резултати су приказани за два случаја: а) графен на статичком супстрату, б) графен на супстрату који подржава два оптичка фононска мода.



**Слика 5.4:** Просторна расподела укупног електростатичког потенцијала  $\Phi_{tot}$  [102] у равни графена (нормиран са  $\Phi_0 = Ze/z_0$ ) као функција  $x - vt$  (нормирана са  $z_0$ ) и  $y = 0$ , за протон ( $Z = 1$ ) који се креће дуж  $x$ -осе на растојању  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  изнад графена за три брзине: а)  $v = 0.5 v_F$ , б)  $v = 2 v_F$  и в)  $v = 4 v_F$ . Резултати су приказани за два модела: у првом моделу је графен на супстрату који подржава два оптичка фонона (пуне линије), а у другом је графен на статичком супстрату (испрекидане линије) и за три различите густине допирања:  $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (танка црна линија),  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (црвена линија средње дебљине),  $n = 65 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (пуна плава линија).

Како би детаљније описали ефекат таласа услед плазмон-фонон хибридизације на слици 5.4 је приказана зависност  $\Phi_{tot}(x)$  у равни графена ( $z = 0$ ) при  $y = 0$  за протон који се креће дуж  $x$ -осе за три брзине:  $v = 0.5 v_F$ ,  $2 v_F$  и  $4 v_F$  на растојању  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  изнад графена који је допиран густинама наелектрисања:  $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  и  $n = 65 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Приказана су два случаја: случај графена на статичком супстрату и случај графена на супстрату који подржава два фононска мода.

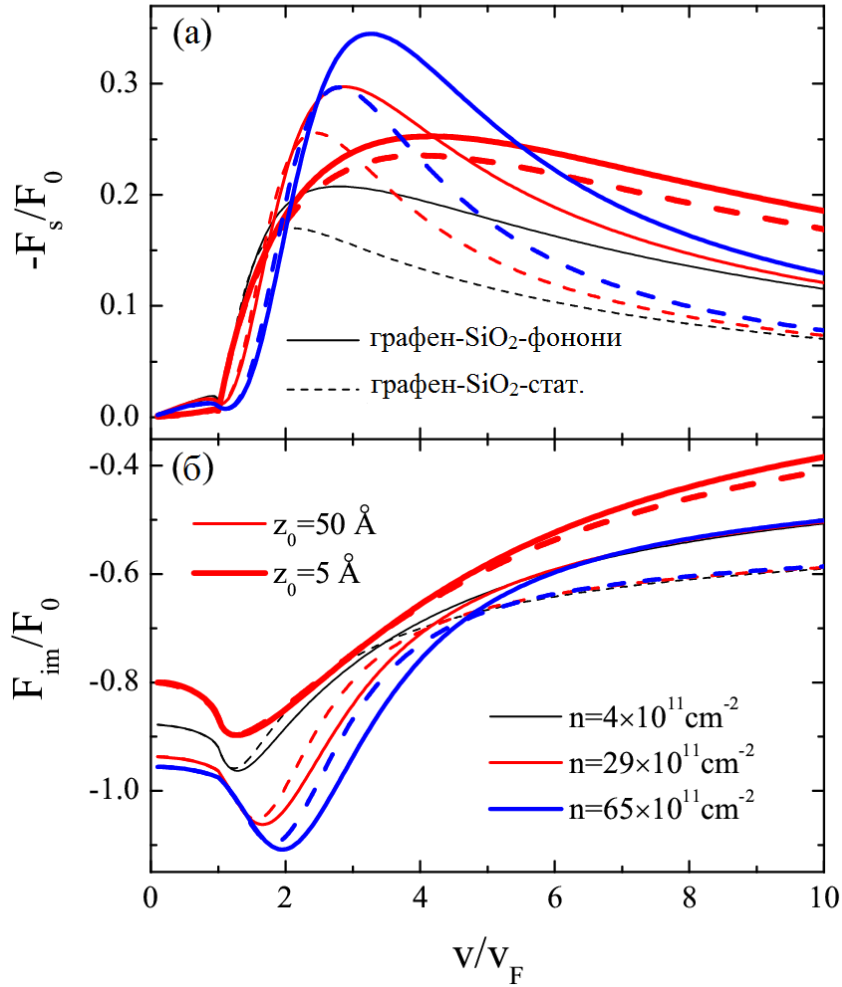
На слици 5.4 а) је приказан случај честице која се креће брзином  $v=0.5 v_F$ . Ова брзина је нижа од прага потребног за појаву ефекта таласа тако да при овој брзини он изостаје у случају статичког супстрата. У случају супстрата који подржава фононе услед плазмон-фонон хибридизације долази до појаве ефекта таласа у виду малих али приметних осцилација потенцијала  $\Phi_{tot}$  на растојањима  $x < vt$ . Период ових осцилација не зависи од густине допирања  $n$ , што је још један показатељ да је ефекат таласа повезан са постојањем недисперзивне гране ниже енергије настале при хибридизацији *Dirac*-овог плазмона и фона на учестаности  $\omega_{TO1}$ . На истој слици се такође може приметити да амплитуда осцилација потенцијала  $\Phi_{tot}$  опада са порастом густине допирања  $n$  што се може објаснити већим *Landau*-овим пригушењем поменуте гране у зони једночестичних унутарзонских прелаза.

На сликама 5.4 б) и в) можемо да видимо да је на растојањима  $x < vt$  дошло до ефекта таласа знатно јачег интензитета него у претходном случају. Брзина честице је у овим случајевима већа од прага потребног за ефекат таласа ( $v > v_F$ ). У случају ових брзина код супстрата који подржава фононе долази до пораста амплитуда осциловања док периоди осциловања опадају у односу на случај статичког супстрата. Претпоставља се да је дошло до измена у облику осцилација потенцијала  $\Phi_{tot}$  пошто је дошло до побуђивања *Dirac*-овог плазмона чија је дисперзија знатно измењена хибридизацијом са фононима супстрата.

Са друге стране, на слици 5.4 је приметно да услед плазмон-фонон хибридизације не долази до значајних промена у облику  $\Phi_{tot}$  на растојањима у блиској околини наелектрисане честице ( $x \approx vt$ ) на којима долази до појаве локалних ефеката који су одговорни за постојање зауставне силе  $F_s$  и силе лика  $F_{im}$  о којима ће сада бити више речи.

#### 5.1.4. Заушавна сила и сила лика у зависности од брзине протона

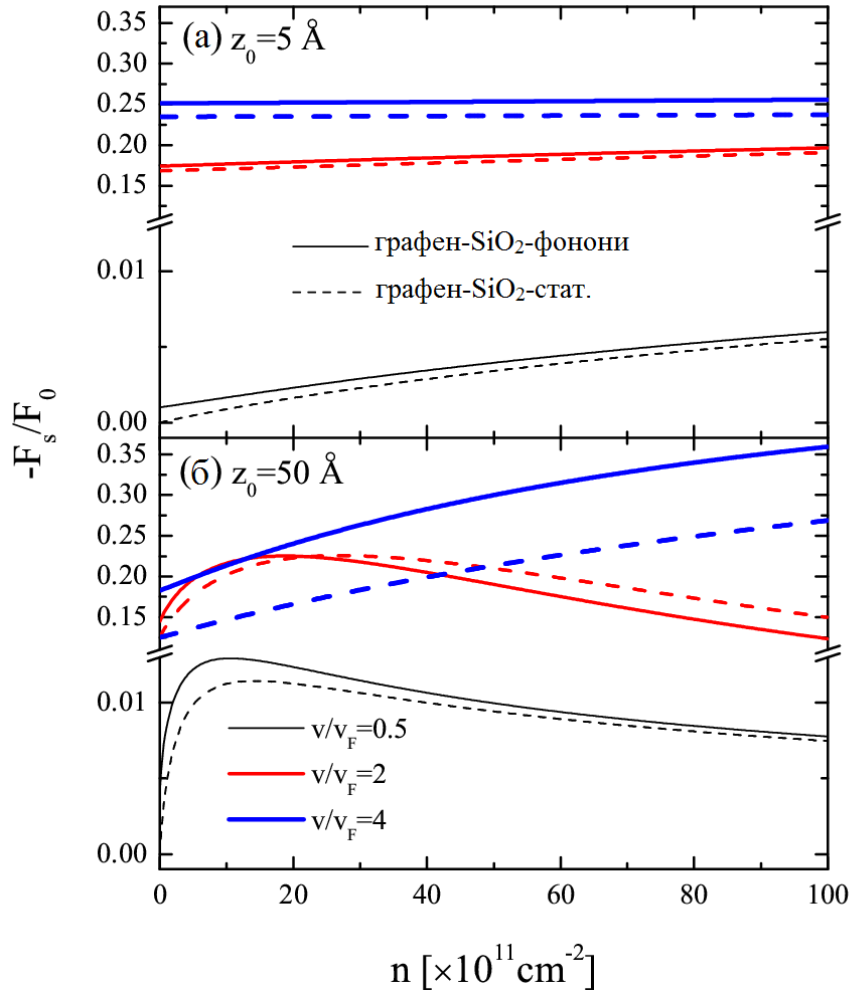
На слици 5.5 приказане су заушавна сила  $F_s$  и сила лика  $F_{im}$  у зависности од брзине протона који се креће дуж  $x$ -осе на растојању  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  изнад графена спонтано допираног наелектрисањем густине  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , као и на знатно већем растојању  $z_0 = 50 \text{ \AA}$  изнад графена за три различите густине наелектрисања:  $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  и  $n = 65 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Овде можемо да приметимо да плазмон-фонон хибридизација готово нема утицаја на заушавну силу и силу лика за брзине ниже од прага, тј.  $v < v_F$  што се може објаснити чињеницом да су за растојања  $x \approx vt$  и при брзинама  $v < v_F$  доминанти једночестични унутарзонски прелази и у потпуности потискују колективне осцилације које би потицале од ниже гране настале након цепања хибридизованог *Dirac*-овог плазмона и фононског мода  $\omega_{TO1}$ . Са друге стране, приметни су значајни ефекти које има плазмон-фонон хибридизација на заушавну силу  $F_s$  на слици 5.5 а) при брзинама  $v > 2 v_F$ , као и на силу лика  $F_{im}$  на слици 5.5 б) при брзинама  $v > 5 v_F$ . Овакав резултат може да се објасни тиме да при довољно великим брзинама протона долази до побуђивања све три гране настале након плазмон-фонон хибридизације са слике 5.2. Када упоредимо понашање заушавне силе и силе лика за растојања протона  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  и  $z_0 = 50 \text{ \AA}$  за густину наелектрисања  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  можемо да приметимо да су ефекти плазмон-фонон хибридизације мало израженији на већим растојањима.



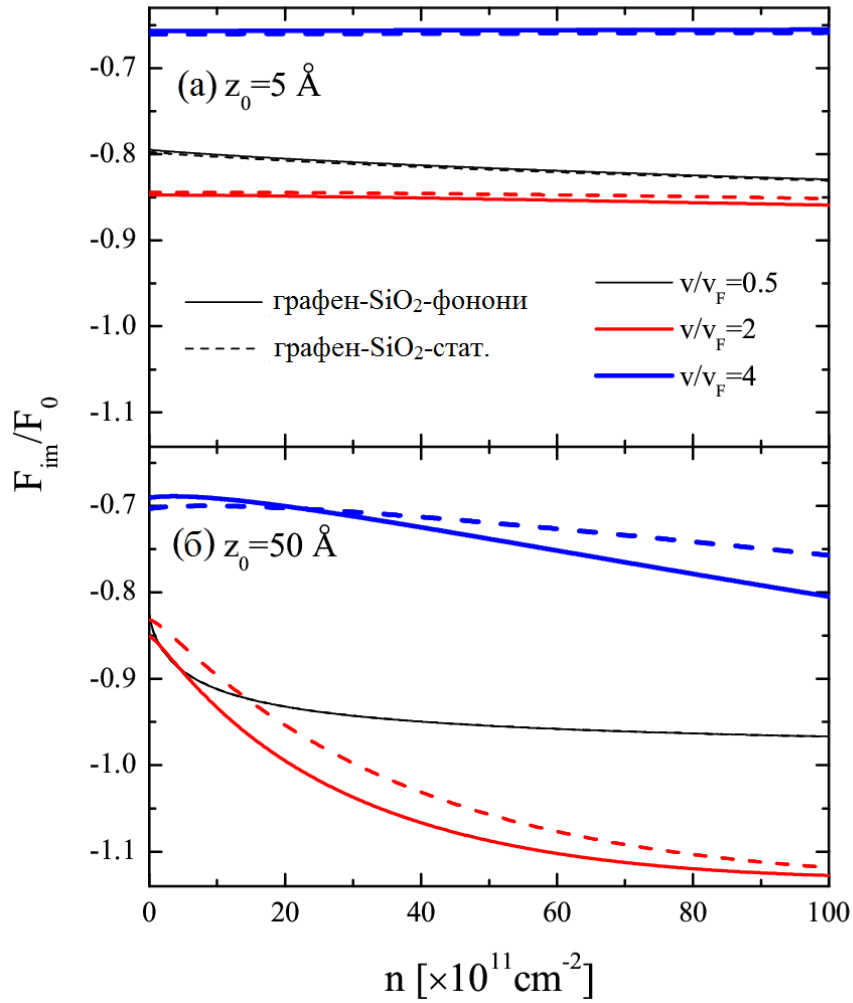
**Слика 5.5:** Зауоставна сила  $F_s$  (слика а)) и сила lika  $F_{im}$  (слика б)), нормиране са  $F_0 = Z^2 e^2 / (4z_0^2)$ , приказане као функције брзине  $v$  (која је нормирана са  $v_F$ ) протона ( $Z = 1$ ) који се креће дуж  $x$ -осе на растојању  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  изнад графена (пуна црвена линија) допираног наелектрисањем густине  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , као и на растојању  $z_0 = 50 \text{ \AA}$  изнад графена за три различите густине наелектрисања:  $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (танка црна линија),  $n = 29 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (црвена линија средње дебљине) и  $n = 65 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (пуна плава линија). Резултати [102] су приказани за два модела: у првом моделу је графен на супстрату који подржава два оптичка фонона (пуне линије), а у другом је графен на статичком супстрату (испрекидане линије).

На сликама 5.6 и 5.7 приказане су зауоставна сила и сила lika у зависности од густине наелектрисања графена за три различите брзине протона:  $v = 0.5 v_F$ ,  $2 v_F$  и  $4 v_F$ , као и за два растојања:  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  и  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ . На овим сликама се такође може приметити да плазмон-фонон хибридизација при брзинама  $v > v_F$  има већи утицај на  $F_s$  и  $F_{im}$  при већем растојању, тј.  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ . Овде је такође приметно да је плазмон-фонон хибридизација имала већи утицај на зауоставну силу на слици 5.6 него на силу lika на слици 5.7 пошто је избор брзина протона на овим сликама био такав да не покрива брзине  $v > 5 v_F$  на којима плазмон-фонон хибридизација има највише утицаја на силу lika (слика 5.5 б)). Са друге стране, приметан је утицај плазмон-фонон

гибридизације на зауставну силу на слици 5.6 чак и на брзинама мањим од брзине прага, тј.  $v=0.5 v_F$ , нарочито при ниским густинама наелектрисања  $n$ . Заправо, у случају „слободног“ графена ( $n \rightarrow 0$ ) на статичком супстрату нема зауставне силе, док у случају супстрата који подржава фононе ипак постоји нека коначна зауставна сила. Могло би се закључити да „слободни“ графен само делимично екранира фононе супстрата.



**Слика 5.6:** Зауставна сила  $F_s$  [102] (нормирана са  $F_0 = Z^2 e^2 / (4z_0^2)$ ), приказана као функција густине наелектрисања  $n$  за протон ( $Z = 1$ ) који се креће дуж  $x$ -осе изнад графена за два растојања: а)  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  и б)  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ , и три различите брзине:  $v=0.5 v_F$  (танка црна линија),  $v=2 v_F$  (црвена линија средње дебљине) и  $v=4 v_F$  (пуна плава линија). Резултати су приказани за два модела: у првом моделу је графен на супстрату који подржава два оптичка фона (пуне линије), а у другом је графен на статичком супстрату (испрекидане линије).

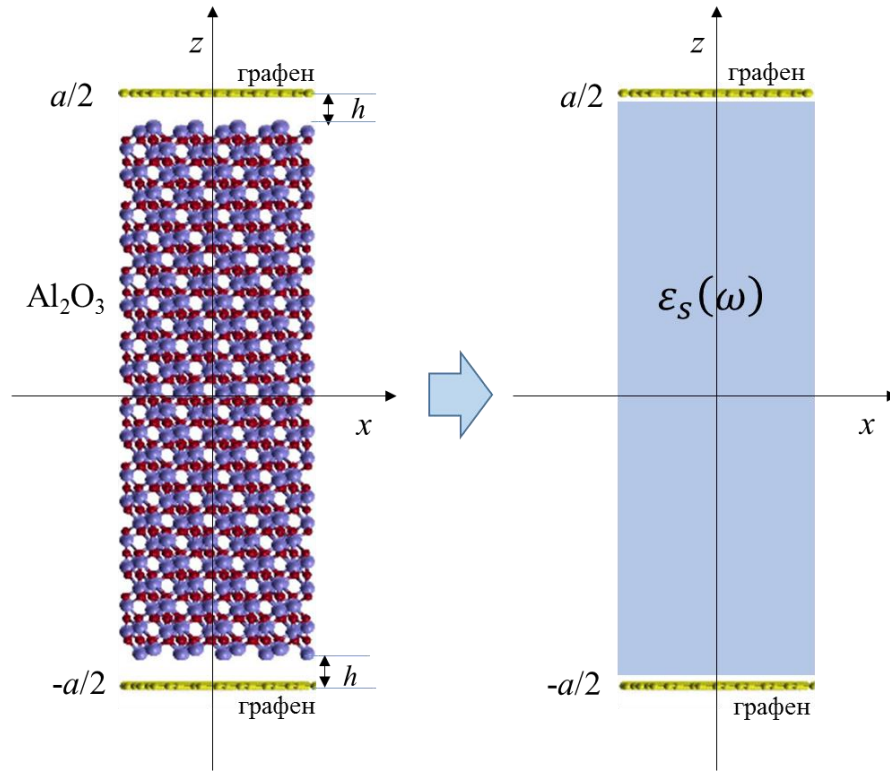


**Слика 5.7:** Сила lika  $F_{im}$  [102] (нормирана са  $F_0 = Z^2 e^2 / (4z_0^2)$ ), приказана као функција густине наелектрисања  $n$  за протон ( $Z = 1$ ) који се креће дуж  $x$ -осе изнад графена за два растојања: а)  $z_0 = 5 \text{ \AA}$  и б)  $z_0 = 50 \text{ \AA}$ , и три различите брзине:  $v=0.5 v_F$  (танка црна линија),  $v=2 v_F$  (црвена линија средње дебљине) и  $v=4 v_F$  (пуна плава линија). Резултати су приказани за два модела: у првом моделу је графен на супстрату који подржава два оптичка фонона (пуне линије), а у другом је графен на статичком супстрату (испрекидане линије).



## 5.2. Испитивање плазмон-фонон хибридизације у систему графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен

У овом поглављу се бавимо испитивањем плазмон-фонон хибридизације у систему који се састоји од два слоја графена са уметнутим диелектриком ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) између њих. На слици 5.8 лево је приказана кристална структура система графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен на којој се види да постоји неко коначно растојање  $h$  између слоја графена и  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Ради једноставности, у упрошћеном моделу приказаном на слици 5.8 десно, ово растојање је занемарено (тј.  $h = 0$ ) док слој  $\text{Al}_2\text{O}_3$  посматрамо као хомогени слој диелектрика дебљине  $a$  који је описан диелектричном функцијом  $\epsilon_s(\omega)$ . Слично као у случају подлоге сачињене од  $\text{SiO}_2$  узимамо да слој  $\text{Al}_2\text{O}_3$  има два доминантна  $\text{FK}$  фононска мода на учестаностима око  $56 \text{ meV}$  и  $110 \text{ meV}$  (као што је већ поменуто у поглављу 2.3). Оба слоја графена посматрамо као 2D системе који су описани поларизационим функцијама  $\chi_{1,2}(q, \omega)$ .



**Слика 5.8:** (Лево) Кристална структура система графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен. (Десно) Упрошћен модел система где је  $\text{Al}_2\text{O}_3$  апроксимиран хомогеним диелектричним слојем чија је диелектрична функција  $\epsilon_s(\omega)$ .

### 5.2.1. Диелектрична функција система графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен

Диелектрична функција  $\epsilon_s(\omega)$  слоја  $\text{Al}_2\text{O}_3$  у овом случају има облик [86]:

$$\epsilon_s^{\text{Al}_2\text{O}_3}(\omega) = \epsilon_{ox}^{\infty'} + (\epsilon_{ox}^{i'} - \epsilon_{ox}^{\infty'}) \frac{\omega_{TO2}^2}{\omega_{TO2}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma'_{TO2}} + (\epsilon_{ox}^{0'} - \epsilon_{ox}^{i'}) \frac{\omega_{TO1}^2}{\omega_{TO1}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma'_{TO1}} \quad (5.28)$$

где су  $\varepsilon_{ox}^{\infty'}$ ,  $\varepsilon_{ox}^{i'}$ , и  $\varepsilon_{ox}^{0'}$  оптичка, средња, и статичка пермитивност,  $\omega'_{TO1}$  и  $\omega'_{TO2}$  су прва и друга трансверзална оптичка (ТО) угаона учестаност (при чему је  $\omega'_{TO1} < \omega'_{TO2}$ ), а  $\gamma'_{TO1}$  и  $\gamma'_{TO2}$  су фактори пригушења одговарајућих ТО фонона. Коришћени су следећи параметри:  $\varepsilon_{ox}^{0'} = 12.53$ ,  $\varepsilon_{ox}^{i'} = 7.27$ ,  $\varepsilon_{ox}^{\infty'} = 3.20$ ,  $\omega'_{TO1} = 48.18 \text{ meV}$ ,  $\omega'_{TO2} = 71.41 \text{ meV}$ ,  $\gamma'_{TO1} = 1.74 \text{ meV}$  и  $\gamma'_{TO2} = 6.82 \text{ meV}$ .

Диелектричну функцију  $\varepsilon(q, \omega)$  која описује систем графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен добијамо користећи индуковану ГФ  $\tilde{G}_{ind}(z, z')$  која представља други члан у једначини (3.128). У случају  $z = z' = \frac{a}{2}$  имамо да је:

$$\tilde{G}_{ind}(q, \omega) = \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1}{\frac{1}{2}(R(q, \omega) + 2S_2(q, \omega)) - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_s^2(\omega) \text{cosech}^2(qa)}{R(q, \omega) + 2S_1(q, \omega)}} - 1 \right] \quad (5.29)$$

Знамо да је:

$$\tilde{G}_{ind}(q, \omega) = \frac{2\pi}{q} \left[ \frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} - 1 \right] \quad (5.30)$$

Поређењем (5.29) и (5.30) добијамо:

$$\varepsilon(q, \omega) = \frac{1}{2}(R(q, \omega) + 2S_2(q, \omega)) - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_s^2(\omega) \text{cosech}^2(qa)}{R(q, \omega) + 2S_1(q, \omega)} \quad (5.31)$$

Заменом (3.104) и (3.109) у (5.31) добијамо да важи:

$$\varepsilon(q, \omega) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \varepsilon_s(\omega) \coth(qa) + \frac{4\pi e^2}{q} \chi_2(q, \omega) \right] - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_s^2(\omega) \text{cosech}^2(qa)}{1 + \varepsilon_s(\omega) \coth(qa) + \frac{4\pi e^2}{q} \chi_1(q, \omega)} \quad (5.32)$$

### 5.2.2. Дисперзионе релације

Дисперзионе криве које описују колективне модове који се јављају у овом случају добијамо решавањем једначине:

$$\varepsilon(q, \omega) = 0 \quad (5.33)$$

Такође, сви фактори пригушења су занемарени и сматрамо да су имагинарни делови поларизационих функција  $\chi_1(q, \omega)$  и  $\chi_2(q, \omega)$  приближно једнаки нули. У специјалном случају, када су поларизационе функције оба слоја графена једнаке, тј.  $\chi_1(q, \omega) = \chi_2(q, \omega) = \chi(q, \omega)$ , једначина (5.33) може да се напише као производ симетричног (5.34) и антисиметричног (5.35) хибридизованог мода:

$$1 + \varepsilon_s^{Al_2O_3}(\omega) \coth \left[ \frac{qa}{2} \right] + \frac{4\pi}{q} e^2 \chi(q, \omega) = 0 \quad (5.34)$$

$$1 + \varepsilon_s^{Al_2O_3}(\omega) \tanh \left[ \frac{qa}{2} \right] + \frac{4\pi}{q} e^2 \chi(q, \omega) = 0 \quad (5.35)$$

Једначине (5.34) и (5.35) можемо да напишемо у оптичком лимиту користећи поларизациону функцију изражену преко проводности допираног графена  $\sigma(\omega)$  када  $q \rightarrow 0$ :

$$\chi(q, \omega) = \frac{iq^2 \sigma(\omega)}{e^2 \omega} \quad (5.36)$$

где проводност представља збир унутарзонске  $\sigma^{\text{intra}}(\omega)$  и међузонске  $\sigma^{\text{inter}}(\omega)$  проводности  $\sigma(\omega) = \sigma^{\text{intra}}(\omega) + \sigma^{\text{inter}}(\omega)$  које су израчунате у [103] коришћењем *RPA* метода. У случају са занемареним пригушењем на нултој температури, унутарзонска проводност је *Drude*-ова и има облик:

$$\sigma^{\text{intra}}(\omega) = \frac{iE_F e^2}{\pi \omega} \quad (5.37)$$

док међузонска проводност сада има облик [103]:

$$\sigma^{\text{inter}}(\omega) = -\frac{ie^2}{4\pi} \ln \left( \frac{2E_F + \omega}{2E_F - \omega} \right), \quad \omega < 2E_F \quad (5.38)$$

Поларизациона функција графена са коначним пригушењем је дата у додатку 7.3 и назива се *Mermin*-овом поларизационом функцијом. Израчуната је помоћу *MDF-RPA* метода.

Ради поређења резултата са резултатима добијеним оптичким *ab initio-RPA* методом, поларизациона функција графена са коначним пригушењем је израчуната коришћењем следеће унутарзонске и међузонске проводности:

$$\sigma^{\text{intra}}(\omega) = \frac{iE_F e^2}{\pi(\omega + i\gamma_{\text{intra}})} \quad (5.39)$$

$$\sigma^{\text{inter}}(\omega) = \frac{ie^2}{4} \left[ \frac{1}{2\pi} \ln \frac{(2E_F - \omega)^2 + \gamma_{\text{inter}}^2}{(2E_F + \omega)^2 + \gamma_{\text{inter}}^2} - i \left( 1 + \frac{1}{\pi} \arctan \frac{\omega - 2E_F}{\gamma_{\text{inter}}} - \frac{1}{\pi} \arctan \frac{\omega + 2E_F}{\gamma_{\text{inter}}} \right) \right] \quad (5.40)$$

где су  $\gamma_{\text{intra}}$  и  $\gamma_{\text{inter}}$  унутарзонско и међузонско пригушење, тим редом.

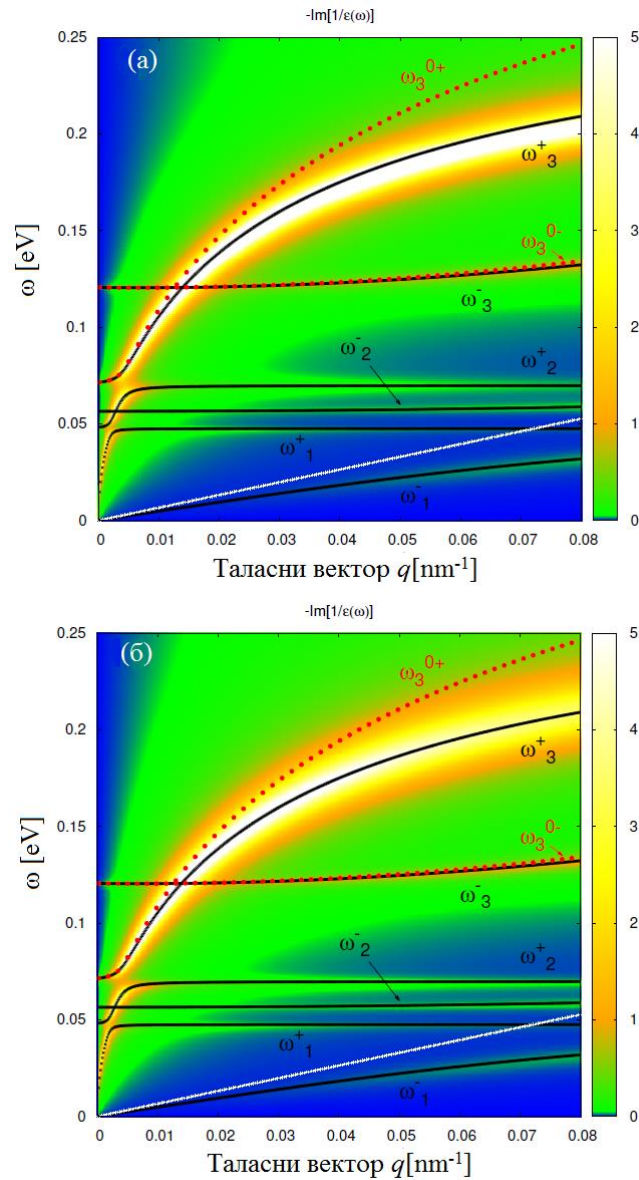
### 5.2.3. Поређење *EELS* спектра

Како би подробније испитали хибридизацију између четири *FK* фонона у сафиру и два *Dirac*-ова плазмона у графену поредићемо *EELS* спектар система који смо добили уз помоћ *MDF-RPA* метода са дисперзионим кривама које су израчунате коришћењем оптичког *MDF-RPA* метода као и *Drude*-овог модела. Поредићемо добијене резултате са резултатима које је наш сарадник доц. др Vito Desroја израчунао користећи *ab initio RPA* метод.

На слици 5.9 а) је приказан *EELS* спектар у редукованом  $(q, \omega)$  простору за систем графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен израчунат оптичким *ab initio RPA* методом, док је на слици 5.9 б) приказан *EELS* спектар добијен оптичким *MDF-RPA* методом за исти систем. Код оба метода коришћене су следеће вредности за унутарзонско и међузонско пригушење:  $\gamma_{\text{intra}} = 10 \text{ meV}$  и  $\gamma_{\text{inter}} = 50 \text{ meV}$ . На слици се јасно види доста добро слагање ова два спектра што иде у прилог валидности оптичког *MDF-RPA* метода који је семи-класичан па и рачунски доста мање захтеван од *ab initio RPA* метода. Код оба спектра се јасно види шест хибридованих плазмон-фонон модова. Пошто се ради о симетричном систему, ових шест модова можемо да поделимо у две групе: симетричну и антисиметричну. Пуном црном линијом су представљене дисперзионе криве ових шест модова израчунате коришћењем оптичког *MDF-RPA* метода где је урачуната  $\epsilon_s^{\text{Al}_2\text{O}_3}(\omega)$  дата са (5.28) са занемареним пригушењем. Коришћењем једначине (5.34) добија се да су  $\omega_1^-, \omega_2^-$  и  $\omega_3^-$  асиметрични модови, док се уз помоћ (5.35) добија да су  $\omega_1^+, \omega_2^+$  и  $\omega_3^+$  симетрични модови. Ових шест дисперзионих крива се одлично поклапају са максимумима у интензитету *EELS* спектра што ће нам помоћи да одредимо плазмон/фононску природу конкретног мода.

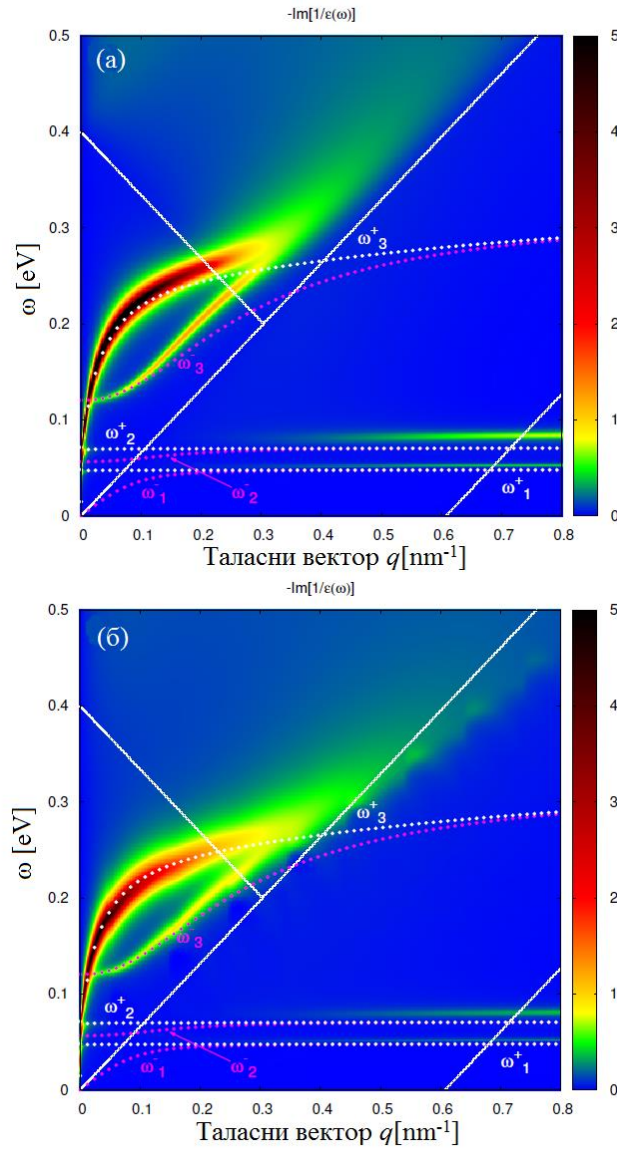
Парност одређеног мода може да се испита уз помоћ два тачкаста наелектрисања, наелектрисана са  $Q_1$  и  $Q_2$  и важи или  $Q_1 = Q_2 = Q$  или  $Q_1 = -Q_2 = Q$ . Наелектрисања се симетрично постављају у систем са слике 5.8 у  $z = \pm \left( \frac{a}{2} + 0^+ \right)$  ( $0^+$  је инфинитезимално мали број) и наелектрисање се мења као  $Q \cos \omega_i t$  где је  $\omega_i$  својствена учестаност хибридованог мода који се испитује. Појединачни симетрични мод је могуће побудити када су наелектрисања истог знака и чине симетрични систем док наелектрисања различитог знака чине антисиметрични систем и могу да побуде антисиметричне модове.

Такође, на слици 5.9 се може видети да природа хибридованих модова зависи од вредности  $q$ . Када  $q$  узима велике вредности, модови  $\omega_1^+$  и  $\omega_2^+$  доста наликују на фононске модове, док модови  $\omega_3^+$  наликују на плазмонске. Са друге стране, када  $q \rightarrow 0$ , у зависности од симетрије одређених модова може доћи до јаке хибридизације између неких од њих. На пример, када се симетрични фононски модови  $\omega_1^+$  и  $\omega_2^+$  нађу у близини симетричног плазмонског мода  $\omega_3^+$ , они јако интерагују са  $\omega_3^+$  и преузимају његов плазмонски карактер. Насупрот томе, антисиметрични модови  $\omega_1^-, \omega_2^-$  и  $\omega_3^-$  секу симетрични мод  $\omega_3^+$  без интеракције док линеарни мод  $\omega_1^-$  не интерагује ни са једним од осталих.



**Слика 5.9:** *EELS* спектар у редукованом  $(q, \omega)$  простору за систем графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен [104] израчунат: а) оптичким *ab initio RPA* методом и б) оптичким *MDF-RPA* методом. Растојање између слојева графена износи  $a = 5 \text{ nm}$  и оба слоја графена су допирана до  $E_F = 200 \text{ meV}$ . Црне линије представљају дисперзионе криве шест хибридованих модова ( $\omega_1^\pm, \omega_2^\pm$  и  $\omega_3^\pm$ ) добијене оптичким *MDF-RPA* методом док црвене тачкасте линије представљају дисперзионе криве два мода највеће учестаности ( $\omega_3^{0\pm}$ ) који су добијени уз помоћ *Drude*-овог модела. Танка бела линија представља горњу границу области ( $\omega = v_F q$ ) у којој долази до унутарзонских једночестичних побуда ( $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$ ) у апроксимацији *Dirac*-овог конуса.

Две црвене тачкасте линије на слици 5.9 означене са  $\omega_3^{0\pm}$  представљају дисперзионе криве одговарајућих хибридованих модова добијене коришћењем *Drude*-овог модела за проводност слојева графена,  $\sigma = \sigma^{\text{intra}}$  из (5.37) са занемареним пригушењем. Остале четири дисперзионе криве израчунате коришћењем *Drude*-овог модела ( $\omega_1^{0\pm}$  и  $\omega_2^{0\pm}$ ) нису приказане пошто се у потпуности поклапају са дисперзионим кривама  $\omega_1^\pm$  и  $\omega_2^\pm$  добијеним коришћењем „комплетне“ проводности  $\sigma = \sigma^{\text{intra}} + \sigma^{\text{inter}}$  ((5.37) и (5.38)) у оптичком *MDF-RPA* моделу.



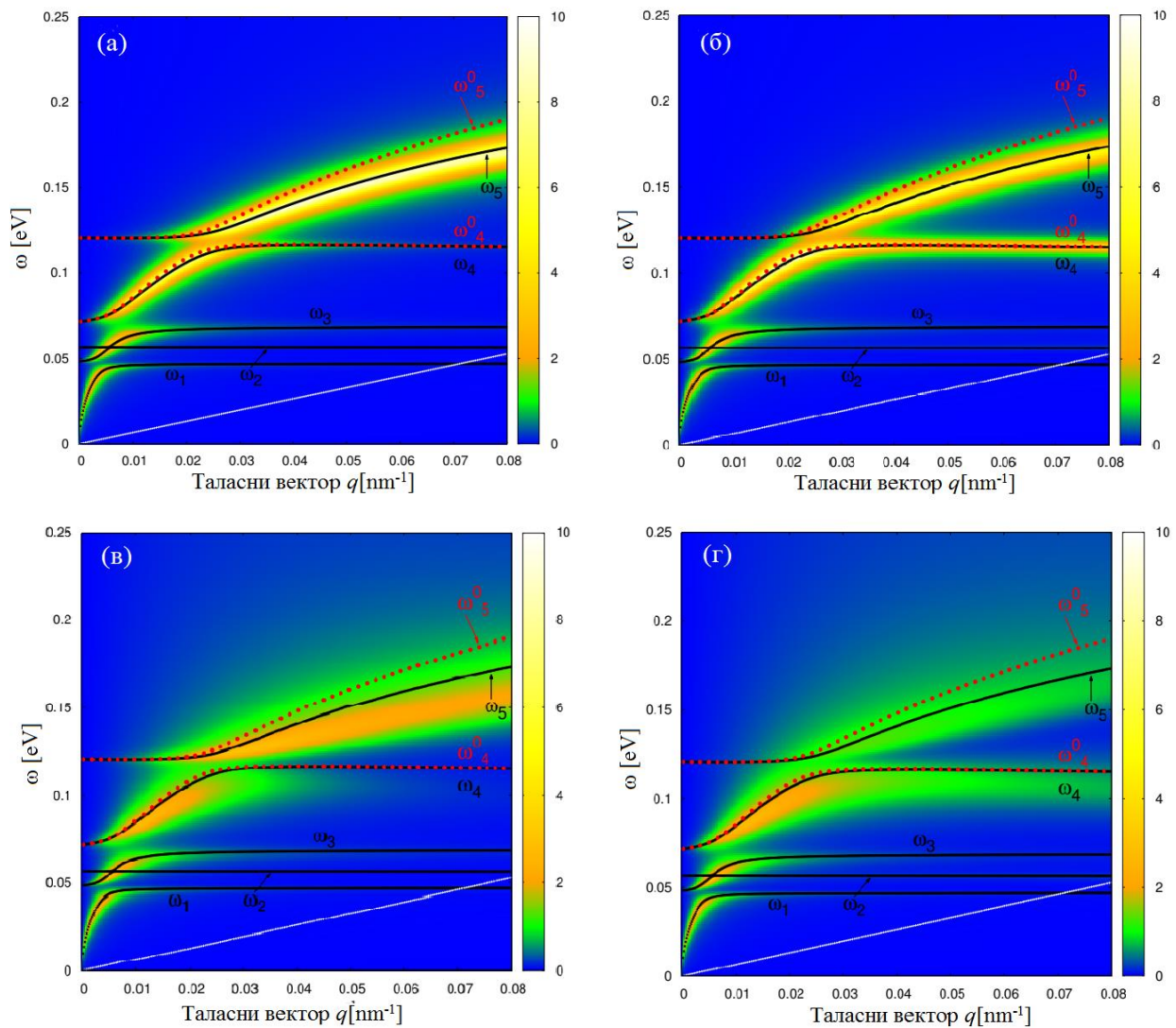
**Слика 5.10:** *EELS* у  $(q, \omega)$  простору за систем графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен [104] израчунат: а) *MDF-RPA* методом и б) комбинацијом оптичког *ab initio RPA* метода и комплетног *ab initio RPA* метода. Растојање између слојева графена износи  $a = 5 \text{ nm}$  (као и дељина слоја  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) и оба слоја графена су допирана до  $E_F = 200 \text{ meV}$ . Тачкасте розе линије представљају дисперзионе криве три непарна мода ( $\omega_1^-, \omega_2^-$  и  $\omega_3^-$ ), док су тачкастим белим линијама представљене дисперзионе криве три парна мода ( $\omega_1^+, \omega_2^+$  и  $\omega_3^+$ ) добијене оптичким *MDF-RPA* методом. Танке беле линије представљају границе области у којима долази до једночестичних (унутарзонских и међузонских) побуда у графену допираном до  $E_F = 200 \text{ meV}$ .

На слици 5.10 је приказан *EELS* спектар у проширеном  $(q, \omega)$  простору за систем графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен израчунат: а) *MDF-RPA* методом (где је узето да је  $\gamma = 10 \text{ meV}$ ) и б) *ab initio RPA* методом за исти систем. Тачкастим линијама су представљене дисперзионе криве израчунате на исти начин као на слици 5.9. И на слици 5.10 а) као и на слици 5.10 б) се може видети да у *EELS* спектру доминирају плазмонеке гране највише енергије које се лепо слажу са дисперзионим кривама добијеним за модове  $\omega_3^\pm$  за  $q < 0.15 \text{ nm}^{-1}$ . За веће вредности  $q$ , максимуми у *EELS* спектру добијеном *MDF-RPA* методом расту доста брже од  $\omega_3^\pm$  дисперзионих крива. Са друге стране,

занимљива је чињеница да се ове дисперзионе криве доста добро слажу са максимумима у *EELS* спектру добијеном *ab initio RPA* методом.

На истој слици се такође може видети доста добро слагање у *EELS* спектрима на сликама а) и б) до  $q < 0.3 \text{ nm}^{-1}$ . За веће вредности таласног броја максимуми у *EELS* спектру, добијеном *MDF-RPA* методом који одговарају  $\omega_3^\pm$  модовима, су померени на више у смеру паралелном са горњом границом ( $\omega = v_F q$ ) унутарзонских једночестичних прелаза  $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$ . До овог померања долази услед коришћења апроксимације *Dirac*-овог конуса. Са друге стране, дисперзионе криве које описују  $\omega_3^\pm$  модове се слажу доста добро са позицијама максимума у *EELS* спектру добијеном *ab initio* методом, чак до границе за међузонске  $\pi \leftrightarrow \pi^*$  прелазе. Ови максимуми секу горњу границу ( $\omega = v_F q$ ) унутарзонских једночестичних прелаза  $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$  на  $q \approx 0.45 \text{ nm}^{-1}$ . У оба *EELS*-а се такође може видети да се максимуми који одговарају  $\omega_3^+$  и  $\omega_3^-$  модовима спајају када је  $q \approx 0.3 \text{ nm}^{-1}$ , док се одговарајуће дисперзионе криве спајају тек на  $q \approx 0.6 \text{ nm}^{-1}$ .

На слици 5.11 је приказан *EELS* спектар у редукованом  $(q, \omega)$  простору израчунат оптичким *ab initio RPA* методом за четири антисиметрична система: а) вакуум- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 200 \text{ meV}$ ), б) графен ( $E_F = 200 \text{ meV}$ )- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -вакуум, в) графен( $E_F = 0 \text{ meV}$ )-  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен( $E_F = 200 \text{ meV}$ ) и г) графен( $E_F = 200 \text{ meV}$ )- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен( $E_F = 0 \text{ meV}$ ). Растојање између слојева графена износи  $a = 5 \text{ nm}$  (као и дебелина слоја  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ). У сваком од посматрана четири случаја долази до појаве једног *Dirac*-овог плазмона у допираном слоју графена док се са друге стране слоја  $\text{Al}_2\text{O}_3$  налази или вакуум или недопирани графен који не подржава *Dirac*-ов плазмон. Поменути *Dirac*-ов плазмон се хибридује са четири *FK* фонона у сафиру тако да у сва четири случаја на слици 5.11 могу да се јасно виде пет хибридуваних плазмон-фонон модова. Дисперзионе криве ових пет модова ( $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4$  и  $\omega_5$ ) представљене су пуним црним линијама и израчунате су коришћењем једначина (5.33) и (5.32). Поларизациона функција  $\chi_1(q, \omega)$  једног слоја графена је изједначена са нулом док је поларизациона функција  $\chi_2(q, \omega)$  другог слоја израчуната користећи оптички *MDF-RPA* метод за допирани графен са нултим пригушењем. Пошто је сада нарушена симетрија система, модови не могу бити више класификовани као симетрични и антисиметрични. На краћим таласним дужинама модови  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  и  $\omega_4$  имају облик сличан фононским модовима, док  $\omega_5$  наликује на плазмонски. У дуготаласном режиму ( $q \rightarrow 0$ ), долази до јаке хибридизације и цепања поменутих модова па  $\omega_1, \omega_3$  и  $\omega_4$  сада изгледају као плазмонски модови док мод  $\omega_5$  има фононски карактер. Фононски мод  $\omega_2$  је доста ниског интензитета и из његовог непромењеног облика се може претпоставити да се није хибридувао са другим модовима.



**Слика 5.11:** *EELS* у редукованом  $(q, \omega)$  простору [104] израчунат оптичким *ab initio RPA* методом за асиметричне системе: а) вакуум- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 200$  meV), б) графен ( $E_F = 200$  meV)- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -вакуум, в) графен( $E_F = 0$  meV)- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 200$  meV) и г) графен( $E_F = 200$  meV)- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 0$  meV). Дебљина  $\text{Al}_2\text{O}_3$  слоја износи  $a = 5$  nm. Црне линије представљају дисперзионе криве пет хибридованих мода ( $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4$  и  $\omega_5$ ) које су добијене оптичким *MDF-RPA* методом, док црвене тачкасте линије представљају дисперзионе криве два мода највеће учестаности ( $\omega_4^0$  и  $\omega_5^0$ ) добијених уз помоћ *Drude*-овог модела. Танка бела линија представља горњу границу области ( $\omega = v_F q$ ) у којој долази до унутарзонских једночестичних побуда ( $\pi^* \leftrightarrow \pi^*$ ) у апроксимацији *Dirac*-овог конуса.

У спектру на слици 5.11 а) се може видети да грана налик на плазмонску има највећи интензитет. Ово је последица тога што се електрон који се користи за испитивање система налази у тачки  $z = a/2 + 0^+$  тик уз слој графена ( $E_F = 200$  meV) који окупира  $z = a/2$  раван и који подржава *Dirac*-ов плазмон. На слици 5.11 б) је приказана супротна ситуација. Сада се допирани слој графена ( $E_F = 200$  meV) налази у  $z = -a/2$  равни док се електрон који се користи за испитивање система налази тик уз слободну површину сафира у  $z = a/2$ . Ово доводи до смањења интензитета *Dirac*-овог плазмона док је интензитет фононског мода  $\omega_4$  знатно појачан. На обе



слике 5.11 а) и б) се може видети доста добро слагање максимума интензитета *EELS*-а са дисперзионим кривама које описују  $\omega_1, \omega_3, \omega_4$  и  $\omega_5$  модове.

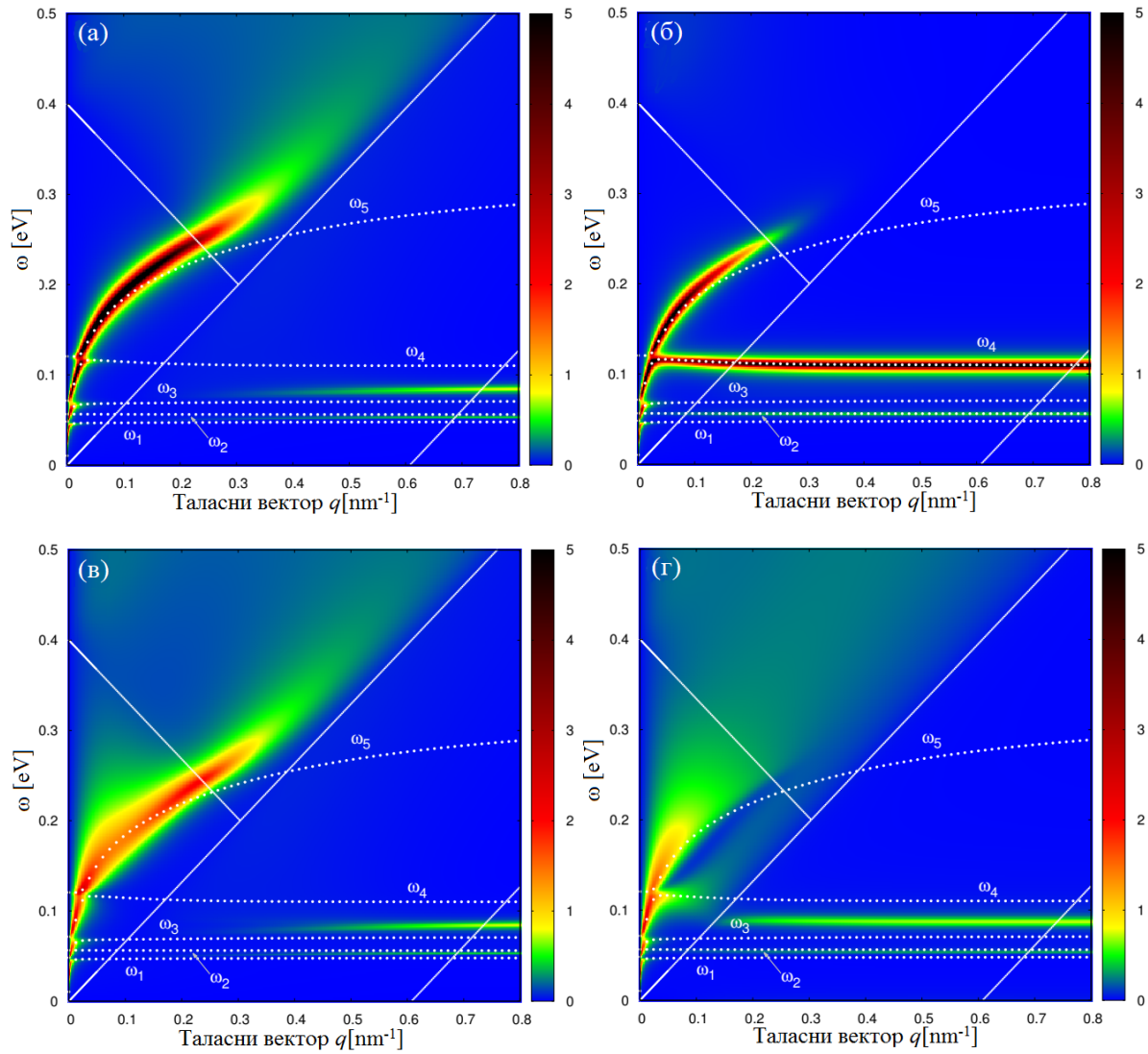
У следећем кораку ћемо поредити слике 5.11 а) и б) са сликама 5.11 в) и г) како би видели до каквих промена у спектру долази када се слој вакуума замени слојем недопираног графена ( $E_F = 0$  meV). На сликама 5.11 в) и г) се може јасно видети да услед присуства недопираног графена долази до смањења интензитета и плазмонског а и фононских модова, у поређењу са сликама 5.11 а) и б). Такође, сада постоји мало одступање максимума *EELS* спектра од дисперзионих кривих које описују  $\omega_1, \omega_3, \omega_4$  и  $\omega_5$  модове.

Две црвене тачкасте линије на слици 5.11 означене са  $\omega_4^0$  и  $\omega_5^0$  представљају дисперзионе криве два мода највеће учестаности које су добијене оптичком *MDF-RPA* методом у коју је урачунат само *Drude*-ов део проводности (5.37). Остале три гране израчунате у *Drude*-овом моделу ( $\omega_1^0, \omega_2^0$  и  $\omega_3^0$ ) нису приказане пошто се комплетно поклапају са дисперзионим кривама  $\omega_1, \omega_2$  и  $\omega_3$  добијеним коришћењем „комплетне“ проводности  $\sigma = \sigma^{\text{intra}} + \sigma^{\text{inter}}$  из оптичког *MDF-RPA*.

На слици 5.12 је приказан *EELS* у проширеном  $(q, \omega)$  простору израчунат *MDF-RPA* методом за антисиметричне системе: а) вакуум- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 200$  meV), б) графен ( $E_F = 200$  meV)- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -вакуум, в) графен ( $E_F = 0$  meV)- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 200$  meV) и г) графен ( $E_F = 200$  meV)- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 0$  meV). Резултати добијени *ab initio RPA* методом у овом случају нису приказани пошто се готово одлично слажу са резултатима добијеним *MDF-RPA* методом. До малог неслагања долази при већим вредностима таласног броја  $q > 0.3$  nm<sup>-1</sup>.

Слике 5.12 а) и б) оправдавају закључке донешене за слике 5.11 а) и б). Наиме, када се електрон којим испитујемо систем налази тик уз слој допираног графена (слика 5.12 а) ), у спектру доминира *Dirac*-ов плазмон  $\omega_5$ . У случају када се електрон којим испитујемо систем налази тик уз  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (слика 5.12 б) ), у спектру доминира фононски мод  $\omega_4$ . Са друге стране, проширени спектар добијен *MDF-RPA* методом има неке интересантне особине. Наиме, на слици 5.12 а) се може видети да *Dirac*-ов плазмон и након уласка у област међузонских једночестичних побуда ( $\pi \leftrightarrow \pi^*$ ) задржава интензитет док за  $q > 0.4$  nm<sup>-1</sup> постаје проширен. На слици 5.12 б), супротно од претходног случаја, можемо да видимо да интензитет *Dirac*-овог плазмона нагло опада и након уласка у област међузонских једночестичних побуда ( $\pi \leftrightarrow \pi^*$ ) изједначава се са нулом.

Тачкастим белим линијама на слици 5.12 представљене су дисперзионе криве пет хибридизованих модова ( $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4$  и  $\omega_5$ ) добијене решавањем једначине (5.33) оптичким *MDF-RPA* методом са занемареним пригушењем. Напомињемо да се на свим деловима слике 5.12, при великим вредностима  $q$ , дисперзионе криве модова  $\omega_1$  и  $\omega_3$  налазе на учестаностима које одговарају ТО фононима  $\omega_1 \approx \omega_{\text{TO1}} \approx 48$  meV и  $\omega_3 \approx \omega_{\text{TO2}} \approx 71$  meV. У исто време, може да се покаже да се при великим вредностима  $q$  дисперзионе криве модова  $\omega_2$  и  $\omega_4$  налазе на



**Слика 5.12:** *EELS* у проширеном  $(q, \omega)$  простору [104] израчунат *MDF-RPA* методом за асиметричне системе: а) вакуум- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 200 \text{ meV}$ ), б) графен ( $E_F = 200 \text{ meV}$ )- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -вакуум, в) графен ( $E_F = 0 \text{ meV}$ )- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 200 \text{ meV}$ ) и г) графен ( $E_F = 200 \text{ meV}$ )- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен ( $E_F = 0 \text{ meV}$ ). Дебљина  $\text{Al}_2\text{O}_3$  слоја износи  $a = 5 \text{ nm}$ . Беле тачкасте линије представљају дисперзионе криве пет хибридованих мода ( $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4$  и  $\omega_5$ ) добијене оптичким *MDF-RPA* методом. Танке беле линије представљају границе области у којима долази до једночестичних (унутарзонских и међузонских) побуда за графен допиран до  $E_F = 200 \text{ meV}$ .

учестаностима које одговарају површинским  $\text{FK}$  фононима чистог  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\omega_2 \approx \omega_{\text{FK1}} \approx 56 \text{ meV}$  и  $\omega_4 \approx \omega_{\text{FK2}} \approx 110 \text{ meV}$ .

У спектру добијеном *MDF-RPA* методом на слици 5.12 а) за велике вредности  $q$  може се видети мода налик на фононску у виду интензивне хоризонталне линије која се налази између две дисперзионе криве:  $\omega_3$  и  $\omega_4$ , као и још једна линија знатно слабијег интензитета између друге две дисперзионе криве:  $\omega_1$  и  $\omega_2$ . Са друге стране, у спектру на слици 5.12 б) можемо да видимо врло интензивну хоризонталну линију, која се одлично слаже са  $\text{FK}$  фононском модом

$\omega_4 \approx \omega_{FK2} \approx 110 \text{ meV}$  за вредности таласног броја  $q > 0.03 \text{ nm}^{-1}$ , као и још једну хоризонталну линију доста слабијег интензитета, која одговара FK фононском моду ниже енергије  $\omega_2 \approx \omega_{FK1} \approx 56 \text{ meV}$ .

На сликама 5.12 в) и г) се може видети јак утицај слоја графена постављеног на место вакуума у претходним случајевима. Долази до додатног *Landau*-овог пригушења *Dirac*-овог плазмона у допираном графену у области  $\omega > v_F q$  услед појаве међузонских једночестичних побуда ( $\pi \leftrightarrow \pi^*$ ) у недопираном графену. Интересантно је да пригушење *Dirac*-овог плазмона није толико јако на слици 5.12 в) када је недопирани графен постављен са супротне стране од електрона са којим испитујемо систем. Са друге стране, постављањем недопираног графена тик уз поменути електрон, *Dirac*-ов плазмон практично нестаје у области  $q > 0.04 \text{ nm}^{-1}$ .

Уколико посматрамо две хоризонталне линије, налик на фононске, приказане у спектрима на сликама 5.12 в) и г), можемо да видимо да за велике таласне бројеве леже на приближно истим енергијама на обе слике али им се интензитети разликују.

### 5.3. Поређење различитих теоријских модела са доступним експериментално добијеним *EELS* спектрима

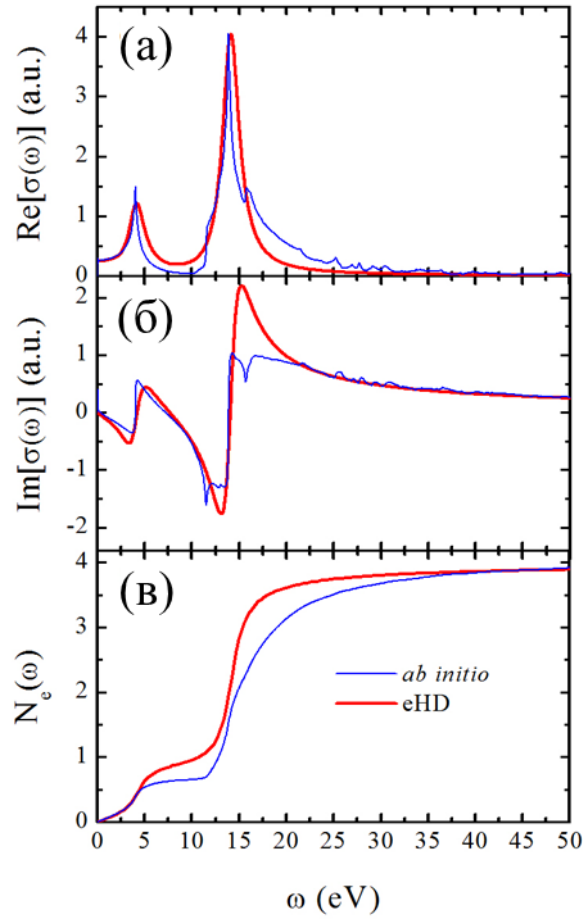
У овом поглављу поредимо резултате које смо добили у оквиру проширеног хидродинамичког (eHD) модела и резултате које је наш сарадник доц. др Vito Desroја израчунао користећи *ab initio* метод са експериментално добијеним *EELS* спектрима. У оквиру eHD модела узели смо да непертурбоване површинске густине наелектрисања износе  $n_{\sigma}^0 \approx 115 \text{ nm}^{-2}$  и  $n_{\pi}^0 \approx 38 \text{ nm}^{-2}$ . Закључили смо да до најбољег слагања доступних експерименталних *EELS* спектра са нашим моделом долази за следеће вредности:  $\omega_{\sigma r} = 14.15 \text{ eV}$ ,  $\omega_{\pi r} = 4.19 \text{ eV}$ ,  $\gamma_{\sigma} = 2.18 \text{ eV}$ ,  $\gamma_{\pi} = 2.04 \text{ eV}$ , и  $\omega_c = 3.54 \text{ eV}$  (одговара  $f \approx 0.785$ ).

#### 5.3.1. Оптичка проводност графена $\sigma(\omega)$

На слици 5.13 су приказани реални и имагинарни део оптичке проводности  $\sigma(\omega)$ , као и број валентних електрона  $N_e(\omega)$  који учествују у побудама на енергијама до  $\omega$  у функцији енергијских губитака  $\omega$  (у eV). Представљени су резултати које смо израчунали у оквиру eHD модела као и резултати добијени *ab initio* методом. Приметно је њихово доста добро слагање.

На слици 5.13 а) се може видети да када енергија тежи нули обе криве реалног дела оптичке проводности узимају вредност 1/4 (у а.у.), док за енергије  $\omega > 30 \text{ eV}$  можемо да видимо да  $\text{Re}[\sigma(\omega)] \rightarrow 0$ . Такође, приметно је да се  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмони јављају на готово идентичним енергијама као и да су висине  $\pi+\sigma$  плазмона једнаке. Напоменућемо да  $\pi+\sigma$  плазмони, који се јављају на око 14 eV и на eHD као и на *ab initio* криви, одговарају међузонским прелазима које означавамо као  $\sigma \rightarrow \sigma_1^*$  у складу са [42]. На слици 5.13 б) се може видети да у оба случаја  $\text{Im}[\sigma(\omega)]$  тежи нули када  $\omega \rightarrow 0$ , на енергијама које одговарају  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмонима мења знак из негативног у позитиван, као и да се криве поклапају на енергијама  $\omega > 20 \text{ eV}$ . На слици 5.13 в) можемо да видимо да долази до скока броја валентних електрона у близини  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмона.

Што се тиче разлика између кривих добијених у ова два модела на *ab initio* криви на слици 5.13 а) се може видети и мали максимум на око 16 eV који представља последицу међузонских прелаза у вишу неокупирану  $\sigma$  зону. Ове прелазе означавамо са  $\sigma \rightarrow \sigma_2^*$  у складу са [42] и њих нисмо узели у обзир у eHD моделу. Такође, на истој слици може се видети да је на енергијама већим од 17 eV, крива добијена *ab initio* методом виша од криве добијене у eHD моделу. На слици 5.13 а) се још може видети да су у случају *ab initio* модела ширине  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  пикова уже, док је висина  $\pi$  пика нешто виша него у eHD моделу.

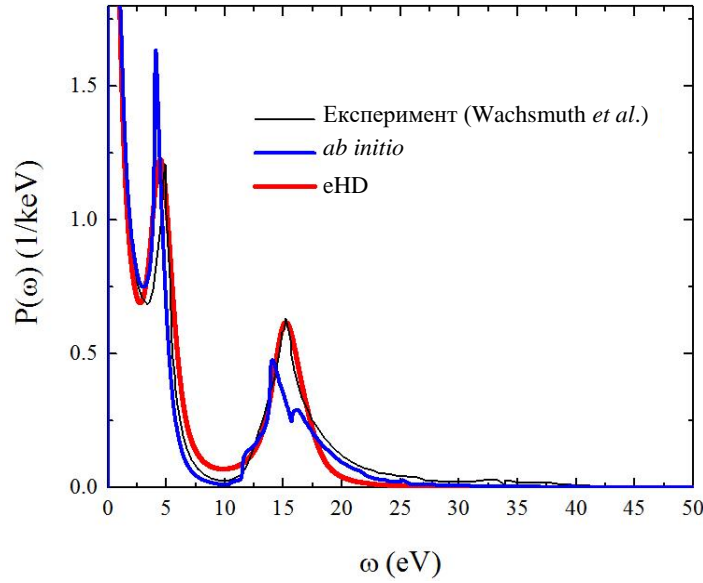


**Слика 5.13:** На слици [105] а) је приказан реални део оптичке проводности  $\text{Re}[\sigma(\omega)]$  (у а.у.), на слици б) је приказан имагинарни део оптичке проводности  $\text{Im}[\sigma(\omega)]$  (у а.у.), и на слици в) је приказан број валентних електрона  $N_e(\omega)$  који учествују у побудама на енергијама до  $\omega$  у функцији енергијских губитака  $\omega$  (у еВ), израчунати у *ab initio* моделу (танка плава линија) и у eHD моделу (израз (4.47)) (пуна црвена линија).

### 5.3.2. Густина вероватноће у функцији енергијских губитака

Сада ћемо поредити ова два теоријска модела са доступним експерименталним резултатима из [47–49]. Пошто су ови подаци дати у произвољним јединицама, сваки експериментално добијени спектар смо множили са погодним фактором како би дошло до што бољег преклапања теоријских и експерименталних спектра за енергијске губитке у интервалу 12-13 еВ. Овај интервал је узет пошто у њему долази до доброг слагања  $\text{Re}[\sigma(\omega)]$  израчунатог у eHD и *ab initio* моделу.

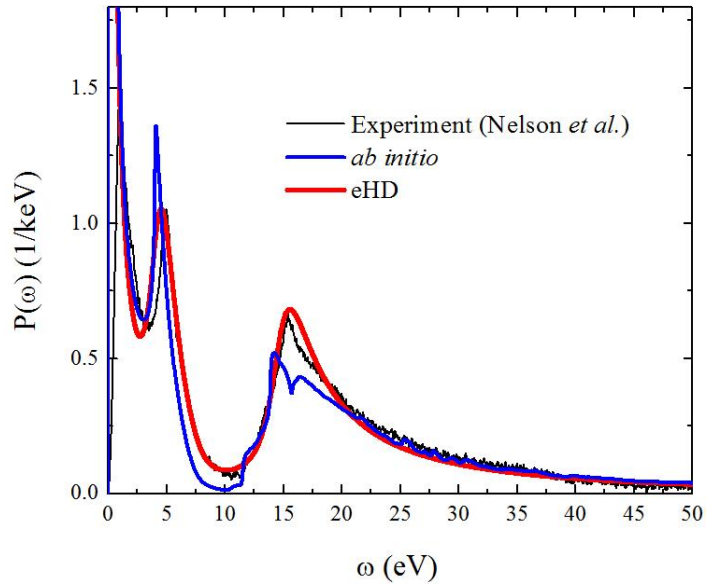
На слици 5.14 приказани су заједно теоријски и експериментално добијени резултати за густину вероватноће  $P(\bar{q}, \omega)$  за упадне електроне енергије 40 keV. Теоријске криве су добијене применом израза (4.38) за  $\bar{q} = 0$  коришћењем оптичке проводности израчунате применом *ab initio* модела (плава линија) и применом eHD модела (израз (4.47)) (црвена линија), док је танком црном линијом представљен експериментално добијен *EEL* спектар за  $q \rightarrow 0$  [48]. Може се приметити доста добро слагање између кривих добијених у оквиру теоријских модела и експериментално добијене криве. Нарочито треба истакнути поклапање и облика и висине максимума теоријске криве добијене у оквиру eHD модела и експерименталне криве.



**Слика 5.14:** Густина вероватноће  $P(\omega)$  (1/keV) у функцији енергијских губитака  $\omega$  (eV) за упадне електроне енергије 40 keV [105], израчуната заменом  $\bar{q} = 0$  у израз (4.38) коришћењем оптичке проводности  $\sigma(\omega)$  добијене у оквиру *ab initio* модела (плава линија) и у оквиру eHD модела (израз (4.47)) (црвена линија). Паралелно са њима је приказан одговарајући експериментално добијен *EELS* спектар за  $q \rightarrow 0$  (танка црна линија) [48].

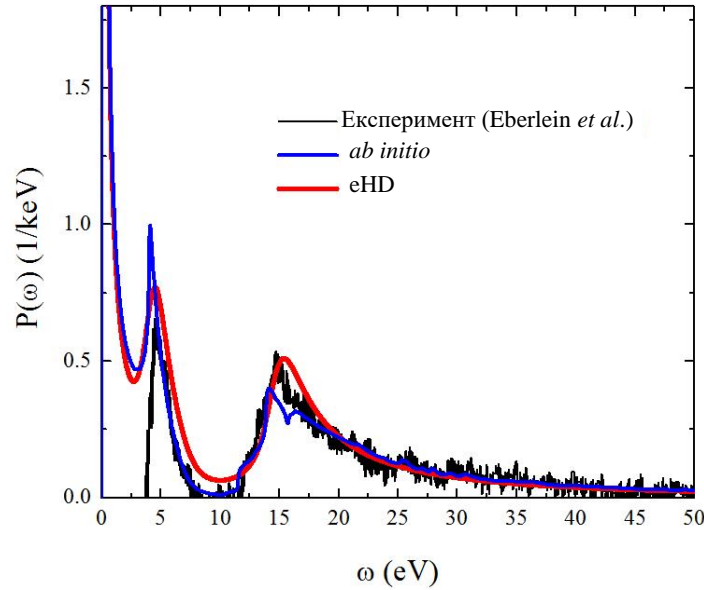
Напомињемо да на слици 5.14 недостају експериментални подаци за енергије ниже од 1.5 eV. Аутори у [48] кажу да „за енергијске губитке ниже од 4 eV и при малим вредностима таласног вектора ( $q < 0.5 \text{ \AA}^{-1}$ ) није било могуће комплетно уклањање *ZL* пика“. Претпостављамо да су мале разлике теоријске eHD и експерименталне криве при енергијама нижим од 5 eV, као и у области  $5 < \omega < 12$  eV последица некомплетног уклањања *ZL* пика из експерименталног спектра. Са друге стране, постоје и неке разлике између теорије и експеримента при енергијама  $\omega > 17$  eV, које могу да буду последица релативно мале ширине отвора коришћеног у експерименту.

На слици 5.15 поредимо теоријски израчунату густину вероватноће  $P(\omega)$  са експериментално добијеним *EEL* спектром за  $q \rightarrow 0$  (танка црна линија) [47] са ког је уклоњен *ZL* пик. Густина вероватноће  $P(\omega)$  је добијена из израза (4.37) и коришћењем (4.31) где је узета оптичка проводност добијена *ab initio* методом (плава линија) и у оквиру eHD модела (4.47) (црвена линија). Може се приметити доста добро слагање теорије и експеримента за  $\omega > 20$  eV. Теоријска крива добијена у оквиру *ab initio* модела се понаша на сличан начин као на слици 5.14, тј. теоријски добијени  $\pi$  и  $\pi + \sigma$  максимуми одступају од одговарајућих измерених максимума за око 1 eV. Такође је приметно доста добро слагање теоријске криве добијене у оквиру eHD модела са експерименталном кривом са малим одступањима на енергијама нижим од 5 eV до ког вероватно долази услед уклањања *ZL* пика. Аутор у [106] наглашава да део *ZL* пика улази у област видљивих учестаности, као и да је усредњен експериментални спектар приказан на слици 5.15 добијен после уклањања *ZL* пика до енергије од 1 eV, док је за енергије мање од 1 eV коришћена кубна интерполација све до 0 eV (како би се осигурало да енергијски губици ишчезавају на нултој учестаности). На слици 5.15 можемо да видимо да однос експериментално добијених  $\pi + \sigma$  и  $\pi$  пикова након уклањања *ZL* пика износи око 1:1.6 док исти однос пре уклањања *ZL* пика износи 1:1.9 (слика 1б у [47] или слика 1 у [97]). На основу наведеног може да се каже да уклањање *ZL* пика има велики утицај и на висину као и на облик експериментално измереног  $\pi$  пика.



**Слика 5.15:** Густина вероватноће  $P(\omega)$  (1/keV) у функцији енергијских губитака  $\omega$  (eV) за упадне електроне енергије 60 keV [105], израчуната из (4.37) и (4.31) коришћењем оптичке проводности  $\sigma(\omega)$  добијене у оквиру *ab initio* модела (плава линија) и у оквиру eHD модела (4.47) (црвена линија). Паралелно са њима је приказан одговарајући експериментално добијен *EEL* спектар за  $q \rightarrow 0$  (танка црна линија) [47] након уклањања *ZL* пика.

На слици 5.16 су приказане теоријске криве које описују густину вероватноће  $P(\omega)$  израчунату из (4.37) коришћењем (4.31) где је узета оптичка проводност добијена *ab initio* методом (плава линија) и у оквиру eHD модела (4.47) (црвена линија), као и експериментално добијен *EELS* спектар за један слој графена (слика 1e из [49] (црна линија)). Аутори у [49] кажу да су „приказали необрађен *EELS* спектар из ког је уклоњен *ZL* пик при идентичним условима“. Овде наглашавамо да недостају експериментални подаци за енергије ниже од око 3.5 eV, највероватније услед уклањања *ZL* пика. Као и на слици 5.15, можемо да приметимо одлично слагање између теоријских крива и експериментално добијене криве за енергије веће од 20 eV. Теоријска крива добијена *ab initio* методом се понаша на сличан начин као на сликама 5.14 и 5.15. Може се приметити, слично као на слици 5.14, да експериментално добијен *EELS* спектар и *ab initio* крива узимају вредности блиске нули у области енергија  $7 < \omega < 12$  eV која се налази између  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  максимума. На око 12 eV долази до наглог скока у *EELS* спектру. У оптичком апсорпционом спектру ово је знак да је дошло до директног прелаза између две 2D зоне параболичног облика. Ако погледамо зонску структуру графена (слика 2.4), могло би да се закључи да овај скок вероватно одговара прелазима између две паралелне зоне параболичног облика  $\pi \rightarrow \sigma^*$  и  $\sigma \rightarrow \pi^*$  у околини  $\Gamma$  тачке *Brillouin*-ове зоне.



**Слика 5.16:** Густина вероватноће  $P(\omega)$  (1/keV) у функцији енергијских губитака  $\omega$  (eV) за упадне електроне енергије 100 keV [105], израчуната помоћу израза (4.37) коришћењем (4.31) где је узета оптичка проводност добијена *ab initio* методом (плава линија) и у оквиру eHD модела (4.47) (црвена линија), као и експериментално добијен *EELS* спектар за један слој графена ( слика 1e из [49] (црна линија)).

Такође, на слици 5.16 се види да се јавља супротна ситуација у односу на слике 5.14 и 5.15. Наиме, висина и ширина  $\pi$  плазмона израчунате у оквиру eHD модела су нешто веће од одговарајућих експерименталних вредности.

### 5.3.3. Улога *Dirac*-ове проводности на нижим енергијама *EELS* спектра

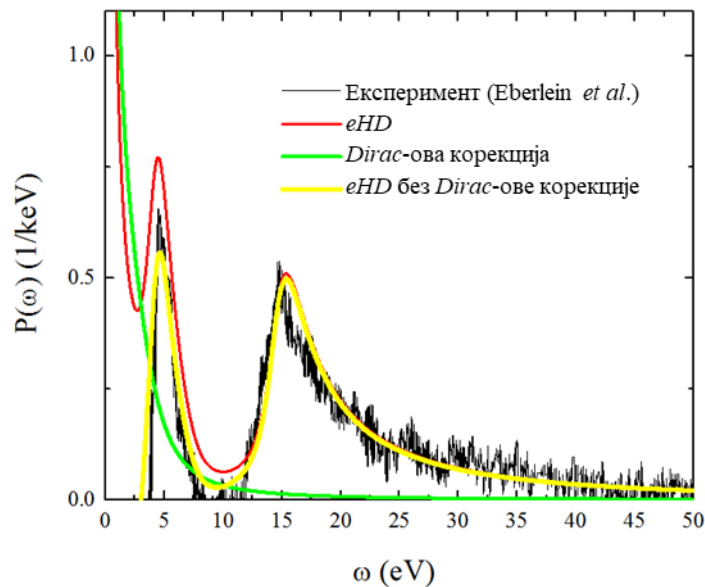
Код обе експериментално добијене *EELS* криве, приказане на сликама 5.14 и 5.15, можемо да приметимо да и након уклањања *ZL* пика остаје присутан локални минимум на око 3.5 eV. Са даљим смањивањем енергије долази до наглог скока у спектру. Теоријске криве које описују  $P(\omega)$  из оба теоријска модела се понашају на врло сличан начин као поменуте експерименталне. Конкретно, о чему ће касније бити више речи, скок у експерименталном спектру док ког долази за  $\omega < 3.5$  eV може да се опише *Dirac*-овом корекцијом у eHD моделу. Са друге стране, на слици 5.16 недостаје део експериментално измерене криве из [49] за енергије мање од 3.5 eV, вероватно услед прекомерног уклањања података који су у вези са *ZL* пиком. Ово је у супротности са обликом експериментално добијених крива на ниским енергијама из [47] и [48], приказаних на сликама 5.14 и 5.15, респективно. Овде ћемо покушати да објаснимо боље како *Dirac* – ова корекција доприноси проводности описивањем нискоенергијских  $\pi \rightarrow \pi^*$  међузонских прелаза у околини *K* тачке *Brillouin*-ове зоне у *EEL* спектру слободног графена на енергијама доста нижим од енергије на којој се налази  $\pi$  плазмон а на које има највећи утицај уклањање *ZL* пика.

У том циљу, на слици 5.17 су представљене три криве које описују густину вероватноће израчунате помоћу (4.37) и коришћењем израза (4.31):  $P_{eHD}(\omega)$  (означена са eHD) где је коришћено  $\sigma_{eHD}(\omega)$  из (4.47),  $P_D(\omega)$  (означена са *Dirac*-ова корекција) где је коришћена само *Dirac*-ова корекција  $\sigma_D(\omega)$  (први члан са десне стране једначине (4.41)), као и  $P_{eHD}(\omega) - P_D(\omega)$  (означена са eHD без *Dirac*-ове корекције). Такође је приказан одговарајући *EELS* спектар (слика



1(e) у раду [49]). Може да се примети да *Dirac*-ова корекција узрокује појаву сингуларитета теоријске криве који има облик  $P_D(\omega) \propto 1/\omega$  када  $\omega \rightarrow 0$  и може се представити функцијом која има уски максимум у  $\omega = 0$  и реп који се протеже доста даље од енергије на којој се налази  $\pi$  плазмон. Уколико погледамо понашање спектра на ниским енергијама израчунатог у ХД моделу у [93], можемо да закључимо да је до слагања еНД модела са експериментално добијеним кривама на сликама 5.14 и 5.15 на енергијама  $\omega < 3.5$  eV дошло услед доприноса *Dirac*-ове корекције проводности графена.

Са друге стране, уколико посматрамо  $P_D(\omega)$  као *ZL* пик и сходно томе га уклонимо из укупног еНД резултата, добијамо криву означену са еНД без *Dirac*-ове корекције на слици 5.17. Овде треба нагласити да се ова крива доста добро слаже са експерименталном кривом из [49]. Иако ово слагање можемо приписати случајности, теоријске криве на слици 5.17 описују хипотетичку ситуацију до које може да дође када је *ZL* пик процењен фитовањем на нискоенергијски фон којим доминира  $P_D(\omega)$ . Уколико се *ZL* пик уклања на овај начин, може врло лако да се погрешно посматрајући  $P_D(\omega)$  као *ZL* пик, или да се  $P_D(\omega)$  уклони из експериментално добијене криве заједно са правим инструменталним *ZL* пиком.

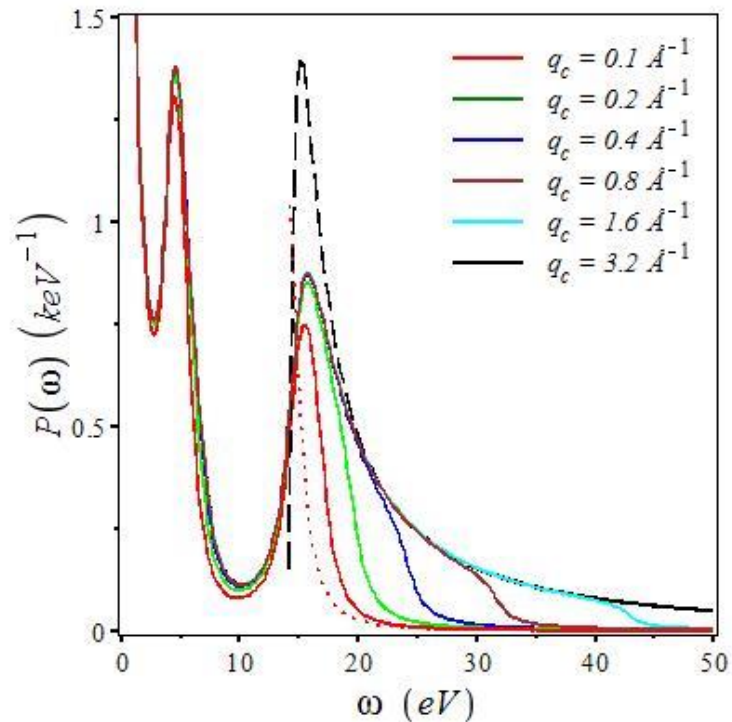


**Слика 5.17:** Густина вероватноће  $P(\omega)$  (1/keV) у функцији енергијских губитака  $\omega$  (eV) за упадне електроне енергије 100 keV [105], израчуната помоћу израза (4.37) коришћењем (4.31) и оптичке проводности  $\sigma(\omega)$  добијене: у оквиру еНД модела (4.47) (црвена линија), коришћењем само *Dirac*-ове корекције  $\sigma_D(\omega)$  (зелена линија), у оквиру еНД модела без *Dirac*-ове корекције (пуна линија жуте боје), као и експериментално добијен *EELS* спектар за један слој графена [49] (црна линија).

### 5.3.4. Високоенергијски репови у *EELS* спектру

Уколико посматрамо енергијске губитке на вишим енергијама, тј. знатно већим од оних на којима се налазе  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмони, на сликама 5.15 и 5.16 видимо да се криве добијене у *ab initio* и еНД моделу доста добро поклапају и да се такође слажу са експерименталним подацима из [47,49] за  $\omega > 20$  eV. У исто време *ab initio* крива на слици 5.14 пролази нешто испод експериментално добијене криве [48] која описује енергијске губитке за  $\omega > 17$  eV, док се еНД

крива налази испод одговарајуће *ab initio* криве, што подсећа на разлику између теоријских крива присутну на слици 5.13. Претпостављамо да до поменуте разлике на вишим енергијама на сликама 5.14, 5.15 и 5.16 долази услед великих разлика у вредности  $q_c$  (максимални сакупљени унутар равански расејани таласни број електрона) који је коришћен на тим сликама. Како би боље приказали ову зависност, на слици 5.18 је представљена зависност  $P(\omega)$  од енергијских губитака електрона израчуната помоћу (4.33) у eHD моделу за упадне електроне енергије 40 keV и за неколико различитих вредности  $q_c$ .



**Слика 5.18:** Густина вероватноће  $P(\omega)$  ( $1/\text{keV}$ ) у функцији енергијских губитака  $\omega$  (eV) за упадне електроне енергије 40 keV [105], израчуната помоћу израза (4.33) коришћењем (4.31), (4.34) и (4.36), и оптичке проводности  $\sigma(\omega)$  добијене у оквиру eHD модела (израз (4.47)) за неколико различитих вредности  $q_c = 0.1, 0.2, 0.4, 0.8, 1.6$  и  $3.2 \text{ \AA}^{-1}$  (пуне линије). Приближан резултат из (5.42) за  $q_c = 0.1 \text{ \AA}^{-1}$  је представљен црвеном тачкастом линијом, док испрекидана црна линија описује приближан резултат из једначине (5.45) (оба резултата се посматрају за  $\omega > \omega_{\sigma r} \approx 14 \text{ eV}$ ).

На вишим енергијама ( $\omega > 20 \text{ eV}$ ) може да се примети да са порастом  $q_c$  долази до померања на више репова који одговарају  $\pi + \sigma$  плазмону. Овде напомињемо да би пораст енергије упадних електрона редуковао висину максимума криве на слици 5.18, али не би променио њихов положај и облик.

Напоменућемо да, иако је једначина (4.33) изведена за експерименте у којима је коришћен кружни отвор који сакупља све расејане електроне [48,49], може да се каже да најниже вредности  $q_c = 0.1 - 0.2 \text{ \AA}^{-1}$  на слици 5.18 одговарају ширини  $\Delta q_x = 0.1 \text{ \AA}^{-1}$  и  $\Delta q_y = 0.25 \text{ \AA}^{-1}$  централно постављеног (тј.  $\bar{q} = 0$ ) правоугаоног отвора у експерименту у [48] о чему је било речи у дискусији везаној за слику 5.14. Са друге стране, највећа вредност  $q_c = 3.2 \text{ \AA}^{-1}$  коришћена на

слици 5.18 одговара највећем импулсу који је измерен у експерименту у [49] (што одговара енергији упадног електрона од 100 keV и највећем расејаном полууглу  $\beta = 19 \text{ mrad}$ ), о чему је било речи у дискусији о слици 5.16. Такође ћемо поменути да је максимални таласни вектор  $q_c = 4.3 \text{ \AA}^{-1}$ , добијен у експерименту у [47] поменутом у дискусији о слици 5.15, већи од највеће вредности  $q_c$  коришћене на слици 5.18.

Како би боље испитали физичку позадину зависности теоријских крива  $P(\omega)$  на вишим енергијама од вредности  $q_c$ , полазимо од једначине (4.28) у којој узимамо општи израз за проводност графена из (4.29). Прво ћемо посматрати ситуацију сличну оној у дискусији о слици 5.14 и претпоставићемо да је  $q_c$  веома мало, што нам омогућава да направимо дуготаласну апроксимацију функције енергијских губитака из (4.28), што нам даје:

$$\text{Im} \left[ -\frac{1}{1 + \frac{2\pi i q}{\omega} \sigma(\omega)} \right] \approx \frac{2\pi q}{\omega} \text{Re}[\sigma(\omega)] \quad (5.41)$$

Коришћењем (5.41) у (4.28) добијамо приближан израз за  $P(\omega)$ :

$$P(\omega) \approx \frac{8e^2 L(\omega)}{v_{\perp}^2 \omega} \text{Re}[\sigma(\omega)] \quad (5.42)$$

Функција  $L(\omega)$  може да се израчуна аналитичким путем и има облик:

$$L(\omega) = \int_0^{q_c} \frac{q^3}{\left[ q^2 + \left( \frac{\omega}{v_{\perp}} \right)^2 \right]^2} dq \quad (5.43)$$

На слици 5.18 је испрекиданом линијом представљена крива добијена из (5.42) где је узето  $L(\omega)$  са  $q_c = 0.1 \text{ \AA}^{-1}$  за  $\omega > \omega_{\sigma r} \approx 14 \text{ eV}$  и може да се примети доста добро слагање са одговарајућом кривом добијеном из (4.33) за енергијске губитке за  $\omega > 20 \text{ eV}$ . Из једначине (5.42) можемо да видимо да, као последица ниске вредности  $q_c$ , на високим енергијама репови функције енергијских губитака електрона испољавају понашање реалног дела проводности графена  $\text{Re}[\sigma(\omega)]$  помноженог са опадајућом функцијом  $L(\omega)/\omega$ .

Са друге стране, када је  $q_c$  јако велико (као у [47,49]) можемо да применимо апроксимацију  $q_c \rightarrow \infty$  у једначини (4.28) и да искористимо (4.37) за добијање теоријских крива на сликама 5.15 и 5.16, које се доста добро слажу са експериментално добијеним кривама на енергијама  $\omega > 20 \text{ eV}$ . Репови на високим енергијама ових крива могу да се добију и у облику са јаснијим физичким значењем узимајући довољно велике енергијске губитке, такве да важи  $\text{Re}[\sigma(\omega)] \rightarrow 0^+$  (видети слику 5.13 а)). Тада зависност енергијских губитака од импулса можемо да апроксимирамо *Dirac*-овом делта функцијом:

$$\text{Im} \left[ -\frac{1}{1 + \frac{2\pi i q}{\omega} \sigma(\omega)} \right] \approx \pi \delta \left( 1 - 2\pi \frac{q}{\omega} \text{Im}[\sigma(\omega)] \right) \quad (5.44)$$

Претходна апроксимација нам омогућава да аналитички извршимо интеграцију по  $q$  у једначини (4.28). Такође, пошто су брзине упадних електрона у експериментима које посматрамо јако велике, може се узети да важи апроксимација  $2\pi \text{Im}[\sigma(\omega)] \ll v_{\perp}$ . Сада можемо да апроксимирамо и кинематички члан у (4.28) са  $\propto q^{-2}$ , што нам даје израз за  $P(\omega)$ :

$$P(\omega) \approx \frac{8\pi e^2}{v_{\perp}^2 \omega} \text{Im}[\sigma(\omega)] \quad (5.45)$$

Опсег учестаности у ком важи горња једначина задовољава услов  $2\pi \text{Im}[\sigma(\omega)] > (\omega/q_c)$ . Променом знака у овој неједнакости и порастом  $\omega$  за коначно  $q_c$ , имамо оштар пад криве (5.45) на енергијама 19.4, 24.1, 31.6 и 42.9 eV за вредности  $q_c = 0.2, 0.4, 0.8,$  и  $1.6 \text{ \AA}^{-1}$  (тим редом). Овде ћемо напоменути да при овим вредностима енергије долази до наглог пада у спектру приказаног на слици 5.18 за исти скуп вредности  $q_c$ . Наравно, подаци за вредности  $q_c = 3.2$  и  $4.3 \text{ \AA}^{-1}$  (из експеримената у [47,49]) излазе из приказаног опсега на сликама 5.15, 5.16 и 5.18.

Уколико погледамо израз (5.45), није изненађујуће то да се *ab initio* и eHD модел одлично слажу за енергије  $\omega > 20 \text{ eV}$  на сликама 5.15 и 5.16, узимајући у обзир одлично слагање између две теоријске криве за имагинарни део проводности  $\text{Im}[\sigma(\omega)]$  на слици 5.13 б) у истом опсегу енергија. Са друге стране, на неки начин изненађује чињеница да постоји одлично слагање оба теоријска модела са експерименталним подацима из [47,49] за  $20 < \omega < 50 \text{ eV}$ .

## 6. Закључак

Један од праваца ове тезе представља проучавање хибридизације *Dirac*-овог плазмона у графену и површинских оптичких фонона у супстрату који га окружује, као и ефеката који се притом јављају. У том контексту смо развили теоријски модел базиран на решавању *Poisson*-ове једначине методом *Green*-ових функција и извели *Green*-ове функције за случајеве двослојних и трослојних структура које садрже један или два слоја графена (глава 3). Овако постављен модел нам је омогућио елегантно израчунавање физичких величина релевантних за описивање система које посматрамо, као што су индуковани потенцијал, зауставна сила и сила лика, и могао би да се прошири и на компликованије системе.

У првом посматраном случају (поглавље 5.1), анализирали смо ефекте који се јављају приликом интеракције наелектрисане честице која се креће паралелно са системом графен/ $\text{SiO}_2$  супстрат и узрокује плазмон-фонон хибридизацију *Dirac*-овог плазмона у графену и површинских оптичких фонона супстрата. Разматрани су случајеви за више брзина  $v$  које су реда величине *Fermi*-јеве брзине у графену  $v_F$ . Посебно је испитиван утицај густине допирања графена на поменуте ефекте. Закључили смо да постоји комплексна веза између густине допирања графена, брзине честице и њеног растојања од графена. Ефекти плазмон/фонон хибридизације постају израженији са повећањем растојања честице од графена и при нижим густинама допирања.

Акцент је такође стављен на проучавање ефекта таласа, тј. анизотропних осцилација које могу да се јаве у индукованом потенцијалу који прати честицу. За побуђивање *Dirac*-овог плазмона у графену на статичком супстрату а самим тим и појаву ефекта таласа, неопходно је да брзине честице буду  $v > v_F$ . Са друге стране, показано је да је у случају графена на супстрату који подржава фононе могућа појава ефекта таласа у индукованом потенцијалу и при брзинама честице  $v < v_F$ . Индуковани потенцијал сада има знатно већи домет од случаја када је супстрат статички. У овом случају плазмон-фонон хибридизација има мали утицај на зауставну силу и силу лика при брзинама честице  $v < v_F$ . Зауставна сила је приметно већег интензитета од статичког случаја при брзинама  $v > 2v_F$ , док је код силе лика ово случај за брзине честице  $v > 5v_F$ .

У другом посматраном случају смо испитивали плазмон-фонон хибридизацију у систему графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен, као и у системима графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -вакуум и вакуум- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен (поглавље 5.2). Израчуната је диелектрична функција система графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен (параграф 5.2.1). У оквиру апроксимације случајних фаза нискоенергијске побуде електрона у  $\pi$  зони су апроксимирани безмасеним *Dirac*-овим фермионима (тзв. *MDF-RPA* метод). Применом *MDF-RPA* методе у оптичком лимиту као и *Drude*-овог модела израчунате су дисперзионе криве настале плазмон-фонон хибридизацијом (параграф 5.2.2). Израчунат је спектар енергијских губитака електрона ових система добијен помоћу *MDF-RPA* метода и добијени резултати су поређени са резултатима које је наш сарадник доц. др Vito Desroја израчунао користећи *ab initio RPA* метод (параграф 5.2.3).

Постоји доста добро слагање између резултата добијених *MDF-RPA* методом и *ab initio RPA* методом за вредности таласног броја до приближно  $0.3 \text{ nm}^{-1}$  (одговара вредности *Fermi*-јевог таласног броја графена  $k_F$  допираног до *Fermi*-јеве енергије  $E_F = 0.2 \text{ eV}$ ). У оквиру *MDF-RPA* метода и *ab initio RPA* метода у оптичком лимиту, добијени су резултати који се одлично слажу за вредности таласног броја  $q$  до  $0.1 \text{ nm}^{-1}$ . У оба модела је добијен спектар са јасно видљивим модовима насталим плазмон-фонон хибридизацијом. Природа ових модова је даље испитивана

поређењем са дисперзионим кривама добијеним оптичким *MDF-RPA* методом у коме је урачуната проводност графена без пригушења, као и диелектрична функција комадног  $\text{Al}_2\text{O}_3$  која подржава два трансферзална оптичка фонона.

Дисперзионе криве добијене *MDF-RPA* методом у оптичком лимиту одлично описују плазмон-фонон хибридизацију у графен- $\text{Al}_2\text{O}_3$ -графен систему за  $q \leq 0.1 \text{ nm}^{-1}$ , што иде у прилог валидности семи-класичног *MDF-RPA* метода у оптичком лимиту. Са друге стране, показано је да коришћење само *Drude*-овог доприноса проводности графена даје добре резултате за  $q \leq 0.01 \text{ nm}^{-1}$ . Са порастом таласног броја (за вредности  $q \geq k_F = 0.3 \text{ nm}^{-1}$ ) *Dirac*-ов плазмон улази у зону *Landau*-овог пригушења и долази до његовог слабљења, док за исте вредности таласног броја долази до појаве модова налик на фононске. Енергије ових фононских модова одговарају површинским *Fuchs-Kliwer*-овим фононима  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , које графен сада само делимично екранира.

Пошто је рачунски доста мање захтеван, наш *MDF-RPA* метод би могао да се користи за описивање сличних система за вредности таласног броја  $q$  чак до  $0.1 \text{ nm}^{-1}$ , захваљујући одличном слагању са рачунски доста захтевнијим *ab initio RPA* методом.

Други правац истраживања ове тезе је везан за теоријско моделовање  $\pi$  и  $\pi+\sigma$  плазмона, односно поређење различитих теоријских модела са доступним експериментално добијеним *EELS* спектрима. При испитивању интеракција брзих електрона са „слободним“ графеном изведени су изрази (поглавље 4.1): за енергијски губитак електрона,  $E_{loss}$ , и густину вероватноће за губитак енергије,  $P(\omega)$ . Израз који описује густину вероватноће је изведен у оптичком лимиту за случај када се снап електрона креће под нормалним углом у односу на графен и зависи од произвољног облика оптичке проводности графена  $\sigma(\omega)$ .

Реални и имагинарни део оптичке проводности графена израчунати у оквиру проширеног хидродинамичког модела (тзв. *eHD* модел) се доста добро слажу са резултатима које је наш сарадник доц. др Vito Despoја израчунао користећи *ab initio* метод (параграф 5.3.1). Густина вероватноће енергијских губитака израчуната у оба модела је директно поређена са *EELS* спектрима добијеним у три независна експеримента. Показано је одлично квалитативно и добро квантитативно слагање теоријских модела и експерименталних резултата (параграф 5.3.2).

Метод уклањања тзв. *zero loss* пика (*ZL* пик) из експериментално добијених *EELS* спектра доста утиче на његово слагање са теоријским моделима (параграфи 5.3.2 и 5.3.3). Конкретно, у *EELS* спектрима добијеним у два независна експеримента [47,48], опадањем енергије долази до наглог скока за  $\omega < 3.5 \text{ eV}$  који смо приписали доприносу нискоенергијске проводности  $\pi$  електрона у апроксимацији *Dirac*-овог конуса. У трећем разматраном експерименту недостају подаци на ниским енергијама [49], што може да буде последица претераног уклањања *ZL* пика.

На вишим енергијама теоријске криве које описују  $P(\omega)$  доста зависе од вредности максималног сакупљеног унутар раванског расејаног таласног броја електрона  $q_c$  (параграф 5.3.4). Мале вредности  $q_c$  доводе до брзог нестајања високоенергијских репова у спектру, што наликује на понашање реалног дела проводности графена на енергијама изнад  $\pi + \sigma$  плазмона. Са друге стране, велике вредности  $q_c$  узрокују споро опадање високоенергијских репова, што је у складу са понашањем имагинарног дела проводности графена. Такође, постоји одлично слагање експерименталних резултата из [47,49] са оба теоријска модела за  $20 < \omega < 50 \text{ eV}$ .

Претходно описано добро слагање добијених резултата са резултатима из три независна експеримента иде у прилог нашем теоријском моделу. На овај начин смо представили комплетан

аналитички модел *EELS* спектра 2D материјала, који би експерименталне групе могле лако да прилагоде и искористе за интерпретацију будућих *EELS* спектра из експеримената у којима је укључен графен, или неки други изотропни материјал што се може постићи погодном модификацијом оптичке проводности.

## 7. Додаци

### 7.1. Извођење *Poisson*-ове једначине

У овом додатку полазимо од *Maxwell*-ових једначина за диелектричну средину које узимамо за полазну тачку нашег модела и изводимо *Poisson*-ову једначину. Природа проблема који решавамо је таква да нас интересује квазистатички режим, тачније занемарујемо тзв. ефекте ретардације а самим тим не узимамо у обзир магнетно поље. Такође, радимо у електростатичком лимесу. У нашем случају *Maxwell*-ове једначине [82] гласе:

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \rho_{ext}(\vec{r}, t) \quad (7.1)$$

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \quad (7.2)$$

Овде је  $\vec{D}(\vec{r}, t)$  електрична индукција,  $\rho_{ext}(\vec{r}, t)$  густина наелектрисања спољашње наелектрисане честице а  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  јачина електричног поља. Из (7.2) следи да је јачина електричног поља конзервативна величина [82] и можемо да је напишемо у облику:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\nabla\Phi(\vec{r}, t) \quad (7.3)$$

где је  $\Phi(\vec{r}, t)$  скаларни потенцијал електричног поља.

Веза између електричне индукције,  $\vec{D}$  (представља електродинамичку реакцију средине на електрично поље успостављено у њој) и јачине електричног поља  $\vec{E}$  која то поље одређује, у случају изотропне (физичке особине исте у свим правцима) и стационарне средине (средине чије се особине не мењају у току времена, тј. остају инваријантне при транслацијама у времену) гласи:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^t f(\vec{r}, t-t') \vec{E}(\vec{r}, t') dt' \quad (7.4)$$

где је  $f$  скаларна функција одређена својствима средине.

Електродинамичка реакција средине у датој тачки простора и у датом тренутку времена одређена је електричним пољем у тој тачки простора, али не само у том тренутку времена већ и у свим ранијим тренуцима. Зато је погодније написати израз (7.4) у облику:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(\vec{r}, t-t') \vec{E}(\vec{r}, t') dt' \quad (7.5)$$

где је  $\varepsilon(\vec{r}, t-t') = f(\vec{r}, t-t')\eta(t-t')$  а  $\eta$  степ функција:

$$\eta(t-t') = \begin{cases} 0, & t < t' \\ 1, & t > t' \end{cases} \quad (7.6)$$



Узели смо у обзир претпоставку да је посматрани систем стационаран. То значи да се макроскопски параметри система не мењају у времену, као и да нема покретних граница између диелектрика. Тада можемо да применимо *Fourier*-ову трансформацију (ФТ) у односу на време и дефинишемо диелектричну функцију,  $\varepsilon(\vec{r}, t - t')$ , и јачину електричног поља  $\vec{E}(\vec{r}, t')$ , као функције у ФТ простору. Даље, написаћемо поменуте функције преко њихових ФТ:

$$\varepsilon(\vec{r}, t - t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega \quad (7.7)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(\vec{r}, \omega') e^{-i\omega't'} d\omega' \quad (7.8)$$

Заменом (7.7) и (7.8) у (7.5) следи:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4\pi} \varepsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (7.9)$$

Са друге стране знамо да је ФТ функције диелектричног помераја облика:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{D}(\vec{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (7.10)$$

Поређењем последња два израза добија се да је:

$$\vec{D}(\vec{r}, \omega) = \frac{1}{4\pi} \varepsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) \quad (7.11)$$

На основу израза (7.10) и аналогних израза за  $\rho_{ext}(\vec{r}, t)$ ,  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  и  $\Phi(\vec{r}, t)$ , изрази (7.1) и (7.3) постају:

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, \omega) = \rho_{ext}(\vec{r}, \omega) \quad (7.12)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, \omega) = -\nabla\Phi(\vec{r}, \omega) \quad (7.13)$$

Заменом (7.13) у (7.11) па у (7.12) следи:

$$\nabla \cdot [\varepsilon(\vec{r}, \omega) \nabla\Phi(\vec{r}, \omega)] = -4\pi\rho_{ext}(\vec{r}, \omega) \quad (7.14)$$

У квазистатичком случају, када диелектрична функција зависи само од вектора положаја, тј.  $\varepsilon(\vec{r}, \omega) = \varepsilon(\vec{r})$ , израз (7.9) постаје

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi} \varepsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (7.15)$$

Заменом израза (7.3) у (7.15) и добијеног израза у (7.1) добијамо *Poisson*-ову једначину за електрични потенцијал:

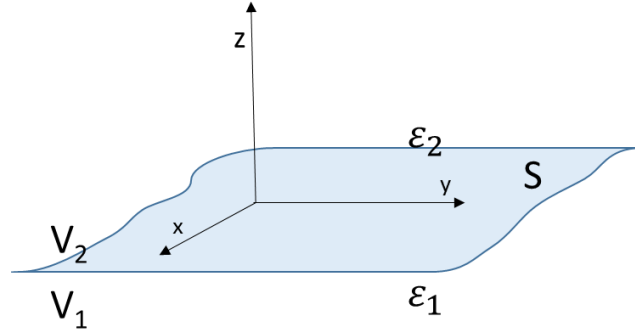
$$\nabla \cdot [\varepsilon(\vec{r}) \nabla\Phi(\vec{r}, t)] = -4\pi\rho_{ext}(\vec{r}, t) \quad (7.16)$$

Од интереса нам је да математички модел који развијамо важи за *Poisson*-ову једначину и у случају када зависи од учестаности, (7.14), као и у временски зависном случају, (7.16). Поређењем ове две једначине видимо да су оне просторно изоморфне па можемо у нотацији да испустимо зависност од  $\omega$  у првом случају, као и зависност од времена у другом. Сада *Poisson*-ова једначина има облик (видети израз (3.1)):

$$\nabla \cdot [\varepsilon(\vec{r}) \nabla \Phi(\vec{r})] = -4\pi \rho_{ext}(\vec{r}) \quad (7.17)$$

## 7.2. Електростатички гранични услови

У општем случају, посматрамо закривљену површ  $S$  (Слика 7.1) која представља границу између две диелектричне средине у 3D простору,  $\mathbb{R}^3$ . Поменути површ  $S$  дели простор  $\mathbb{R}^3$  на две области. Област испод површи  $S$  (укључујући  $z = -\infty$  у *Descartes*-овом координатном систему) означавамо са  $V_1$ , а област изнад површи  $S$  (укључујући  $z = \infty$  у *Descartes*-овом координатном систему) означавамо са  $V_2$ .



Слика 7.1: Шематски приказ закривљене површи  $S$  и области  $V_1$  и  $V_2$ .

Електричну индукцију и јачину електричног поља означавамо са  $\vec{D}_1(\vec{r})$  и  $\vec{E}_1(\vec{r})$  у области  $V_1$ , и  $\vec{D}_2(\vec{r})$  и  $\vec{E}_2(\vec{r})$  у области  $V_2$ . Такође, претпостављамо да су диелектрична функција  $\varepsilon(\vec{r})$  и потенцијал  $\Phi(\vec{r})$  дефинисани на следећи начин:

$$\varepsilon(\vec{r}) = \begin{cases} \varepsilon_1, \vec{r} \in V_1 \\ \varepsilon_2, \vec{r} \in V_2 \end{cases} \quad (7.18)$$

$$\Phi(\vec{r}) = \begin{cases} \Phi_1(\vec{r}), \vec{r} \in V_1 \\ \Phi_2(\vec{r}), \vec{r} \in V_2 \end{cases} \quad (7.19)$$

Тада на површи  $S$  електрична индукција  $\vec{D}(\vec{r})$  и електростатички потенцијал  $\Phi(\vec{r})$  трпе скок у виду [82]:

$$(\vec{D}_2 - \vec{D}_1) \cdot \vec{n}_{12} = 4\pi\sigma, \vec{r} \in S \quad (7.20)$$

$$-\varepsilon_2 \vec{n}_{12} \cdot \nabla \Phi_2 + \varepsilon_1 \vec{n}_{12} \cdot \nabla \Phi_1 = 4\pi\sigma, \vec{r} \in S \quad (7.21)$$

где је  $\vec{n}_{12}$  јединични вектор површи  $S$  у смеру од  $V_1$  ка  $V_2$ , а  $\sigma$  површинска густина наелектрисања површи  $S$ . Како би применили претходне граничне услове на слојевиту структуру, претпоставићемо да површ  $S$  представља раван  $z=0$  у *Descartes*-овом координатном систему са координатама  $\vec{r} = (x, y, z)$ . Услови на граници за скок потенцијала  $\Phi(\vec{r})$  су облика:

$$\varepsilon_1 \left. \frac{\partial \Phi_1}{\partial z} \right|_{z=0} - \varepsilon_2 \left. \frac{\partial \Phi_2}{\partial z} \right|_{z=0} = 4\pi\sigma \quad (7.22)$$

Ако претпоставимо да нема слободних наелектрисања на граници између два диелектрика, можемо да заменимо  $\sigma = 0$  у (7.20). Даље следи да је нормална компонента вектора јачине електричног поља непрекидна на поменутиим границама. Заменом  $\sigma = 0$  у (7.21) добијамо услов за извод у правцу нормале електростатичког потенцијала на границама, који мора такође да важи и за ГФ  $G(\vec{r}, \vec{r}')$ .

### 7.3. Поларизациона функција графена

Поларизациона функција неинтерагујућих  $\pi$  електрона у слободном графену добијена *MDF-RPA* методом [62,90] може да се напише у следећем облику [107]:

$$\chi(q, \omega) = \frac{g_s g_v}{2\hbar v_F} \left[ \frac{iq}{8\sqrt{\zeta}} + \frac{k_F}{\pi} + \frac{q}{8\pi\sqrt{\zeta}} \left( F\left(\frac{\omega + i\gamma}{qv_F} + \frac{2k_F}{q}\right) - F\left(\frac{\omega + i\gamma}{qv_F} - \frac{2k_F}{q}\right) \right) \right] \quad (7.23)$$

где је:

$$\zeta = \left( \frac{\omega + i\gamma}{qv_F} \right)^2 - 1 \quad (7.24)$$

а  $F(u)$  функција облика:

$$F(u) = \frac{u\sqrt{\zeta(u^2 - 1)}}{\sqrt{\zeta}} - \ln \left[ u\sqrt{\zeta} + \sqrt{\zeta(u^2 - 1)} \right] \quad (7.25)$$

Овде је  $g_s = 2$ ,  $g_v = 2$  и  $\omega > 0$  и  $q > 0$ . Овде треба напоменути да је  $\zeta$  комплексан број па самим тим важи  $\sqrt{\zeta(u^2 - 1)} \neq \sqrt{\zeta} \sqrt{u^2 - 1}$ .

У случају коначног пригушења  $\gamma$ , коришћењем *Mermin*-ове процедуре [108], поларизациона функција графена  $\chi_M(q, \omega)$  може да се напише у следећем облику:

$$\chi_M(q, \omega) = \frac{\chi(q, \omega)}{1 - \frac{i\gamma}{\omega + i\gamma} \left( 1 - \frac{\chi(q, \omega)}{\chi_S(q)} \right)} \quad (7.26)$$

где је  $\chi_S(q) = \chi(q, 0)$  поларизациона функција у статичком лимиту када важи  $\omega \rightarrow 0$  и  $\gamma \rightarrow 0$ , која може да се напише у облику [62,90]:

$$\chi_S(q) = \frac{g_s g_v k_F}{2\pi\hbar v_F} \begin{cases} 1, & q \leq 2k_F \\ 1 - \frac{1}{2} \sqrt{1 - \left(\frac{2k_F}{q}\right)^2} + \frac{q}{4k_F} \arccos \frac{2k_F}{q}, & q > 2k_F \end{cases} \quad (7.27)$$

## 8. Референце

- [1] R.S. Zhang, J.W. Jiang, *Front. Phys.* 14 (2019) 13401.
- [2] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Science* 306 (2004) 666.
- [3] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* 81 (2009) 109.
- [4] A.K. Geim, P. Kim, *Sci. Am.* 298 (2008) 90.
- [5] M. Jablan, H. Buljan, M. Soljačić, *Phys. Rev. B* 80 (2009) 245435.
- [6] W.L. Barnes, *J. Opt. A Pure Appl. Opt.* 8 (2006) S87.
- [7] W.L. Barnes, A. Dereux, T.W. Ebbesen, *Nature* 424 (2003) 824.
- [8] G.X. Ni, A.S. McLeod, Z. Sun, L. Wang, L. Xiong, K.W. Post, S.S. Sun, B.-Y. Jiang, J. Hone, C.R. Dean, M.M. Fogler, D.N. Basov, *Nature* 557 (2018) 530.
- [9] Y. Ding, X. Zhu, S. Xiao, H. Hu, L.H. Frandsen, N.A. Mortensen, K. Yvind, *Nano Lett.* 15 (2015) 4393.
- [10] C.T. Phare, Y.-H. D. Lee, J. Cardenas, M. Lipson, *Nat. Photonics* 9 (2015) 511.
- [11] A. Politano, G. Chiarello, *Nanoscale* 6 (2014) 10927.
- [12] J.D. Cox, F.J. García De Abajo, *Acc. Chem. Res.* 52 (2019) 2536.
- [13] N. Rivera, I. Kaminer, B. Zhen, J.D. Joannopoulos, M. Soljačić, *Science* 353 (2016) 263.
- [14] J.D. Cox, F.J. García De Abajo, *Nano Lett.* 19 (2019) 3743.
- [15] Z. Li, W. Zhang, F. Xing, *Int. J. Mol. Sci.* 20 (2019) 24.
- [16] H. Hu, X. Yang, X. Guo, K. Khaliji, S.R. Biswas, F.J. García De Abajo, T. Low, Z. Sun, Q. Dai, *Nat. Comm.* 10 (2019) 1.
- [17] K. Khaliji, S.R. Biswas, H. Hu, X. Yang, Q. Dai, S.-H. Oh, P. Avouris, T. Low, *Phys. Rev. Appl.* 13 (2020) 011002.
- [18] I.A. Nechepurenko, E.S. Andrianov, A.A. Zyablovsky, A. V. Dorofeenko, A.A. Pukhov, Y.E. Lozovik, *Phys. Rev. B* 98 (2018) 075411.
- [19] J. Sloan, N. Rivera, M. Soljačić, I. Kaminer, *Nano Lett.* 18 (2018) 308.
- [20] J. Yang, F. Kong, K. Li, *Plasmonics* 11 (2016) 981.
- [21] X. Zhao, C. Yuan, L. Zhu, J. Yao, *Nanoscale* 8 (2016) 15273.
- [22] M.B. Lundeberg, Y. Gao, R. Asgari, C. Tan, B. V. Duppen, M. Autore, P. Alonso-González, A. Woessner, K. Watanabe, T. Taniguchi, R. Hillenbrand, J. Hone, M. Polini, F.H.L. Koppens, *Science* 357 (2017) 187.
- [23] E.J.C. Dias, D.A. Iranzo, P.A.D. Gonçalves, Y. Hajati, Y. V. Bludov, A.P. Jauho, N.A. Mortensen, F.H.L. Koppens, N.M.R. Peres, *Phys. Rev. B* 97 (2018) 245405.
- [24] Y. Fan, N. Shen, F. Zhang, Q. Zhao, H. Wu, Q. Fu, Z. Wei, H. Li, C.M. Soukoulis, *Adv. Opt. Mater.* 7 (2018) 1800537.
- [25] H. Yan, T. Low, W. Zhu, Y. Wu, M. Freitag, X. Li, F. Guinea, P. Avouris, F. Xia, *Nat. Photon.* 7 (2013) 394.
- [26] H. Yan, X. Li, B. Chandra, G. Tulevski, Y. Wu, M. Freitag, W. Zhu, P. Avouris, F. Xia, *Nat.*

Nanotech. 7 (2012) 330.

- [27] Z. Fei, G.O. Andreev, W. Bao, L.M. Zhang, A.S. McLeod, C. Wang, M.K. Stewart, Z. Zhao, G. Dominguez, M. Thiemens, M.M. Fogler, M.J. Tauber, A.H. Castro-Neto, C.N. Lau, F. Keilmann, D.N. Basov, *Nano Lett.* 11 (2011) 4701.
- [28] Y. Liu, R.F. Willis, *Phys. Rev. B* 81 (2010) 081406(R).
- [29] Y. Liu, R.F. Willis, K. V. Emtsev, T. Seyller, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 201403(R).
- [30] K.F. Allison, Z.L. Mišković, *Nanotechnology* 21 (2010) 134017.
- [31] A. Principi, E. Van Loon, M. Polini, M.I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* 98 (2018) 035427.
- [32] A. Politano, I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, G. Chiarello, *Carbon* 96 (2016) 91.
- [33] A. Politano, I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, H.K. Yu, D. Fariás, G. Chiarello, *Carbon* 114 (2017) 70.
- [34] Z. Sun, Y.-H. Hu, *Matter* 2 (2020) 1106.
- [35] U. Mogera, G.U. Kulkarni, *Carbon* 156 (2020) 470.
- [36] J. Wang, X. Mu, L. Wang, M. Sun, *Mater. Today Phys.* 9 (2019) 100099.
- [37] M. Liu, X. Yin, F. Wang, X. Zhang, *Nano Lett.* 12 (2012) 1482.
- [38] T. Low, P. Avouris, *ACS Nano* 8 (2014) 1086.
- [39] K. Lyon, D.J. Mowbray, Z.L. Mišković, *Ultramicroscopy* (2020) 113012.
- [40] I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, *Phys. Lett. A* 378 (2014) 2206.
- [41] V.U. Nazarov, *New J. Phys.* 17 (2015) 073018.
- [42] D. Novko, V. Despoja, M. Šunjić, *Phys. Rev. B* 91 (2015) 195407.
- [43] M.B. Roman, S.M. Bose, *Plasmonics* 12 (2017) 145.
- [44] D.J. Mowbray, *Phys. Status Solidi B* 251 (2014) 2509.
- [45] O. Roslyak, G. Gumbs, D. Huang, *Phys. E* 44 (2012) 1874.
- [46] K. Lyon, K. Akbari, Z.L. Mišković, *Radiat. Eff. Def. Solids* 175 (2020) 84.
- [47] F.J. Nelson, J.-C. Idrobo, J.D. Fite, Z.L. Mišković, S.J. Pennycook, S.T. Pantelides, J.U. Lee, A.C. Diebold, *Nano Lett.* 14 (2014) 3827.
- [48] P. Wachsmuth, R. Hambach, M.K. Kinyanjui, M. Guzzo, G. Benner, U. Kaiser, *Phys. Rev. B* 88 (2013) 075433.
- [49] T. Eberlein, U. Bangert, R.R. Nair, R. Jones, M. Gass, A.L. Bleloch, K.S. Novoselov, A.K. Geim, P.R. Briddon, *Phys. Rev. B* 77 (2008) 233406.
- [50] A.K. Geim, K.S. Novoselov, *Nat. Mater.* 6 (2007) 183.
- [51] P.R. Wallace, *Phys. Rev.* 71 (1947) 622.
- [52] F. Guinea, T. Low, *Phil. Trans. R. Soc. A* 368 (2010) 5391.
- [53] A.K. Geim, A.H. MacDonald, *Phys. Today* 60 (2007) 35.
- [54] M. Wilson, *Phys. Today* 59 (2006) 21.
- [55] I. Radović, *Interakcija jona sa grafenom*, Fizički fakultet, Beograd, 2008.
- [56] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, *Nature* 438 (2005) 197.

- [57] V. Despoja, D. Novko, K. Dekanić, M. Šunjić, L. Marušić, *Phys. Rev. B* 87 (2013) 075447.
- [58] F. Varchon, R. Feng, J. Hass, X. Li, B.N. Nguyen, C. Naud, P. Mallet, J.-Y. Veullen, C. Berger, E.H. Conrad, L. Magaud, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) 126805.
- [59] P. Sutter, J.T. Sadowski, E. Sutter, *Phys. Rev. B* 80 (2009) 245411.
- [60] X. Luo, T. Qiu, W. Lu, Z. Ni, *Mat. Sci. Eng. R* 74 (2013) 351.
- [61] A.G. Marinopoulos, L. Reining, V. Olevano, A. Rubio, T. Pichler, X. Liu, M. Knupfer, J. Fink, *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002) 076402.
- [62] E.H. Hwang, S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 205418.
- [63] V. Despoja, K. Dekanić, M. Šunjić, L. Marušić, *Phys. Rev. B* 86 (2012) 165419.
- [64] V. Despoja, L. Marušić, *Phys. Rev. B* 97 (2018) 205426.
- [65] T. Stauber, *J.Phys.:Condens. Matter* 26 (2014) 123201.
- [66] A.N. Grigorenko, M. Polini, K.S. Novoselov, *Nat. Photon.* 6 (2012) 749.
- [67] L. Rast, T.J. Sullivan, V.K. Tewary, *Phys. Rev. B* 87 (2013) 045428.
- [68] X. Du, I. Skachko, A. Barker, E.Y. Andrei, *Nat. Nanotech.* 3 (2008) 491.
- [69] J.S. Gomez-Diaz, C. Moldovan, S. Capdevila, J. Romeu, L.S. Bernard, A. Magrez, A.M. Ionescu, J. Perruisseau-Carrier, *Nat. Comm.* 6 (2015) 6334.
- [70] M. V. Fischetti, D.A. Neumayer, E.A. Cartier, *J. Appl. Phys.* 90 (2001) 4587.
- [71] H. Buljan, M. Jablan, M. Soljačić, *Nat. Photon.* 7 (2013) 346.
- [72] B.K. Ridley, *Quantum processes in semiconductors*, Clarendon Press, Oxford, 1999.
- [73] J. Burgdörfer, *Nucl. Instrum. Methods B* 67 (1992) 1.
- [74] F.J. García De Abajo, P.M. Echenique, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 13399.
- [75] V.N. Neelavathi, R.H. Ritchie, W. Brandt, *Phys. Rev. Lett.* 33 (1974) 302.
- [76] Y.-N. Wang, T.-C. Ma, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 16395.
- [77] D.J. Mowbray, Z.L. Mišković, F.O. Goodman, Y.-N. Wang, *Phys. Lett. A* 329 (2004) 94.
- [78] I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, *Phys. Lett. A* 375 (2011) 3720.
- [79] I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, *Phys. Rev. B* 86 (2012) 125442.
- [80] I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, *Phys. Lett. A* 377 (2013) 2614.
- [81] A.J. Chaves, N.M.R. Peres, G. Smirnov, N. Asger Mortensen, *Phys. Rev. B* 96 (2017) 195438.
- [82] B. Milić, *Meksvelova elektrodinamika*, Studentski trg, Beograd, 2002.
- [83] J.D. Jackson, *Classical electrodynamics*, John Wiley and Sons, New York, 1999.
- [84] T. M.-U, L. Debnath, *Linear partial differential equations for scientists and engineers*, Birkhäuser, Boston, 2007.
- [85] R. Aničić, Z.L. Mišković, *Phys. Rev. B* 88 (2013) 205412.
- [86] Z.-Y. Ong, M. V. Fischetti, *Phys. Rev. B* 86 (2012) 165422.
- [87] R. Haberman, *Applied partial differential equations with Fourier series and boundary value problems*, Pearson, Boston, 2013.
- [88] M.I. Katsnelson, *Graphene: carbon in two dimensions*, University Press, Cambridge, 2012.

- [89] T. Marinković, I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, *Phys. Lett. A* 379 (2015) 377.
- [90] B. Wunsch, T. Stauber, F. Sols, F. Guinea, *New J. Phys.* 8 (2006) 318.
- [91] Y. Barlas, T. Pereg-Barnea, M. Polini, R. Asgari, A.H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007) 236601.
- [92] K.W.-K. Shung, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 979.
- [93] V. Borka Jovanović, I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, *Phys. Rev. B* 84 (2011) 155416.
- [94] R.F. Egerton, *Rep. Prog. Phys.* 72 (2009) 016502.
- [95] D.J. Mowbray, S. Segui, J. Gervasoni, Z.L. Mišković, N.R. Arista, *Phys. Rev. B* 82 (2010) 035405.
- [96] I. Radović, L. Hadžievski, N. Bibić, Z.L. Mišković, *Phys. Rev. A* 76 (2007) 042901.
- [97] J.-C. Idrobo, W. Zhou, *Ultramicroscopy* 180 (2017) 156.
- [98] E.G. Mishchenko, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 246802.
- [99] J. Sabio, J. Nilsson, A.H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 075410.
- [100] B.G. Frederick, G. Apai, T.N. Rhodin, *Phys. Rev. B* 44 (1991) 1880.
- [101] M. Ishigami, J.H. Chen, W.G. Cullen, M.S. Fuhrer, E.D. Williams, *Nano Lett.* 7 (2007) 1643.
- [102] T. Marinković, I. Radović, D. Borka, Z.L. Mišković, *Plasmonics* 10 (2015) 1741.
- [103] L.A. Falkovsky, S.S. Pershoguba, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 153410.
- [104] V. Despoja, T. Djordjević, L. Karbunar, I. Radović, Z.L. Mišković, *Phys. Rev. B* 96 (2017) 075433.
- [105] T. Djordjević, I. Radović, V. Despoja, K. Lyon, D. Borka, Z.L. Mišković, *Ultramicroscopy* 184 (2018) 134.
- [106] F. Nelson, *Study of the Dielectric Function of Graphene from Spectroscopic Ellipsometry and Electron Energy Loss Spectroscopy*, University at Albany, State University of New York, 2012.
- [107] K.F. Allison, D. Borka, I. Radović, L. Hadžievski, Z.L. Mišković, *Phys. Rev. B* 80 (2009) 195405.
- [108] N.D. Mermin, *Phys. Rev. B* 1 (1970) 2362.



## Биографија

Тијана Ђорђевић (до 25.10.2015. Маринковић) рођена је 06.08.1984. године у Сабрати, Либија. Основну школу завршила је у Сикирици, општина Параћин, а Математичку гимназију (прва три разреда) у Београду.

Дипломирала је 11.07.2013. године на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика, са просечном оценом 8.85 у току студија, и оценом 10 на дипломском раду под називом „Оптичке и диелектричне особине танких слојева оксида титана“. Његовом изразом руководио је др Давор Перушко, виши научни сарадник Института за нуклеарне науке „Винча“. Исте године уписала је докторске академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду.

Од 01.12.2013. године запослена је у Лабораторији за атомску физику (040) Института за нуклеарне науке „Винча“. Област истраживања Тијане Ђорђевић везана је за интеракције наелектрисаних честица са наноструктурним материјалима, као и на депоновање и карактеризацију танких слојева са посебним акцентом на испитивање њихових оптичких особина.

## Изјава о ауторству

Име и презиме аутора Тијана Ђорђевић

Број индекса 8021/2013

### Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Теоријски модели плазмона у графену при интеракцији са наелектрисаним честицама

- 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 кршио/ла ауторска права и користио/ла интелектуалну својину других лица.

**Потпис аутора**

У Београду, 08.06.2021

## Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Тијана Ђорђевић

Број индекса 8021/2013

Студијски програм Квантна, математичка, и нанофизика

Наслов рада Теоријски модели плазмона у графену при интеракцији са наелектрисаним честицама

Ментор др Иван Радовић

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла 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.

**Потпис аутора**

У Београду, 08.06.2021

\_\_\_\_\_

## Изјава о коришћењу

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

---

### **Теоријски модели плазмона у графену при интеракцији са наелектрисаним честицама**

---

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла 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 одлучио/ла.

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).

**Потпис аутора**

У Београду, 08.06.2021

1. **Ауторство.** Дозвољаваате умножавање, 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.** Дозвољаваате умножавање, 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.** Дозвољаваате умножавање, 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.** Дозвољаваате умножавање, 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.** Дозвољаваате умножавање, 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.** Дозвољаваате умножавање, 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.