

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ФИЗИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Миливоје З. Хаџијојић

ИСПИТИВАЊЕ ДВОДИМЕНЗИОНАЛНИХ КРИСТАЛА
КОРИШЋЕЊЕМ ЕФЕКТА ДУГИНОГ РАСЕЈАЊА

докторска дисертација

Београд, 2023

UNIVERSITY OF BELGRADE
FACULTY OF PHYSICS

Milivoje Z. Hadžijojić

STUDY OF TWO-DIMENSIONAL CRYSTALS BY
RAINBOW SCATTERING EFFECT

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2023

Комисија за преглед и оцену докторске дисертације

Ментор:

др Марко Ћосић, виши научни сарадник,
Институт за нуклеарне науке “Винча”, Београд

Чланови комисије:

др Марко Ћосић, виши научни сарадник,
Институт за нуклеарне науке “Винча”, Београд

др Едиб Добарџић, ванредни професор,
Физички факултет, Универзитет у Београду

др Божидар Николић, ванредни професор,
Физички факултет, Универзитет у Београду

Датум одбране: __.__._____.

ИСПИТИВАЊЕ ДВОДИМЕНЗИОНАЛНИХ КРИСТАЛА КОРИШЋЕЊЕМ ЕФЕКТА ДУГИНОГ РАСЕЈАЊА

Сажетак

Испитана је трансмисија протона енергије 5 keV кроз кристале налик графену. Путање протона дефинишу пресликавање скупа почетних положаја у скуп углова расејања. Сингуларитети овог пресликавања су линије дуге. Дуж ликова ових линија у скупу углова расејања је вредност угаоне расподеле велика. Промена параметара потенцијала или правца упадног снопа узрокује преображај угаоне расподеле трансмитованих протона и одговарајућег дугиног обрасца. Испитан је утицај свих параметара модела на облик линија дуге. Преображај дуга поштује строга правила теорије катастрофа. Интеракције дуга су објашњене бифуркацијама критичних тачака ефективног потенцијала интеракције. Утврђена правила преображаја дугиног обрасца би могла бити употребљена за одређивање квалитативно тачног облика дугиног обрасца у равни ударног параметра и распореда критичних тачака ефективног потенцијала интеракције. Развијен морфолошки метод се темељи на изучавању облика, а не висине или положаја пика угаоне расподеле. Стога су закључци морфолошке анализе отпорни на шум у мерном сигналу. Поред дугиних максимума, угаона расподела поседује и несингуларне максимуме чији је настанак објашњен анализом спектра Јакобијана закона расејања. Развијен је поступак којим се на основу величине и оријентације линија дуге може одредити матрица коваријансе термалних вибрација атома. Показано је да величина линије дуге зависи од врста атома који граде кристалну решетку, што би могло послужити за одређивање састава дводимензионалних кристала. Испитана је трансмисија протона кроз графен са тачкастим дефектима. Утврђено је да свакој врсти дефекта одговара јединствен дугин образац, на основу кога је из одговарајуће угаоне расподеле могуће одредити густине и врсте дефеката графена.

Кључне речи: Дугино расејање, дводимензионални кристали, теорија сингуларитета, дефекти графена, топлотно кретање графена

Научна област: Физика

Ужа научна област: Физика атома и молекула

STUDY OF TWO-DIMENSIONAL CRYSTALS BY RAINBOW SCATTERING EFFECT

Abstract

Transmission of 5 keV protons through graphene-like crystals was studied. Proton trajectories define mapping of the set of impact parameters to the set of scattering angles. Rainbows are singularities of this mapping. Angular yield is large along images of these lines in the scattering angle plane. Variation of the potential parameters or direction of the incident beam induces transfiguration of the angular distribution of transmitted protons and corresponding rainbow pattern. Influence of model parameters on the shape of the rainbows was investigated. Metamorphoses of the rainbow lines follow strict rules of the catastrophe theory. Interactions of the rainbow lines are explained by the bifurcations of the effective potential critical points. Principles of the rainbow pattern transfiguration could be used for determination of the qualitatively correct shape of the rainbow pattern in the impact parameter plane and distribution of the effective potential critical points. Developed morphological method is based on the study of shape of the rainbow pattern and not on the exact position of the rainbow lines or the particle count, making it insensitive to noise. Nonsingular maxima of the angular distributions were investigated and related to the spectrum of the Jacobian matrix of the map generated by the scattering law. Procedure for extraction of the covariance matrix from the size and orientation parameters of the rainbow lines was developed. It was shown that outer rainbows corresponding to different atomic species differ in diameters. This property of the rainbow pattern could be used for determination of atomic content in two-dimensional crystals. Transmission of protons through the graphene containing point defects was studied. It was found that each defect type generates its distinctive rainbow pattern. It was shown how the information obtained from the rainbow patterns and corresponding angular yield could be used for determination of unknown defect densities of the different defect types present in the graphene sample.

Key words: Rainbow scattering, two-dimensional crystals, singularity theory, graphene defects, graphene thermal motion

Scientific field: Physics

Scientific subfield: Physics of atoms and molecules

Садржај

1. Увод.....	1
2. Дводимензионални кристали	2
2.1. Особине и примене.....	2
2.2. Испитивање дводимензионалних кристала	6
3. Дугино расејање	9
3.1. Сингуларитети диференцијалног пресека	9
3.2. Честичне дуге.....	12
3.3. Ефекат кристалне дуге	13
3.4. Примена ефекта кристалне дуге	16
4. Дугино расејање протона на графену	20
4.1. Расејање протона на графену	20
4.1.1. Експериментална поставка	20
4.1.2. Потенцијал интеракције протона и атома угљеника.....	22
4.1.3. Потенцијал интеракције протона и графена	22
4.2. Термалне флукуације графена.....	24
4.3. Угаона расподела и дугин образац трансмитованих протона	28
5. Математичке основе морфолошке анализе дугиног расејања.....	32
5.1. Елементи теорије катастрофа и бифуркација.....	32
5.1.1. Елементарне катастрофе	33
5.1.2. Елементарне бифуркације.....	34
5.2. Бифуркације конусних пресека.....	35
5.3. Теорија индекса	37
6. Модел дугиног расејања	40
6.1. Импулсна апроксимација	40
6.2. Катастрофични модел линије дуге	42
6.3. Дефектни каспоиди коранка 2.....	43
6.3.1. Чворови и сингуларитети линија дуге.....	45

7. Морфолошка анализа угаоне расподеле	55
7.1. Примена импулсне апроксимације	55
7.2. Варијација параметара модела и преображај дугиног обрасца	57
7.2.1. Утицај коваријансе термалних вибрација на дугин образац	58
7.2.2. Утицај модела потенцијала интеракције на дугин образац	63
7.2.3. Утицај редног броја атома на дугин образац	66
7.2.4. Преображај дугиног обрасца услед промене оријентације	67
7.2.5. Решавање инверзног проблема	76
7.2.6. Утицај структуре на дугин образац	81
7.3. Несингуларни максимуми угаоне расподеле	90
8. Примена морфолошке анализе за карактеризацију 2Д кристала.....	93
8.1. Одређивање матрице коваријансе	93
8.2. Карактеризација атомског састава кристала.....	97
8.3. Карактеризација дефеката графена	98
9. Закључци	104
Литература	106
Прилози.....	116
Модел спољашње линије дуге.....	117
Утицај дивергенције упадног снопа на дугин образац	120
Биографија аутора	124
Изјаве.....	125
Изјава о ауторству	126
Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада	127
Изјава о коришћењу	128

Глава 1

Увод

Ова дисертација је заснована на подробном испитивању трансмисије протона кроз дводимензионалне кристале. У следећој глави су укратко описани дводимензионални кристали. Реч је о материјалима изванредних особина. Резултати ове дисертације би могли омогућити развој сасвим нове методе за испитивање дводимензионалних кристала.

У глави 3 су размотрени сингуларитети диференцијалног пресека за расејање класичне честице и објашњен је ефекат дуге. Ефекат дуге узрокује настанак сингуларних пикова угаоне расподеле расејаних честица и стога дугин образац има пресудан утицај на облик угаоне расподеле. Потом је размотрен ефекат кристалне дуге који се јавља приликом трансмисије јона кроз канале веома танких кристала.

У глави 4 је представљена теорија дугиног расејања протона на графену. Прво је размотрена динамика расејања протона на графену. Подробно су изучене термалне флукуације графена применом LAMMPS-а, симулатора класичне молекулске динамике. Потом је конструисан потенцијал интеракције протона и графена.

Главе 5 и 6 су посвећене основама теорије катастрофа, теорије бифуркација, теорије индекса и импулсној апроксимацији. Импулсном апроксимацијом је закон расејања сведен на градијентно пресликавање скупа почетних положаја протона на скуп углова расејања протона, чиме су нумерички прорачуни знатно поједностављени.

У глави 7 су представљени резултати анализе угаоних расподела протона трансмитованих кроз дводимензионални кристал. На примеру графена је показано изванредно подударње дугиних линија које су израчунате решавањем једначина кретања и дуга израчунатих применом импулсне апроксимације. Установљено је да су са становишта облика дугиног обрасца, а тиме и облика угаоне расподеле протона, релевантни параметри модела: угао нагиба графена у односу на правац упадног снопа протона, редни бројеви атома који граде решетку, параметри модела потенцијала интеракције протона и атома и варијансе отклона атома услед термалних флукуација кристала. Испитан је преображај дугиног обрасца услед промене кључних параметара модела. Утврђено је да примена катастрофичног модела линије дуге и теорије индекса омогућава квалитативну анализу ефективног потенцијала интеракције протона и графена. Поступак је назван морфолошка анализа дугиног обрасца. Анализом расејања протона на графену и дводимензионалном кристалу бор-нитрида је испитан утицај редног броја атома на облик и величину угаоне расподеле и дугиног обрасца. Утицај структуре кристала на линије дуге је испитан на примеру графена са различитим врстама тачкастих дефеката. Поред дугиних максимума угаона расподела поседује и несингуларне максимуме. Настанак ових структура је објашњен на самом крају главе 7.

Глава 8 је посвећена примени морфолошке анализе дугиног обрасца за карактеризацију дводимензионалних кристала. Конструисане су калибрационе криве које би могле послужити за одређивање коваријансе термалних вибрација атома и густине дефеката графена. Показано је и да анализа величине дугиног обрасца може омогућити одређивање атомског састава кристала.

Последња глава је посвећена закључцима истраживања које је спроведено у оквиру ове дисертације.

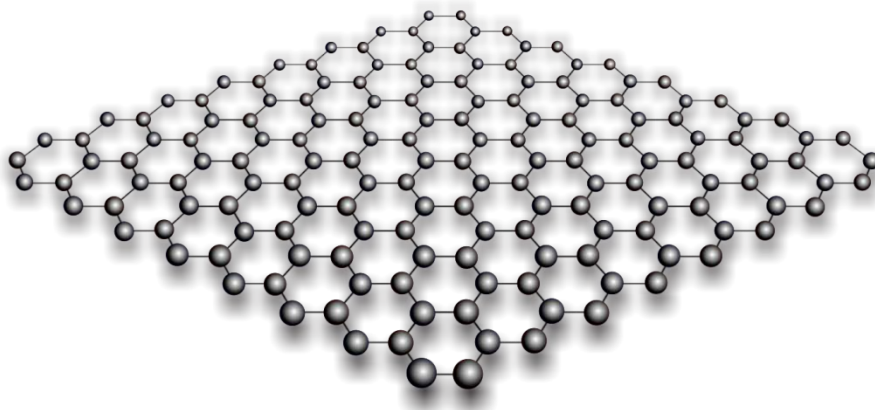
Глава 2

Дводимензионални кристали

Дводимензионални кристали или краће *2Д кристали* су кристали образовани транслирањем скупа атома (базиса или мотива) двама линеарно независним векторима. Реч је о материјалима изванредних особина. У првом поглављу су укратко описане особине и примене најчешће проучаваних 2Д кристала. Дуго се сматрало да дводимензионалне кристалне структуре нису термодинамички стабилне. Стога је посебна пажња посвећена термалним флукуацијама 2Д кристала. Друго поглавље је посвећено најчешће коришћеним методама за карактеризацију дводимензионалних материјала.

2.1. Особине и примене

Године 2004. је изолован *графен*, први 2Д кристал [1]. Графен је сачињен од само једног слоја атома угљеника који граде саћасту решетку. На слици 2.1 је приказан цртеж графена. Утврђено је да графен одликују изузетне особине. Измерени Јунгов модул графена износи чак 1 ТПа [2]. Графен је могуће растегнути и до 20% без пуцања. Дисперзиона релација израчуната у апроксимацији снажно везаних електрона (*tight-binding method*) је линеарна у околини K и K' тачака Бриленове зоне графена [3]. Фермијева површ је сачињена од само две тачке. Због високе покретљивости носиоца наелектрисања графен је прикладан за примене у електроници. Направе сачињене од графена би у будућности могле парирати силицијумским направама [4]. Графен је непропустљив за гасове, иако је реч о кристалу дебљине атома. Подесивост хемијских особина, велика површина по јединици запремине и биокompatibilност чине функционализован графен прикладним материјалом за примене у медицини [5,6].



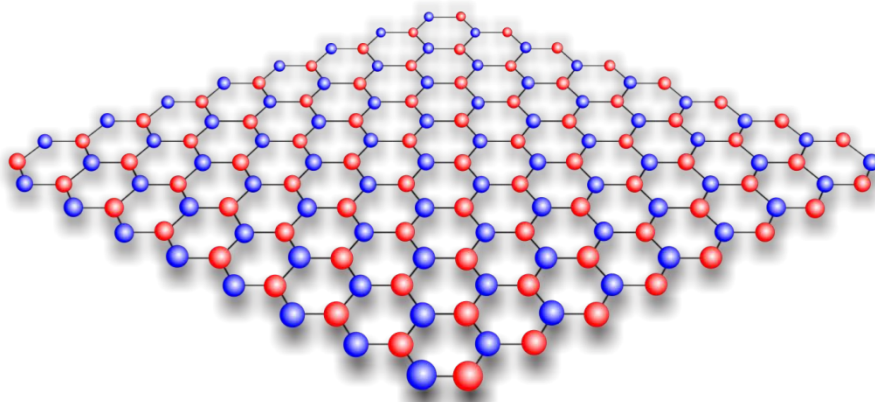
Слика 2.1. Модел ограниченог графена. Лоптама црне боје су представљени атоми угљеника које на окупу држе ковалентне везе представљене линијама црне боје.

Много напора је уложено у потрагу за додатним 2Д полупроводним кристалима [7]. Међу осталим једнослојним кристалима, истичу се: дводимензионални кристал хексагоналног бор-нитрида, силицен, молибден-дисулфид, фосфорен, антимонон и други. У наставку су укратко описана својства наведених наноматеријала.

Дводимензионални кристал хексагоналног бор-нитрида је једнослојни кристал у ком атоми бора и азота граде решетку саћасте структуре. На слици 2.2 је дата илустрација једнослојног кристала бор-нитрида. Са становишта електричних својина, једнослојни бор-нитрид је изолатор са директним процепом ширине 4.5 eV у K и K' тачкама Бриленове зоне. Кристална решетка једнослојног бор-нитрида је скоро идентична решетки графена. Дводимензионални бор-нитрид је чест супстрат за графен, фосфорен и остале једнослојне материјале. Због изванредне подударности две кристалне решетке, двослој сачињен од графена и једнослојног бор-нитрида је погодан за проучавање утицаја различитих Моиреових образаца на електронске и оптичке одлике материјала [8]. Једнослојни бор-нитрид слабо оксидује [9]. Изванредна температурна стабилност, непропустљивост за течности и гасове, и електрична непроводност, чине једнослојни бор-нитрид погодним за заштиту материјала од корозије и оксидације [10-12]. Дводимензионални бор-нитрид поседује боља адсорпциона својства него вишеслојни кристал бор-нитрида [13]. Ширина процепа између зона електронског спектра 2Д бор-нитрида је подесива контролисаном имплементацијом Стоун-Вејлсових дефеката, допирањем или променом броја слојева [14, 15]. Вишеслојни бор-нитрид може наћи примену у резвоју технологије горивних ћелија [16].

Прелазни метални дихалкогениди (ПМД) чине широку класу 2Д кристала различитих особина. Највише су проучавана полупроводна једињења облика MX_2 , где је М обично молибден (Mo) или волфрам (W), док је X сумпор (S), селен (Se) или телур (Te). Грађа MX_2 је сложенија од структуре графена. Атоми метала М образују раванску троугаону кристалну решетку и сваки од њих је повезан ковалентним везама са шест X атома. Преглед особина ове класе кристалних структура се налази у референци [17]. Зонска структура електронског спектра показује снажну зависност од броја слојева. Једнослојни ПМД су полупроводници са директним процепом у електронском спектру (direct bandgap). Ширина директног процепа износи приближно 1.9 eV и налази се у K и K' тачкама хексагоналне Бриленове зоне. Вишеслојни ПМД су полупроводници са индиректним процепом између зона електронског спектра ширине око 1.3 eV. Ширина процепа је подесива применом спољашњег електричног поља или напрезањем узорка.

Једнослојни кристал црног фосфора је познат као фосфорен [18]. Сваки атом фосфора је везан за три суседна атома. За разлику од графена, атоми фосфора нису компланарни. Фосфорен је полупроводник. Ширина директног процепа расте са смањењем броја слојева.



Слика 2.2. Модел дводимензионалног хексагоналног бор-нитрида. Црвеним и плавим лоптама су представљени атоми бора и азота.

У случају једнослојног црног фосфора је ширина директног процепа 1.5 eV. Ширина процепа показује снажну зависност од напрезања узорка [19]. Стога је ширина процепа у спектру подесива, што је нарочито корисно у фотоници и оптоелектроници.

Слагањем различитих једнослојних кристала, једног преко другог, настају наноструктуре сасвим другачијих особина. На овај начин се добијају вишеслојни кристали, познати као Ван дер Валсове структуре. Реч је о флексибилним материјалима са изванредним својствима која се могу подешавати [20].

Термалне вибрације 2Д кристала

Атоми и молекули чврстих тела се крећу у околини равнотежних положаја. У хармонијској апроксимацији потенцијала интеракције између атома кристала, средњи квадрат отклона атома дивергира логаритамски у лимесу бесконачне таласне дужине [21]. Другим речима, флукуације положаја атома расту са повећањем величине кристала. Строго посматрано, исувише велики отклони атома нарушавају важеће почетне претпоставке да су отклони атома из равнотежних положаја довољно мали. Због “споре” логаритамске дивергенције је преовладавало становиште да флукуације могу бити мале и код веома великих слојева [21]. Мермин је показао да у случају широке класе потенцијала интеракције Ленард-Џоунсовог типа не постоји конвенционални дугодометни кристални поредак у две димензије [22]. Опадање температуре топлеења танких филмова са смањењем дебљине је поткрепило становиште да дводимензионални кристали не могу постојати [23, 24].

Експериментално откриће графена изнова је преусмерило пажњу истраживача на питање стабилности 2Д кристала. Уочено је да изоловани узорци графена, иако високог кристалног квалитета, нису савршено равни. Утврђено је да правац нормале на површину графена варира у опсегу од неколико степени и да је површина графена прожета наборима [25]. Процењено је да су у размотреним узорцима средње висине набора 1 nm. Ален и сарадници су термалне вибрације графена мерили дифракцијом електрона [26]. Измерене вредности варијансе у равни и нормално на раван графена на собној температури износе 15.2 nm^2 и 104 nm^2 , респективно. Разлика између резултата експеримената који су објављени у референцама [25] и [26] није занемарљива и може бити последица утицаја супстрата и присуства нечистоћа на површини графена на собној температури, о чему сведоче аутори референце [26]. С друге стране, резултатима експеримената је заједничко да кретање атома стварних узорака графена није ограничено на кретање у равни. То значи да услов компланарности атома, на коме почива Мерминова теорема о непостојању кристалног поретка у две димензије, није испуњен. Може се закључити да је набирање значајно за термодинамичку стабилност графена.

Како би се разјаснили узроци набирања и температурне стабилности графена спроведен је низ нумеричких експеримената. Фасолино, Лос и Катселсон су спровели Монте-Карло симулације узорака графена различитих величина и на различитим температурама [27]. Примењени су периодични гранични услови и коришћен је више-честични потенцијал интеракције за угљеник. Резултати симулације графена на собној температури указују на постојање набора. Утврђено је да у симулираном графену на ненулној температури постоји велика вероватноћа да је једна од три хемијске везе које атом угљеника гради са суседним атомима значајно краћа од преостале две. Аутори су закључили да је ова асиметрија узрок набирања графена на ненулној температури. У случају графена сачињеног од 8640 атома средња дужина набора износи 80 \AA , што је упоредиво са резултатом експеримента из референце [25]. С друге стране, израчуната средња висина набора износи 0.7 \AA , што значајно одступа од вредности која је процењена на основу експеримента у референци [25]. Томпсон-Флаг, Моура и Мардер су утврдили да набирање графена није последица ислучиво термалних флукуација у равнотежном стању [28]. Аутори су уместо периодичних граничних услова (примењених у референци [27]) применом MEAM-a (modified embedded

atom method) симулирали узорке графена коначне величине. Утврђено је да ефекти ивица узрокују настанак набора чије амплитуде опадају са растојањем од обода узорка. Површина стварних узорака графена може бити прекривена ОН молекулима што узрокује повећање дужине две од три везе које атоми угљеника граде са најближим суседима за чак 10 % [29]. Интеракцију графена са ОН групама аутори су моделовали одговарајућим повећањем дужине везе између насумично одабрана три суседна атома. Утврђено је да концентрација ОН адсорбаната од 20% узрокује настанак набора графена чије су особине подударне са резултатима експеримента [25]. Нумеричким прорачунима је показано да деформација кристалне структуре на растојањима упоредивим са константом решетке омогућава температурну стабилност дводимензионалних кристала [30]. У овој дисертацији су варијансе отклоне атома графена услед термалних флукуација израчунате помоћу ЛАММПС-а, симулатора класичне молекулске динамике. Резултати ових испитивања су представљени у поглављу 4.2.

Разилажење резултата теоријских прорачуна и експеримената није занемарљиво и сведочи о значају развоја нових метода за испитивање термалних флукуација графена и осталих дводимензионалних кристала. У овој дисертацији је размотрена могућност одређивања варијанси термалних вибрација атома графена анализом угаоне расподеле трансмитованих протона. У поглављима 8.1 су представљени резултати овог истраживања.

2.2. Испитивање дводимензионалних кристала

У овом поглављу су описане најчешће коришћене методе за одређивање састава и структуре, односно карактеризацију дводимензионалних кристала. То су: оптичка микроскопија, микроскопија скенирајућом сондом, скенирајућа електронска микроскопија, трансмисиона електронска микроскопија, скенирајућа трансмисиона електронска микроскопија, Раманова спектроскопија и анализа сноповима јона. У наставку су укратко описане предности и недостаци наведених техника.

Оптичка микроскопија

Приликом осветљавања кристала део упадне светлости се трансмитује док се део рефлектује. Оптичка микроскопија материјала се своди на одређивање интензитета рефлектоване светлости, који зависи од дебљине кристала, индекса преламања, апсорпционих коефицијената различитих области узорка, као и таласне дужине употребљене светлости. Оптичком микроскопијом је могуће одредити положај, величину и дебљину кристала сачињених од свега неколико слојева [31-33]. На овај начин је до данас је испитано неколико врста веома танких кристала сачињених од неколико слојева [32-34]. Оптичка микроскопија се сврстава у “грубе” методе и није прикладна за испитивање примеса или структурних дефеката. Нарочито је неприкладна у случају изолатора, попут дводимензионалног хексагоналног бор-нитрида, код којих је вредност индекса преламања мала.

Микроскопија скенирајућом сондом

Микроскопија скенирајућом сондом (МСС) је скуп експерименталних метода за испитивање површинских одлика материјала [35, 36]. Две често коришћене МСС технике су *скенирајућа тунелска микроскопија* (scanning tunneling microscopy), скраћено СТМ и *микроскопија атомских сила* (atomic force microscopy) или краће МАС. Овим методама је могуће приказати површину узорка са резолуцијом мањом од једног нанометра. У СТМ се приказ површине материјала конструише на основу измерене струје тунеловања између проводне сонде и површине узорка [37]. У оквиру МАС методе се површина узорка скенира сондом пречника мањег од 100 Å. Сонда је причвршћена за савитљив носач. Ван дер Валсове силе између сонде и површине материјала узрокују савијање носача [38]. Сензор мери помераје носача приликом скенирања узорка. На основу измереног сигнала се генерише приказ површине материјала. Структура графена и других дводимензионалних материјала се може испитивати МСС методама [39].

Међутим, самостално примењене МСС методе нису без ограничења. Иако прикладне за карактеризацију структуре 2Д кристала, овим методама није могуће карактерисати хемијски састав [36].

Скенирајућа електронска микроскопија

Скенирајућа електронска микроскопија (СЕМ) користи електроне за приказивање површине узорка [40, 41]. СЕМ је широко распрострањена метода за испитивање материјала. За разлику од оптичке микроскопије, код које је резолуција ограничена на микрометарске таласне дужине видљиве светлости, СЕМ омогућава већу просторну резолуцију захваљујући много краћој таласној дужини електрона. Упадни снап електрона се електромагнетним

сочивима фокусира у област мале површине на узорку. Електрони интерагују са атомима узорка при чему долази до повратног расејања електрона, емисије секундарних електрона, емисије X-зрачења или трансмисије електрона. Детектор сакупља емитоване електроне, што уз информацију о положају фокуса упадног снопа омогућава карактеризацију површине узорка. Сигнал који генеришу секундарни електрони омогућава приказ структуре површине. С друге стране, сигнал који генеришу повратно расејани електрони омогућава приказ хемијског састава површине. Потребно је да се узорак налази у довољно високом вакууму. Фокусираним снопом електрона се скенира површина материјала. На овај начин је могуће приказати површину узорка са резолуцијом од свега неколико нанометара. Може се стећи утисак да је СЕМ беспрекорна метода за анализу дводимензионалних кристала. Карактеризација дводимензионалних материјала помоћу СЕМ-а је веома изазован поступак [42]. Поред техничких изазова, постоје и суштинска ограничења. Прва потешкоћа је транспарентност дводимензионалних материјала за електроне високе енергије који се употребљавају у СЕМ-у. Друго, упадни електрони могу сами узроковати оштећења материјала који се испитује. Да би се у потпуности испитала структура 2Д материјала неопходно је поред СЕМ-а користити допуњујуће методе за карактеризацију наноматеријала, попут трансмисионе електронске микроскопије или МАС-а.

Трансмисиона и скенирајућа трансмисиона електронска микроскопија

Трансмисиона електронска микроскопија или ТЕМ користи снап електрона за испитивање својстава веома танких узорака [41]. Уређај чини извор електрона, електромагнетна сочива и детектор електрона. Сноп електрона се убрзава и фокусира електромагнетним сочивима. Сноп електрона пролази кроз узорак и увећава се додатним сочивима. Трансмитовани електрони се сакупљају у детектору. ТЕМ-ом је могуће образовати слику узорка са резолуцијом 0.2 nm. Једна варијанта ТЕМ-а је и скенирајућа трансмисиона електронска микроскопија или СТЕМ. У случају СТЕМ-а се снап електрона фокусира у тачку а не на целу површину узорка. Трансмитовани електрони се детектују. Померањем фокуса се генерише приказ целог узорка. Скенирањем узорка је могуће испитивати својства материјала у различитим тачкама. Квалитет кристалне структуре, оријентација кристала, кристална фаза и правац раста кристала се могу испитивати ТЕМ-ом високе резолуције (ТЕМВР) [43]. Ова техника се често употребљава у анализи епитаксијално нараслих металних халкогенида на хетероструктурама. Упоредним коришћењем резултата ТЕМ-а са нумеричким симулацијама дифракције је могуће одредити број слојева 2Д кристалне структуре. На овај начин се може утврдити број слојева екслолираног фосфорена [44]. ТЕМ-ом су одређени величина и правац раста нанослојева злата у густо пакованој кристалној решетки [45]. СТЕМ уз одговарајућу оптику јесте у могућности да прикаже појединачне атоме у веома танким материјалима и 2Д кристалима [46-50]. Истим методом је могуће одредити и положај појединачних атома прелазних метала у ПМД кристалима. Показано је да се помоћу СТЕМ-а могу одредити и фазе 2Д кристала које су присутне у узорку. Добро познат пример је утврђивање области 2Н и 1Т кристалних фаза једнослојног MoS_2 [51]. ТЕМ се може уотребити и за модификацију 2Д материјала.

ТЕМ и СТЕМ су изванредне технике за испитивање квалитета решетке кристала, облика, величине, кристалне фазе и правца раста танких материјала [52]. Као и у случају СЕМ-а, узорак који се анализира мора се налазити у довољно високом вакууму. Важно је поменути да су енергије електрона који се користе у трансмисионој електронској микроскопији довољно велике да узрокују оштећење материјала. Снажно зрачење узроковано ТЕМ-ом може променити фазу кристала. Познати примери су кристалне фазе нано-слоја злата у густо пакованој фази и 2Н фаза једнослојног MoS_2 [45, 53].

Раманова спектроскопија

Раманова спектроскопија се заснива на нееластичном расејању светлости на метерији [54]. Приликом расејања светлости долази до размене енергије између фотона и материје што се одражава на вибрације атома и молекула. Уколико је учестаност расејаног фотона мања од учестаности упадног фотона, материјалу је предата енергија и догађај је познат као Стоксов процес. У супротном се говори о анти-Стоксовом процесу. Раманова спектроскопија је веома корисна за одређивање састава полупроводничких легура [55- 59]. Раманова спектроскопија је брза и недеструктивна метода. Постојање дефеката и присуство нечистоћа у материјалу се такође може опазити у Рамановом спектру [60, 61]. Раманоома спектроскопијом се могу испитивати електронска својства 2Д кристала [62]. Након успешне примене Раманове спектроскопије у анализи графена [63- 65], метод се показао као изванредна техника за одређивање броја слојева, квалитета кристалне структуре и кристалне фазе и осталих једнослојних материјала, попут једнослојног MoS_2 [66] и једнослојних кристала из класе прелазних металних дихалкогенида. На основу односа интензитета Раманових пикова је могуће одредити густине различитих неправилности у структури кристала. Класична Раманова спектроскопија није техника без недостатака. Класичном Рамановом спектроскопијом није могуће одредити положаје шупљина, примеса и тополошких дефеката у кристалу. Класичном Рамановом спектроскопијом се не могу међусобно разликовати неке врсте дефеката, попут моноваканција и диваканција. Постоје напредне верзије Раманове спектроскопије. Ту се сврставају тзв. микро-Раманова спектроскопија, конфокална Раманова микроскопија и друге. Раманова спектроскопија није прикладна за испитивање органских једињења због флуоресценције, која чини анализу излазног сигнала знатно сложенијом.

Анализа танких кристала сноповима јона

Истраживање расејања јона на атомима чврстих тела је подстакнуто експерименталним опажањем повратно расејаних алфа-честица [67]. Спектрометрија Радерфордовога повратног расејања, честично индукована емисија X-зрака, анализа нуклеарних реакција и анализа еластичног одбитка су неке од најчешће коришћених техника за анализу материјала сноповима јона. Наведене технике су засноване на интеракцији јона са електронима унутрашњих атомских љуски или са атомским језгрима. Употребом фокусираних снопова лаких јона јонска спектрометрија је преобразена у јонску микроскопију [68]. Јонска микроскопија се спроводи нуклеарном микросондом, уређајем који помоћу електромагнетних сочива фокусира снап јона у област микрометарских размера. Сондом се потом скенира површина узорка. Нуклеарном микросондом се могу приказати тачкасти дефекти, дефекти раста и дислокације унутар кристала [68]. Продором јона MeV-ских енергија кроз материјал настаје мноштво јонизованих електрона. Ово је последица великог губитка енергије упадних јона при интеракцији са електронима. Већина јонизованих електрона нема енергију већу од 100 keV-а. Стога електрони који напуштају површину материјала долазе из слојева не дубљих од неколико нанометара. Детекцијом емитованих електрона је могућ приказ топографије површине материјала. Јонска микроскопија се показала као успешна техника у топографије површине материјала. Јонска микроскопија се показала као успешна техника у испитивању појаве *каналисања* јона кроз танке кристале [69-74], о чему ће бити више речи у наредном поглављу.

Овај кратак преглед најчешће коришћених техника сведочи да постоји потреба за побољшањем постојећих и развојем нових метода за карактеризацију материјала. Истраживање на коме се темељи ова дисертација може допринети развоју сасвим нове методе за карактеризацију 2Д кристала.

Глава 3

Дугино расејање

Ова глава представља увод у теорију *дугиног расејања*. Под дугиним расејањем или *ефектом дуге* се најчешће подразумева шарена светлосна појава присутна на небу током кише. Тада се говори о тзв. *метеоролошкој дуги*. Показало се да ефекат дуге није својствен искључиво расејању сунчеве светлости на капима воде у ваздуху.

У првом поглављу су размотрени сингуларитети диференцијалног пресека за класично расејање. У другом поглављу ће бити речи о *честичним дугама*. У трећем поглављу је показано да ефекат постоји у трансмисији јона кроз веома танак кристал. Тада се говори о *кристалној дуги*. У четвртном поглављу је показано на који начин се ефекат кристалне дуге може употребити за карактеризацију кристала.

3.1. Сингуларитети диференцијалног пресека

Размотримо класично расејање честице масе m у потенцијалу V . Вектор положаја честице у тренутку t је $\mathbf{r}(t)$. Путања честице је решење једначине кретања:

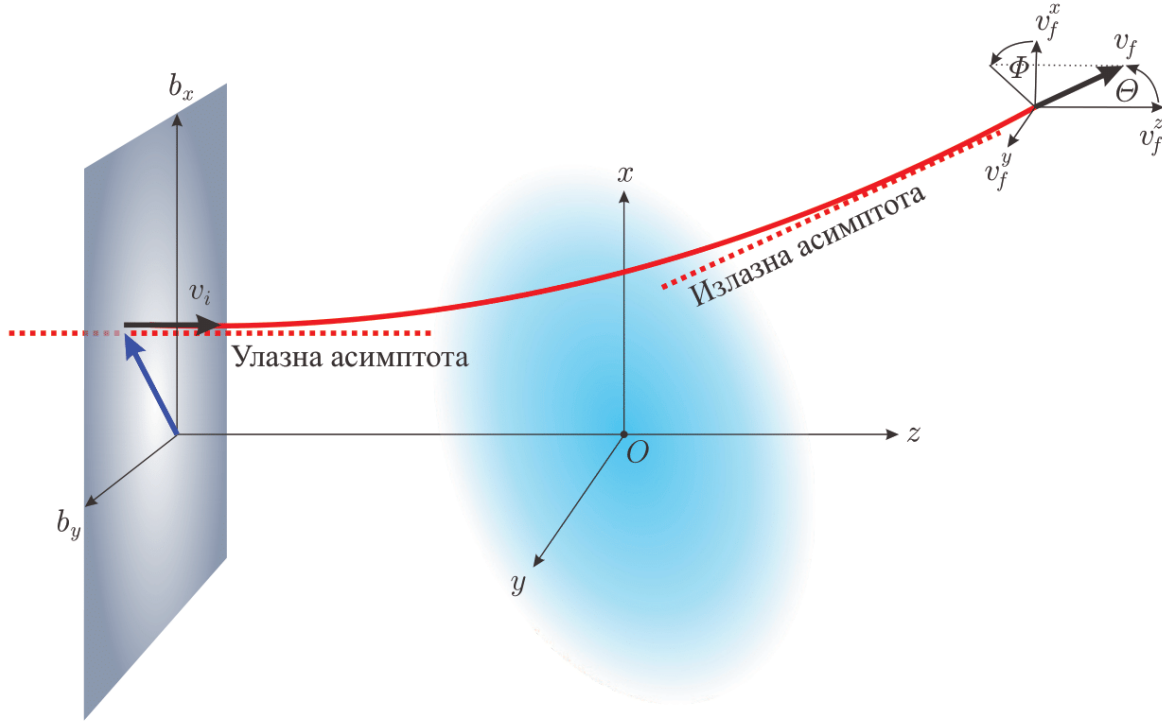
$$m\ddot{\mathbf{r}}(t) = -\nabla V[\mathbf{r}(t)], \quad (3.1)$$

где је $\nabla V[\mathbf{r}(t)]$ градијент потенцијала V у тачки $\mathbf{r}(t)$, а $\dot{\mathbf{r}}(t)$ убрзање честице у тренутку t . Део простора у коме кретање честице највише одступа од равномерног праволинијског кретања се назива *област интеракције*. Пре уласка у област интеракције кретање честице наликује на кретање слободне честице. Асимптота трајекторије честице у лимесу $t \rightarrow -\infty$ се назива *улазна асимптота* [75]. Брзина честице у лимесу $t \rightarrow -\infty$ назива се *почетна брзина* и обележава са \mathbf{v}_i . Након изласка из области интеракције кретање честице поново наликује на слободно праволинијско кретање и путања у бесконачности асимптотски прилази правој која се назива *излазна асимптота*. Брзину честице у лимесу $t \rightarrow +\infty$ називамо *коначна брзина* и обележавамо са \mathbf{v}_f . Угао између вектора почетне и коначне брзине честице се назива *угао расејања* [76]. Правац вектора почетне брзине честице се назива *лонгитудинални правац*.

На слици 3.1 је илустровано класично расејање честице масе m . Дефинисан је правоугли координатни систем такав да је z -оса паралелна са лонгитудиналним правцем кретања честице. Трансверзална раван у бесконачности $z \rightarrow -\infty$ се назива *раван ударног параметра*. *Ударни параметар* честице је вектор (b_x, b_y) , где су b_x и b_y трансверзалне координате пресека улазне асимптоте и равни ударног параметра. Правац вектора коначне брзине честице је једнозначно одређен сферним координатама (θ, Φ) које су дефинисане изразима:

$$\mathbf{v}_f = |\mathbf{v}_f|(\sin \theta \cos \Phi, \sin \theta \sin \Phi, \cos \theta); \quad \theta \in [0, \pi], \Phi \in [0, 2\pi). \quad (3.2)$$

Углови θ и Φ су углови расејања.



Слика 3.1. Нацрт класичног расејања честице. Област светло-плаве боје је област интеракције. Линијом црвене боје је представљена путања честице. Испрекиданим линијама црвене боје су представљене улазна и излазна асимптота. Вектори црне боје су почетна брзина \mathbf{v}_i и коначна брзина честице \mathbf{v}_f . Трансверзална раван сиве боје (b_x, b_y) представља раван ударног параметра. Вектор плаве боје је ударни параметар приказане трајекторије. v_f^x , v_f^y и v_f^z су Декартове координате вектора \mathbf{v}_f . Углови θ и Φ су сферне координате вектора \mathbf{v}_f .

Размотримо расејање снопа честица. Претпоставимо да се извор снопа налази на бесконачној удаљености од расејача. У том случају је део снопа који продира у област интеракције могуће апроксимирати паралелним и униформним снопом честица.

Путање честица различитих ударних параметара дефинишу пресликавање скупа ударних параметара (b_x, b_y) у скуп углова (θ, Φ) :

$$(b_x, b_y) \rightarrow (\theta, \Phi). \quad (3.3)$$

Пресликавање (3.3) није инјективно у општем случају. Стога је скуп ударних параметара, који се функцијом (3.3) пресликава у елемент просторног угла $\Delta\Omega$ у правцу (θ, Φ) , у општем случају дисјунктна унија подскупова $\Delta S_n(\theta, \Phi, \Delta\Omega)$ ($n = 1, 2, 3, \dots, N$), где је N мултиплцитет инверзног пресликавања пресликавању (3.3). Нека је j флуks униформног упадног снопа честица. Број честица које се у јединици времена расејавају у елемент просторног угла $\Delta\Omega$ у правцу који је одређен сферним координатама (θ, Φ) је дат изразом:

$$N(\theta, \Phi; \Delta\Omega) = j \cdot \sum_{n=1}^N |\Delta S_n(\theta, \Phi, \Delta\Omega)|, \quad (3.4)$$

где је $|\Delta S_n(\theta, \phi, \Delta\Omega)|$ површина подскупа $\Delta S_n(\theta, \phi, \Delta\Omega)$. У случају инфинитезимално малог просторног угла $d\Omega$ уведемо ознаке:

$$N(\theta, \phi, d\Omega) = dN(\theta, \phi), \quad (3.5)$$

$$|\Delta S_n(\theta, \phi, \Delta\Omega)| = |dS_n(\theta, \phi)|. \quad (3.6)$$

Величина $dN(\theta, \phi)/d\Omega$ представља број честица које се у јединици времена расејавају у правцу (θ, ϕ) и назива се излазни флуks. $|dS_n(\theta, \phi)|$ је површина инфинитезимално мале области $dS_n(\theta, \phi)$ која се функцијом (3.3) пресликава у тачку (θ, ϕ) . Однос излазног флуksа у правцу (θ, ϕ) и флуksа упадних честица назива се *диференцијални пресек* [77]. На основу израза (3.4), (3.5) и (3.6), диференцијални пресек је

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{dN(\theta, \phi)/d\Omega}{j} = \sum_{n=1}^N \frac{|dS_n(\theta, \phi)|}{|\sin \theta d\theta d\phi|}. \quad (3.7)$$

Детерминанта Јакобијеве матрице пресликавања (3.3) у тачки $(b_x^{(n)}, b_y^{(n)})$ чија је околина $dS_n(\theta, \phi)$ је:

$$\mathcal{J}_{(\theta, \phi)}(b_x^{(n)}, b_y^{(n)}) = \frac{|d\theta d\phi|}{|dS_n(\theta, \phi)|}. \quad (3.8)$$

Диференцијални пресек је стога:

$$\sigma(\theta, \phi) = \sum_{n=1}^N \left| \sin \theta \cdot \mathcal{J}_{(\theta, \phi)}(b_x^{(n)}, b_y^{(n)}) \right|^{-1}, \quad (3.9)$$

Уколико постоје честице за које је θ једнако 0 или π , диференцијални пресек $\sigma(\theta, \phi)$ дивергира као $(\sin \theta)^{-1}$. Ефекат се назива *исцјаванье* (glory) [76]. Уколико је за неко n испуњено:

$$\mathcal{J}_{(\theta, \phi)}(b_x^{(n)}, b_y^{(n)}) = 0, \quad (3.10)$$

диференцијални пресек дивергира у правцу (θ, ϕ) . Овај ефекат се назива *дугино расејање* или само ефекат дуге [76]. У овој дисертацији је подробно испитан утицај ове врсте сингуларитета диференцијалног пресека на облик угаоне расподеле протона трансмитованих кроз 2Д кристал. Ако ефекат дуге постоји, из услова (3.10) и теореме о инверзној функцији [78] се закључује да пресликавање (3.3) није инвертибилно. Дугино расејање је стога прикладно анализирати у равни ударног параметра.

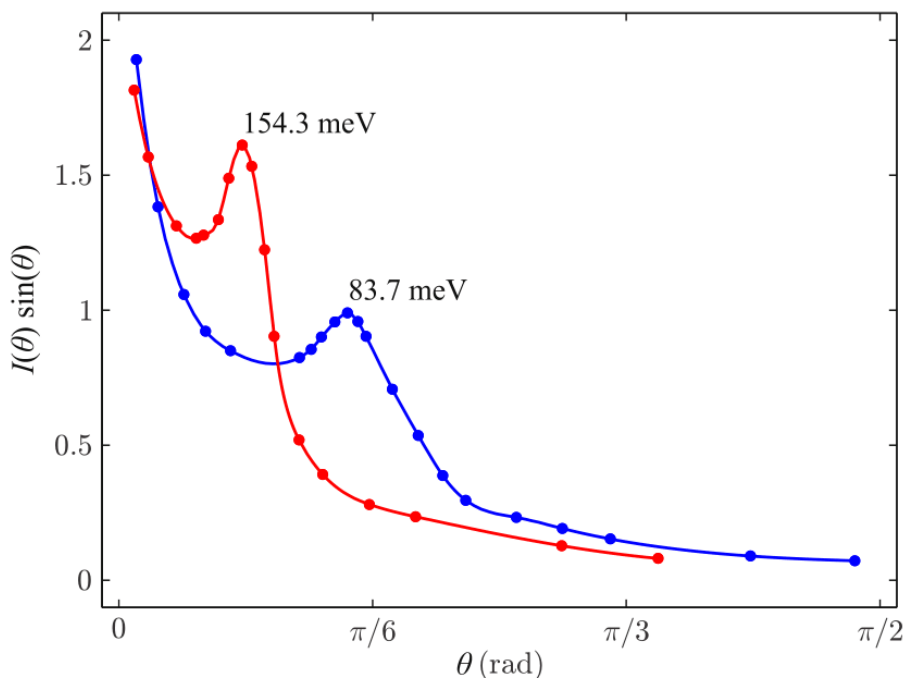
У експериментима се мери угаона расподела расејаних честица, тј. број честица расејаних под одговарајућим углом. Број честица је у реалним сноповима коначан. Стога су

и вредности угаоне расподеле коначне, али релативно веће у околини дугиног пика диференцијалног пресека. Поменимо да примена таласне теорије у случају расејања светлости на капи воде и примена квантне теорије у случају расејања честица показује да је вредност диференцијалног пресека у дугином пику велика али коначна [76]. Штaviше, применом таласне теорије је откривено постојање додатних, тзв. прекобројних пикова. У случају система који се разматра у овој дисертацији, квантне поправке су занемарљиве и примена таласне теорије није потребна.

3.2. Честичне дуге

Фирсов је открио да ефекат дуге постоји у расејању атома на атомима или молекулима [79]. Ефекат је познат као *атомска дуга*. Фирсов је анализирао класично расејање атома у потенцијалу са привлачном и одбојном интеракцијом. Показао је да зависност угла расејања од ударног параметра има екстремум, услед чега је диференцијални пресек бесконачан. Неколико година касније ефекат је уочио и Мејсон [80]. Форд и Вилер су први увидели везу између ефекта метеоролошке и атомске дуге [81,82]. Расејање атома и језгара су анализирали семи-класично у околини сингуларитета диференцијалног пресека. Ефекат атомске дуге је експериментално први опазио Бек у расејању снопа атома К на молекулима НВr, релативних енергија 83.7 meV и 154.3 meV [83]. Резултати експеримента су приказани на слици 3.2. Примећују се два максимума који одговарају дугиним сингуларитетима диференцијалног пресека.

У еластичном расејању језгара су експериментално опажена два ефекта дуге: *Кулонове* и *нуклеарне дуге*. Кулонове дуге су први увидели Форд и Вилер у расејању алфа честица кинетичке енергије 22 MeV на језгрима ^{107}Ag [81, 82]. Утврђено је квази-експоненцијално опадање $\sigma(\theta)$ за θ веће од угла који одговара Кулоновој дуги. Нуклеарне дуге су први измерили Голдберг и Смит у расејању алфа честица енергије 139 MeV на језгрима ^{58}Ni [84].



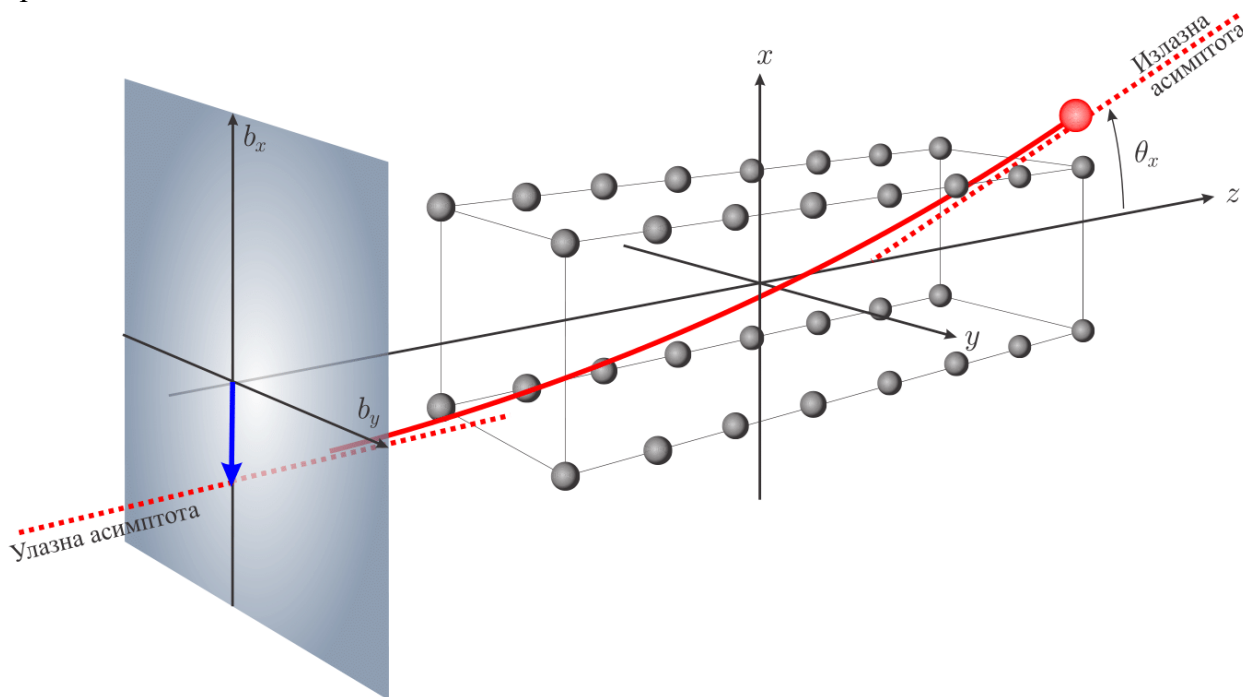
Слика 3.2. Експерименталне угаоне расподеле еластично расејаних К атома на молекулима НВr при релативним кинетичким енергијама 83.7 meV и 154.3 meV. (прилагођено на основу података из референце [83])

Ефекат дуге у расејању атома на површини кристала је први испитивао Оман симулацијом класичног еластичног расејања атома Не термалних кинетичких енергија на површини кристала Ag [85]. Ефекат је назван *површинска дуга*. Прво мерење ефекта је спроведено у случају расејању атома Ag на кристалу LiF [86]. Меклур је уочио повезаност измереног ефекта са ефектом метеоролошке дуге [87]. Аутори референце [88] су анализирали расејање атома Не и атома Не термалних енергија на површини кристала LiF и показали повезаност ефекта површинске дуге са ефектом дифракције на површини. Дуге су уочене у еластичном расејању атома eV-ских и keV-ских енергија и нееластичном расејању молекула на површини.

3.3. Ефекат кристалне дуге

Размотримо расејање јона на кристалу. Уколико је упадни правац јона паралелан са неким од главних кристалографских праваца, пројекције великог броја атома на трансверзалну раван су исте. Скуп атома који се пројектује у исту тачку на трансверзалној равни образује *атомски низ*. Простор између суседних кристалних равни се назива *равански канал*. У пресеку раванских канала се налазе *осни канали кристала*.

Претпоставимо да је упадни правац јона скоро паралелан са осом канала. Уколико је брзина јона довољно велика, јон се расејава под веома малим углом приликом продора кроз прву кристалну раван [89]. Уколико је расејање на атомима атомских низова корелисано, кретање јона је ограничено на унутрашњост канала кристала. Овакво “везано” кретање јона дуж канала кристала се назива *каналисање* [89]. На слици 3.3 је илустровано каналисање позитивно наелектрисане честице дуж осног канала веома танког кристала.



Слика 3.3. Илустрација трансмисије позитивног јона кроз осни канал веома танког кристала. Канал је одређен са четири низа атома. z -оса је паралелна са осом канала. Сфере црне боје представљају атоме кристала. Каналисана честица је представљена сфером црвене боје. Лينيјом црвене боје је представљена путања каналисане честице. Трансверзална раван сиве боје је раван ударног параметра. Вектор плаве боје је ударни параметар честице. Испрекидане линије црвене боје су улазна и излазна асимптота каналисане честице. θ_x је Декартов угао расејања у x правцу.

Домет каналисаних позитивних јона је већи од домета неканалисаних јона. Осно каналисани позитивни јони значајно време проводе у близини осе канала где је нуклеарна и електронска густина мала. У опсегу брзина у коме доминира електронски губитак енергије, осно каналисани позитивни јони изгубе duplo мање енергије од неканалисаних јона, чија је трајектора сачињена од насумичних судара са атомима кристала [89]. Де Брољева таласна дужина осно каналисаног јона енергије реда MeV-а је занемарљива у односу на удаљеност између суседних низова атома. У том случају су дифракциони ефекти занемарљиви и каналисање је могуће моделовати класичном механиком.

Теорија кристалне дуге

Нешковић је предвидео постојање ефекта дуге у каналисњу [90]. Ефекат је назван *кристална дуга*. Уследило је прво мерење ефекта кристалне дуге [91]. Размотримо трансмисију снопа позитивних јона кроз паралелне канале кристала. Дефинисан је правоугли координатни систем такав да се z -оса подударе са осом једног канала. За разлику од канала кристала, реални снопови имају макроскопске димензије. Упадне честице су каналисане дуж различитих канала кристала. Вероватноћа трансмисије два јона кроз исти канал кристала је веома мала. Стога је у прорачунима могуће занемарити интеракцију између упадних јона. Почетни положаји јона у односу на центре канала су насумични. Паралелни канали кристала су физички еквивалентни због translационе симетрије кристалне решетке. Стога је расејање снопа на паралелним каналима кристала могуће моделовати расејањем густог униформног снопа на једном каналу кристала.

Декартови углови расејања честице у односу на почетни правац кретања θ_x и θ_y су дефинисани следећим изразима:

$$\tan \theta_x = \frac{v_f^x}{v_f^z}, \quad \tan \theta_y = \frac{v_f^y}{v_f^z}. \quad (3.11)$$

(θ_x, θ_y) се назива *раван углова расејања*. Сферне координате вектора коначне брзине честице (θ, Φ) су дефинисане изразом (3.2). Веза између углова расејања (θ_x, θ_y) и углова (θ, Φ) је:

$$\tan^2 \theta = \tan^2 \theta_x + \tan^2 \theta_y, \quad \tan \Phi = \frac{\tan \theta_y}{\tan \theta_x}, \quad (3.12)$$

Путање јона са различитим ударним параметрима дефинишу пресликавање скупа ударних параметара (b_x, b_y) у скуп углова расејања (θ_x, θ_y) :

$$f_{(\theta, \Phi)}: (b_x, b_y) \rightarrow (\theta_x, \theta_y). \quad (3.13)$$

Пресликавање (3.13) се назива *закон расејања*. Упадни углови јона θ и Φ су параметри пресликавања (3.13). Сходно изразу (3.9), диференцијални пресек је сингуларан ако постоји тачка (b_x, b_y) у којој је испуњен услов:

$$\sin \theta \cdot J_{(\theta, \Phi)}(b_x, b_y) = 0. \quad (3.14)$$

Услов (3.14) је могуће расписати на следећи начин:

$$\sin \theta \cdot J_{(\theta, \Phi)}(\theta_x, \theta_y) \cdot J_{(\theta_x, \theta_y)}(b_x, b_y) = 0, \quad (3.15)$$

где су $J_{(\theta, \Phi)}(\theta_x, \theta_y)$ и $J_{(\theta_x, \theta_y)}(b_x, b_y)$ детерминанте Јакобијевих матрица пресликавања $(\theta_x, \theta_y) \rightarrow (\theta, \Phi)$ и пресликавања (3.13). Употребом релација (3.12), израз (3.15) постаје:

$$\frac{\cos \theta_x \cos \theta_y}{(1 - \sin^2 \theta_x \sin^2 \theta_y)^{3/2}} \cdot J_{(\theta_x, \theta_y)}(b_x, b_y) = 0, \quad (3.16)$$

Углови (θ_x, θ_y) су у случају трансмисије осно каналисане честице мали и испуњавају следеће услове:

$$-\pi/2 < \theta_x < \pi/2, \quad -\pi/2 < \theta_y < \pi/2. \quad (3.17)$$

Из тог разлога је диференцијални пресек бесконачан искључиво у тачкама (b_x, b_y) у којима је Јакобијева матрица пресликавања (3.13) сингуларна:

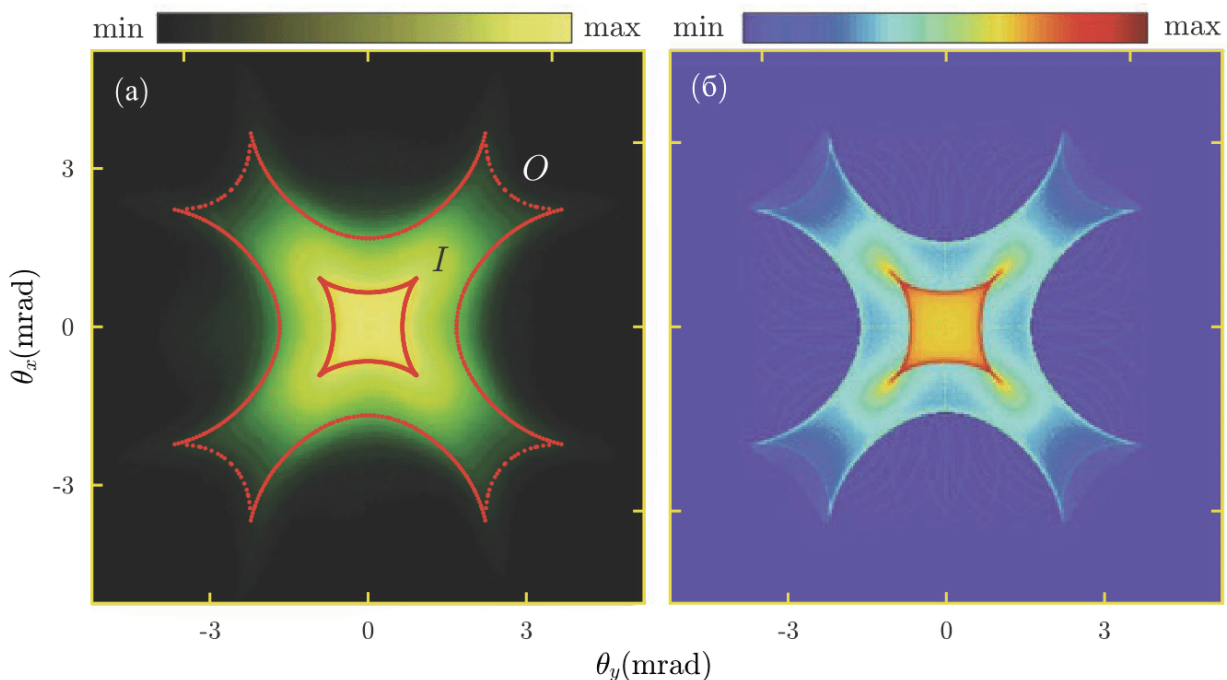
$$J_{(\theta_x, \theta_y)}(b_x, b_y) = 0. \quad (3.18)$$

Решења једначине (3.18) су криве у равни ударног параметра и називају се *линије дуге у равни ударног параметра*. Ове криве нису доступне експерименталном опажању. Ликови ових линија су криве у равни углова расејања дуж којих је диференцијални пресек бесконачан. Ове линије се могу експериментално одредити и називају се *линије дуге у равни углова расејања* или само *угаоне линије дуге*. Према теорему о инверзној функцији [78], у довољно малој околини тачке (b_x, b_y) у којој је испуњен услов (3.18) пресликавање (3.13) није инвертибилно. То значи да у околини тачке (b_x, b_y) у којој је испуњен услов (3.18) постоји више различитих преликова истог вектора (θ_x, θ_y) . Угаоне линије дуге су границе између области различитог мултиплицитета пресликавања $(\theta_x, \theta_y) \rightarrow (b_x, b_y)$. Области вишег и нижег мултиплицитета се називају *светла* и *тамна страна дуге*, респективно. У експериментима се мери угаона расподела расејаних честица. Угаона расподела $Y(\theta_x, \theta_y)$ представља број расејаних честица у елемент $\Delta\theta_x \Delta\theta_y$ са средиштем у тачки (θ_x, θ_y) . Као сингуларитети диференцијалног пресека угаоне линије дуге снажно утичу на облик угаоне расподеле трансмитованих честица. У реалним сноповима је број честица коначан. Стога је и дуж угаоних линија дуге вредност угаоне расподеле коначна и велика. Дугини максимуми угаоне расподеле су асиметрични због скоковите промене мултиплицитета пресликавања $(\theta_x, \theta_y) \rightarrow (b_x, b_y)$.

3.4. Примена ефекта кристалне дуге

Ефекат кристалне дуге је употребљен за конструкцију тачнијег модела потенцијала интеракције јона и атома. Аутори референце [92] су измерили угаоне расподеле високе резолуције протона трансмитованих кроз канале кристала силицијума дебљине 55 nm. У прорачунима је потенцијал интеракције протона и кристала моделован збиром потенцијала интеракције протона и атома силицијума. Урачунате су и термалне вибрације атома кристала. Показало се да најчешће коришћени модели потенцијала интеракције Зиглер-Бирзак-Литмарка (ЗБЛ) [93, 94] и Молијера [95] не могу са довољном тачношћу репродуковати измерену угаону расподелу. Док ЗБЛ модел ваљано репродукује линије дуге и угаону расподелу протона који се расејавају у близини низова атома, Молијеров потенцијал тачније моделује расејање протона даље од атомских низова [96, 92]. Аутори референце [92] су модификовали Молијеров потенцијал интеракције протона и атома силицијума тако да израчунати облик дугиног обрасца ближе оцртава облик измерене угаоне расподеле. На тај начин је конструисан тачнији модел потенцијала интеракције, како у околини атомских низова, тако и у близини осе канала. Модел је назван *дугин потенцијал*.

На слици 3.4 су приказани резултати експеримента и симулације трансмисије протона енергије 2.0 MeV кроз осне канале силицијума. На слици 3.4(a) је приказана измерена угаона расподела са израчунатим линијама дуге. Дугин образац чине крива облика астроиде *I* и крива *O*. Дуга *I* је образована протонима који се расејавају у близини осе канала. Дуга *O* је образована протонима који се расејавају у близини атомских низова. Лако је уочити да линије дуге одређују облик угаоне расподеле. Унутрашњости линија *I* и *O* су светле стране дуге, док су спољашњости тамне стране дуге. На слици 3.4(б) је приказана израчуната угаона расподела. Иако су дефекти кристалне решетке и судари протона са електронима кристала занемарени, утврђено је одлично слагање теоријске и измерене угаоне расподеле.



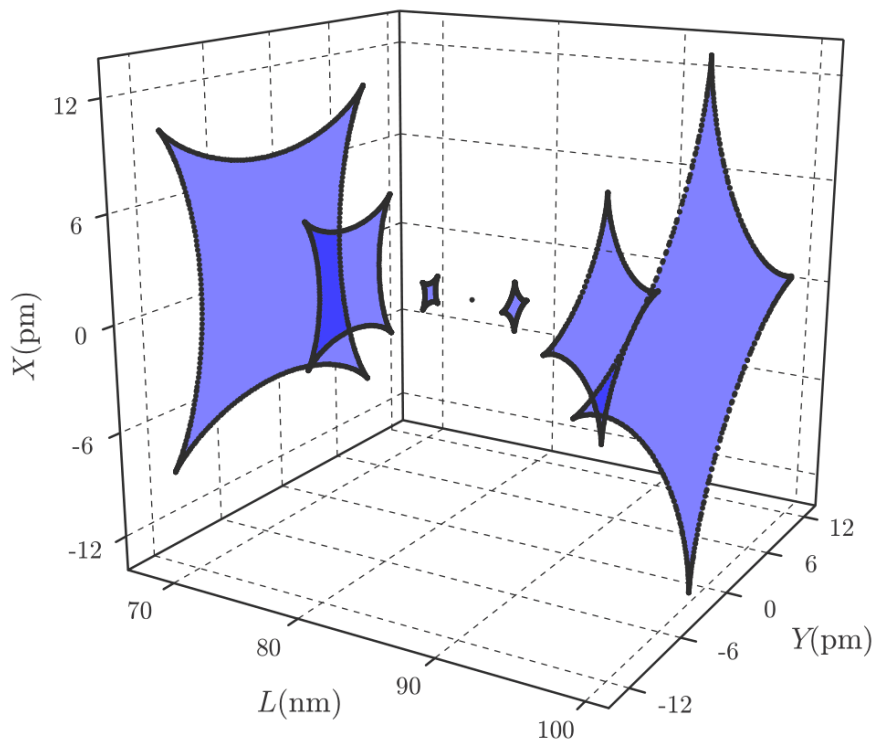
Слика 3.4. (а) Измерена угаона расподела протона енергије 2.0 MeV трансмитованих кроз канал кристала силицијума дебљине 55 nm. Криве црвене боје *I* и *O* су линије дуге израчунате применом дугиног потенцијала интеракције. (б) Теоријска расподела израчуната коришћењем дугиног потенцијала интеракције. (Прилагођено на основу података из референце [92])

У референцама [97-99] су изучени периодични преображаји угаоне расподеле каналисаних јона у зависности од дебљине кристала, наелектрисања, масе и брзине јона. Уколико су вредности ових величина одговарајуће, значајан део снопа је фокусиран у околини координатног почетка трансверзалне равни. Ефекат је познат као *просторно фокусирање*. Утврђено је да постоје вредности параметара такве да се велики део каналисаних јона расејава паралелно са осом канала. Тада је снап фокусиран у околини координатног почетка скупа углова расејања и ефекат се назива *фокусирање под нултим углом*. Утврђено је да ефекат угаоног фокусирања опада експоненцијално са повећањем дебљине кристала [98-100]. Демков и Мајер су изучавали просторно фокусирање јона у хармонијској апроксимацији потенцијала интеракције усредњеног у лонгитудиналном правцу [101]. Израчуната област фокусирања има ширину мању од 0.01 nm и протеже се на више од десет слојева кристала. Стога је ефекат назван *суперфокусирање* каналисаних јона. Изучено је суперфокусирање протона енергије 2.0 MeV кроз кристал силицијума применом теорије дугиног расејања [102]. На одговарајућим пресецима канала су израчунате просторне расподеле протона, односно број протона чије трансверзалне координате припадају елементу површине $\Delta x \Delta y$ са средиштем у тачки (x, y) . Утврђено је да са променом дебљине кристала просторна расподела у околини координатног почетка осцилује.

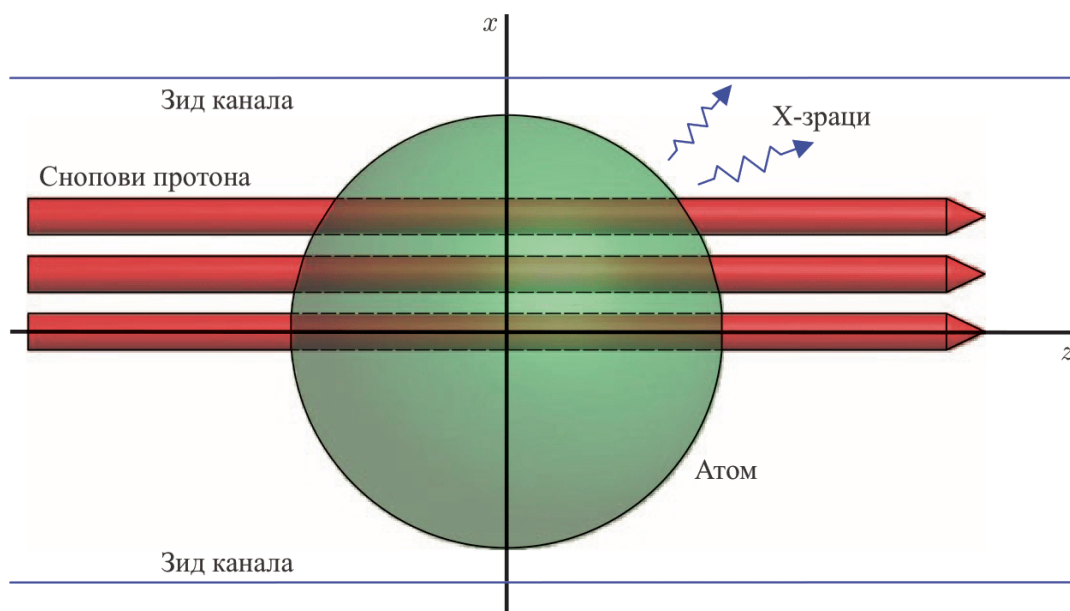
Велика вредност и осцилације просторне расподеле у околини координатног почетка су објашњени теоријом дугиног расејања. Израчунати су сингуларитети пресликавања:

$$(b_x, b_y) \rightarrow (x, y), \quad (3.19)$$

где су x и y трансверзалне координате протона. Ликови ових сингуларитета у равни (x, y) се називају *просторне линије дуге*. На слици 3.5 је приказана промена просторне линије дуге са променом дебљине кристала.



Слика 3.5. Еволуција линије дуге у трансверзалној равни у околини тачке суперокусирања протона енергије 2.0 MeV кроз канал силицијума. Светле стране дуга су представљене површима плаве боје. (Прилагођено на основу података из референце [102])



Слика 3.6. Скица интеракције снопова протона различитих упадних праваца са електронима унутрашњих љуски атома од интереса, који се налази у каналу кристала у тачки суперфокусирања. Производ интеракције је емисија X-зрачења. (Прилагођено на основу података из референце [103])

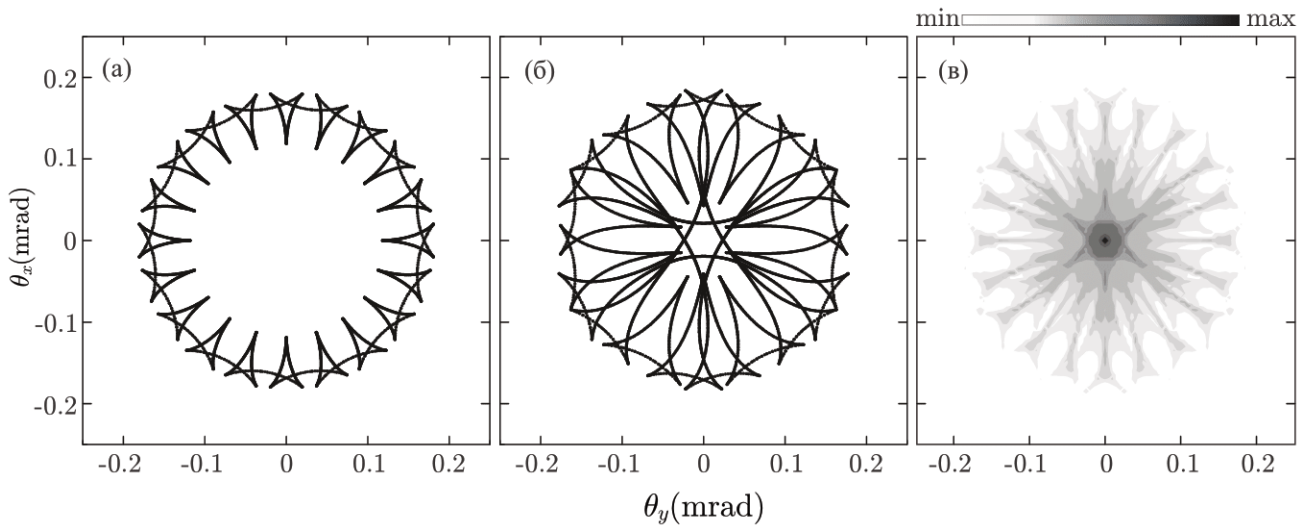
Унутрашњости линија дуге су светле стране дуге и представљене су површима плаве боје. Сноп је сажимањем линије дуге фокусиран у веома малу околину координатног почетка трансверзалне равни. Суперфокусирање је на тај начин објашњено као ефекат сажимања просторне линије дуге у тачку [102]. Процењена полуширина снопа протона у тачки суперфокусирања је 11 пута мања од Боровог радијуса. Израчуната област суперфокусирања се протеже на 32 слоја атома. Утврђено је да се променом угла нагиба упадног снопа максимум просторне расподеле креће у трансверзалној равни [103].

На слици 3.6 је илустрована трансмисија снопа протона кроз канал у којем се налази атом сумпора. Променом угла нагиба упадног снопа би се могло спровести селективно побуђивање атомских љуски атома од интереса и спровести анализа материјала са пикометарском резолуцијом [103].

Једнослојни или вишеслојни графен савијен у цилиндар се назива угљенична наноцев [104]. Дужина наноцеви може износити и неколико десетина микрометара док им је пречник реда величине нанометра [105]. У референци [106] је теоријски показано да ефекат дуге постоји у трансмисији протона енергије 1 GeV кроз сноп правих једнозидних угљеничних наноцеви хиралних индекса (10,10), дужине 1 μm . Узорак се састоји од кружних канала које чине унутрашњости наноцеви и троугаоних канала које чине простор између наноцеви. У овом случају дугин образац је сачињен од два дела. Део приказан на слици 3.7(а) образују протони каналисани кроз кружне канале. Други део обрасца, приказан на слици 3.7(б), чине протони који су каналисани кроз троугаоне канале. На слици 3.7(в) је приказана израчуната угаона расподела протона расејаних на снопу наноцеви.

Слика 3.7(в) показује да су максимуми угаоне расподеле, изузев максимума у координатном почетку, последица дугиног расејања протона. У референци [107] је показано да се анализом угаоних расподела трансмитованих протона може одредити пречник и дужина наноцеви.

Реалне наноцеви садрже дефекте. Дефекти наноцеви утичу на механичка, електрична, магнетна и хибридна својства наноцеви. Тополошки дефекти наноцеви омогућавају спајање наноцеви металног и полупроводног типа [104]. Штавише, дефекти су кључни за функционализацију наноцеви [108].



Слика 3.7. Дугин образац и угаона расподела протона енергија 1 GeV расејаних на снопу једнозидних угљеничних наноцеви (10,10) дужине 1 μm . (а) угаоне линије дуге образоване протонима каналисаним кроз кружне канале. (б) угаоне линије дуге образоване протонима каналисаним кроз троугаоне канале. (в) угаона расподела каналисаних протона. (Прилагођено на основу података из референце [106])

Анализирано је дугино расејање протона енергије 1 GeV каналисаних кроз једнозидне угљеничне наноцеви типа “наслоњаче” (armchair) са поравнатим Стоун-Вејлсовим дефектима [109]. Аутори су спровели подробну морфолошку анализу дугиног обрасца и угаоних расподела трансмитованих протона. Утврђено је да симетрија дугиног обрасца зависи од оријентације Стоун-Вејлсових дефеката. Аутори су закључили да се анализом дугиног обрасца може одредити оријентација и линеарна густина Стоун-Вејлсових дефеката.

Ефекат кристалне дуге јавља и при каналисању квантних честица кроз угљеничне наноцеви [110]. Са повећањем Де Бројеве таласне дужине каналисане честице сингуларни дугини максимуми прелазе у коначне максимуме праћене скупом мањих максимума названих квантним прекобројним дугама. Показано је да је распоред квантних прекобројних дуга знатно осетљивији на малу промену пречника наноцеви него одговарајући индуковани померај класичне дуге [111].

Глава 4

Дугино расејање протона на графену

На основу резултата представљених у претходној глави се може закључити да је дугино расејање кључно за разумевање облика расподеле јона трансмитованих кроз веома танке кристале и угљеничне наноцеви. Смислено је поставити питање да ли ефекат дуге постоји и приликом трансмисије протона кроз дводимензионалне кристале. Резултати представљени у овој глави сведоче да је одговор на ово питање потврдан. У првом поглављу је размотрена динамика расејања протона енергије 5 keV на графену и описана експериментална поставка која би могла послужити за анализу графена и сродних 2Д кристала. У другом поглављу су представљени резултати изучавања термалних флукуација графена. У трећем поглављу су приказани резултати прорачуна угаоних расподела протона трансмитованих кроз графен и одговарајући дугини обрасци.

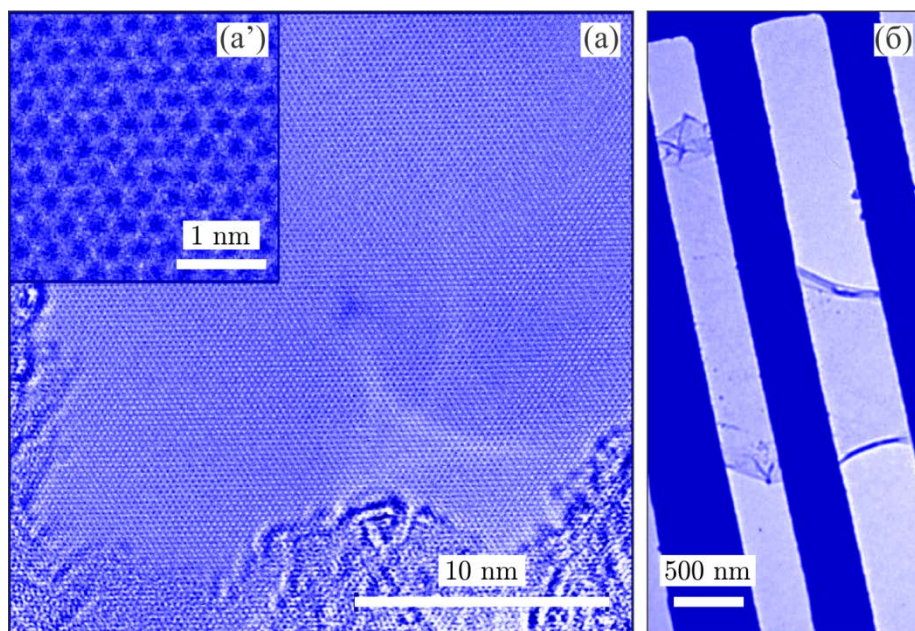
4.1. Расејање протона на графену

Размотримо трансмисију снопа протона енергије 5 keV кроз савршен једнослојни графен. Удаљеност суседних атома угљеника у графену је 0.144 nm. Де Брољева таласна дужина протона енергије 5 keV износи $4.0476 \cdot 10^{-4}$ nm. Како је таласна дужина протона мала у односу на растојање између суседних атома угљеника у графену, дифракциони ефекти се могу занемарити. То значи да је оправдана примена теорије дугиног расејања класичне честице која је представљена у претходном поглављу.

Током трансмисије протон губи енергију услед судара са језгрима и електронима атома. Губитак енергије протона ове енергије је понајвише последица интеракције протона са електронима кристала [112]. Према ЗБЛ теорији губитка енергије, графен површинске густине $3.82 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ приликом трансмисије протона енергије 5 keV апсорбује енергију од 22.96 eV. Дакле свега 0.46% почетне енергије протона [113]. Стога се губици енергије могу занемарити. На кретање језгара атома угљеника се пренесе 0.63 eV, што је недовољно за образовање дефеката [114]. Вероватноћа да протон енергије 5 keV захвати електрон је приближно 40% [112, 115]. У теоријским прорачунима је ради једноставности анализирано искључиво расејање неутрализованог дела снопа.

4.1.1. Експериментална поставка

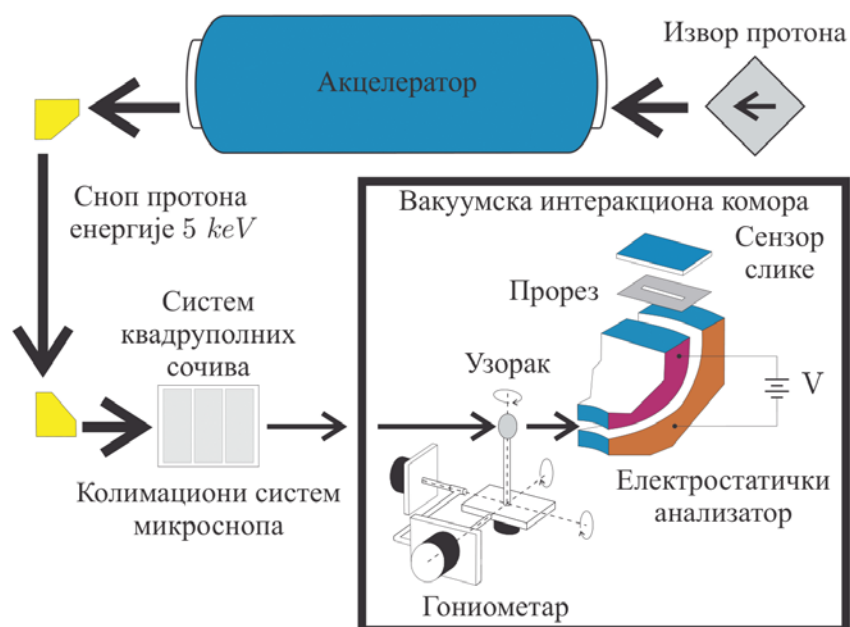
Претпоставимо да су узорци графена припремљени на сличан начин као у референцама [25,115]. У првом приступу слој графена је добијен епитаксијалним растом на одговарајућем супстрату. Супстрат је потом уклоњен и чист слој графена пренет на мрежу трансмисионог електронског микроскопа, која служи као механичка потпора. Трансмисија протона је могућа искључиво кроз отворе на ТЕМ мрежи. Ако су отвори на ТЕМ мрежи довољно велики, слој графена који прекрива отворе се може сматрати слободним и бесконачним [115]. На слици 4.1(а) је дат ТЕМ приказ овако излованог узорка графена. На увеличаном приказу једнослојног графена на слици (а') се јасно види саћаста структура кристалне решетке графена. У другом приступу је епитаксијално нарасли



Слика 4.1 (а) ТЕМ приказ једнослојног графена. (а') Увеличан приказ једнослојног графена. (б) ТЕМ приказ нанотрака графена. Једнослојне нанотраке су обележене стрелицама. (Прилагођено на основу података из референци [25, 115]).

графен прекривен металном решетком са веома малим размаком између суседних преграда. Супстрат је потом уклоњен чиме је добијен низ нанотрака графена ослоњених на металној решетки [115]. На слици 4.1(б) је дат приказ нанотрака графена.

На слици 4.2 је дат нацрт експерименталне поставке коју су аутори референце [113] предложили за мерење угаоне расподеле протона трансмитованих кроз графен. Поставка се грубо може поделити на четири јединице: извор протона, акцелератор, систем за колимацију и интеракциона комора. Протони се убрзавају до енергије од 5 keV помоћу акцелератора. Колимациони систем производи узак и паралелан сноп протона довољно високе струје. Унутар коморе су смештени носач узорка, гониометар и електростатички анализатор [115-117]. Гониометар омогућава окретање узорка.



Слика 4.2 Нацрт експерименталне поставке. (Прилагођено на основу података из референце [118])

Мерење захтева веома висок вакуум (реда 10^{-13} mbar) и што чистији узорак [115,116]. Како би се детектовали искључиво ненеутрализовани протони, неопходно је детектор опремити електростатичким анализатором [25]. Електростатички анализатор чине тороидалне електроде. Електроде спроводе до детектора искључиво честице одговарајуће енергије и наелектрисања. Оствариве резолуције по углу и енергији могу достићи 1 mrad и 0.15%, респективно [117, 119-121].

4.1.2. Потенцијал интеракције протона и атома угљеника

Како би се конструисао потенцијал интеракције протона и графена неопходно је моделовати потенцијал интеракције протона и атома угљеника. Најчешћи избор су Молијеров [95]. Дојл-Тарнеров [122] и Зиглер-Бирзак-Литмарков (ЗБЛ) модел [93]. Молијеров потенцијал је аналитичка апроксимација Томас-Фермијевог модела атома, где су електрони моделовани слободним гасом честица. Модел занемарује постојање електронских љуски унутар атома. Полазиште ЗБЛ модела су сферно-симетричне расподеле наелектрисања атома добијене Хартри-Фоковом методом. Реч је о апроксимацији једноставног аналитичког облика, где функција екранирања зависи од редног броја атома. ЗБЛ теоријом је моделован губитак енергије упадног јона. Дојл-Тарнеров модел потенцијала интеракције је аналитичка апроксимација потенцијала изведеног на основу релативистичког Хартри-Фоковог модела атома [123,124]. Модел занемарује магнетну интеракцију између електрона и коначну величину језгра. Сва три модела занемарују електростатичку поларизацију гаса електрона.

Молијеров модел је због статистичке основе најприкладнији за моделовање интеракције протона и атома са већим бројем електрона. ЗБЛ модел је прикладан за израчунавање домета јона и губитка енергије. Дојл-Тарнеров модел је још једна довољно тачна апроксимација потенцијала интеракције протона енергије реда keV и атома угљеника [125]. Штавише, Дојл-Тарнеров модел је нарочито прикладан за аналитичка израчунавања. Стога је у овој глави потенцијал интеракције протона и графена конструисан помоћу Дојл-Тарнеровог модела. Утицај различитих модела потенцијала интеракције на угаоне расподеле трансмитованих протона је подробно испитан у поглављу 7.2.2.

Дојл-Тарнеров модел потенцијала интеракције протона и атома угљеника је дат следећим изразом:

$$V^{DT}(\mathbf{r}) = 16\pi^{5/2}Z_1 \frac{\hbar^2}{m_e} \sum_{n=1}^4 \frac{\alpha_n^{DT}}{(\beta_n^{DT})^{3/2}} \exp\left(-4\pi^2 \frac{r^2}{\beta_n^{DT}}\right), \quad (4.1)$$

где је \mathbf{r} вектор узајамног положаја протона и атома угљеника, $r = |\mathbf{r}|$ интензитет истог вектора, Дојл-Тарнерови параметри α_n^{DT} и β_n^{DT} су компоненте следећих вектора: $\boldsymbol{\alpha}^{DT} = (0.07307, 0.1951, 0.04563, 0.01247)$ nm и $\boldsymbol{\beta}^{DT} = (0.369951, 0.112966, 0.028139, 0.003456)$ nm², \hbar је редукована Планкова константа, m_e је маса електрона, док је $Z_1 = 1$ (редни број протона).

4.1.3. Потенцијал интеракције протона и графена

Мотив кристалне решетке графена чине два атома угљеника на узајамној удаљености од 0.144 nm. Дефинисан је правоугли координатни систем као на слици 4.3. Нека је удаљеност између суседних атома у графену l . Примитивни вектори решетке графена су дати изразима:

$$\mathbf{a}_1 = (l\sqrt{3}/2, 3l/2, 0), \quad \mathbf{a}_2 = (-l\sqrt{3}/2, 3l/2, 0). \quad (4.2)$$

Вектори положаја атома мотива у односу на средиште елементарне ћелије су:

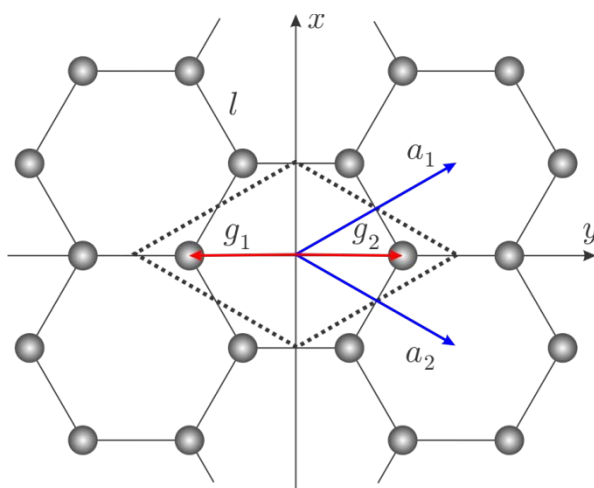
$$\mathbf{g}_1 = (0, -l/2, 0), \quad \mathbf{g}_2 = (0, l/2, 0) \quad (4.3)$$

Време интеракције графена и протона кинетичке енергије 5 keV је занемарљиво у односу на период осцилације положаја атома угљеника. Стога се протон ефективно расејава на непомичној решетки у којој су атоми угљеника отклоњени из равнотежних положаја услед термалних флукуација графена.

Термалне флукуације графена се могу урачунати на више начина. Потенцијал интеракције протона и графена је могуће моделовати статистички отежињеном сумом потенцијала интеракције протона и графена са насумичном конфигурацијом атома, при чему сваки атом у принципу има другачију расподелу отклона. Овако конструисан потенцијал интеракције не поседује нужно транслациону симетрију графена. Могуће је урачунати термалне вибрације атома и при томе очувати транслациону симетрију графена. Приликом трансмисије, протон сусреће атоме који су у средњем отклоњени од равнотежног положаја за вектор \mathbf{r}' :

$$\mathbf{r}' = \frac{1}{N}(\mathbf{r}_1 + \dots + \mathbf{r}_N), \quad (4.4)$$

при чему је N број атома у графену, док је \mathbf{r}_n вектор отклона n -тог атома ($n = 1, 2, \dots, N$). Дефинишимо појам “усредњеног атома”, чији је отклон из равнотежног положаја дат случајним одабирком из расподеле уведене промењиве \mathbf{r}' . Према централној граничној теореми [126], ако је



Слика 4.3 Сферама сиве боје су представљени атоми угљеника у графену. Испрекидана линија црне боје је обод елементарне ћелије графена. Векторима плаве боје су обележени примитивни вектори решетке \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , док су векторима црвене боје приказани вектори мотива \mathbf{g}_1 и \mathbf{g}_2 . Са l је обележена удаљеност два суседна атома угљеника.

број атома довољно велик, расподела отклона “усредњеног атома” \mathbf{r}' дата је следећом мултиваријантном нормалном расподелом [127]:

$$P_{th}(\mathbf{r}') = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 |\det \boldsymbol{\Sigma}|}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{r}'^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{r}'\right), \quad (4.5)$$

где је матрица $\boldsymbol{\Sigma}$ математичка очекивана вредност матрице $\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}'^T$, односно коваријанса отклона атома. Нека је $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ потенцијал интеракције протона који се налази у тачки \mathbf{r} и атома угљеника који се налази у тачки \mathbf{r}' . Потенцијал интеракције протона и “усредњеног атома” је:

$$V_{th}^{DT}(\mathbf{r}) = \int d^3 \mathbf{r}' V^{DT}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') P_{th}(\mathbf{r}'). \quad (4.6)$$

Потенцијал интеракције протона и графена у тачки \mathbf{r} је дат збиром потенцијала интеракције протона и усредњених атома:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} \sum_{n_2 \in \mathbb{Z}} \sum_{k=1}^2 V_{th}^{DT}(|\mathbf{r} - \mathbf{g}_k - n_1 \mathbf{a}_1 - n_2 \mathbf{a}_2|), \quad (4.7)$$

где су n_1 и n_2 цели бројеви, док је $k \in \{1,2\}$.

4.2. Термалне флукуације графена

У овом одељку су приказани резултати прорачуна матрице коваријансе $\boldsymbol{\Sigma}$ [118]. Варијансу отклона атома услед термалних флукуација је најједноставније израчунати применом Дебајевог модела [128,89]. Показало се да је овај приступ прикладан за моделовање изотропних и некорелисаних термалних вибрација атома кубних кристала [89,129] или угљеничних наноцеви [125]. Израз (4.5) се у случају изотропних термалних вибрација атома своди на:

$$P_{th}(\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\sigma_{th}^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}'|^2}{2\sigma_{th}^2}\right), \quad (4.8)$$

где је σ_{th} стандардна девијација отклона атома. Квадрат стандардне девијације је према Дебајевом моделу:

$$\sigma_{th}^2 = \frac{\hbar}{(M_c m_u k_B \Theta_D / 3)^{1/2}} \left(\frac{\mathcal{D}_f(\Theta_D/T)}{\Theta_D/T} + \frac{1}{4} \right), \quad (4.9)$$

где је $M_c = 12.0107$ маса атома угљеника, $m_u = 1.6605 \cdot 10^{-27}$ kg универзална јединица атомске масе, θ_D је Дебајева температура, $k_B = 1.3806 \cdot 10^{-23}$ J/K је Штефан-Болцманова константа, T је температура графена, док је са \mathcal{D}_f означена Дебајева функција. Примера ради, у случају дијаманта на собној температури је Дебајева температура $\theta_D = 2000$ K [117] и одговарајућа варијанса σ_{th} износи 17.3663 pm².

Термалне вибрације атома дводимензионалних кристала нису изотропне јер су отклони атома у правцу нормале на раван кристала знатно већи од отклона у равни [26,27]. Стога смо развили реалистичнији модел термалних вибрација атома у графену [118]. Отклони атома су рачунати помоћу LAMMPS-а, симулатора класичне молекулске динамике [130]. Величина рачунске суперћелије је $N_1 \mathbf{a}_1 \times N_2 \mathbf{a}_2 \times c \mathbf{e}_z$, где су N_1 , N_2 бројеви елементарних ћелија садржаних у правцима примитивних вектора и c величина суперћелије дуж \mathbf{e}_z правца. Ограниченост суперћелије у \mathbf{e}_z правцу има незанемарљив утицај на динамику решетке. Кључно је одабрати довољно велику вредност параметра c . У спроведеним прорачунима је одабрано $c = 4$ nm. Сила између атома је израчуната на основу AIREBO модела потенцијала са параметрима преузетим из референце [131]. Сви прорачуни су спроведени у оквиру канонског ансамбла са одржаним бројем честица, запремином и температуром. Временски корак коришћених прорачуна износи 1 fs.

Матрица коваријансе отклона n -тог атома из равнотежног положаја зависи од времена и у тренутку t је дата изразом:

$$\boldsymbol{\Sigma}_n(t) = \frac{1}{\tau} \int_{t-\tau/2}^{t+\tau/2} dt' \begin{bmatrix} x_n^2(t') & x_n(t')y_n(t') & x_n(t')z_n(t') \\ y_n(t')x_n(t') & y_n^2(t') & y_n(t')z_n(t') \\ z_n(t')x_n(t') & z_n(t')y_n(t') & z_n^2(t') \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

Након одређеног времена наступа устаљен начин кретања. Коваријанса n -тог атома у устаљеном режиму кретања одговара граничној вредности $\boldsymbol{\Sigma}_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \boldsymbol{\Sigma}_n(t)$. Матрица коваријансе графена се налази усредњавањем по свим атомима и дата је следећим изразом:

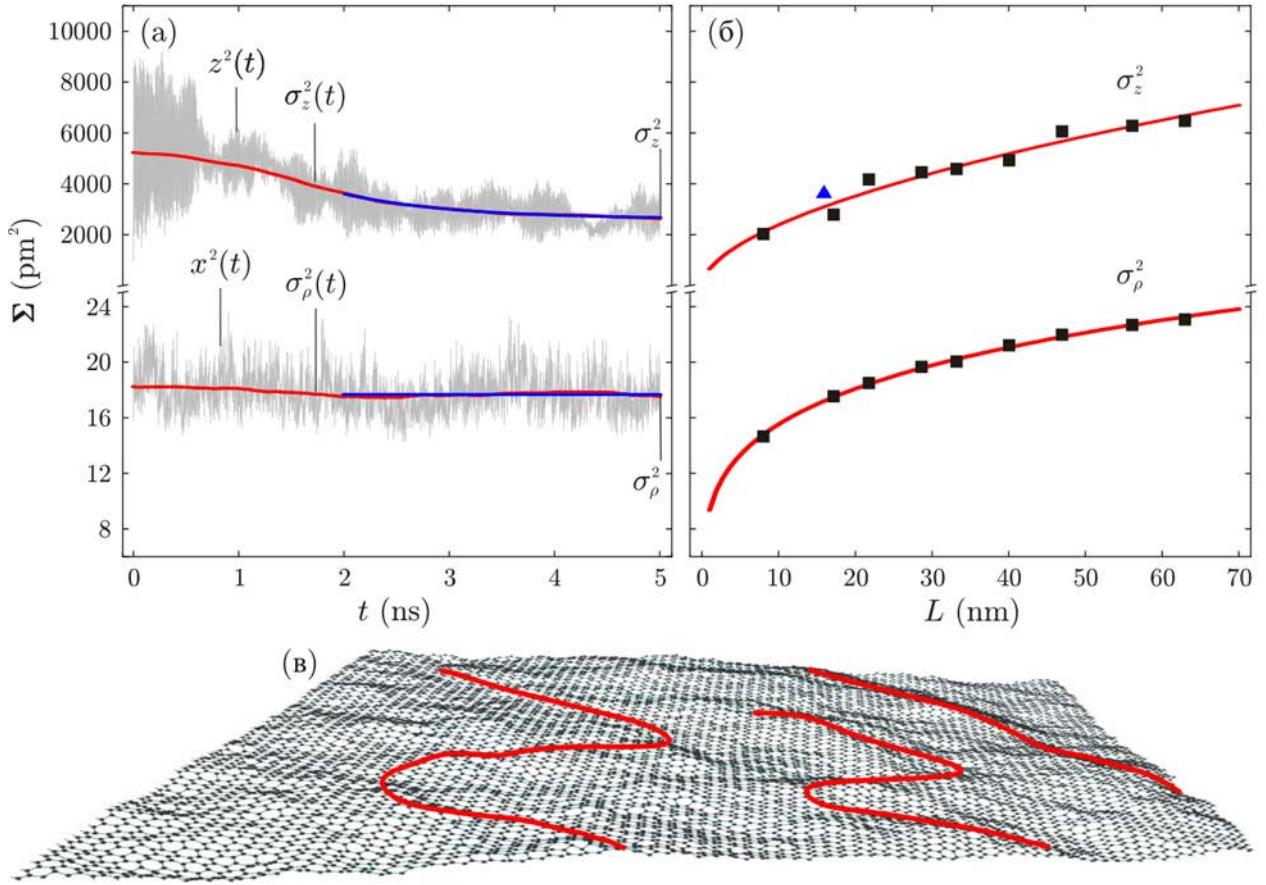
$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \boldsymbol{\Sigma}_n, \quad (4.11)$$

где је N број атома. Како свака елементарна ћелија графена садржи два атома угљеника важи $N = 2N_1N_2$.

Неограничен графен

У овом одељку су приказани резултати прорачуна матрице коваријансе у случају једнослојног графена који прекрива бесконачну раван. Периодични гранични услови су примењени на кретање атома у равни, а у ортогоналном правцу фиксирани гранични услови.

На слици 4.4 су приказани резултати прорачуна у случају суперћелије која садржи 11250 атома (тј. 75x75 елементарних ћелија) на температури $T = 300$ K. Линијама сиве боје су на слици 4.4(a) приказани усредњени квадрати отклона у x и z правцу респективно. Зависност усредњеног квадрата отклона у y правцу није приказана због изузетно велике подударности са зависношћу усредњеног квадрата отклона у x правцу. Слика 4.4(a) показује да прелазни режим кретања траје око 2 ns.



Слика 4.4 (а) Зависност средњег квадрата отклона атома (сиве линије) и елемената матрице коваријансе (црвене линије) од времена t у случају графена на температури $T = 300$ К. Плавим линијама су приказани фитови временске зависности матрице коваријансе током устаљеног кретања графена. (б) Квадратима црне боје су обележене вредности елемената матрице коваријансе у случају рачунских суперћелија различитих величина исказаних параметром L . Фитови степеном функцијом L^ζ су приказани црвеним линијама. Троугао плаве боје представља резултат нумеричких прорачуна из референце [27]. (в) Стање графена у тренутку $t = 2.9$ ns. Израженији набори су обележени црвеним линијама.

Линијама црвене боје су на слици 4.4(a) приказане зависности од времена xx и zz компонента матрице $\Sigma(t)$, односно вредности варијанса отклона у x и z правцу, $\sigma_x^2(t)$ и $\sigma_z^2(t)$ респективно. Утврђено је да прикладна ширина интервала τ износи 2 ns. Бројне вредности недијагоналних компоненти матрице коваријансе $\Sigma(t)$ су веома мале и неправилно осцилују у околини нуле. Максимална вредност девијације xz и yz компоненте је приближно 0.8 pm^2 .

Приликом одређивања граничне вредности елемената матрице коваријансе $\Sigma(t)$ у бесконачности су занемарене прве две наносекунде прелазног режима кретања. Остатак зависности од времена је фитован функцијом $A + B \exp(-Ct)$. Гранична вредност овог фита у бесконачности је једнака A . Одређени фитови за xx и zz елементе матрице коваријансе су на слици 4.4(a) приказани линијама плаве боје. Вредности израчунатих матричних елемената су дате у Табели 4.1. Утврђено је да су бројне вредности вандијагоналних елемената матрице Σ преко 80 пута мање од дијагоналних матричних елемената. Стога су у наставку анализе вандијагонални елементи коваријансе Σ занемарени. Разлика $\sigma_y^2 - \sigma_x^2$ је два пута мања од занемарене вредности елемента σ_{xy} . Стога се и ова разлика може занемарити. Дефинисана је величина $\sigma_\rho^2 = (\sigma_x^2 + \sigma_y^2)/2$. Дијагонална матрица Σ дефинисана изразом:

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_\rho^2, \sigma_\rho^2, \sigma_z^2) = \text{diag}(17.67, 17.67, 2619.10) \text{ pm}^2, \quad (4.12)$$

представља матрицу коваријансе термалних вибрација неограниченог графена на температури од 300 K. Из облика матрице Σ се може закључити да у устаљеном стању атоми графена врше некорелисано и изотропно кретање у равни.

У циљу бољег разумевања кретања графена, испитана је зависност матрице коваријансе Σ од величине графена. Дефинисан је параметар L као мера линеарне величине графена на следећи начин: $L = \sqrt{L_x L_y}$, где су L_x и L_y величине графена у x и y правцу респективно. Претходно описан поступак одређивања матрице коваријансе је поновљен у случајевима суперћелија са $N = 2450, 11250, 18050, 31250, 42050, 61250, 80000, 84050$ и 120050 атома угљеника.

Одговарајуће вредности елемената матрице коваријансе су на слици 4.4(б) приказане квадратима црне боје. Израчунате вредности указују да варијансе σ_ρ^2 и σ_z^2 расту с повећањем величине система. Феноменолошка теорија термалних вибрација флексибилних мембрана предвиђа степену зависност варијансе од параметра L [132]. Стога су добијени подаци фитовани функцијом AL^ζ . Одговарајући фитови су на слици 4.4(б) приказани линијама црвене боје.

Добијени резултати су упоређени са резултатима Монте-Карло прорачуна [27] и резултатима експеримента [26]. На слици 4.4(б) је плавим троуглом обележен резултат објављен у референци [27]. Израчуната варијанса термалних вибрација у равни $\sigma_\rho^2 = 17.67 \text{ pm}^2$ је блиска вредности до које се долази применом Дебајевог модела ($\sigma^2 = 17.37 \text{ pm}^2$) и резултату експеримента ($\sigma^2 = 15.2 \text{ pm}^2$). Варијанса отклона атома у правцу нормалном на раван графена $\sigma_z^2 = 2619.10 \text{ pm}^2$ је у сагласности са вредношћу која се налази Монте-Карло симулацијом ($\sigma_z^2 = 3600 \text{ pm}^2$) [27]. Приметити да су обе вредности добијене теоријским прорачунима знатно веће од вредности која је утврђена експериментом ($\sigma_z^2 = 104 \text{ pm}^2$) [26]. Добијене вредности су приказане у Табели 4.1.

Изразито неслагање између резултата теоријских прорачуна и резултата експеримента може имати најмање два узрока. Прорачуни молекулске динамике су показали снажну осетљивост и на најмање напрезање. Сажимањем рачунске суперћелије дуж у правца за 0.4 % узрокује преко 13 пута већу бројну вредност варијансе σ_z^2 [118]. С друге стране једнако истезање снижава вредност варијансе σ_z^2 само 1.14 пута. Истезање суперћелије у x и y правцу за 0.5 % узрокује 2.08 пута мању варијансу σ_z^2 . Може се закључити да неслагање прорачуна са експериментом може бити последица истезања графена услед интеракције са супстратом. Вредно је поменути да су аутори референце [26] на температурама нижим од 800 K уочили присуство значајне количине нечистоћа на разматраним узорцима графена.

Табела 4.1. Равнотежне вредности елемената матрице коваријансе Σ . Одговарајуће грешке представљају стандардне грешке поступка фитовања.

	неограничен графен	нанотрака графена
σ_x^2 (pm ²)	17.6716 ± 0.0022	18.1376 ± 0.0007
σ_y^2 (pm ²)	17.6628 ± 0.0024	35.4455 ± 0.0067
σ_z^2 (pm ²)	2619.1019 ± 1.6661	3698.1845 ± 2.6935
σ_{xy} (pm ²)	-0.0398 ± 0.0403	0.0246 ± 0.0300
σ_{xz} (pm ²)	0.3145 ± 0.1411	-0.6065 ± 0.6261
σ_{yz} (pm ²)	-0.3351 ± 0.3203	-0.2413 ± 0.6598

Присуство примеса може узроковати пригушење кретања у нормалном правцу а притом незнатно утицати на кретање атома у равни графена.

Утврђено је да се пикови расподеле положаја атома подударају са положајима атома у случају непокретне решетке. Ово указује на очување кристалног поретка. Уочено је да се дуж графена образују набори. На слици 4.4(в) је приказано стање суперћелије која садржи 11250 атома угљеника у тренутку 2.9 ns. Најизраженији набори су обележени линијама црвене боје.

Нанотрака графена

Матрица коваријансе у случају нанотраке графена је одређена на сличан начин као у случају неограниченог графена. Узето је у обзир да потпора нанотрака узрокује значајно пригушење осцилација атома са којима је у непосредном додиру. Уведимо координатни систем такав да се металне лествице, које служе као потпора графену, пружају дуж у правца. Ако са \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y и \mathbf{e}_z обележимо ортове правоуглог координатног система, величина коришћене рачунске суперћелије је $\sqrt{3}N_1l\mathbf{e}_x \times 3N_2l\mathbf{e}_y \times c\mathbf{e}_z$, где су N_1 и N_2 бројеви елементарних ћелија садржаних у x и y правцу, респективно. Вредност параметра c је као и у претходном прорачуну $c = 4$ nm. Примењени су мешовити гранични услови; у x правцу су усвојени фиксирани гранични услови, дуж y правца слободни гранични услови, док су у правцу нормалном на графен примењени фиксирани гранични услови. Резултати прорачуна су представљени у Табели 4.1.

Вандијагонални матрични елементи су занемарљиви у односу на дијагоналне и стога су занемарени. Матрица коваријансе у устаљеном стању кретања нанотраке графена је:

$$\mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_x^2, \sigma_y^2, \sigma_z^2) = \text{diag}(18.14, 35.45, 3698.18) \text{ pm}^2. \quad (4.13)$$

Дијагонални облик матрице коваријансе и различите вредности варијанси σ_x^2 и σ_y^2 указују да атоми нанотраке врше некорелисано и потпуно анизотропно кретање. И у случају нанотраке је уочено набирање површине графена.

4.3. Угаона расподела и дугин образац трансмитованих протона

У овом поглављу су представљени резултати прорачуна расејања протона енергије 5 keV на неограниченом графену са коваријансом термалних вибрација атома $\mathbf{\Sigma}$ која је дата изразом (4.12). Потенцијал интеракције протона и атома угљеника је моделован Дојл-Тарнеровом апроксимацијом. Дојл-Тарнеров модел потенцијала усредњен нормалном расподелом (4.5) са коваријансом $\mathbf{\Sigma}$ је могуће израчунати аналитички и дат је следећим изразом:

$$V_{th}^{DT}(\mathbf{r}) = \frac{Z_1 \hbar^2}{4\sqrt{\pi}m_e} \sum_{k=1}^4 \frac{\alpha_k^{DT}}{\sqrt{\left| \det \left(\frac{\beta_k^{DT}}{16\pi^2} \mathbf{I} + \frac{1}{2} \mathbf{\Sigma} \right) \right|}} \exp \left[-\frac{1}{4} \mathbf{r}^T \left(\frac{\beta_k^{DT}}{16\pi^2} \mathbf{I} + \frac{1}{2} \mathbf{\Sigma} \right)^{-1} \mathbf{r} \right], \quad (4.14)$$

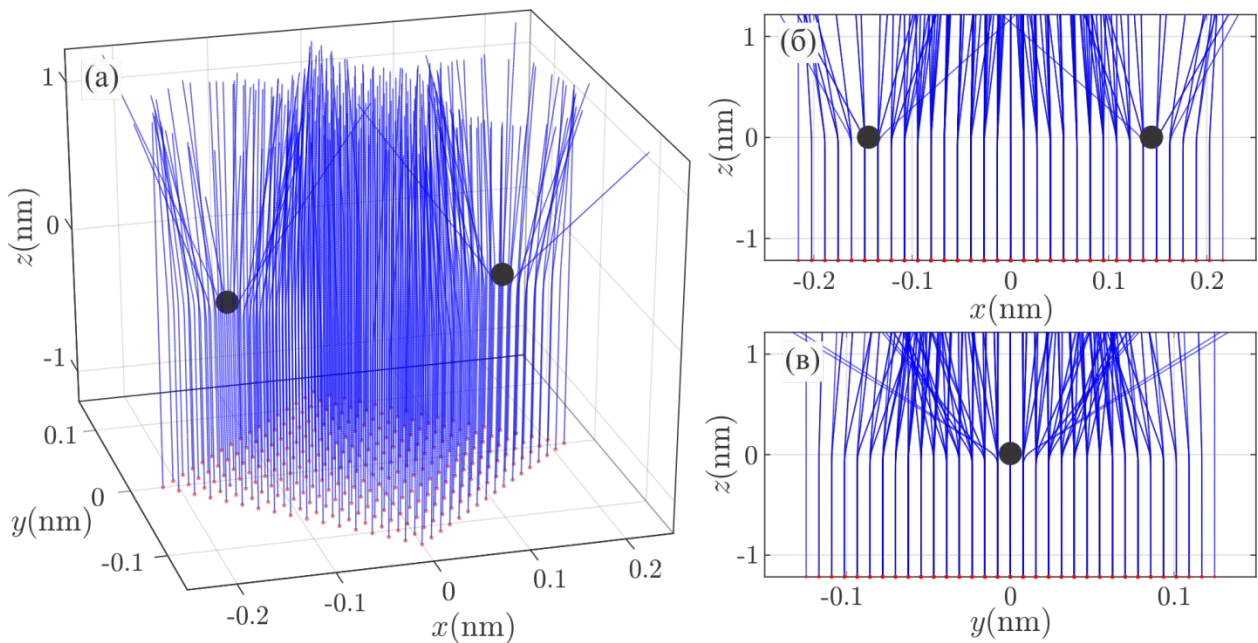
где је $\mathbf{\Sigma}$ дата изразом (4.12).

Бесконачне редове у изразу (4.7) је у нумеричким прорачунима потребно ограничити тако да је грешка која се чини занемарљива. Пажљивим испитивањем је утврђено да израчунавање потенцијала интеракције, са задовољавајућом тачношћу у оквиру једне елементарне ћелије изискује сумирање по бар три најближа симетријска окружења. Потенцијал интеракције опада монотono са удаљеношћу од равни графена. Област интеракције је дефинисана као скуп тачака у којим је вредност потенцијала већа од милијардитог дела глобалног максимума потенцијала. Нека се обод области интеракције налази на удаљености z_m од равни графена. Израчуната вредност параметра z_m у случају Дојл-Тарнеровог модела износи 1.2165 nm.

На слици 4.5(a) су приказане израчунате путање паралелног и униформног снопа протона енергије 5 keV приликом трансмисије кроз неограничен графен. Почетне брзине протона су нормалне на раван графена. Ударни параметри приказаних путања припадају једној елементарној ћелији графена. На сликама 4.5(б) и 4.5(в) су приказане пројекције путања на равни yOz и xOz , респективно.

Приметити да се путања протона може веома добро апроксимирати преломљеном правом линијом. Највећи отклон од упадног правца настаје у непосредној близини равни кристала ($z = 0$). У околини атома угљеника су одбојне силе између протона и графена највеће. Стога су највише отклоњени протони који се расејавају у непосредној околини атома. Максимални угао отклона је 128.41 mrad. Повратно или вишеструко расејане честице нису опажене, што је последица изузетно кратког времена интеракције од свега 5 fs и нормалне инциденције снопа.

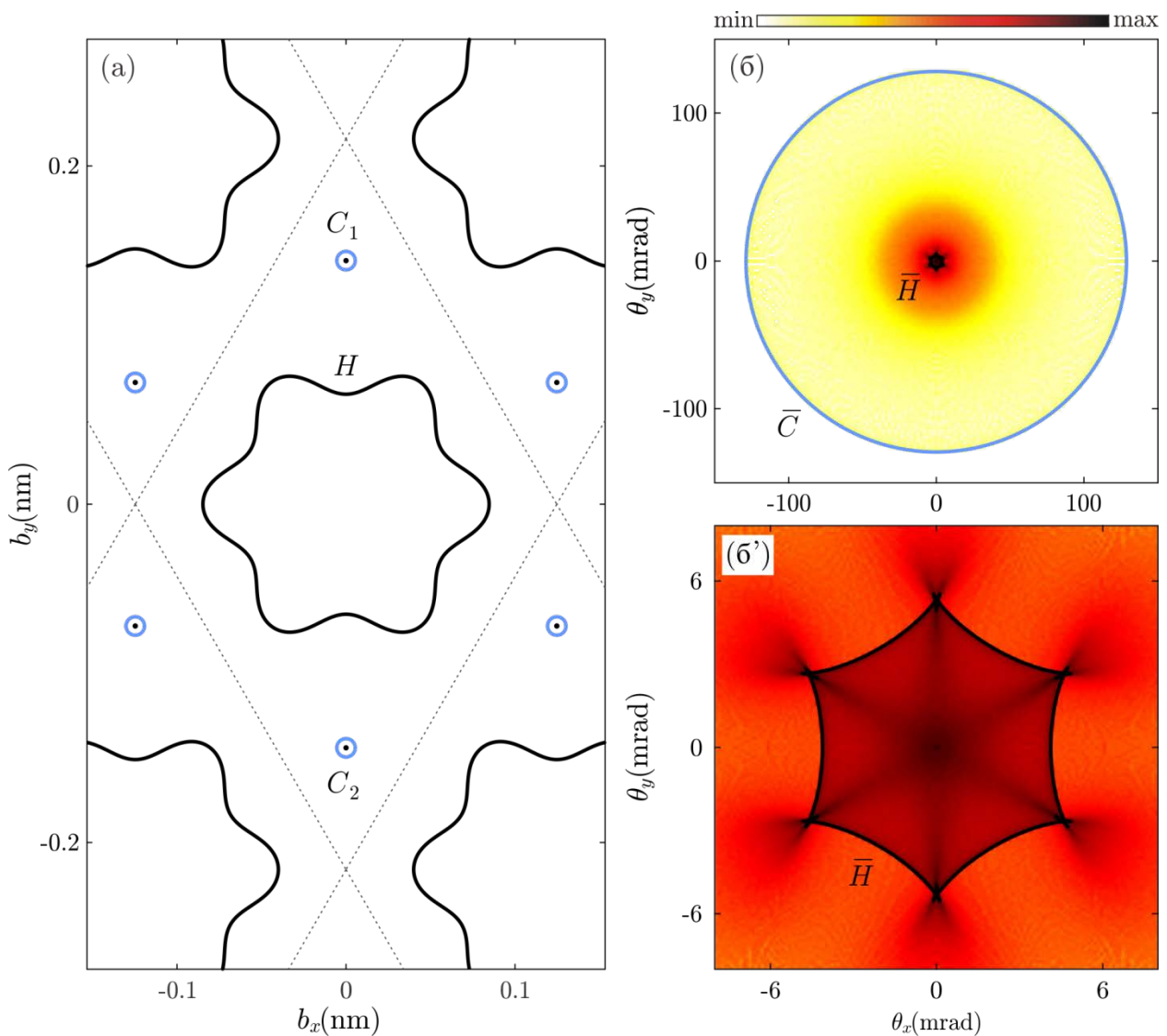
На слици 4.6 су приказани резултати прорачуна дугиног обрасца и угаоне расподеле паралелног и униформног снопа протона енергије 5 keV који се расејава на графену у случају нормалне инциденције. На слици 4.6(a) је приказана раван ударног параметра и линије дуге одређене нумеричким решавањем једначине (3.18). Елементарне ћелије графена су оивичене испрекиданим линијама црне боје. Положаји атома угљеника су обележени тачкама црне боје. У оквиру сваке елементарне ћелије постоје три линије дуге: H , C_1 и C_2 . Линије дуге светло плаве боје обележене са C_1 и C_2 су кружнице чији се центри



Слика 4.5. Плавим линијама су приказане путање протона у области интерљакције. Тачке уласка у област интеракције су обележене тачкама црвене боје. Црним лоптама су приказани атоми угљеника (пречници црних лопти не одражавају величину атома).

подударају са положајима атома угљеника. Пречници ових линија су 0.0108 nm . Линија дуге црне боје обележена са H окружује средиште елементарне ћелије и има шестоугаону симетрију. Крива H се може описати правилним шестоугаоником странице 0.0840 nm .

На слици 4.6(б) је приказана угаона расподела трансмитованих протона. Расподеле су израчунате на основу 1517282 путања протона. Ударни параметри протона равномерно прекривају елементарну ћелију графена. Због транслационе симетрије потенцијала интеракције свака елементарна ћелија графена једнако доприноси укупној угаоној расподели расејаних протона. Одброј трансмитованих честица је приказан у логаритамској размери. На слици 4.6(б') је приказана увеличана област малих углова расејања. Унутрашњи део расподеле одражава шестоугаону симетрију угљеничног прстена графена, док је кружна симетрија спољашњег дела расподеле последица сферне симетрије потенцијала интеракције у малој околини појединачних атома. Дугин образац у скупу углова расејања је лик дугиног обрасца из равни ударног параметра образован пресликавањем (3.13). Ликови дуга C_1 и C_2 су подударне кружнице обележене са \bar{C} . Пречник кружнице \bar{C} износи 256.82 mrad .



Слика 4.6 (а) Дугин образац у равни ударног параметра сачињен од кривих црне и светло плаве боје. Положаји атома угљеника су представљени црним тачкама. Обод елементарне ћелије графена је исцртан испрекиданом линијом црне боје. (б) Угаона расподела трансмитованих протона у логаритамској скали. Релативни односи вредности расподеле су изражене преливом топлих боја. Ликови линија дуге из равни ударног параметра су представљени кривама одговарајуће боје. (б') Увеличан приказ угаоне расподеле у околини координатног почетка равни углова расејања.

Лик линије дуге H је сложена крива \bar{H} са шестоугаоном симетријом у чијим теменима се налазе сложене структуре сачињене од по три сингуларитета. Ове структуре ће бити подробно описане и објашњене у предстојећим поглављима. Дуга \bar{H} се може описати правилним шестоугаоником странице 5.523 \AA . Приметити да је дуж линија дуге одброј честица веома велик. Најистакнутији максимуми угаоне расподеле, изузев средишњег, последица су ефекта дуге. Приметити да изван области обухваћене дугом \bar{C} нема расејаних протона. Унутрашњости дуга \bar{C} и \bar{H} имају већи принос честица. Стога су унутрашњости ових кривих светле а спољашњости тамне стране дуга. Сlike 4.6(б) и 4.6(б') потврђују да су линије дуге места скоковите промене вредности угаоне расподеле.

Приказани резултати сведоче да у трансмисији протона кроз савршен графен постоји ефекат дуге. Утврђено је да дугин образац чине затворене линије које имају значајан утицај на облик угаоне расподеле трансмитованих протона.

Глава 5

Математичке основе морфолошке анализе дугиног расејања

У првом поглављу ове главе су представљени елементи *теорије катастрофа* и *бифуркација*. Потом су уведене *бифуркације конусних пресека*, кључне за анализу преображаја дугиног обрасца. У последњем поглављу су уведене основе теорије индекса, такође значајне за разумевање структуре дугиног обрасца.

5.1. Елементи теорије катастрофа и бифуркација

Нека је $\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ градијентно векторско поље:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{c}) = \nabla V(\mathbf{r}; \mathbf{c}), \quad (5.1)$$

где је $\mathbf{r} = (r_1, r_2, \dots, r_n)$ вектор n -димензионалног простора стања, $V(\mathbf{r}, \mathbf{c})$ је потенцијал који зависи од m параметара система $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_m)$ и $\nabla = (\partial_{r_1}, \partial_{r_2}, \dots, \partial_{r_n})$. У теорији катастрофа се бројеви n и m називају *коранк* и *кодимензија*. *Сингуларитет* поља је тачка у којој је амплитуда поља једнака нули:

$$|\mathbf{F}(\mathbf{r}; \mathbf{c})| = 0. \quad (5.2)$$

Критична тачка \mathbf{r}_0 потенцијала V је тачка у којој важи:

$$\frac{\partial V(\mathbf{r}_0; \mathbf{c})}{\partial r_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (5.3)$$

Дакле, поље \mathbf{F} је сингуларно у критичним тачкама потенцијала.

Критична тачка потенцијала \mathbf{r}_0 је *недегенерисана* или *Морсова тачка* ако је Хесијан потенцијала у тој тачки регуларна матрица, односно:

$$\det \mathbf{H}[V(\mathbf{r}, \mathbf{c})]|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_0} = \det \left(\frac{\partial^2 V(\mathbf{r}_0; \mathbf{c})}{\partial r_i \partial r_j} \right) \neq 0. \quad (5.4)$$

Скаларна функција се у околини недегенерисане критичне тачке може прикладном сменом променљивих свести на облик [78,133]:

$$M(r_1, \dots, r_n) = +r_1^2 + \dots + r_{n-l}^2 - r_{n-l+1}^2 - \dots - r_n^2. \quad (5.5)$$

Ово тврђење је познато као Морсова лема. Функција облика (5.5) се назива *Морсова l-седло* или *Морсова функција* [78,133]. Функција коранка 1 је у околини недегенерисане критичне тачке према Морсовој леми еквивалентна функцији $\pm \frac{1}{2}r_1^2$. У случају функција коранка 2 постоји више могућности. Ако се у околини недегенерисане критичне тачке функција коранка 2 може свести на неки од два еквивалентна облика:

$$M_e^\pm(r_1, r_2) = \pm \frac{1}{2}r_1^2 \pm \frac{1}{2}r_2^2, \quad (5.6)$$

одговарајућа недегенерисана критична тачка се назива *елиптичка*. Елиптичке критичне тачке могу бити максимуми или минимуми функције. У околини елиптичке критичне тачке функција коранка 2 има облик исечка сфере. Ако се у околини недегенерисане критичне тачке функција коранка 2 може свести на неки од два еквивалентна облика:

$$M_h^\pm(r_1, r_2) = \pm \frac{1}{2}r_1^2 \mp \frac{1}{2}r_2^2. \quad (5.7)$$

недегенерисана критична тачка се назива *хиперболичка*. У околини хиперболичке критичне тачке функција коранка 2 има облик седла. Хесијани функција M_e^\pm и M_h^\pm су [78] :

$$\det \mathbf{H}[M_e^\pm(r_1, r_2)] = +1, \quad \det \mathbf{H}[M_h^\pm(r_1, r_2)] = -1. \quad (5.8)$$

5.1.1. Елементарне катастрофе

Дегенерисане критичне тачке су критичне тачке у којима није испуњен услов (5.4). Теорија катастрофа класификује понашање структурно стабилних фамилија функција при варијацији параметара у околини дегенерисаних критичних тачака [133]. У довољно малој околини дегенерисане критичне тачке постоји смена променљивих којом се свака скаларна функција може свести на један од елементарних облика који се називају *катастрофе* [133,134].

Нека су $V_1(\mathbf{r}; \mathbf{c})$ и $V_2(\mathbf{r}; \mathbf{c})$ фамилије глатких функција. Функције $V_1(\mathbf{r}; \mathbf{c})$ и $V_2(\mathbf{r}; \mathbf{c})$ су *еквивалентне* у околини критичне тачке \mathbf{r}_0 ако постоји глатко пресликавање $\varphi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, такво да у околини тачке \mathbf{r}_0 важи:

$$V_1(\mathbf{r}; \mathbf{c}) = V_2(\varphi(\mathbf{r}); \mathbf{c}) + \alpha, \quad (5.9)$$

где је α константа [133, 78].

Нека је $V(\mathbf{r}, \mathbf{c})$ пресликавање са кодимиензијом не већом од 4. По *Томовој теорему* пресликавање $V(\mathbf{r}, \mathbf{c})$ је у околини дегенерисане критичне структурно стабилно ако и само ако је еквивалентно некој од 7 функција дефинисаних са [78].

$$A_2(\mathbf{r}; \mathbf{c}) = r_1^3 + c_1 r_1 + M(r_2, \dots, r_n), \quad (5.10)$$

$$A_3(\mathbf{r}; \mathbf{c}) = \pm(r_1^4 + c_2 r_1^2 + c_1 r_1) + M(r_2, \dots, r_n), \quad (5.11)$$

$$A_4(\mathbf{r}; \mathbf{c}) = r_1^5 + c_3 r_1^3 + c_2 r_1^2 + c_1 r_1 + M(r_2, \dots, r_n), \quad (5.12)$$

$$A_5(\mathbf{r}; \mathbf{c}) = \pm(r_1^6 + c_4 r_1^4 + c_3 r_1^3 + c_2 r_1^2 + c_1 r_1) + M(r_2, \dots, r_n), \quad (5.13)$$

$$D_4^-(\mathbf{r}; \mathbf{c}) = r_1^2 r_2 - r_2^3 + c_3 r_1^2 + c_1 r_1 + c_2 r_2 + M(r_3, \dots, r_n), \quad (5.14)$$

$$D_4^+(\mathbf{r}; \mathbf{c}) = r_1^2 r_2 + r_2^3 + c_3 r_1^2 + c_1 r_1 + c_2 r_2 + M(r_3, \dots, r_n), \quad (5.15)$$

$$D_5(\mathbf{r}; \mathbf{c}) = \pm(r_1^2 r_2 + r_2^4 + c_3 r_1^2 + c_4 r_2^2 + c_1 r_1 + c_2 r_2) + M(r_3, \dots, r_n), \quad (5.16)$$

где су M Морсове функције. Називи ових катастрофа су редом *набор* (A_2), *рог* (A_3), *ластин реп* (A_4), *лептир* (A_5), *елиптичко средиште* (D_4^-), *хиперболично средиште* (D_4^+) и *параболично средиште* (D_5). У случају катастрофа типа рога и лептира предзнак “+” одговара њиховој тзв. стандардној форми, док предзнак “-” одговара тзв. дуалној форми. Број катастрофичних прототипова је већи у случају функција веће кодимиензије. Разлика катастрофе K и одговарајуће Морсове функције се назива *генератриса катастрофе* [133]. Скуп критичних тачака генератрисе катастрофе се назива *равнотежни скуп*. Скуп дегенерисаних критичних тачака генератрисе се назива *катастрофични скуп*. Пројекција катастрофичног скупа у простор параметара се назива *бифуркациони скуп*.

5.1.2. Елементарне бифуркације

Променом вредности параметара \mathbf{c} , може доћи до нагле промене броја и типа критичних тачака потенцијала V . Овај процес се назива бифуркација. Размотримо генератрисе катастрофа набор и рог. Променљиву r_1 означимо са x . Нека је у додатна променљива стања. Додавањем члана y^2 у изразима за генератрисе набор и рог катастрофа коранка 1 могу се конструисати две катастрофе коранка 2:

$$V_{A_2}(x, y) = -\frac{x^3}{3} + c_1 x + y^2, \quad (5.17)$$

$$V_{A_3}(x, y) = \frac{x^4}{4} + c_1 \frac{x^2}{2} + y^2. \quad (5.18)$$

Промена вредности параметра c_1 у изразу (5.17), од негативне ка позитивној вредности, узрокује настанак минимума (елиптичке) и седласте (хиперболичке) критичне тачке. Овом бифуркацијом настају две недегенерисане критичне тачке. Уобичајена ознака за ову врсту бифуркације је A_2 . Промену од позитивне ка негативној вредности параметра c_1 у изразу (5.18) прати подела елиптичке тачке на две елиптичке и једну хиперболичку тачку између њих. Овом бифуркацијом од једне дегенерисане критичне тачке настају три недегенерисане критичне тачке. Уобичајена ознака за ову врсту бифуркације је A_3 .

5.2. Бифуркације конусних пресека

Општи облик једначине конусног пресека је:

$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 + D = 0, \quad (5.19)$$

при чему коефицијенти A , B и C задовољавају услов:

$$B^2 \neq 4AC. \quad (5.20)$$

Сменом променљивих, која одговара ротацији у равни, квадратна форма (5.19) се може свести на облик:

$$\lambda_1 x^2 + \lambda_2 y^2 + D = 0, \quad (5.21)$$

где су параметри λ_1 и λ_2 решења једначине:

$$\lambda^2 - (A + C)\lambda + (AC - B^2/4) = 0. \quad (5.22)$$

Нека је у равни задата крива у параметарском облику $(x(s), y(s))$, где је s параметар криве. Функција кривине $k(s)$ је дефинисана као извод тангенте $\mathbf{t} = (x'(s), y'(s))$ и дата је изразом:

$$k(s) = \frac{\frac{dx}{ds} \frac{d^2y}{ds^2} - \frac{dy}{ds} \frac{d^2x}{ds^2}}{\left(\left(\frac{dx}{ds} \right)^2 + \left(\frac{dy}{ds} \right)^2 \right)^{3/2}}. \quad (5.23)$$

Овако дефинисана кривина је инваријантна на репараметризацију $s = f(t)$, где је f произвољна монотона функција. Чворови криве су екстремуми функције кривине, односно тачке у којима је закривљеност криве највећа или најмања.

Хиперболичка коњугациона бифуркација

Ако важи $\lambda_1 \lambda_2 < 0$ и $\text{sgn}(\lambda_1 D) = -1$, постоји смена променљивих којом се израз (5.21), може свести на канонски облик једначине хиперболе. Полуосе одговарајуће хиперболе су дате изразима [135]:

$$a^2 = \frac{|D|}{|\lambda_1|}, \quad b^2 = \frac{|D|}{|\lambda_2|}. \quad (5.24)$$

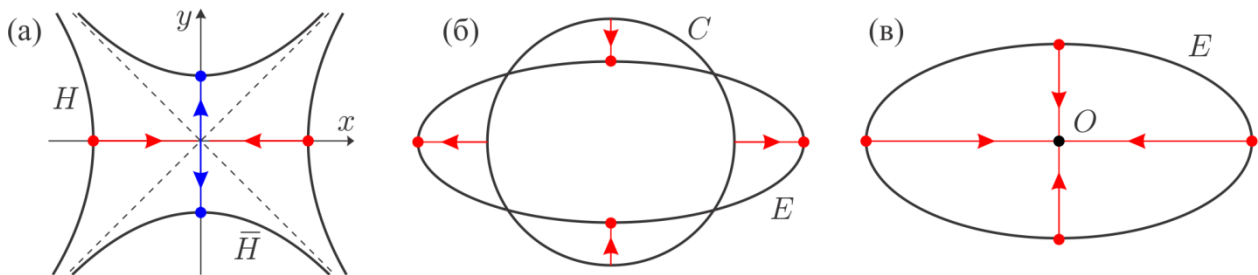
Хипербола се може параметризовати на следећи начин:

$$x(t) = a \sec(t), \quad y(t) = b \tan(t). \quad (5.25)$$

Вредностима параметра t из опсега $[\pi/2, 3\pi/2]$ је покривена једна грана хиперболе, а вредностима из опсега $[-\pi/2, \pi/2]$ друга грана хиперболе. Чворови хиперболе су решења једначине:

$$\frac{ab \sin(t) \cos^2(t)}{(a^2 \sin^2(t) + b^2)^{5/2}} = 0. \quad (5.26)$$

За $a \neq b$, једначина (5.26) има на свакој грани по три решења, односно укупно шест. Четири решења су на асимптотама у бесконачности. Два решења су прави чворови и налазе се на x оси. За $D = 0$ гране хиперболе приађају асимптотама. Ако је $\text{sgn}(\lambda_1 D) = 1$, хипербола се преображава у коњуговану хиперболу. Овом коњугацијом нестају чворови на x -оси и образују се два нова чвора на y -оси. Овај процес се назива хиперболичка коњугациона бифуркација τ_H и приказан је на слици 5.1(a).



Слика 5.1. (а) Хиперболичка коњугациона бифуркација. Испрекидане линије црне боје су асимптоте хиперболе H и коњуговане хиперболе \bar{H} . Чворови хиперболе H су обележени тачкама црвене боје. Чворови коњуговане хиперболе \bar{H} су обележени тачкама плаве боје. Путање чворова H и \bar{H} су представљене линијама црвене и плаве боје, респективно. (б) Кружна бифуркација. Кружница C се кружном бифуркацијом преображава у елипсу E . Путање чворова су представљене линијама црвене боје. (в) Елиптичка коњугациона бифуркација. Чворови елипсе E су обележени црвеним тачкама. Сажимањем елипсе чворови нестају у тачки O .

Кружна и елиптичка коњугациона бифуркација

Ако је $\lambda_1 \lambda_2 > 0$ и $\text{sgn}(\lambda_1 D) = -1$, израз (5.21) је прикладном сменом променљивих могуће свести на канонски облик једначине елипсе. Полуосе елипсе су дате изразима [135]:

$$a^2 = \frac{|D|}{|\lambda_1|}, \quad b^2 = \frac{|D|}{|\lambda_2|}. \quad (5.27)$$

Елипса је параметризована изразима:

$$x(t) = a \cos(t), \quad y(t) = b \sin(t) \quad (5.28)$$

где параметар t припада скупу $[0, 2\pi]$. Екстремуми функције кривине елипсе су решења једначине:

$$\frac{(a^2 - b^2) \sin(2t)}{[a^2 \sin^2(t) + b^2 \cos^2(t)]^{5/2}} = 0. \quad (5.29)$$

Сваком екстремуму функције кривине одговара један чвор елипсе. Ако је $a \neq b$ једначина (5.29) има четири решења. Ако је $a = b$ елипса представља кружницу и једначина (5.29) нема нетривијалних решења. На слици 5.1(б) је илустрован процес преображаја круга у елипсу током ког настају четири чвора. Овај процес се назива *кружна бифуркација* τ_c .

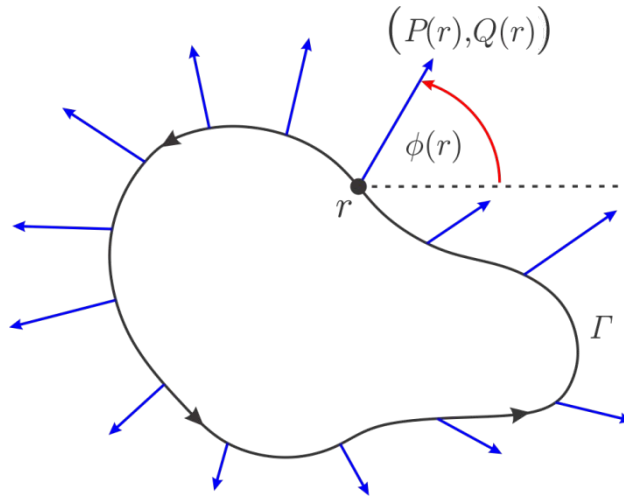
Ако је $D = 0$, реална елипса се сажима у тачку. Ако полуосе елипсе проласком кроз нулу постану имагинарне, реална елипса постаје *коњугована елипса*. Тада је $\text{sgn}(\lambda_1 D) = 1$. На слици 5.1(в) је приказан процес коњугације елипсе током ког нестају четири чвора. Процес се назива *елиптичка коњугациона бифуркација* τ_e .

5.3. Теорија индекса

Теоријом индекса се могу изучавати глобална својства векторског поља. Нека је у равни дефинисано глатко векторско поље $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = (P(\mathbf{r}), Q(\mathbf{r}))$. На слици 5.2 је илустрована затворена крива без самопресека Γ . Претпоставимо да Γ не пролази кроз сингуларитете поља \mathbf{F} . Тада је у свакој тачки криве добро дефинисан угао:

$$\phi(\mathbf{r}) = \tan^{-1} \frac{Q(\mathbf{r})}{P(\mathbf{r})}. \quad (5.30)$$

Померајући тачку \mathbf{r} дуж криве Γ у позитивном смеру (супротном од смера кретања казаљке на сату), глатко поље $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ се мења непрекидно. Повратком у почетну тачку је начињен један пун обилазак криве Γ . Правац и интензитет поља су исти на почетку и на крају једног



Слика 5.2. Затвореном линијом црне боје је приказана крива Γ . Стрелицама плаве боје је приказано глатко векторско поље \mathbf{V} у тачкама криве Γ . Поље у тачки \mathbf{r} је обележено са $(P(\mathbf{r}), Q(\mathbf{r}))$. Испрекиданом линијом црне боје је приказан правац у односу на који се рачуна вредност угла $\phi(\mathbf{r})$ у тачки \mathbf{r} . Стрелицом црвене боје је обележен смер рачунања угла $\phi(\mathbf{r})$.

обиласка контуре Γ . То значи да се обиласком криве Γ вредност угла ϕ променила за целобројни умножак броја 2π [136,137]. Означимо са $\Delta_{\Gamma}\phi$ укупан прираштај угла ϕ током једног обиласка криве Γ .

Индекс затворене криве Γ у односу на векторско поље $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ је дефинисан изразом:

$$\text{Ind}_{\Gamma}\mathbf{F} = \frac{1}{2\pi}\Delta_{\Gamma}\phi. \quad (5.31)$$

Индекс криве $\text{Ind}_{\Gamma}\mathbf{F}$ представља број обртаја векторског поља током обиласка криве Γ у позитивном смеру. Из израза (5.30) следи:

$$d\phi = \frac{PdQ - QdP}{P^2 + Q^2}. \quad (5.32)$$

Коришћењем израза (5.30) и (5.31) се долази до израза [136]:

$$\text{Ind}_{\Gamma}\mathbf{F} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma} \frac{PdQ - QdP}{P^2 + Q^2}. \quad (5.33)$$

Нека је Γ_n низ затворених контура без самопресека које обухватају тачку M . Нека је:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \Gamma_n = M. \quad (5.34)$$

Индекс тачке M је дефинисан изразом [136, 137] :

$$\text{Ind}_M \mathbf{F} = \lim_{n \rightarrow +\infty} \text{Ind}_{\Gamma_n} \mathbf{F}, \quad (5.35)$$

Индекс елиптичке критичне тачке је +1, док је индекс хиперболичке критичне тачке -1. Ако је криву Γ могуће деформисати у криву Γ' и притом не пресећи неки од сингуларитета поља онда важи:

$$\text{Ind}_\Gamma \mathbf{F} = \text{Ind}_{\Gamma'} \mathbf{F}. \quad (5.36)$$

Ако крива Γ не обухвата ниједну сингуларну тачку поља \mathbf{F} , онда је:

$$\text{Ind}_\Gamma \mathbf{F} = 0. \quad (5.37)$$

Ако крива Γ обухвата n критичних тачака, онда је индекс криве Γ једнак збиру индекса обухваћених критичних тачака. То значи да индекс криве може открити да ли су кривом Γ обухваћени сингуларитети векторског поља [136].

Глава 6

Модел дугиног расејања

У првом поглављу ове главе је уведена импулсна апроксимација. Потом је представљен катастрофични модел линије дуге. У последњем поглављу су конструисани дефектни каспоиди коранка 2.

6.1. Импулсна апроксимација

Дефинисан је правоугли координатни систем такав да се z -оса подудара са вектором почетне брзине честице. Једначина кретања честице је:

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}(t)), \quad (6.1)$$

где је t време, $\mathbf{p}(t)$ импулс честице у тренутку t , а $V(\mathbf{r}(t))$ потенцијал интеракције у тачки $\mathbf{r}(t)$, а $\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$. Укупна промена трансверзалне пројекције импулса честице приликом проласка кроз област интеракције је дата изразом:

$$\Delta\mathbf{p}_\perp = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \nabla_\perp V(\mathbf{r}(t)), \quad (6.2)$$

где је $\Delta\mathbf{p}_\perp = (p_x(t = +\infty), p_y(t = +\infty))$ и $\nabla_\perp = (\partial_x, \partial_y)$. Декартови углови расејања $\boldsymbol{\theta} = (\theta_x, \theta_y)$ су дефинисани изразом (3.11).

Ако је почетна енергија честице довољно велика или област интеракције довољно мала, промена брзине у лонгитудиналном правцу је занемарљива и важи:

$$\boldsymbol{\theta} \approx \frac{\Delta\mathbf{p}_\perp}{p_z(-\infty)}. \quad (6.3)$$

Углови расејања су на основу израза (6.2) једнаки [77]:

$$\boldsymbol{\theta} = -\frac{1}{mv_z(-\infty)} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \nabla_\perp V(\mathbf{r}(t)), \quad (6.4)$$

где је m маса честице. Ако се путања честице може апроксимирати правом линијом, трансверзалне координате честице су константе:

$$x = b_x, \quad y = b_y \quad (6.5)$$

где је (b_x, b_y) ударни параметар честице. Тада се применом смене:

$$dt \approx \frac{dz}{v_z(-\infty)}, \quad (6.6)$$

путања честице може параметризовати лонгитудиналном координатом z . Израз (6.4) се у том случају своди на:

$$\theta = -\frac{1}{2E_k} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \nabla_{\perp} V(b_x, b_y, z), \quad (6.7)$$

где је (b_x, b_y) ударни параметар честице и E_k почетна кинетичка енергија честице. Ако се замени поредак оператора ∇_{\perp} и $\int_{-\infty}^{+\infty} dz$ у изразу (6.7) долази се до израза:

$$\theta = -\frac{1}{2E_k} \nabla_{\perp} \int_{-\infty}^{+\infty} dz V(\mathbf{r}(z)) = -\frac{1}{2E_k} \nabla_{\perp} \varphi(b_x, b_y) \quad (6.8)$$

Угао отклона је пропорционалан градијенту потенцијала интеграленог у правцу кретања $\varphi(b_x, b_y)$. Потенцијал $\varphi(b_x, b_y)$ се назива *редуковани потенцијал интеракције*.

У глави 3 је показано да је диференцијални пресек расејања бесконачан у тачкама у којима је Јакобијева матрица пресликавања (3.14) сингуларна, односно уколико важи:

$$\mathcal{J}_{(\theta_x, \theta_y)}(b_x, b_y) = \begin{vmatrix} \frac{\partial \theta_x}{\partial b_x} & \frac{\partial \theta_x}{\partial b_y} \\ \frac{\partial \theta_y}{\partial b_x} & \frac{\partial \theta_y}{\partial b_y} \end{vmatrix} = \frac{\partial \theta_x}{\partial b_x} \frac{\partial \theta_y}{\partial b_y} - \frac{\partial \theta_x}{\partial b_y} \frac{\partial \theta_y}{\partial b_x} = 0. \quad (6.9)$$

Решења једначине (6.9) су линије дуге. Заменом израза (6.8) у израз (6.9) се једначина за линије дуге у равни ударног параметра своди на:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial b_x^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial b_y^2} - \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial b_x \partial b_y} \right)^2 = 0. \quad (6.10)$$

Односно, линије дуге су криве у равни ударног параметра дуж којих је детерминанта Хесијана редукованог потенцијала интеракције $\det \mathbf{H}\{\varphi(b_x, b_y)\}$ једнака нули. Овај закључак нуди веома корисну геометријску интерпретацију линија дуге. Гаусова кривина K површи $z = \varphi(b_x, b_y)$ је пропорционална детерминанти Хесијана функције $\varphi(x, y)$ [135]:

$$K = \frac{\det \mathbf{H}[\varphi(b_x, b_y)]}{\left(1 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial b_x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial b_y}\right)^2\right)^2}. \quad (6.11)$$

Стога су линије дуге контуре нулте кривине редукованог потенцијала интеракције $\varphi(b_x, b_y)$.

6.2. Катастрофични модел линије дуге

Трансмисију честице је могуће посматрати као пресликавање тачке $(b_x, b_y, 0, 0)$ фазног простора у тачку $(x, y, \theta_x, \theta_y)$, где су x и y положаји честице након трансмисије. Размотримо генератрису $F_2(b_x, b_y, \theta_x, \theta_y)$ канонске трансформације типа 2 за коју важи [138]:

$$\frac{\partial F_2}{\partial b_x} = 0, \quad \frac{\partial F_2}{\partial b_y} = 0; \quad (6.12)$$

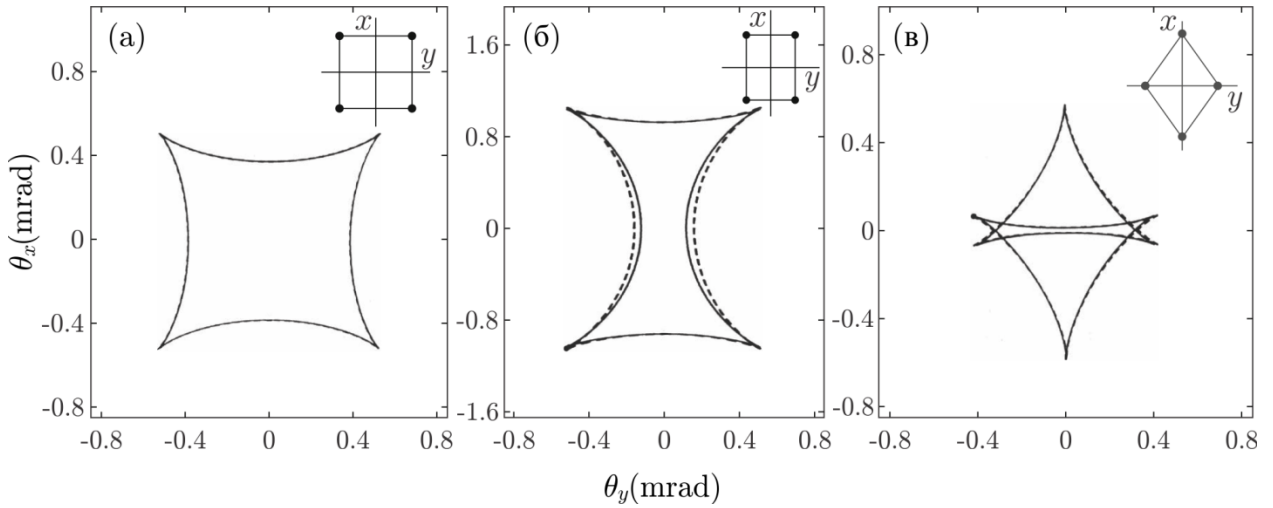
$$\frac{\partial F_2}{\partial \theta_x} = x, \quad \frac{\partial F_2}{\partial \theta_y} = y. \quad (6.13)$$

Израз (6.12) даје почетне углове долазне честице који су једнаки 0 у случају паралелног снопа. Израз (6.13) одређује положај честице након трансмисије. Функцију F_2 је потребно одредити тако да израз (6.12) истовремено представља закон расејања дат изразом (6.8), односно градијентно пресликавање равни ударног параметра (b_x, b_y) у раван углова расејања (θ_x, θ_y) . Најједноставнија функција F_2 која задовољава постављене услове дата је следећим изразом:

$$F_2(b_x, b_y, \theta_x, \theta_y) = b_x \theta_x + b_y \theta_y + \frac{1}{2E_k} \varphi(b_x, b_y). \quad (6.14)$$

Дегенерисане критичне тачке генератрисе F_2 су решења једначине:

$$\frac{\partial^2 F_2}{\partial b_x^2} \frac{\partial^2 F_2}{\partial b_y^2} - \left(\frac{\partial^2 F_2}{\partial b_x \partial b_y}\right)^2 = 0 \quad (6.15)$$



Слика 6.1. Линије дуге у равни ударног параметра у случају протона енергије 10 MeV трансмитованих кроз 100 nm дуг (а) $\langle 100 \rangle$ канал кристала Au, (б) $\langle 110 \rangle$ канал кристала W и (в) $\langle 111 \rangle$ канал Au. Линије дуге генерисане генератрисама F_2 су приказане линијама црне боје. Дуге генерисане моделом φ_c су приказане испрекиданим линијама црне боје. (Прилагођено на основу података из референце [139])

Лако је уочити да су решења једначине (6.15) истовремено и решења једначине (6.10). Стога су линије дуге дегенерисане критичне тачке генератрисе F_2 .

Катастрофични модел функције генератрисе F_2 добија се поистовећивањем редукованог потенцијала φ са одговарајућим катастрофичним полиномом φ_c . Контролни параметри катастрофе φ_c се одређују из захтева да се бифуркациони скуп катастрофе φ_c подударе са опаженим линијама дуга у равни угла расејања.

Пример катастрофичног моделовања може се наћи у референци [139], где је показано да је оптимални катастрофични модел потенцијала квадратних осних канала кристала дат клицом сложене катастрофе 4X_9

$$\varphi_c = E_0 \{ \gamma b_x^2 + \delta b_y^2 \pm (b_x^4 + K b_x^2 b_y^2 + b_y^4) \}, \quad (6.16)$$

где су γ , δ и K контролни параметри катастрофе док је E_0 фактор пропорционалности.

Пуном линијом на слици 6.1 су приказане линије дуга у равни углова расејања које се јављају при трансмисији протона енергије 10 MeV кроз 100 nm дуге канале кристала Au и W. Испрекиданим линијама су представљене линије дуга одговарајућих катастрофичних модела. Може се закључити да једноставан полиномни модел потенцијала интеракције (6.16) одлично репродукује дугин образац.

6.3. Дефектни каспоиди коранка 2

У овом поглављу су конструисане катастрофичне фамилије коранка 2 прикладне за моделовање линија дуга које су образоване трансмисијом протона кроз графен. Размотримо класу *каспоидних катастрофа* коранка 1 дефинисану изразом:

$$A_k(x; c_1, c_2, \dots, c_{k-1}) = \frac{x^{k+1}}{k+1} + c_{k-1} \frac{x^{k-1}}{k-1} + \dots + c_2 \frac{x^2}{2} + c_1 x, \quad (6.17)$$

где је x променљива стања, док су $c = (c_1, c_2, \dots, c_{k-1})$ параметри. A_3 је генератриса катастрофе рог, A_4 је генератриса катастрофе ластин реп, док је A_5 генератриса катастрофе лептир.

Фамилија каспоидних катастрофа коранка 2 се може најједноставије конструисати додавањем Морсовог члана $M(x, y)$ у израз (6.17). Међутим, на тај начин се могу конструисати искључиво потенцијали чије су линије дуге праве линије у равни (x, y) . Стога је за моделовање дугиних линија општијег облика потребно конструисати тзв. *дефектне каспоиде* коранка 2 [134]:

$$F_k(x, y; \theta_x, \theta_y, c_2, \dots, c_{k-1}) = A_k(x; -\theta_x, c_2, \dots, c_{k-1}) + y \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} - \theta_y y, \quad (6.18)$$

Параметри θ_x и θ_y уз линеарне чланове развоја имају физички смисао углова расејања. Фамилија F_k је сачињена од каспоидног члана коранка 1:

$$A_k(x; -\theta_x, c_2, \dots, c_{k-1}) = \frac{x^{k+1}}{k+1} + c_{k-1} \frac{x^{k-1}}{k-1} + \dots + c_2 \frac{x^2}{2} - \theta_x x, \quad (6.19)$$

затим тзв. *Морсовог* члана:

$$\frac{y^2}{2} - \theta_y y, \quad (6.20)$$

и члана који спреже променљиве x и y :

$$y \frac{x^2}{2}. \quad (6.21)$$

Критичне тачке функције F_k су решења једначина:

$$\partial_x F_k = \partial_y F_k = 0, \quad (6.22)$$

и чине њен равнотежни скуп, којим је имплицитно задат закон расејања:

$$\theta_x = x^k + c_{k-1}x^{k-2} + \dots + (c_2 + y)x, \quad (6.23)$$

$$\theta_y = \frac{x^2}{2} + y.$$

Дегенерисане критичне тачке, одређене нулама Хесијана:

$$\partial_{xx}^2 F_k \cdot \partial_{yy}^2 F_k - (\partial_{xy}^2 F_k)^2 = 0, \quad (6.24)$$

користимо да моделујемо линије дуге у простору стања (x, y) :

$$y + c_2 + 2c_3x + (3c_4 - 1)x^2 + \dots + (k - 2)c_{k-1}x^{k-3} + kx^{k-1} = 0, \quad (6.25)$$

односно, линија дуге је задата у облику:

$$y(x) = -c_2 - 2c_3x - (3c_4 - 1)x^2 + \dots - (k - 2)c_{k-1}x^{k-3} - kx^{k-1}. \quad (6.26)$$

Приметити да вредност параметра c_2 нема утицај на облик линије дуге и стога ће у наставку анализе бити занемарен. Заменом добијеног израза (6.26) у закон расејања налази се линија дуге у равни углова расејања у параметарском облику $(\theta_x(x), \theta_y(x))$. У наставку су подробно испитане дефектне катастрофичне фамилије значајне за истраживање спроведено у оквиру ове дисертације.

6.3.1. Чворови и сингуларитети линија дуге

Изучавање облика линија дуге заузима средишње место у овој дисертацији. Облик криве је инваријантан на ортогоналне трансформације, translације у равни и репараметризацију криве. У претходном поглављу је линија дуге у равни ударног параметра задата или у имплицитном облику или као график функције $y = y(x)$, док је линија дуге у равни углова расејања задата у параметарском облику $(\theta_x(x), \theta_y(x))$. Екстремуми функције $y = y(x)$ зависе од одабира координатног система (x, y) и стога се нужно не подударују са чворовима криве. Из тог разлога је прикладније облик дуге у равни ударног параметра изучавати помоћу функције кривине која је дефинисана изразом (5.23). Ако је координата x добро дефинисан параметар криве $y = y(x)$, израз за кривину (5.23) се своди на:

$$k(x) = \frac{\frac{d^2y}{dx^2}}{\left(1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right)^{3/2}}. \quad (6.27)$$

Облик криве у равни је одређен бројем сингуларитета и чворова криве. У овом одељку су подробније размотрени *дефектни рог* коранка 2, *дефектни ластин реп* коранка 2 и *дефектни лептир* коранка 2. Утврђено је да се помоћу ових модела линија дуге може објаснити однос између чворова дуге у равни ударног параметра и сингуларитета дуге у равни углова расејања.

Дефектни рог коранка 2

Размотримо фамилију:

$$F_3(x, y; \theta_x, \theta_y) = \frac{x^4}{4} + y\frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} - \theta_x x - \theta_y y. \quad (6.28)$$

Одговарајући закон расејања гласи:

$$\begin{aligned} \theta_x &= x^3 + xy, \\ \theta_y &= \frac{x^2}{2} + y. \end{aligned} \quad (6.29)$$

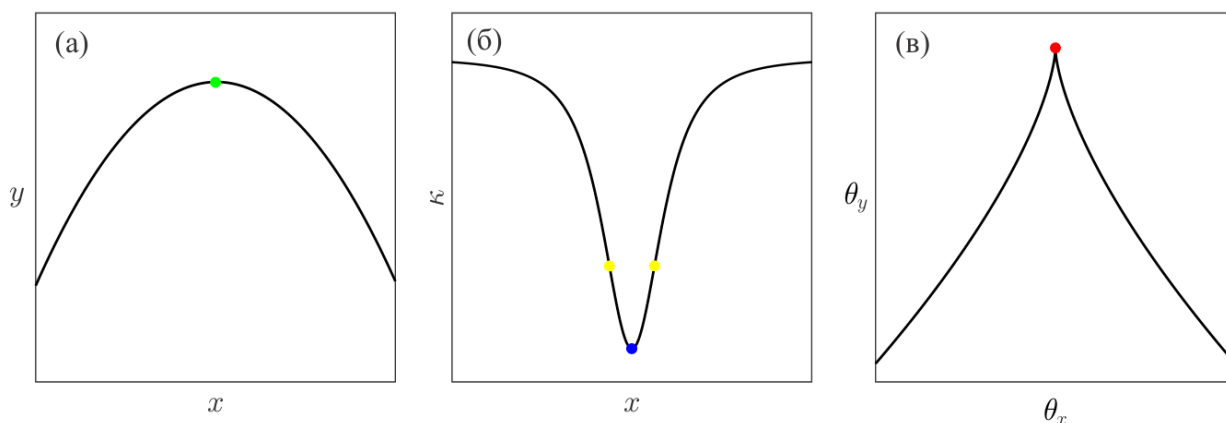
Линија дуге у равни ударног параметра своди се на једначину параболе:

$$y + 2x^2 = 0. \quad (6.30)$$

Крива (6.30) је приказана на слици 6.2(a). Екстремум криве је обележен тачком зелене боје. Кривина линије дуге у равни ударног параметра је дата изразом:

$$k(x) = -\frac{4}{(1 + 16x^2)^{3/2}}, \quad (6.31)$$

На слици 6.2(б) је приказана функција кривине (6.31). Функција k има екстремум у тачки $x = 0$ и обележен је тачком плаве боје. Крива (6.30) поседује један чвор који се подудара са екстремумом функције $y = y(x)$. Функција кривине (6.31) има две превојне тачке и на слици 6.2(б) су обележене



Слика 6.2 (а) Линија дуге дефектног рога коранка 2 у равни ударног параметра. Екстремум функције $y = y(x)$ је обележен тачком зелене боје. (б) Функција кривине линије дуге у равни ударног параметра. Екстремум функције кривине је обележен тачком плаве боје. Превојне тачке функције кривине су обележене тачкама жуте боје. (в) Линија дуге дефектног рога коранка 2 у равни углова расејања. Сингуларитет дуге је обележен тачком црвене боје.

тачкама жуте боје. Дуга у равни углова расејања се добија применом закона расејања и дата је једначинама:

$$\begin{aligned} \theta_x &= -x^3, \\ \theta_y &= -\frac{3}{2}x^2. \end{aligned} \tag{6.32}$$

На слици 6.2(в) је приказана крива (6.32). Сингуларитети дуге су тачке у којима је тангента једнака нули:

$$\left(\frac{d\theta_x}{dx}, \frac{d\theta_y}{dx} \right) = (0,0). \tag{6.33}$$

$\theta_x(x)$ и $\theta_y(x)$ имају екстремум у тачки $x = 0$. Стога крива $(\theta_x(x), \theta_y(x))$ поседује један сингуларитет и на слици 6.2(в) је обележен тачком црвене боје. У изразима (6.32) нема слободних параметара и стога је овај сингуларитет неотклоњив. Може се закључити да се чвор функције кривине линије дуге у равни (x, y) пресликава законом расејања у сингуларитет линије дуге у равни (θ_x, θ_y) .

Дефектни ластин реп коранка 2

Размотримо дефектни ластин реп коранка 2 дефинисан изразом:

$$F_4(x, y; \theta_x, \theta_y, c_3) = \frac{x^5}{5} + c_3 \frac{x^3}{3} + y \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} - \theta_x x - \theta_y y, \quad (6.34)$$

Одговарајући закон расејања гласи:

$$\begin{aligned} \theta_x &= x^4 + c_3 x^2 + yx, \\ \theta_y &= \frac{x^2}{2} + y. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Ако се параметар c_3 преименује у α , линија дуге у равни ударног параметра је:

$$y + 4x^3 - x^2 + 2\alpha x = 0, \quad (6.36)$$

док је дуга у скупу углова расејања дата једначинама:

$$\begin{aligned} \theta_x &= -x^2(3x^2 - x + \alpha), \\ \theta_y &= -4x^3 + \frac{3}{2}x^2 - 2\alpha x. \end{aligned} \quad (6.37)$$

За $\alpha < 1/24$ функција $y = y(x)$, имплицитно задата једначином (6.36), има два екстремума. У супротном нема екстремума. Кривина линије дуге (6.36) је дата изразом:

$$k(x) = \frac{-24x + 2}{[1 + 4(\alpha - x + 6x^2)^2]^{3/2}}. \quad (6.38)$$

Чворови дуге (6.36) су одређени решењима једначине:

$$-720x^4 + 240x^3 - 2(13 + 48\alpha)x^2 + (1 + 16\alpha)x + 4\alpha^2 - \alpha + 1 = 0. \quad (6.39)$$

Нуле полинома је могуће класификовати на основу дискриминанте полинома. Ако је број нула полинома које нису реалне дељив бројем 4, вредност дискриминанте је позитивна; у супротном је дискриминанта негативна. Дискриминанта полинома четвртог степена је дата изразом [140]:

$$\begin{aligned}
D_4 = & (a_1^2 a_2^2 a_3^2 - 4a_1^3 a_3^3 - 4a_1^2 a_2^3 a_4 + 18a_1^3 a_2 a_3 a_4 - 27a_1^4 a_4^2 + 256a_0^3 a_4^3) \\
& + a_0(-4a_2^3 a_3^2 + 18a_1 a_2 a_3^3 + 16a_2^4 a_4 - 80a_1 a_2^2 a_3 a_4 - 6a_1^2 a_3^2 a_4 \\
& + 144a_1^2 a_2 a_4^2) + a_0^2(-27a_3^4 + 144a_2 a_3^2 a_4 - 128a_2^2 a_4^2 - 192a_1 a_3 a_4^2). \quad (6.40)
\end{aligned}$$

На основу израза (6.40) дискриминанта полинома (6.39) је:

$$D_{F_4} = -2^8 3^6 5(192\alpha^2 - 16\alpha + 27)^2(576\alpha^2 - 48\alpha + 145). \quad (6.41)$$

D_{F_4} је строго негативна функција. Како је реч о дискриминанти полинома четвртог степена, полином има две комплексно коњуговане и две реалне нуле [141]. То значи да линија дуге има два чвора.

Линија дуге у равни углова расејања је дата у параметарском облику:

$$\theta_x = -x^2(3x^2 - x + \alpha), \quad (6.42)$$

$$\theta_y = -4x^3 + \frac{3}{2}x^2 - 2\alpha x.$$

Потребно је испитати сингуларитете ове криве. Изводи функција $\theta_x(x)$ и $\theta_y(x)$ су:

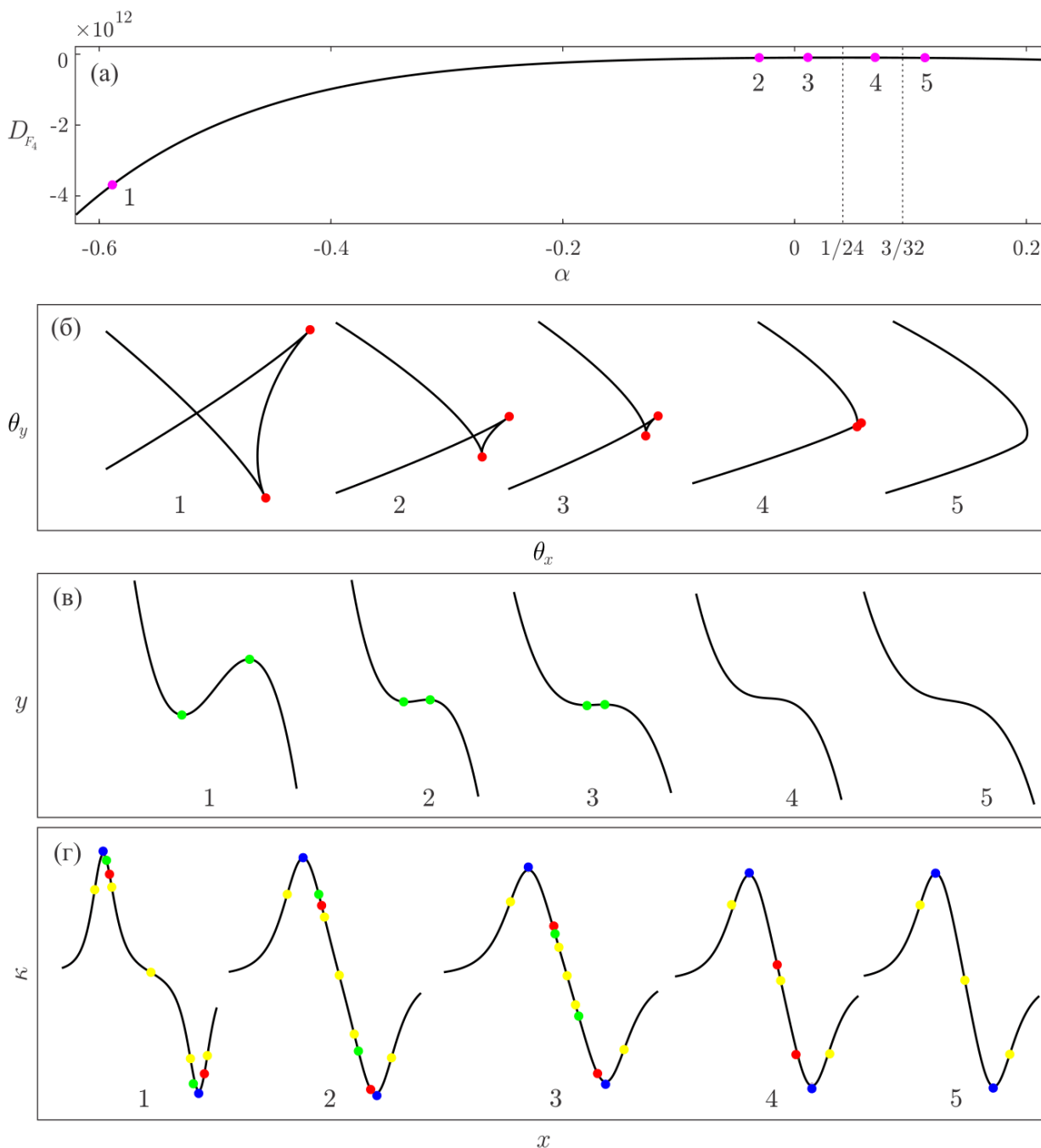
$$\frac{d}{dx}\theta_x = -12x^3 + 3x^2 - 2\alpha x = x(-12x^2 + 3x - 2\alpha), \quad (6.43)$$

$$\frac{d}{dx}\theta_y = -12x^2 + 3x - 2\alpha.$$

Оба извода су једнаки нули у тачкама $x_{1,2} = (3 \pm \sqrt{9 - 96\alpha})/24$, за које је $-12x^2 + 3x - 2\alpha = 0$. Ако је вредност параметра $\alpha < 3/32$, нуле $x_{1,2}$ су реалне и крива $(\theta_x(x), \theta_y(x))$ у равни углова расејања има две сингуларне тачке; у супротном нема сингуларитета.

На слици 6.3 су приказане дугине линије и функција кривине модела у случају пет различитих вредности параметра α . На слици 6.3(а) је приказана дискриминанта D_{F_4} . Тачкама магента боје су представљене вредности дискриминанте D_{F_4} за одабране вредности параметра α . Издвојене тачке су обележене бројевима од 1 до 5. Вертикалне испрекидане линије су праве које одговарају критичним вредностима параметра: $\alpha = 1/24$ и $\alpha = 3/32$. На слици 6.3(б) је приказан преображај линије дуге у равни (θ_x, θ_y) . Док је вредност параметра α мања од $3/32$, дуга у равни углова расејања има два сингуларитета обележена тачкама црвене боје. Са порастом вредности параметра α , сингуларитети се приближавају и узајамно анихилирају када параметар α достигне вредност $3/32$. На слици 6.3(в) је приказан одговарајући преображај дуге у равни ударног параметра која је у имплицитном облику

задата изразом (6.36). Крива $y = y(x)$ поседује два екстремума ако је вредност параметра α мања од $1/24$. Екстремуми су обележени тачкама зелене боје. За $\alpha = 1/24$ се екстремуми узајамно пониште. На слици 6.3(г) је приказан преображај кривине линије дуге у равни ударног параметра са променом вредности параметра α . Функција k у разматраном опсегу вредности параметра α има два екстремума, који су на слици 6.3(г) обележени тачкама плаве боје. Док је вредност параметра α мања од $1/24$ функција k има пет превојних тачака које су на слици 6.3(г) обележене тачкама жуте боје.



Слика 6.3. (а) Тачкама магента боје су представљене вредности дискриминанте D_{F_4} за одабране вредности параметра α . Испрекиданим линијама су представљене праве $\alpha = 1/24$ и $\alpha = 3/32$. (б) Преображај дугиног обрасца у равни углова расејања, (в) преображај дугиног обрасца у равни ударног параметра. (г) преображај функције кривине. Критичне тачке одговарајућих кривих су обележене тачкама црвене, зелене и плаве боје.

Између екстремума дуге у равни ударног параметра постоје три превојне тачке. Анихилацијом екстремума ове превојне тачке претрпе бифуркацију након које постоји само једна превојна тачка. Приметити да се тек након анихилације два екстремума линије дуге у равни ударног параметра дешава анихилација сингуларитета дуге у равни углова расејања. С друге стране, екстремуми функције кривине постоје и након анихилације два сингуларитета угаоне линије дуге. Може се закључити да однос чворова дуге у равни ударног параметра и сингуларитета угаоне дуге није тривијалан. Број сингуларитета угаоне дуге и број чворова дуге у равни ударног параметра нису нужно једнаки.

Дефектни лептир коранка 2

Размотримо дефектни лептир коранка 2 дефинисан изразом:

$$F_5(x, y; \theta_x, \theta_y, c_2, c_3, c_4) = \frac{x^6}{6} + c_4 \frac{x^4}{4} + c_3 \frac{x^3}{3} + c_2 \frac{x^2}{2} + y \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} - \theta_x x - \theta_y y, \quad (6.44)$$

Ако се параметар c_2 занемари, а преостали параметри преименују на следећи начин: $c_3 = \beta$, $c_4 = \alpha$, израз (6.44) се своди на:

$$F_5(x, y; \theta_x, \theta_y, \alpha, \beta) = \frac{x^6}{6} + \alpha \frac{x^4}{4} + \beta \frac{x^3}{3} + y \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} - \theta_x x - \theta_y y. \quad (6.45)$$

Закон расејања је дат изразима:

$$\begin{aligned} \theta_x &= x^5 + \alpha x^3 + \beta x^2 + yx, \\ \theta_y &= \frac{x^2}{2} + y. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Линија дуге у равни ударног параметра је:

$$y + 5x^4 - (1 - 3\alpha)x^2 + 2\beta x = 0. \quad (6.47)$$

Крива $y = y(x)$, имплицитно задата једначином (6.47), може имати један или три екстремума зависно од вредности параметара α и β . Кривина линије дуге је:

$$k(x) = \frac{-60x^2 + 2(1 - 3\alpha)}{[1 + 4(10x^3 - (1 - 3\alpha)x + \beta)^2]^{3/2}}. \quad (6.48)$$

Чворови линије дуге су решења једначине:

$$7000x^7 + 1100(3\alpha - 1)x^5 + 500\beta x^4 + 50(3\alpha - 1)^2 x^3 + 20\beta(3\alpha - 1)x^2 + [(3\alpha - 1)^3 - 5(4\beta^2 + 1)]x + (3\alpha - 1)^2 \beta = 0. \quad (6.49)$$

Одговарајућа дискриминанта D_{F_5} је полином две променљиве α и β степена 21. Нумерички прорачуном је утврђено да решења једначине $D_{F_5}(\alpha, \beta) = 0$ деле раван (α, β) на два подскупа. У једном подскупу је дискриминанта позитивна, док је у другом подскупу дискриминанта негативна. Када је дискриминанта позитивна, број нула полинома које нису реалне дељив је бројем 4. У случају полинома седмог степена то значи да полином (6.49) има три реалне нуле. Када је дискриминанта негативна, број решења која нису реална није дељив бројем 4; како је реч о полиному седмог степена, може постојати једна или пет реалних нула. Конкретним израчунавањем је утврђено да полином (6.49) може имати највише једну реалну нулу ако је $D_{F_5}(\alpha, \beta)$ негативна. Наиме, ако би у скупу $\{(\alpha, \beta) | D_k(\alpha, \beta) < 0\}$ постојале тачке за које полином (6.49) има једну реалну нулу и тачке за које полином (6.49) има пет реалних нула, ова два подскупа тачака би била разграничена тачкама у којима је дискриминанта $D_{F_5}(\alpha, \beta)$ једнака нули. Како то није случај и како је утврђено да постоје тачке у скупу $\{(\alpha, \beta) | D_k(\alpha, \beta) < 0\}$ за које једначина (6.49) има једно реално решење, закључује се да полином (6.49) не може имати пет реалних нула.

Линија дуге у скупу углова расејања је дата једначинама:

$$\begin{aligned} \theta_x &= -\beta x^2 + (1 - 2\alpha)x^3 - 4x^5, \\ \theta_y &= -2\beta x + \frac{3}{2}(1 - 2\alpha)x^2 - 5x^4. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Екстремуми функције θ_x су решења једначине:

$$-2\beta x + 3(1 - 2\alpha)x^2 - 20x^4 = 0. \quad (6.51)$$

Екстремуми функције θ_y су решења једначине:

$$-2\beta + 3(1 - 2\alpha)x - 20x^3 = 0. \quad (6.52)$$

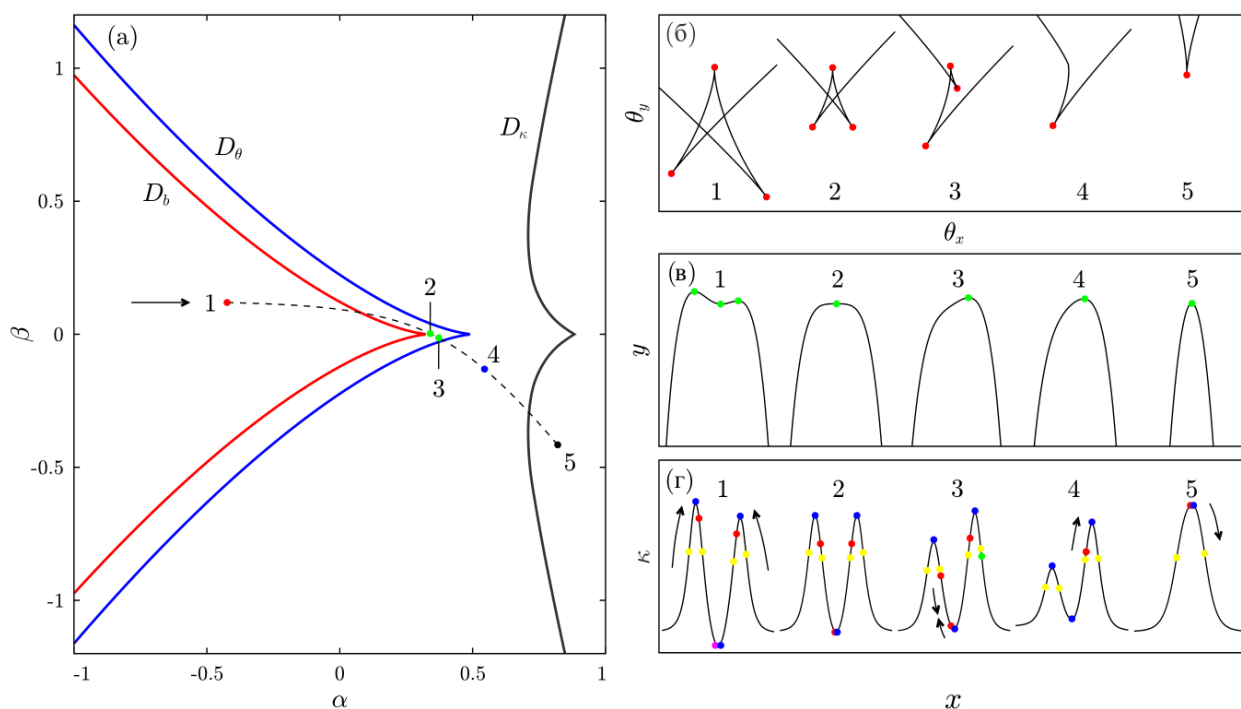
Решења једначине (6.52) су решења и једначине (6.51). Број могућих сингуларитета је један или три. Односно, угаона линија дуге може имати један или три рога.

Простор параметара (α, β) је приказан на слици 6.4(а). Нацртане криве су сачињене од тачака у којима се дешава бифуркација критичних тачака линије дуге у равни ударног параметра (6.47), одговарајуће функције кривине (6.48) и линије дуге у равни углова расејања (6.50). Екстремуми функције $y = y(x)$, која је имплицитно дата изразом (6.47), су решења једначине:

$$20x^3 - 2(1 - 3\alpha)x + 2\beta = 0. \quad (6.53)$$

Нека је D_b дискриминанта полинома у изразу (6.53). Крива $D_b = 0$ је приказана линијом црвене боје. Нека је D_θ дискриминанта полинома у једначини (6.52). Знак дискриминанте D_θ зависи од броја сингуларитета угаоне линије дуге. Плавом кривом је приказан скуп $D_\theta = 0$. Нуле дискриминанте D_κ полинома из једначине (6.49) су приказане црном линијом. Испрекиданом линијом црне боје је приказана одабрана путања система у простору параметара. Издвојене тачке дуж трајекторије су обележене бројевима од 1 до 5. На сликама 6.4(б) и 6.4(в) су приказане одговарајуће промене угаоне линије дуге и линије дуге у равни ударног параметра. Критичне тачке су обележене црвеним и зеленим тачкама. На слици 6.4(г) је приказана промена функције кривине линије дуге у равни ударног параметра.

Критичне тачке кривине су обележене тачкама плаве боје. Када путања пресече црвену линију, критичне тачке линије дуге у равни ударног параметра претрпе бифуркацију; при еволуцији од стања 1 до стања 2 крива са три критичне тачке се преобрази у криву са једном критичном тачком. Реч је о A_3 бифуркацији. Упоредо са овом променом, линија дуге у равни углова расејања и функција кривине задржавају три критичне тачке. Преласком путање преко плаве линије (део путање између тачака 3 и 4), угаона линија дуге претрпи бифуркацију; средишњи и десни рог лептира се узајамно пониште (видети криве 3 и 4 на слици 6.4(б)). Процес је познат као *одмотавање* лептира. Функција кривине поседује три критичне тачке упркос бифуркацијама линија дуге у равни ударног параметра и равни углова расејања. Тек преласком стања система преко црне линије у простору параметара и функција кривине претрпи бифуркацију током које се пониште леви и средишњи екстремум функције.



Слика 6.4 (а) Простор параметара катастрофе F_5 . Црвена, плава и црна крива представљају линије бифуркације критичних тачака линије дуге у равни ударног параметра, линије дуге у равни углова расејања и функције кривине, респективно. Испрекиданом линијом црне боје је приказана одабрана путања система у простору параметара. (б) преображај дугиног обрасца у равни углова расејања, (в) преображај дугиног обрасца у равни ударног параметра. (г) преображај функције кривине. Критичне тачке одговарајућих кривих су обележене тачкама црвене, зелене и плаве боје. (Прилагођено на основу података из референце [134])

Превојне тачке функције кривине су на слици 6.4(г) приказане жутом бојом. Тачке које се законом расејања пресликавају у рогове угаоне линије дуге су на функцији кривине обележене тачкама црвене боје. Уколико се систем налази у стању довољно удаљеном од рога криве $D_\theta = 0$, између леве и десне црвене тачке на графику 6.4(г) се налазе све значајне тачке функције кривине. Трећа црвена тачка која одговара средишњем рогу лептира се налази веома близу минимума функције кривине. Како се вредности параметара система приближавају тачки 1, спољашње црвене тачке се приближавају. Најпре пређу преко спољашњих инфлекссионих тачака кривине, а потом и оба максимума. Након преласка преко тачке 1, спољашње црвене тачке настављају да се приближавају унутрашњим инфлекссионим тачкама функције кривине. У области простора параметара између рогова кривих $D_b = 0$ и $D_\theta = 0$, средишња црвена тачка се почиње кретати видљивије улево или удесно, зависно од знака бројне вредности параметра β . Током одабране еволуције стања, средишња тачка се креће улево, додирује се са левом црвеном тачком у близини превојне тачке. Две тачке се поништавају бифуркацијом. Преостала црвена тачка се наставља кретати према десном максимуму функције кривине. За вредности параметра $\alpha \gg 1$, преостала црвена тачка пређе преко максимума кривине.

Из наведеног се може закључити да како се криве D_θ , D_b и D_k не преклапају, број сингуларитета угаоне дуге и број критичних тачака или чворова дуге у равни ударног параметара нису нужно једнаки.

Глава 7

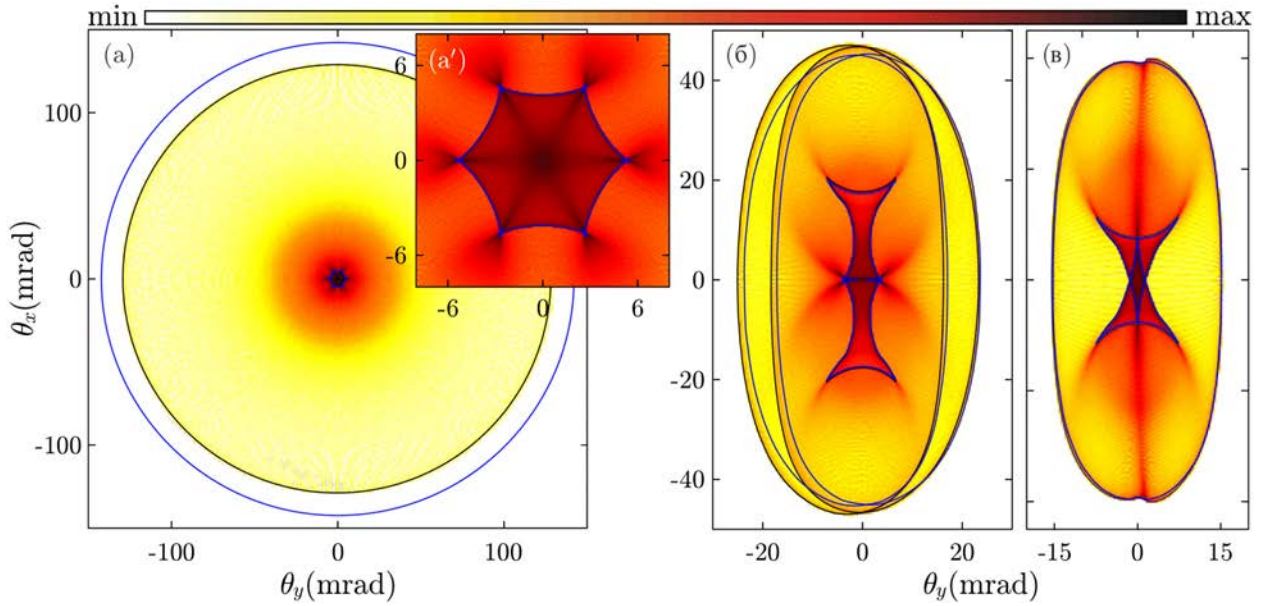
Морфолошка анализа угаоне расподеле

У овој глави је представљена морфолошка анализа угаоне расподеле. Показано је да се трансмисија протона кроз дводимензионални кристал може довољно добро моделовати употребом импулсне апроксимације. Испитан је преображај дугиног обрасца услед варијације релевантних параметара усвојеног модела.

7.1. Примена импулсне апроксимације

У овом поглављу је размотрена трансмисија униформног, паралелног и монохроматског снопа протона кроз неограничен графен на собној температури у случају различитих оријентација графена и упадног правца снопа. Неутрализација и губици енергије протона су занемарени сходно закључцима с почетка поглавља 4.1. Термално усредњени потенцијал интеракције протона и атома угљеника је дефинисан изразом (4.14). Матрица коваријансе отклона атома услед термалних флукуација је дата изразом (4.12). Упоредени су резултати прорачуна засновани на импулсној апроксимацији и резултати добијени решавањем једначина кретања протона. Сви резултати прорачуна су приказани у координатном систему таквом да се (x, y) раван подударе са трансверзалном равни упадног снопа, док је z -оса паралелна са правцем упадног снопа протона. На сликама 7.1(а), 7.1(б) и 7.1(в) су приказане израчунате угаоне расподеле протона трансмитованих кроз графен у случају нултог азимуталног угла $\Phi = 0$ и углова нагиба $\theta = 0 \text{ mrad}$, $\theta = 600 \text{ mrad}$ и $\theta = 900 \text{ mrad}$, респективно. Приказане расподеле су израчунате решавањем једначина кретања протона. Угаона расподела у случају нормалне инциденције ($\theta = 0$) је идентична резултату који је приказан на слици 4.6. Унутрашњи део расподеле одражава шестоугаону симетрију угљеничног прстена графена. Спољашњи део расподеле има кружну симетрију. Ако је $\theta = 600 \text{ mrad}$, унутрашњи део расподеле има облик шестоугаоника издуженог у вертикалном правцу. Спољашњи део расподеле чине две области облика елипсе. У случају када је $\theta = 900 \text{ mrad}$, унутрашњи део расподеле чине две троугаоне области, док су две елиптичне области сада обједињене.

На слици 7.1 су линијама црне боје нацртане линије дуге израчунате нумеричким решавањем једначине (3.18). Кривама плаве боје су нацртане линије дуге израчунате применом импулсне апроксимације, односно реч је о решењима једначине (6.10). У случају нормалне инциденције протона, дугине обрасце приказане на сликама 7.1(а) и 7.1(а') чине два дела. Унутрашња линија дуге је сложена крива облика шестоугаоника у чијим теменима се налазе по три сингуларитета који чине лептир F_5 ; еволуција лептира са променом параметара модела је описана у поглављу 6.3.1. Сlike 7.1(а) и 7.1(а') потврђују да су линије дуге места скоковите промене вредности угаоне расподеле. Спољашњи део дугиног обрасца је кружница. Кружница црне боје савршено одговара граници угаоне расподеле. Пречник плаве кружнице је за 10.24 % већи од пречника црне кружнице. Ако је угао нагиба $\theta = 600 \text{ mrad}$, унутрашња линија дуге је крива издужена у вертикалном правцу. Унутрашња линија дуге на слици 7.1(б) поседује два лептира и четири рога. Преклапање плаве и црне унутрашње линије дуге је и у овом случају изванредно. Линије дуге се одлично подудару са скупом тачака у равни углова расејања у којима се дешава скоковита промена у вредностима угаоне расподеле трансмитованих протона.



Слика 7.1. (а)-(в) Угаоне расподеле протона трансмитованих кроз графен нагнут за 0 mrad, 600 mrad и 900 mrad, респективно. На слици (а') је увеличан приказ угаоне расподеле у околини нултог угла расејања. Линијама црне боје су обележене линије дуге одређене нумеричким решавањем једначине (3.18), док су плавим линијама обележене линије дуге израчунате у оквиру импулсне апроксимације (Нацртано на основу података из референце [134])

Спољашњи део дугиног обрасца чине две криве облика елипсе, издужене у вертикалном правцу. Разлика између црних и плавих спољашњих линија дуге је у овом случају значајно мања. Ако је угао $\theta = 900$ mrad, унутрашњи део дугиног обрасца чине две криве облика троугла. Спољашњи део дугиног обрасца чини само једна линија. Разлика између црних и плавих линија дуге је у овом случају занемарљива.

Промена облика спољашње линије дуге, из кружног у елипсаст, услед мале промене угла нагиба се може објаснити применом импулсне апроксимације. У поглављу 4.3 је показано да су спољашње линије дуге образоване путањама протона који се расејавају у малој околини атома угљеника где је утицај суседних атома веома мали. Размотримо стога расејање протона на само једном атому угљеника. У прилогу А је применом импулсне апроксимације показано да је линија дуге у равни ударног параметра нормална пројекција елипсоида:

$$\mathbf{r}^T \mathbf{Y}^{-1} \mathbf{r} = 1, \quad (7.1)$$

на трансверзалну равн. Матрица \mathbf{Y} је дата изразом:

$$\mathbf{Y} = \beta \mathbf{I} + \frac{1}{2} \mathbf{\Sigma}, \quad (7.2)$$

где је β доминантан параметар Дојл-Тарнеров модела (видети израз (А.1)). Како је матрица $\beta \mathbf{I}$ инваријантна на ротације, облик линије дуге је у потпуности одређен матрицом $\mathbf{\Sigma}$. Градијентним пресликавањем (6.8) се ова кружница пресликава у кружницу у равни углова расејања која одговара угаоној линији дуге. Термалне вибрације атома у случају неограниченог графена нису изотропне. Варијансе термалних вибрација су исте искључиво у равни графена. Стога је пројекција елипсоида, дефинисаног у изразу (7.1), кружница искључиво у случају нормалне инциденције. Нагиб графена у односу на правац упадног

снопа узрокује нагиб трансверзалне равни у односу на елипсоид дефинисан у изразу (7.1), а тим и преображај пројекције из кружнице у елипсу. Описана промена се може опазити и на сликама сликама 7.1(а) и 7.1(б). Приметити да је у случају изотропних термалних вибрација спољашња линија дуге нужно кружног облика. Варијансе отклона у атома унутар равни неограниченог графена ($\sigma_\rho^2 = 17.67 \text{ pm}^2$) су веома блиске варијанси која је израчуната Дебајевом теоријом изотропних термалних вибрација ($\sigma^2 = 17.37 \text{ pm}^2$). Одговарајуће спољашње линије дуге су кружнице, чији се пречници разликују за 0.6%. Да исто важи и ван оквира импулсне апроксимације је показано у поглављу 7.2.1. Стога се дугино расејање протона енергије 5 keV на графену у случају нормалне инциденције може довољно тачно моделовати и применом Дебајеве теорије изотропних термалних вибрација.

Слика 7.1 сведочи да промена оријентације графена узрокује преображај дугиног обрасца који није лако предвидети. Испитан је и преображај угаоне расподеле узрокован променом азимуталног угла Φ . Утврђено је да у случају мањих вредности угла θ , промена угла Φ узрокује сразмерну ротацију и малу деформацију дугиних линија приказаних на слици 7.1. Стога у опсегу малих углова нагиба облик угаоне расподеле превасходно зависи од поларног угла θ .

У случајевима када је $\theta = 600 \text{ mrad}$ и $\theta = 900 \text{ mrad}$, спољашњи део дугиног обрасца и спољашњи део угаоне расподеле су благо асиметрични у односу на вертикалну осу. Спољашњи део дугиног обрасца израчунат импулсном апроксимацијом је симетричан у односу на вертикалну осу. То је последица симетрије потенцијала интеракције у односу на xOy раван и интеграције потенцијала интеракције дуж лонгитудиналног правца. Приметити да у случају већег угла нагиба θ , разлика између резултата тачног прорачуна и импулсне апроксимације постаје занемарљива чак и у случају спољашњег дела дугиног обрасца. Интеграл силе дуж лонгитудиналног правца је највећи у случају нормалне инциденције јер је тада пројекција елипсоида (7.1) на лонгитудинални правац највећа. У случају ненулног угла нагиба графена, динамика протона дуж лонгитудиналног правца је занемарљивија. Стога је у случају већих углова нагиба тачност импулсне апроксимације већа.

Док је енергија протона довољно велика, линије дуге израчунате у оквиру импулсне апроксимације квалитативно добро оцртавају облик угаоне расподеле. Импулсна апроксимација је у случају већих углова нагиба тачна и у квалитативном и у квантитативном смислу. Стога је даљња анализа заснована претежно на импулсној апроксимацији. Једна предност је речунска једноставност; угаону расподелу трансмитованих протона и одговарајући дугин образац је знатно лакше израчунати применом импулсне апроксимације и решавањем једначине (6.10). Друга погодност почива на постојању непосредне везе између линија дуге и редукованог потенцијала интеракције, што анализу преображаја дугиног обрасца чини посредном методом за изучавање промене топлотије редукованог потенцијала интеракције протона и кристала.

7.2. Варијација параметара модела и преображај дугиног обрасца

У претходном поглављу је показано да се трансмисија протона кроз графен може довољно тачно моделовати применом импулсне апроксимације, односно законом расејања (6.8). Параметри закона расејања (6.8) се грубо могу разврстати на физичке и геометријске. У физичке параметре се убрајају почетна енергија протона, коваријансе термалних вибрација атома кристала, редни бројеви атома од којих је сачињена кристална решетка, параметри усвојеног модела потенцијала интеракције протона и појединачних атома и параметри који одређују структуру кристала. Множењем израза (6.8) са E_k и дефинисањем новог скупа углова расејања $\theta = E_k \theta$ могуће је извести нов закон расејања независан од почетне енергије протона. То значи да почетна енергија протона E_k утиче искључиво на величину

угаоне расподеле али не и на њен облик. Стога са становишта облика угаоне расподеле трансмитованих протона почетна енергија није релевантан параметар модела. У геометријске параметре се убрајају параметри који одређују узajамну оријентацију снопа протона и равни кристала. То су поларни и азимутални угао правца упадног снопа протона у односу на нормалу на раван кристала. У претходном поглављу је истакнуто да у случају мањих вредности угла θ , промена угла Φ узрокује сразмерну ротацију и малу деформацију угаоне расподеле и одговарајућих дугиних линија приказаних на слици 7.1. Стога је у опсегу малих углова нагиба, са становишта анализе облика угаоне расподеле, поларни угао θ релевантан геометријски параметар модела.

У овом поглављу је подробно испитан утицај релевантних физичких и геометријских параметара модела на облик дугиног обрасца, а тиме и одговарајуће угаоне расподеле трансмитованих протона. Прво је испитан утицај коваријансе термалних вибрација атома на дугин образац. Потом је изучен утицај различитих модела потенцијала интеракције протона и атома на дугин образац. Обе анализе су спроведене у случају графена. Затим је испитана зависност облика и величине дугиног обрасца од редног броја атома који граде кристалну решетку. Утицај редног броја атома 2Д кристала на особине угаоне расподеле је најприкладније изучавати анализом дугиних линија које образују протони трансмитовани кроз два 2Д кристала исте кристалне структуре али различитих атомских састава. Таква два кристала постоје. Реч је о графену и дводимензионалном хексагоналном кристалу бор-нитрида. Док саћасту решетку графена граде атоми угљеника, саћасту решетку бор-нитрида чине атоми бора и азота. Упоредном анализом дугиних образаца и угаоних расподела протона трансмитованих кроз бор-нитрид и графен је установљена зависност облика и величине угаоне расподеле од редног броја атома који граде кристалну решетку.

Потом је изучен преображај дугиног обрасца услед промене геометријских параметара модела, тј. правца упадног снопа протона. Подробно је испитан преображај спољашњег и унутрашњег дела дугиног обрасца. Затим је испитан утицај структуре кристала на дугин образац и одговарајуће угаоне расподеле трансмитованих протона. Анализа је спроведена у случају графена са различитим тачкастим структурним дефектима.

Већ је утврђено да дугин образац има пресудан утицај на облик угаоне расподеле. Поред линија дуге угаона расподела поседује и несингуларне максимуме. Настанак несингуларних максимума расподеле је објашњен анализом спектра Јакобијана градијентног пресликавања (6.8) којим је моделовано расејање.

7.2.1. Утицај коваријансе термалних вибрација на дугин образац

У овом поглављу је подробно испитан утицај коваријансе отклона атома услед термалних флукуација графена на преображај дугиног обрасца трансмитованих протона. Анализа је спроведена у случају трансмисије протона енергије 5 keV кроз савршен Дебајев графен, савршену неограничену раван графена и савршену нанотраку графена. Кључни геометријски параметри модела су поларни и азимутални углови правца упадног снопа протона θ и Φ . Потенцијал интеракције протона и атома угљеника је моделован Дојл-Тарнеровом апроксимацијом. Угаоне расподеле и линије дуге су приказане у трансверзалној равни координатног система придруженог упадном снопу протона. Угаоне расподеле су израчунате решавањем Њутнових једначина кретања (3.1). Расподеле су израчунате на основу 1517282 путања протона, чији ударни параметри равномерно прекривају раван ударног параметра. Зависност потенцијала интеракције од коваријансе термалних вибрација је најизраженија у малој околини појединачних атома. Слика (4.6) показује да су спољашње линије дуге образоване управо протонима који се расејавају у малој околини атома 2Д кристала. На основу дискусије у поглављу 7.1 и детаљних прорачуна садржаних у прилогу А, јасно је да облик и величина спољашње линије дуге зависе од коваријансе отклона атома услед

термалних вибрација. Унутрашњем делу угаоне расподеле највише доприносе протони који се расејавају далеко од појединачних атома. Утврђено је да облик и величина унутрашњег дела угаоне расподеле не показују значајну зависност од коваријансе термалних вибрација атома [118]. Стога спољашњи део дугиног обрасца заузима средишње место у анализи коваријансе термалних вибрација.

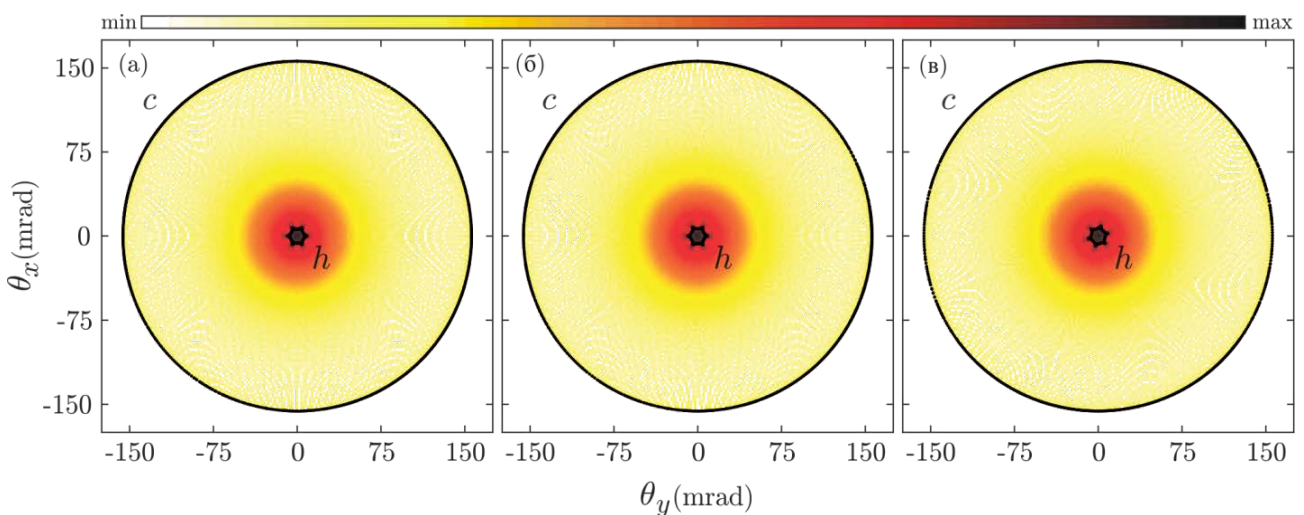
Изотропне термалне вибрације и одговарајуће угаоне расподеле

На слици 7.2 су приказане израчунате линије дуге и одговарајуће угаоне расподеле трансмитованих протона у случају изотропних термалних вибрација ($\sigma^2 = 17.37 \text{ pm}^2$). На слици 7.2(а) је приказан резултат прорачуна за нормалну инциденцију протона. Резултат прорачуна у случају графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$ у односу на правац упадног снопа је приказан на слици 7.2(б). На слици 7.2(в) је приказан резултат прорачуна у случају графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$ и заротираног за угао $\Phi = 0.25\pi \text{ rad}$.

Унутрашњи део дугиног обрасца чини крива шестоугаоног облика која је на слици 7.2 обележена словом h . У случају нормалне инциденције протона 7.2(а), линија h је облика правилног шестоугаоника. Линија дуге h на слици 7.2(б) је линија са слике 7.2(а) сажета дуж хоризонталног правца онолико пута колико је сажета и одговарајућа пројекција хексагона графена на трансверзалну раван. Линија h на слици 7.2(в) је преобликована и заротирана на исти начин као и пројекција хексагона графена на трансверзалну раван.

Спољашњи део дугиног обрасца приказан на слици 7.2 је сачињен од две исте криве c које се преклапају. У случају нормалне инциденције пречник линије c износи $D_c = 305.27 \text{ mrad}$. У случају нагнутог графена за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$ је пречник линије $D_c = 305.29 \text{ mrad}$. У случају графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$ и заротираног за угао $\Phi = 0.25\pi \text{ rad}$ пречник линије дуге c износи $D_c = 305.25 \text{ mrad}$. Приметити да су спољашње линије дуге на сликама 7.2(а), 7.2(б) и 7.2(в) практично подударне.

Добијени резултати су у сагласности са закључцима представљеним у Прилогу А. Спољашња линија дуге се понаша као пројекција елипсоида (7.1) на трансверзалну раван. У случају изотропних термалних вибрација је коваријанса скаларна матрица и пројекција елипсоида (7.1) је кружница независно од узајамне оријентације трансверзалне равни и равни графена.



Слика 7.2. Угаона расподела трансмитованих протона и угаоне линије дуге (криве црне боје) у случају изотропних термалних вибрација атома графена и (а) нормалне инциденције, (б) нагнутог графена за $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$, (в) графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$ и заротираног за угао $\Phi = 0.25\pi \text{ rad}$.

Неограничен графен и одговарајуће угаоне расподеле

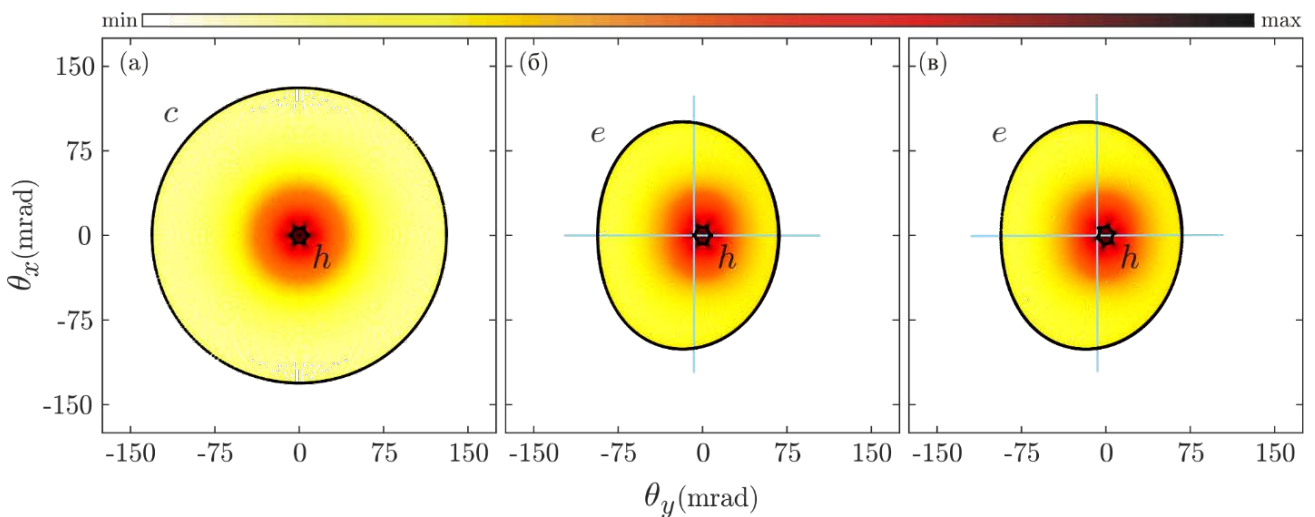
На слици 7.3 су приказане линије дуге и одговарајуће угаоне расподеле у случају графена који прекрива бесконачну раван ($\sigma_\rho^2 = 17.67 \text{ pm}^2$, $\sigma_z^2 = 2619.10 \text{ pm}^2$). На слици 7.3(а) је приказан резултат прорачуна у случају нормалне инциденције снопа протона. На слици 7.3(б) је приказан резултат прорачуна у случају нагнутог графена за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$ у односу на правац упадног снопа протона. На слици 7.3(в) је приказан резултат прорачуна у случају равни графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$ у односу на правац упадног снопа протона и додатно заротиране за угао $\Phi = 0.25\pi \text{ rad}$.

Унутрашње линије дуге h су истог облика као у случају изотропних термалних вибрација атома. Поређење слика 7.2(а) и 7.3(а) открива да су у случају нормалне инциденције линије дуге h готово у потпуности подударне [118]. У случају нагнутог, односно нагнутог и заротираног графена, унутрашње линије дуге h приказане на сликама 7.3(б) и 7.3(в) се такође веома мало разликују од линија дуге h приказаних на сликама 7.2(б) и 7.2(в). Закључак је да термалне вибрације имају изузетно мали утицај на путање протона које образују унутрашњу линију дуге h [118].

Приметити да су варијансе отклона атома у равни Дебајевог графена и неограниченог графена приближно једнаке ($\sigma^2 = 17.37 \text{ pm}^2$, $\sigma_\rho^2 = 17.67 \text{ pm}^2$). С друге стране, варијанса отклона атома нормално на раван графена се битно разликује у случају Дебајевог графена и неограниченог графена ($\sigma^2 = 17.37 \text{ pm}^2$, $\sigma_z^2 = 2619.10 \text{ pm}^2$).

Спољашњи део дугиног обрасца у случају нормалне инциденције чине две преклапајуће криве облика елипсе; на слици 7.3(а) су спољашње линије дуге обележене словом c . Пречник линија c износи $D_c = 256.81 \text{ mrad}$. У случају нагнутог графена за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$, спољашњи део дугиног обрасца чине две преклапајуће линије; на слици 7.3(б) су спољашње линије дуге означене словом e . Нагиб графена узрокује промену облика спољашњих линија дуге.

Облик линије дуге e се може изучавати на следећи начин. Дуга је рефлектована у односу на сваку праву која пролази кроз средиште дуге. Дефинисана је метрика у простору кривих у равни којом је могуће квантификовати разлику између рефлектоване и почетне дуге. Другим речима, дефинисан је функционал на простору правца који пролазе кроз средиште линије дуге. Минимум овако дефинисаног функционала дефинише *својствену осу* линије дуге.



Слика 7.3. Угаона расподела трансмитованих протона и угаоне линије дуге (криве црне боје) у случају неограниченог графена и (а) нормалне инциденције, (б) нагнутог графена за $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$, (в) графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$ и заротираног за угао $\Phi = 0.25\pi \text{ rad}$.

Утврђено је да израчунате спољашње линије дуге поседују по две својствене осе. У случају савршене елипсе се својствене осе подударају са малом и великом осом елипсе. Мали и велики пречник линије дуге су дефинисани као мали и велики пресек линија дуге дуж својствених оса.

Својствене осе линије дуге e на слици 7.3(б) су вертикална и водоравна права. Велики и мали пречник линије e износе $D_e^M = 196.21$ mrad и $D_e^m = 153.04$ mrad, респективно. Разлика између пречника прекапајућих спољашњих линија дуге је мања од 0.13 mrad и занемарена је у наставку анализе. Средиште линије e је од координатног почетка скупа углова расејања отклоњено за вектор $\Delta\theta_c = (-12.01, 0)$ mrad.

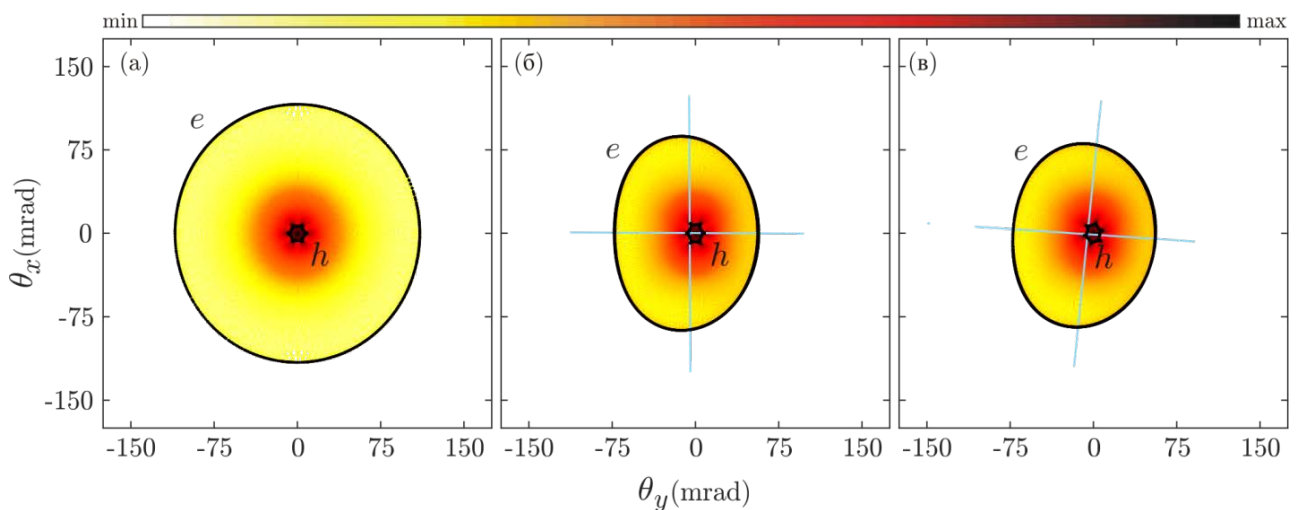
Спољашњи део дугиног обрасца је у случају графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi$ rad у односу на правац упадног снопа протона и додатно заротираног за угао $\Phi = 0.25\pi$ rad приказан на слици 7.3(в). И у овом случају постоје две спољашње линије дуге, обележене словима e , које се преклапају. Својствене осе ових линија су паралелне са x и y осом. Велики и мали пречник линије e износе $D_e^M = 196.05$ mrad и $D_e^m = 153.03$ mrad, респективно. Координате средишта линије e су $\Delta\theta_c = (-12.07, 0)$ mrad. Разлика између пречника две преклапајуће спољашње линије дуге је мања од 0.09 mrad и занемарена је у даљњој анализи.

Приметити да у квалитативном смислу преображај спољашње дуге приказан на сликама 7.3 одговара преображају трансверзалне пројекције елипсоида (7.1) услед промене угла нагиба θ . Спољашња дуга је кружница искључиво у случају нормалне инциденције због облика матрице коваријансе. У случају нагиба графена спољашња линија дуге личи на елипсу.

Нанотраке графена и одговарајуће угаоне расподеле

На слици 7.4 су приказане израчунате угаоне расподеле у случају нанотраке графена ($\sigma_x^2 = 18.14$ pm², $\sigma_y^2 = 35.45$ pm², $\sigma_z^2 = 3698.18$ pm²). Израчуната расподела и дугин образац у случају нормалне инциденције снопа протона, нагнутог графена за угао $\theta = 0.065\pi$ rad и нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi$ rad и додатно заротираног графена за угао $\Phi = 0.25\pi$ rad су приказане на сликама 7.4(а), 7.4(б) и 7.4(в), респективно.

Утврђено је да су унутрашње линије дуге h истог облика и величине као у случају изотропних термалних вибрација (слика 7.2) и у случају бесконачног графена који прекрива раван (слика 7.3) [118]. Овај резултат потврђује закључак да термалне вибрације атома графена имају занемарљив утицај на унутрашњу линију дуге.



Слика 7.4. Угаона расподела трансмитованих протона и угаоне линије дуге (криве црне боје) у случају нанотраке графена и (а) нормалне инциденције, (б) нагнутог графена за $\theta = 0.065\pi$ rad, (в) графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi$ rad и заротираног за угао $\Phi = 0.25\pi$ rad.

Спољашње линије дуге у случају нормалне инциденције протона су две преклапајуће криве облика елипсе, означене на слици 7.4(а) словом e . Средишта обе криве се налазе у координатном почетку равни углова расејања. Својствене осе ових линија су паралелне са x и y осом. Велики и мали пречник линије e износе $D_e^M = 227.11$ mrad и $D_e^m = 215.06$ mrad, респективно. У случају нагнутог графена за угао $\theta = 0.065\pi$ rad спољашњи део дугиног обрасца је сачињен од две преклапајуће криве облика елипсе, које су на слици 7.4(б) обележене словом e . Својствене осе ових линија су паралелне са x и y осом. Велики и мали пречник линије e износе $D_e^M = 165.11$ mrad и $D_e^m = 121.26$ mrad, респективно. Координате средишта линије e су $\Delta\theta_c = (-8.01, 0)$ mrad. Разлика између пречника две преклапајуће спољашње линије дуге је мања од 0.15 mrad и занемарена је у даљњој анализи. У случају графена нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi$ rad и додатно заротираног за угао $\Phi = 0.25\pi$ rad, спољашњи део дугиног обрасца чине две преклапајуће линије облика елипсе које су на слици 7.4(в) обележене словом e . Својствене осе линије e су узајамно ортогоналне и нагнуте за угао од 91.32 mrad у односу на вертикални правац. Велики и мали пречник линије e износе $D_e^M = 160.36$ mrad и $D_e^m = 120.01$ mrad, респективно. Средиште линије e је од координатног почетка отклоњено за вектор $\Delta\theta_c = (-7.76, -1.74)$ mrad.

Приметити да у квалитативном смислу преображај спољашње дуге приказан на сликама 7.4 прати промену облика трансверзалне пројекције елипсоида (7.1) услед промене угла нагиба θ . Спољашња дуга у случају нанотраке није кружница ни у нормалној инциденцији јер су све три полуосе елипсоида (7.1) различите због потпуне анизотропности термалних вибрација атома графена.

Из наведеног се може закључити да термалне вибрације не утичу на облик унутрашње линије дуге h . У случају изотропних термалних вибрација спољашње линије дуге поседују облик кружнице који је независан од узајамне оријентације снопа протона и графена. Ако су термалне вибрације атома угљеника изотропне само у равни графена, тада ненулта нагиб графена у односу на правац снопа протона узрокује промену облика спољашње линије дуге; линија кружног облика s се преобрази у линију облика елипсе e . Ротација око лонгитудиналног правца и накнадни нагиб графена не узрокују промену облика спољашње линије дуге. У случају некорелисаног и потпуно анизотропног топлотног кретања атома угљеника, спољашња линија дуге има облик елипсе. Нагиб графена узрокује већи ексцентрицитет спољашње линије дуге. Ротација око лонгитудиналног правца уз нагиб графена узрокује ротацију спољашње линије дуге e .

Промена облика спољашње линије дуге услед преоријентације графена се подудара са преображајем пројекције елипсоида задатог матрицом $\Sigma^{-1} = \text{diag}(\sigma_x^{-2}, \sigma_y^{-2}, \sigma_z^{-2})$. Ако су термалне вибрације некорелисане и изотропне, тада је коваријанса скаларна матрица $\Sigma = \sigma I$ и нормална пројекција одговарајућег елипсоида је нужно кружница. У случају графена који прекрива бесконачну раван, елипсоид $\Sigma^{-1} = \text{diag}(\sigma_\rho^{-2}, \sigma_\rho^{-2}, \sigma_z^{-2})$ поседује две полуосе исте дужине σ_ρ^{-2} , и једну знатно краћу полуосу дужине σ_z^{-2} . У случају нормалне инциденције пројекција датог елипсоида је кружница. У случају осталих оријентација је нормална пројекција елипса мање величине. У случају нанотраке графена елипсоид $\Sigma^{-1} = \text{diag}(\sigma_x^{-2}, \sigma_y^{-2}, \sigma_z^{-2})$ поседује две различите полуосе истог реда величине σ_x^{-2} и σ_y^{-2} и једну релативно краћу полуосу σ_z^{-2} . У случају нормалне инциденције, нормална пројекција датог елипсоида на трансверзалну раван је елипса. У случају осталих оријентација графена, нормална пројекција истог елипсоида на трансверзалну раван је у општем случају заротирана елипса мањег обима.

7.2.2. Утицај модела потенцијала интеракције на дугин образац

У овом поглављу су представљене угаоне расподеле и линије дуге у случају три различита модела потенцијала интеракције протона и атома угљеника: Дојл-Тарнеровог, ЗБЛ и Молијеровог модела. У прорачунима је коришћена импулсна апроксимација. Дојл-Тарнеров модел потенцијала интеракције протона и угљеника је дата у изразу (4.1). ЗБЛ апроксимација потенцијала интеракције је дата следећим изразом:

$$V^{ZBL}(\mathbf{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_n \alpha_n^{ZBL} \exp\left(-\frac{\beta_n^{ZBL}}{a^{ZBL}} r\right). \quad (7.3)$$

Параметри α_n^{ZBL} и β_n^{ZBL} су компоненте вектора: $\boldsymbol{\alpha}^{ZBL} = (0.1818, 0.5099, 0.2802, 0.02817)$ nm и $\boldsymbol{\beta}^{ZBL} = (3.2, 0.9423, 0.4029, 0.2016)$ nm², ϵ_0 је електрична пропустљивост вакуума, $Z_2 = 6$ је редни број атома угљеника, e је елементарно наелектрисање, a^{ZBL} је радијус екранирања дат изразом:

$$a^{ZBL} = \frac{(9\pi^2/128)^{1/3}}{(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} a_0, \quad (7.4)$$

где је a_0 Боров радијус. Молијеров потенцијал интеракције је:

$$V^M(\mathbf{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_n \alpha_n^M \exp\left(-\frac{\beta_n^M}{a^F} r\right). \quad (7.5)$$

Параметри овог фита α_n^M и β_n^M су компоненте вектора: $\boldsymbol{\alpha}^M = (0.35, 0.55, 0.10)$ nm и $\boldsymbol{\beta}^M = (0.1, 1.2, 6.0)$ nm². a^F је Фирсовљев радијус екранирања:

$$a^F = \frac{(9\pi^2/128)^{1/3}}{(Z_1^{0.5} + Z_2^{0.5})^{3/2}} a_0. \quad (7.6)$$

Претпостављена је нормална инциденција упадног снопа протона. На основу дискусије с почетка поглавља 7.1 и резултата представљених у поглављу 7.2.1, може се закључити да је у случају нормалне инциденције примена Дебајеве теорије термалних вибрација оправдана. У случају изотропних термалних вибрација термално усредњавање разматраних модела потенцијала интеракције даје затворене аналитичке изразе. Дојл-Тарнеров модел усредњен по изотропној расподели отклона атома (4.8) је:

$$V_{th}^{DT}(\mathbf{r}) = 16\pi^{5/2} Z_1 \frac{\hbar^2}{m_e} \sum_n \frac{\alpha_n^{DT}}{(\bar{\beta}_n^{DT})^{3/2}} \exp\left(-4\pi^2 \frac{r^2}{\bar{\beta}_n^{DT}}\right), \quad (7.7)$$

где је $\bar{\beta}_n^{DT} = \beta_n^{DT} + 8\pi^2\sigma_{th}^2$. Израз је по облику истоветан полазном Дојл-Тарнеровом изразу (4.1) до на замену β_n^{DT} са $\bar{\beta}_n^{DT}$. ЗБЛ модел потенцијала интеракције усредњен расподелом (4.8) је једнак:

$$V_{th}^{ZBL}(\mathbf{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_n \alpha_n^{ZBL} \exp \left[\left(\frac{\beta_n^{ZBL} \sigma_{th}}{a^{ZBL} \sqrt{2}} \right)^2 \right] f(r, \beta_n^{ZBL}, a^{ZBL}, \sigma_{th}), \quad (7.8)$$

где је:

$$f(r, \beta, a, \sigma) = \exp \left(-\frac{\beta}{a} r \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\beta\sigma}{a\sqrt{2}} - \frac{r}{\sigma\sqrt{2}} \right) - \exp \left(\frac{\beta}{a} r \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\beta\sigma}{a\sqrt{2}} + \frac{r}{\sigma\sqrt{2}} \right), \quad (7.9)$$

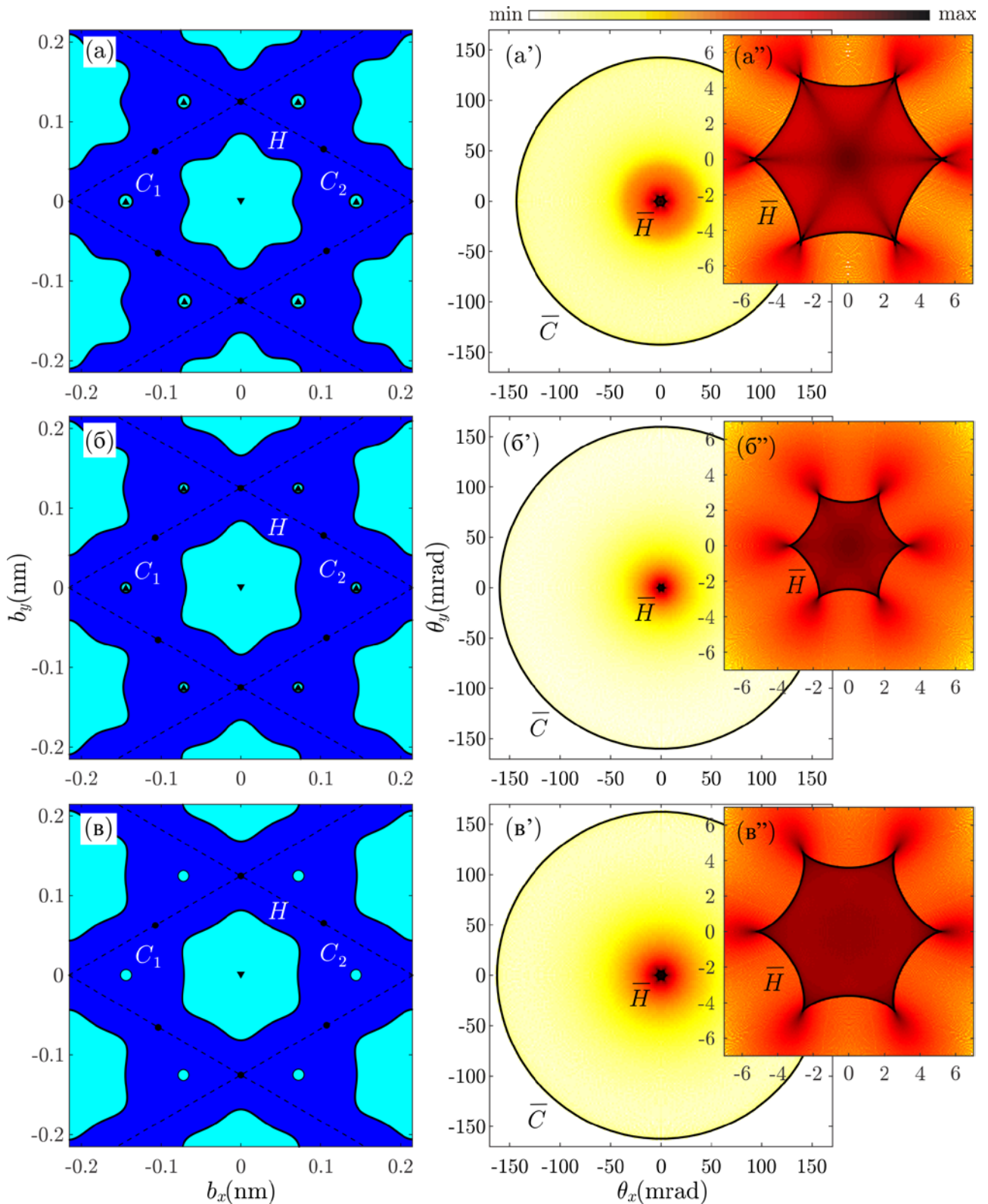
док erfc представља комплементарну ерор функцију [142]. Молијеров потенцијал интеракције усредњен расподелом (4.8) је:

$$V_{th}^M(\mathbf{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_n \alpha_n^M \exp \left[\left(\frac{\beta_n^M \sigma_{th}}{a^F \sqrt{2}} \right)^2 \right] f(r, \beta_n^M, a^F, \sigma_{th}), \quad (7.10)$$

где је функција f дата изразом (7.9).

На сликама 7.5(а), 7.5(б) и 7.5(в) су приказана решења једначине (6.10) у случају Дојл-Тарнеровог, ЗБЛ и Молијеровог модела потенцијала, респективно. У сва три случаја елементарна ћелија графена садржи три линије дуге. Линије дуге C_1 и C_2 су кружнице чији се центри подудару са положајима атома угљеника. Полупречници ових линија су 0.0084 nm, 0.0062 nm и 0.0063 nm у случају Дојл-Тарнеровог, ЗБЛ и Молијеровог модела потенцијала интеракције, тим редом. Линија дуге H која окружује средиште елементарне ћелије има шестоугаону симетрију. Крива H се може описати правилним шестоугаоником, чије су странице у случају Дојл-Тарнеровог, ЗБЛ и Молијеровог модела 0.0847 nm, 0.0840 nm и 0.0815 nm, респективно. Линијама дуге су разграничене области позитивне и негативне кривине редукованог потенцијала. На сликама 7.5(а), 7.5(б) и 7.5(в) су ове области обојене у цијан и плаво респективно. Дуге C_1 и C_2 окружују локалне максимуме редукованог потенцијала интеракције, који су на сликама 7.5(а), 7.5(б) и 7.5(в) обележени са \blacktriangle . Дуга H окружује минимум редукованог потенцијала интеракције означен симболом \blacktriangledown . Седласте критичне тачке редукованог потенцијала интеракције се налазе на ободу елементарне ћелије графена. Има их осам и обележене су са \bullet . Приметити су линије дуге у равни ударног параметра привучене оближњим седластим критичним тачкама редукованог потенцијала интеракције, док су одбијене од стране максимума редукованог потенцијала.

Угаоне расподеле трансмитованих протона су приказане на сликама 7.5(а'), 7.5(б') и 7.5(в'). Одброј је приказан у логаритамској размери. У сва три случаја је спољашњи део угаоне расподеле кружног облика. Унутрашњи део угаоне расподеле, чији је увеличан приказ дат на сликама 7.5(а''), 7.5(б'') и 7.5(в''), има шестоугаону симетрију. Линије дуге у равни углова расејања су представљене кривама црне боје. Очигледно је да линије дуге имају пресудан утицај на облик угаоних расподела. У сва три случаја постоје две линије дуге. Веће линије \bar{C} имају облик кружнице. У случају Дојл-Тарнеровог, ЗБЛ и Молијеровог модела полупречник дуге \bar{C} је 142.5 mrad, 159.9 mrad и 162.4 mrad респективно. Важно је поменути да линију \bar{C} заправо чине два преклапајућа лика линија C_1 и C_2 из равни ударног параметра.



Слика 7.5. (а), (б) и (в) линије дуге у равни ударног параметра израчунате импулсном апроксимацијом у случају Дебајевог модела термалних вибрација и Дојл-Гарнеровог, ЗБЛ и Молијерог модела. Испрекиданим линијама црне боје су обележене границе елементарне ћелије графена. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet . (а'), (б') и (в') Угаоне расподеле и линије дуге у равни углова расејања. (а''), (б'') и (в'') увеличане околине координатног почетка у равни углова расејања.

Мање линије дуге обележене са \bar{H} су ликови дуга H . Ове линије поседују шестоугаону симетрију као и одговарајући преликови. Дуге \bar{H} се могу описати правилним шестоугаоником. Странице описаних шестоугаоника су 5.514 mrad, 3.346 mrad, и 5.191 mrad, респективно. На сликама 7.5(а''), 7.5(б'') и 7.5(в'') су приказани увеличани средишњи делови слика 7.5(а'), 7.5(б') и 7.5(в'). У случају ЗБЛ и Молијеровог модела потенцијала дуге \bar{H} поседују по шест рогова. Свако теме дуге \bar{H} у случају Дојл-Тарнеровог модела садржи лептир.

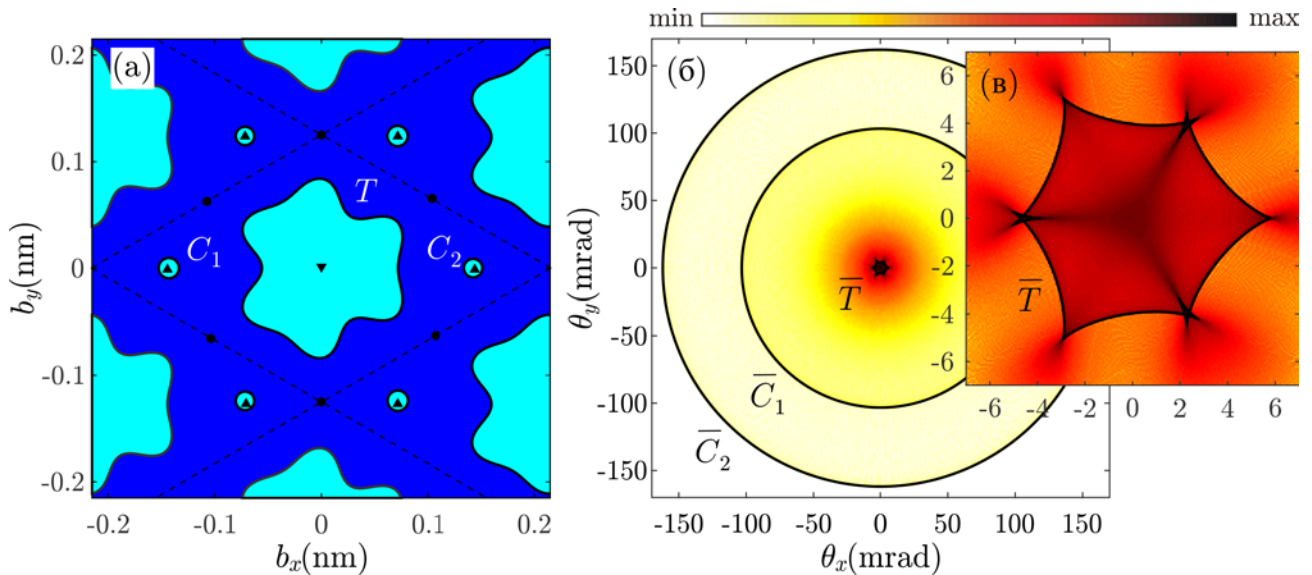
На основу представљених резултата се може закључити да модел потенцијала интеракције снажно утиче на облик унутрашњег дела дугиног обрасца. То значи да анализа облика угаоне расподеле може бити употребљена за одређивање тачнијег модела потенцијала интеракције протона и атома угљеника.

7.2.3. Утицај редног броја атома на дугин образац

Утицај атомског састава кристала на дугин образац је испитан упоредном анализом дугиног расејања протона на графену и дводимензионалном кристалу истоветне структуре али другачијег хемијског састава. Једнослојни хексагонални бор-нитрид поседује потребне особине [143, 144]. Дводимензионални бор-нитрид је укратко описан у глави 2. Стога су у наставку представљени резултати прорачуна дугиног обрасца протона енергије 5 keV трансмитованих кроз дводимензионални кристал бор-нитрида. Претпостављена је нормална инциденција снопа протона. Из тог разлога се термалне вибрације бор-нитрида могу довољно добро моделовати и Дебајевом теоријом. Потенцијал интеракције протона и атома бора и азота је моделован Дојл-Тарнеровим изразом (7.7). Параметри модела су у случају атома бора: $\alpha^{DT} = (0.09446, 0.13120, 0.04188, 0.01159)$ nm и $\beta^{DT} = (0.464438, 0.141778, 0.032228, 0.003767)$ nm², у случају атома азота: $\alpha^{DT} = (0.05717, 0.10425, 0.04647, 0.01311)$ nm и $\beta^{DT} = (0.288465, 0.090542, 0.024213, 0.003167)$ nm². Дебајева температура бор-нитрида на собној температури износи 1650 K [145]. Варијансе термалних вибрација атома бора и азота на собној температури израчунате изразом (4.9) су 24.75 pm² и 19.10 pm², респективно. Израчунате линије дуге у равни ударног параметра и равни углова расејања су приказане на слици 7.6.

На слици 7.6(а) је кривама црне боје приказан дугин образац у равни ударног параметра. Обод елементарне ћелије графена је приказан испрекиданим линијама црне боје. Дугин образац је у свакој елементарној ћелији идентичан и сачињен од једне затворене криве T и две кружнице C_1 и C_2 . Дуга C_1 окружује атом бора, док дуга C_2 окружује атом азота. Дуге C_1 и C_2 су кружнице пречника 0.0184 nm и 0.0168 nm, респективно. Кружна симетрија дуга C_1 и C_2 је одраз кружне симетрије редукованог потенцијала у околини атома бора и азота. Линијама дуге су разграничене области позитивне и негативне кривине потенцијала. На слици 7.6(а) су ове области обојене у цијан и плаво, респективно. Дуге C_1 и C_2 окружују локалне максимуме редукованог потенцијала интеракције, који су на слици 7.6(а) обележени са \blacktriangle . Унутрашња линија дуге је одређена топологијом редукованог потенцијала у околини средишта канала. Како је симетрија редукованог потенцијала у каналу бор-нитрида троугаона, таква је симетрија и унутрашње линије дуге T . Дуга T окружује минимум редукованог потенцијала интеракције означен симболом \blacktriangledown . Седласте критичне тачке редукованог потенцијала интеракције се налазе на ободу елементарне ћелије. Има их осам и обележене су са \bullet . Као и у случају графена, линије дуге су привучене оближњим седластим критичним тачкама редукованог потенцијала интеракције и одбијене од стране максимума редукованог потенцијала.

На слици 7.6(б) је кривама црне боје је приказана угаона расподела трансмитованих протона. Спољашњи део угаоне расподеле је сачињен од две концентричне кружне области. Увеличан приказ средишњег дела расподеле је приказан на слици 7.6(в).



Слика 7.6. Трансмисија протона кроз дводимензионални Дебајев бор-нитрид у случају нормалне инциденције снопа. (а) Кривама црне боје су исцртане линије дуге у равни ударног параметра. Области позитивне и негативне кривине редукованог потенцијала су обојене у цијан и плаво, респективно. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet . (б) и (в) Угаоне расподеле трансмитованих протона у логаритамској размери. Кривама црне боје су исцртане линије дуге у равни углова расејања.

Унутрашњи део угаоне расподеле поседује троугаону симетрију. Дугин образац у равни углова расејања је представљен кривама црне боје. Лако је уочити да линије дуге одређују облик угаоне расподеле. Спољашњи део обрасца чине две концентричне кружнице \bar{C}_1 и \bar{C}_2 . Криве C_1 и C_2 се законом расејања пресликавају у криве у криве \bar{C}_1 и \bar{C}_2 . Унутрашњи део обрасца чини једна крива \bar{T} са троугаоном симетријом. У теменима криве \bar{T} се налазе три рога и три лептира. Крива \bar{T} је лик дуге T . Пречници веће и мање кружнице су 323.6 mrad и 206.4 mrad.

Пречник спољашње дуге у случају графена која је приказана на слици 7.5(а') износи 285 mrad. Редни бројеви атома бора, угљеника и азота су 5, 6 и 7 респективно. У ова три случаја пречник дуге монотонно расте са повећањем редног броја атома. Штавише, може се закључити да је број различитих спољашњих линија дуге једнак броју различитих врста атома који граде кристал. Како садрже информацију о саставу кристала, спољашње линије дуге се називају и *композитне дуге*. Троугаона симетрија линија T и \bar{T} , је одраз троугаоне симетрије редукованог потенцијала интеракције у односу на средиште шестоугаоног канала бор-нитрида. Може се закључити да унутрашња линија дуге одражава структуру кристала искључиво у случају хомоатомских кристала, попут графена. Стога је приликом карактеризације кристала неопходно спровести подробну анализу дугог обрасца у целости. Уколико постоји само једна спољашња линија дуге, кристал је хомоатомски и тада морфологија унутрашње линије дуге одражава не само симетрију потенцијала интеракције у односу на средиште канала већ и симетрију самог канала кристала.

7.2.4. Преображај дугог обрасца услед промене оријентације

Спроведена је подробна анализа преображаја дугог обрасца узрокованог променом вредности поларног угла θ . Вредност азимуталног угла је притом непроменљива и једнака нули. Потом је објашњена веза уочене еволуције облика линија дуге и промене облика редукованог потенцијала интеракције $\varphi(\mathbf{b})$.

У наставку су унутрашње и спољашње линије дуге у равни ударног параметра обележене са I_1, I_2, \dots и O_1, O_2, \dots , респективно. Бројна вредност дуге одговара редоследу појављивања. Ликови ових линија у равни углова расејања су обележени са $\bar{I}_1, \bar{I}_2, \dots$ и $\bar{O}_1, \bar{O}_2, \dots$, респективно. Потенцијал интеракције поседује рефлексивну симетрију у односу на x и y осе. Стога је таква и симетрија одговарајућег дугиног обрасца. Линија дуге која одговара рефлексiji криве I у односу на x или y осу је означена са I' или $-I$, респективно. Екстремуми и превојне тачке кривине линије дуге у равни ударног параметра су обележени са a, b, \dots . Ликови ових тачака образовани рефлексijом у односу на x или y су обележени са a', b', \dots , односно $-a, -b, \dots$ респективно. Бифуркацијом тачке a настају тачке обележене са a_1, a_2, \dots . Лик произвољне критичне тачке p је у равни углова расејања обележен са \bar{p} .

На слици 7.7(a) је кривама црне боје приказан дугин образац у случају $\theta = 0$ mrad. Унутрашњи део обрасца чини једна крива \bar{I} са шестоугаоном симетријом, док спољашњи део обрасца чини линија \bar{O} облика кружнице. У горњем десном углу слике 7.7(a) је приказан увећан средишњи део равни углова расејања и јасно се виде лептири $F_5^{(1)}, \dots, F_5^{(6)}$ у теменима шестоугаоне криве \bar{I} . У доњем десном углу слике 7.7(a) је приказан увеличан део равни углова расејања у околини лептира $F_5^{(6)}$.

Линије дуге деле раван углова расејања на области различитог мултиплицитета пресликавања инверзног закону расејања: $\theta \rightarrow b$. Израчунате вредности мултиплицитета су 0, 2, 4, 6 и 8. Одговарајући подскупови су обојени белом бојом и различитим преливима црвене боје, од светло до тамно црвене. Локално линије дуге разграничавају области чији се мултиплицитет разликује за 2. Нулту вредност мултиплицитета поседује област изван спољашње линије дуге \bar{O} . Израчунат мултиплицитет тачака у унутрашњости линије дуге \bar{O} није 2 већ 4. Тиме је потврђено да крива \bar{O} представља две преклапајуће линије дуге. Мултиплицитет већине тачака унутар линије дуге \bar{I} је 6. Увеличан приказ равни углова расејања који се налази у доњем десном углу слике 7.7(a). Највећу вредност мултиплицитета имају тачке у унутрашњости средишњег рога лептира.

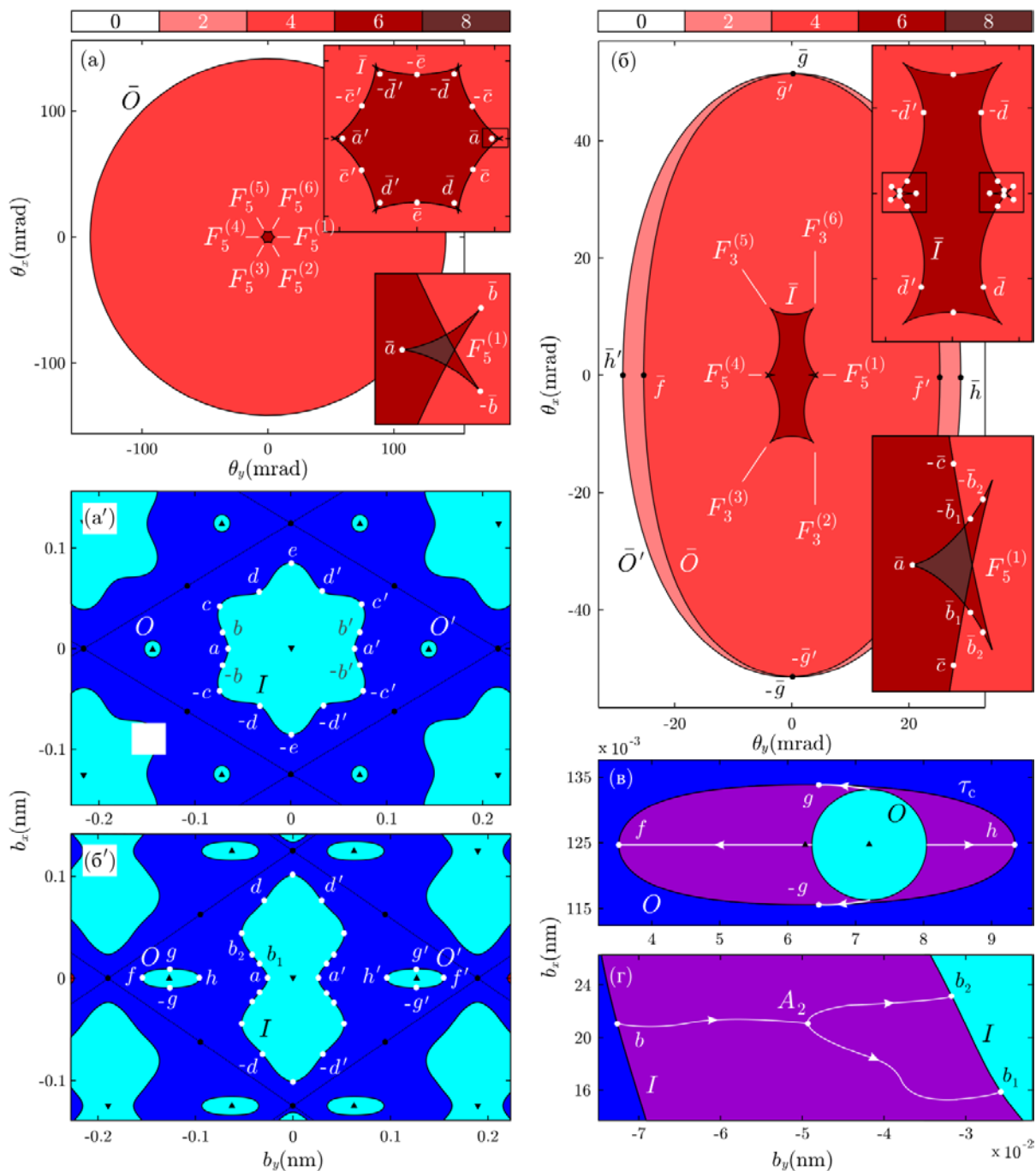
Линијама црне боје су на слици 7.7(a') представљене линије дуге у равни ударног параметра. Обод елементарне ћелије графена је приказан испрекиданим линијама црне боје. Дугин образац је у свакој елементарној ћелији идентичан и сачињен од једне затворене криве I и две затворене кружнице O и O' . Линија I се законом расејања пресликава у криву \bar{I} , а криве O и O' у криву \bar{O} . Слика сведочи да линија \bar{O} заиста представља две преклапајуће линије дуге. У том смислу је дуга \bar{O} двоструко дегенерисана.

Линије дуге су нуле Хесијана редукованог потенцијала интеракције и стога контуре нулте закривљености површи која је дефинисана редукованим потенцијалом интеракције. Линијама дуге су разграничене области позитивне и негативне кривине потенцијала. На слици 7.7(a') су ове области обојене у цијан и плаво респективно. Дуге окружују екстремуме редукованог потенцијала. Прецизније, линије дуге затварају области у којима је закривљеност потенцијала позитивна. У средини линије I се налази локални минимум потенцијала обележен са \blacktriangledown . Центри линија O и O' се подударају с локалним максимумима потенцијала интеракције и обележени су са \blacktriangle . Седласте критичне тачке редукованог потенцијала интеракције се налазе на ободу елементарне ћелије графена. Има их осам и обележене су са \bullet .

Чворови линија дуге су на слици 7.7(a') обележени тачкама беле боје. Кружне линије дуге O и O' немају чворове. Чворови дуге I су обележени словима a, b, c, d и e . Тачке a, d и њихови симетријски еквиваленти су минимуми кривине дуге. Тачке c, e и одговарајући симетријски еквиваленти су максимуми кривине линије дуге. Између сваког максимума и минимума функције кривине се налази превојна тачка. У овој анализи су значајне тачке $b, b', -b$ и $-b'$. Слике 7.7(a) и 7.7(a') указују да се минимуми кривине линије дуге I пресликавају у сингуларитете линије дуге \bar{I} , тј. средишње рогове лептира. Максимуми кривине се пресликавају у средишње тачке страна шестоугаоне криве \bar{I} . Утврђено је да се лук

дуге I између тачака $-c$ и c законом расејања пресликава у лептир $F_5^{(1)}$. Превојне тачке b и $-b$ се готово савршено пресликавају у два бочна рога лептира $F_5^{(1)}$.

У поглављу 6.3.1 је потанко испитан преображај линија дуге у случају катастрофа F_3 , F_4 и F_5 . Анализом преображаја модела F_5 је закључено да лук дуге I између тачака $-c$ и c у равни ударног параметра може имати један или три чвора. С друге стране, лик овог дела дуге се пресликава у лептир сачињен од три рога. Однос броја чворова линије дуге у равни ударног параметра и броја сингуларних тачака дуге у равни углова расејања је могуће боље разумети анализом параметарског простора (α, β) катастрофе F_5 .



Слика 7.7. (а) и (б) Линије дуге и расподела мултиплицитета у равни углова расејања за $\theta = 0$ mrad и $\theta = 500$ mrad. (а') и (б') Одговарајући дугини обрасци у равни ударног параметра. (в) и (г) Бифуркације чворова дуга O и I . Области позитивне и негативне кривине редукованог потенцијала су обојене у цијан и плаво, респективно. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet .

Параметар α одређује величину дугиног обрасца. Параметар β утиче на симетрију лептира. У простору параметара приказаном на слици 6.4(а) постоје три значајне криве обележене са D_θ , D_b и D_k . Свака крива дели раван (α, β) на два подскупа. Лептири са различитих страна кривих D_θ , D_b и D_k се разликују према броју сингуларитета дуге у равни углова расејања, броју критичних тачака и чворова дуге у равни ударног параметра, респективно. Међутим поменуте три криве се не преклапају. Последично број сингуларитета угаоне дуге и број критичних тачака или чворова дуге у равни ударног параметра нису нужно једнаки. Показано је да се један минимум и две оближње превојне тачке кривине линије дуге пресликавају у три рога угаоне дуге ако се тачка (α, β) налази између кривих D_θ и D_b (обратити пажњу на тачку 2 на сликама 6.4(б) и 6.4(г)). Линије дуге \bar{I} и \bar{O} немају петље и стога су индекси ових дуга +1.

На слици 7.7(б) је приказан дугин образац у равни углова расејања у случају нагиба $\theta = 500 \text{ mrad}$. Уочава се укидање дегенерације спољашње линије дуге; уместо једне линије дуге кружног облика, сада постоје две криве \bar{O} и \bar{O}' облика елипсе. Укидање дегенерације се одражава и на расподелу мултиплицитета. Линија \bar{O} је благо отклоњена улево, дуга \bar{O}' је једнако отклоњена удесно. Промена унутрашње линије дуге \bar{I} је сложенија; лептири $F_5^{(2)}$, $F_5^{(3)}$, $F_5^{(5)}$ и $F_5^{(6)}$ су преображени у рогове $F_3^{(2)}$, $F_3^{(3)}$, $F_3^{(5)}$ и $F_3^{(6)}$. Пажљиво је испитана ова промена облика. Закључено је да се приликом повећања угла нагиба графена θ , средишњи и бочни рог лептира приближавају. За вредност угла $\theta = 234.6 \text{ mrad}$ ове две сингуларне тачке се узајамно пониште бифуркацијом. Преостаје само један бочни рог. Ова промена облика је у поглављу 6.3.1 приказана на слици 6.4(б). Додатним повећањем вредности угла θ се унутрашња линија дуге сажима дуж хоризонталног правца а шири дуж вертикалног правца.

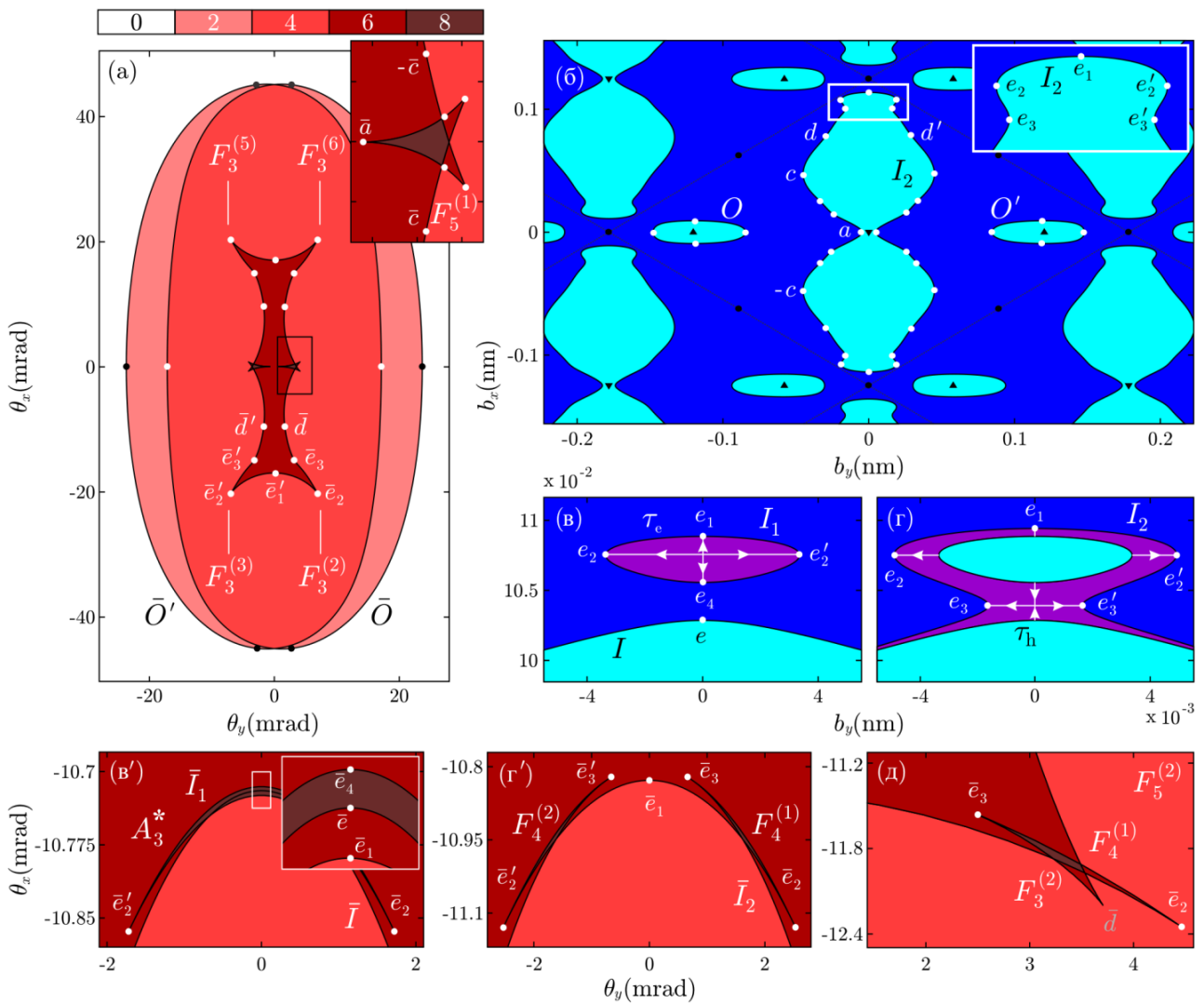
Одговарајући дугин образац у равни ударног параметра је приказан на слици 7.7(б'). Спољашњи део дугиног обрасца чине две линије O и O' облика елипсе. Обе криве имају по четири чвора. Тачке f , g , h и одговарајући симетријски ликови ових тачака су чворови дуга које чине спољашњи део дугиног обрасца. Стога је нетривијална еволуција само тачака f , g и h . Путање које ове тачке исцртавају услед промене вредности угла нагиба θ су приказане на слици 7.7(в). Слика показује да сва четири чвора настају бесконачно малим нагибом графена. Процес се може схватити као бифуркација чворова кружнице. Ова бифуркација је подробно описана у поглављу 5.2 и на слици 7.7(в) је обележена са τ_c .

Унутрашњи део дугиног обрасца чини једна издужена крива I са 20 чворова. Приметити да описан преображај четири лептира у равни углова расејања није праћен променом облика криве I у околини тачке d и симетријских еквивалената ове тачке. Ако је $\theta = 0 \text{ mrad}$ тачка d се пресликава у средишњи рог одговарајућег лептира у равни углова расејања. Ако је вредност угла нагиба $\theta = 234.6 \text{ mrad}$, тачка d се пресликава у двоструко дегенерисану сингуларну тачку која настаје узајамном анихилацијом два рога. Током овог процеса се пар рогова који се узајамно поништавају удаљава од трећег рога. Након одмотавања лептира се тачка d пресликава у тачку \bar{d} . Ова тачка је према описаној еволуцији придружена преосталом рогу. Приметити да се тачка \bar{d} не подудара са врхом рога. Ово понашање је сагласно са одмотавањем катастрофичног модела F_5 , у случају мале почетне а велике коначне вредности параметра асиметрије β (одговарајућа путања је приказана на слици 6.4 у поглављу 6.3.1).

Слика 7.7(б') указује на постојање два чвора b_1 и b_2 уместо једне превојне тачке b . Преображај тачке b је испитан и приказан на слици 7.7(г). При нагибу $\theta = 444.9 \text{ mrad}$ превојна тачка b постаје дегенерисана критична тачка. Бифуркацијом A_2 се ова дегенерисана критична тачка грана у две критичне тачке. Истоветна је еволуција свих симетријских еквивалената ове тачке. Увећан приказ равни углова расејања, који се налази у доњем десном углу слике 7.7(б), показује да се тачке b_1 и b_2 пресликавају у околину рога угаоне дуге. Након бифуркације су три чвора $-b_1$, b и b_1 придружена лептиру $F_5^{(1)}$. Уочено понашање савршено одговара преображају катастрофичног модела F_5 када је $\alpha \ll -1$. Линије дуге ограничавају области у којима је кривина редукованог потенцијала позитивна. Унутар сваког острва позитивне кривине налази се елиптичка тачка. Стога је индекс сваке угаоне линије дуге +1.

На слици 7.8(a) су приказани резултати прорачуна када је $\theta = 600$ mrad. Спољашњи део дугиног обрасца чине и даље две линије \bar{O} и \bar{O}' облика елипсе са истим бројем и распоредом чворова као у случају $\theta = 500$ mrad. На први поглед је и облик унутрашње линије дуге \bar{I}_2 непромењен. У горњем десном углу слике 7.8(a) је приказан увећан лептир $F_5^{(1)}$, који је истоветан оном са слике 7.7(б). Кривина линије дуге \bar{I}_2 мења знак у роговима $F_3^{(2)}$, $F_3^{(3)}$, $F_3^{(5)}$ и $F_3^{(6)}$. Слика указује да нема значајних промена у расподели мултиплицитета.

На слици 7.8(б) је приказан одговарајући дугин образац у равни ударног параметра. Сходно очекивању, чворови линија O и O' се пресликавају у чворове дуга \bar{O} и \bar{O}' . Унутрашња линија дуге I_2 има 28 чворова. У горњем десном углу слике 7.8(б) је дат увећан приказ дела линије дуге I_2 . Додатних 8 чворова настаје бифуркацијом тачака e и $-e$, чиме настаје по пет нових чворова. Праћен је преображај унутрашње линије дуге у опсегу углова $\theta \in [500, 600]$ mrad. Када угао нагиба θ достигне вредност 506.3 mrad настаје линија дуге I_1 са четири чвора.



Слика 7.8. (а) Линије дуге и мултиплицитет пресликавања у равни углова расејања за $\theta = 600$ mrad. (б) Одговарајући дугин образац у равни ударног параметра. (в) и (г) Бифуркације чворова дуга I и I_1 , респективно. (в') и (г') Ликови бифуркација у равни углова расејања. (д) Увећан приказ лептира $F_5^{(2)}$ за $\theta = 520$ mrad. Области позитивне и негативне кривине редукованог потенцијала су обојене у цијан и плаво, респективно. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet .

Раст вредности угла θ узрокује раст линија дуге I_1 не мењајући број чворова. На слици 7.8(в) је приказана линија дуге I_1 у случају $\theta = 508 \text{ mrad}$. Приказане су путање чворова e_1, e_2, e'_2 и e_4 током промене вредности угла нагиба у опсегу од 0 mrad до 508 mrad . Уколико је вредност угла нагиба мало већа од 506.3 mrad , линија I_1 је по облику веома слична елипси. Стога се настанак ове линије може описати коњугационом бифуркацијом конусног пресека. Ову врсту бифуркације у случају елипсе обележавамо са τ_e . Елиптичка коњугациона бифуркација је процес у ком обе осе елипсе након изједначавања с нулом постају чисто имагинарне величине. Долази до коњугације елипсе; реална елипса постаје имагинарна. Еволуција линије дуге I_1 , приказана на слици 7.8(в), одговара инверзној елиптичкој коњугационој бифуркацији.

Наставак еволуције унутрашње линије дуге је приказан на слици 7.8(г). Са порастом вредности угла θ , линија I_1 се повећава. Када вредност угла θ достигне вредност 509.34 mrad , чвор e_4 линије I_1 се додирне са чвором e дуге I . У тачки додир се две дуге обједине. На тај начин настаје линија дуге I_2 , чворови e и e_4 се узајамно пониште и настану два симетрична чвора e_3 и e'_3 . Приметити да се у околини чворова e, e_4, e_3 и e'_3 линије дуге могу моделовати деловима хиперболе. Стога се процес спајања линија дуге, приказан на слици 7.8(г), може схватити као преображај хиперболе у коњуговану хиперболу. Коњугација хиперболе је процес у коме већа и мања полуоса хиперболе теже нули и након изједначавања с нулом постају чисто имагинарне величине. Очито је реч о хиперболичкој коњугационој бифуркацији τ_h .

Преображај одговарајућих дуга у равни углова расејања је приказан на сликама 7.8(в'), 7.8(г'), 7.8(д). Крива I_1 је пресликана у линију \bar{I}_1 која садржи два рога и два чвора. У теорији катастрофа је овај облик познат као *усне* и обележава се са A_3^* [78]. Максимуми функције кривине e_2 и e'_2 , пресликавају се у рогове \bar{e}_2 и \bar{e}'_2 . Минимуми кривине e_1 и e_4 се пресликавају у чворове дуге \bar{I}_1 . У тачки у којој се дешава бифуркација τ_h настају два ластина репа $F_4^{(1)}$ и $F_4^{(2)}$. Чворови e_2, e'_2, e_3 и e'_3 се пресликавају у рогове ластиних репова $F_4^{(1)}$ и $F_4^{(2)}$. Описани образац је приказан на слици 7.8(г') за вредност $\theta = 510 \text{ mrad}$. Описана еволуција дугиног обрасца одговара одмотавању правога хиперболичког средишта коранка 2 [146]. Стога постоји савршен однос између чворова дуга у равни ударног параметра и сингуларитета и чворова дуга у равни углова расејања. За веће вредности угла θ , ластин реп $F_4^{(1)}$ се приближава рогу $F_3^{(2)}$ и заједно граде нови образац лептира $F_5^{(2)}$. Овај образац је приказан на слици 7.8(д) за вредност угла $\theta = 520 \text{ mrad}$. Са повећањем вредности угла θ , рог придружен чвору d и рог \bar{e}_3 се узајамно пониште седластом бифуркацијом. Овиме је лептир $F_5^{(2)}$ сведен на рог $F_3^{(2)}$, који је приказан на слици 7.8(а), с тим што је сада сингуларитет придружен тачки \bar{e}_2 . Ова седласта бифуркација узрокује промену знака функције кривине линије дуге \bar{I}_2 у околини тачке \bar{e}_2 .

Сходно очекивању, линије дуге у равни ударног параметра обухватају области у којима је кривина потенцијала позитивна. Индекси дуга O, O' и I_2 су једнаки $+1$, док су индекси дуга I_1 и $-I_1$ једнаки нули.

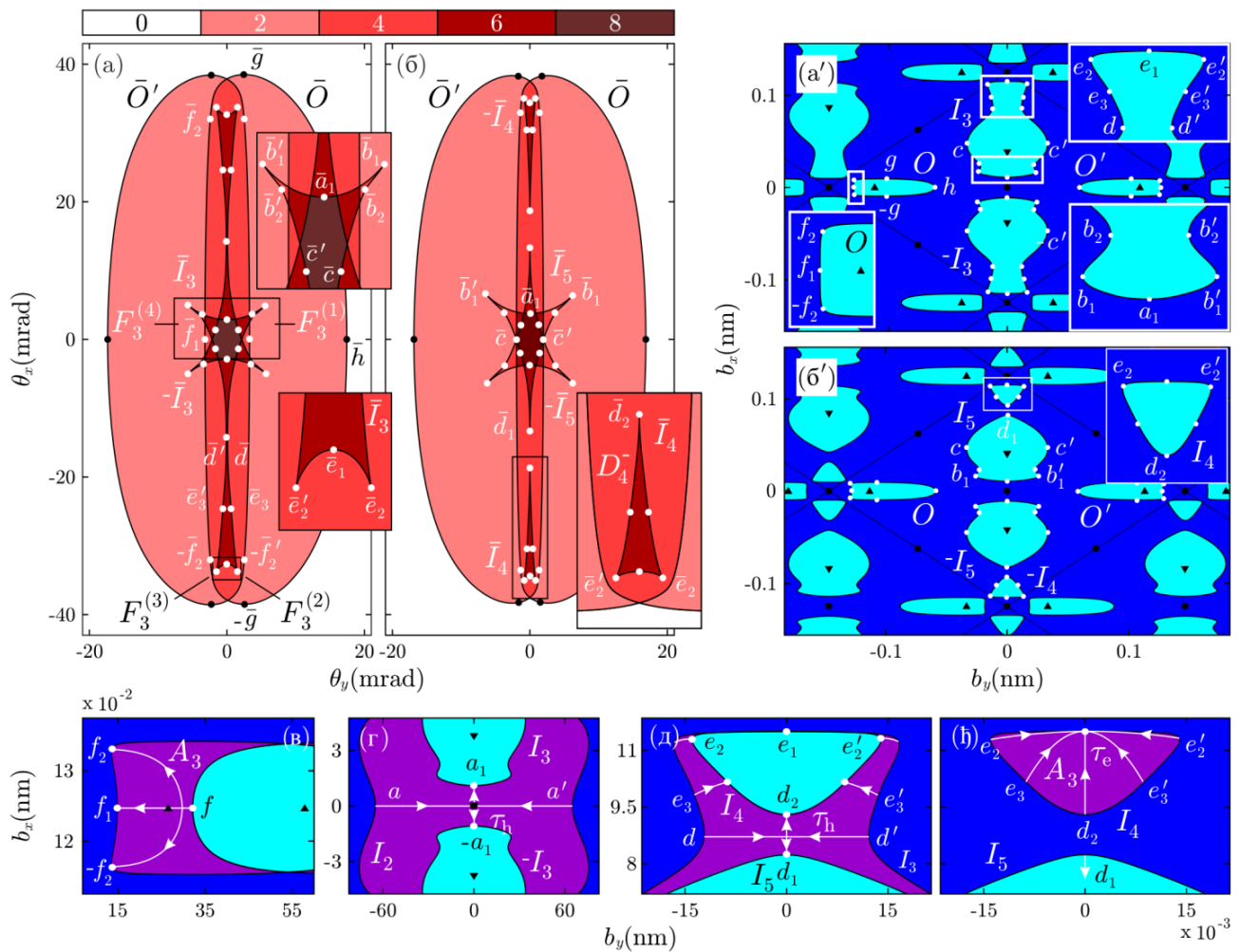
Дугин образац и мултиплицитет инверза закона расејања су у случају нагиба $\theta = 800 \text{ mrad}$ приказани на слици 7.9(а). Спољашњи део дугиног обрасца је истоветан са спољашњим обрасцима приказаним на сликама 7.7(б) и 7.8(а). Прорачуни су показали да дуге \bar{O} и \bar{O}' садрже по четири чвора. Унутрашњи део дугиног обрасца чине две линије четвороугаоног облика \bar{I}_3 и $-\bar{I}_3$. Дуге \bar{I}_3 и $-\bar{I}_3$ садрже по четири рога, који су обележени са $F_3^{(1)}, \dots, F_3^{(4)}$ и $-F_3^{(1)}, \dots, -F_3^{(4)}$, респективно. У доњем делу слике је дат увећан приказ који сведочи да кривина линије дуге не мења знак у околини тачака \bar{e}_2 и \bar{e}'_2 .

Мултиплицитет пресликавања је сада битно другачији. Мултиплицитет тачака унутар дуга \bar{O} и \bar{O}' је једнак 2. Пресек унутрашњости ових дуга образује област у којој је

мультиплицитет 4. Мультиплицитет дуге $\pm\bar{I}_3$ је такође једнак 2. Преклапањем наведених дуга, настају области унутар којих мултиплицитет има вредности у опсегу од 4 до 8.

На слици 7.9(а') је приказан одговарајући дугин образац у равни ударног параметра. Спољашње линије дуге O и O' садрже по 6 чворова. У доњем левом углу је приказано увећање одговарајућег дела равни ударног параметра. Јасно се на месту првобитног чвора f виде три чвора дуге O . Настанак ових чворова је изучен праћењем преображаја дуге O услед промене вредности угла θ у опсегу $[600, 800]$ mrad. Путање чворова дуге су приказане на слици 7.9(в). Максимум функције кривине, који одговара чвору f , грана се на три екстремума када угао θ достигне вредност 635 mrad. Реч је о виљушка бифуркацији која се обележава са A_3 . На овај начин су од једног чвора настала три нова. Нови минимум функције кривине је обележен са f_1 , док су нова два максимума обележени са f_2 и $-f_2$. Са повећањем вредности угла θ , настали чворови се крећу до положаја приказаних на слици 5.4(а'). Ликови ових чворова су у равни углова расејања обележени са \bar{f}_1 и $\pm\bar{f}_2$. Приметити да се једино чвор f_1 законом расејања пресликава у одговарајући чвор угаоне линије дуге \bar{O} .

Слика 7.9(а') показује да сада уместо једне линије дуге I_2 , постоје две дуге $\pm I_3$. Може се закључити да су деобом дуге I_2 нестале тачке a и a' , а настали чворови $\pm a_1$ дуге $\pm I_3$.



Слика 7.9. (а) и (б) Дугин образац у равни углова расејања и мултиплицитет пресликавања за $\theta = 800$ mrad и $\theta = 825$ mrad, респективно. (а') и (б') Одговарајући дугини обрасци у равни ударног параметра. (в)-(ћ) Бифуркације чворова дуга O , I_3 и I_4 . Области позитивне и негативне кривине редукованог потенцијала су обојене у цијан и плаво, респективно. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet .

Кретање тачака a и a' је приказано на слици 7.9(г). Утврђено је да се чворови додирују када угао нагиба достигне вредност 604.28 mrad . Тада наступа хиперболичка коњугациона бифуркација τ_h . Последишно настају два нова чвора $\pm a_1$ и две нове дуге $\pm I_3$. Додиром лептира $F_5^{(1)}$ и $F_5^{(4)}$ у равни углова расејања нестају средишњи рогови ових облика. На тај начин настају лукови који спајају тачке \bar{b}_1 и \bar{b}'_1 , односно $-\bar{b}_1$ и $-\bar{b}'_1$ дуга $\pm \bar{I}_3$, респективно. Додиром лептира $F_5^{(1)}$ и $F_5^{(4)}$ настају рогови $F_3^{(1)}$ и $F_3^{(4)}$ линије \bar{I}_3 , и два одговарајућа симетријска еквивалента који припадају дуги $-\bar{I}_3$.

Редуковани потенцијал интеракције на почетку еволуције има један минимум, означен са \blacktriangledown . Када нагиб достигне вредност 790 mrad дешава се деоба минимума на једну седласту тачку обележену са \bullet и два минимума означена са \blacktriangledown . Може се закључити да је τ_h бифуркација дугиног обрасца подударна са бифуркацијом A_3 критичних тачака редукованог потенцијала. Слика потврђује да линије дуге обухватају области позитивне кривине редукованог потенцијала интеракције. Индекси линија дуге су једнаки $+1$.

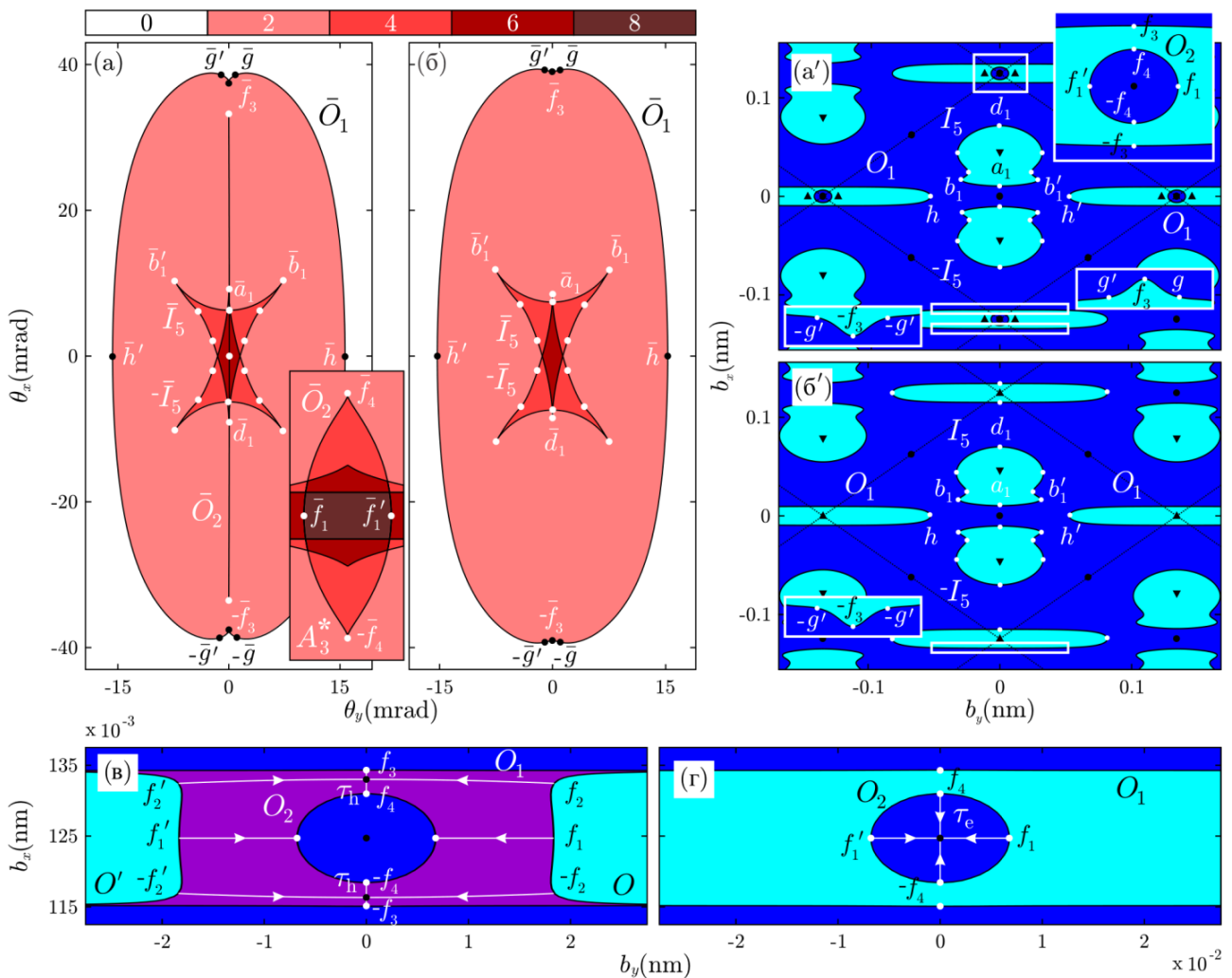
На слици 7.9(б) је приказан дугин образац у случају нагиба $\theta = 825 \text{ mrad}$. Облик спољашњег дела дугиног обрасца је исти као у случају приказаном на слици 7.9(а). Унутрашњи део дугиног обрасца сада чине четири криве облика троугла, обележене са $\pm \bar{I}_4$ и $\pm \bar{I}_5$. Мултиплицитет инверзног пресликавања закону расејања је сличан оном са слике 7.9(а). Нове унутрашње линије дуге $\pm \bar{I}_4$ се налазе унутар области мултиплицитета 4, која је образована пресеком дуга \bar{O} и \bar{O}' . Мултиплицитет унутар дуга $\pm \bar{I}_4$ је 6.

На слици 7.9(б') је приказан одговарајући дугин образац у равни ударног параметра. Дуге $\pm I_4$ садрже по 6 чворова, док дуге $\pm I_5$ имају по 8 чворова. Поређењем слика 7.9(а') и 7.9(б') чини се да су нове линије дуге I_4 и I_5 настале деобом дуге I_3 у околини тачака d и d' . У опсегу $\theta \in [800, 880] \text{ mrad}$ је испитана промена облика дела дуге који је приказан у горњем десном делу слике 7.9(а'). Израчунате путање чворова дуге су приказане на сликама 7.9(д) и 7.9(ђ). На почетку еволуције се сви чворови изузев чвора e_1 крећу према вертикалној оси рефлексивне симетрије дуге. Чвор e_1 се налази на вертикалној оси рефлексивне симетрије и стога је непомичан. Слика 7.9(д) показује да се чворови d и d' крећу према вертикалној оси рефлексивне симетрије дуге најкрећим путем. Када угао нагиба достигне вредност $\theta = 825 \text{ mrad}$, тачке d и d' се додирују, услед чега се хиперболичком τ_h бифуркацијом узајамно пониште. Линија дуге I_3 се подели на две дуге и настају два нова чвора d_1 и d_2 . Дуга I_4 са шест чворова, пресликава се законом расејања у дугу \bar{I}_4 , приказану у доњем десном углу слике 7.9(б). Приметити савршен однос између чворова дуге I_4 са једне и сингуларитета и чворова дуге \bar{I}_4 са друге стране. Уочен однос чворова и сингуларитета је својствен дугином обрасцу катастрофе D_4^- која се назива елиптичко средиште. Чвор d_1 дуге I_5 се пресликава у рог \bar{d}_1 дуге \bar{I}_5 . Са повећањем вредности угла θ , сви чворови дуге I_4 настављају да се крећу према чвору e_1 . Чворови d_2 , e_3 и e'_3 се узајамно пониште виљушка бифуркацијом A_3 чиме настаје нови чвор d_3 . Дуга I_4 се смањује. По облику постаје неразличива од елипсе. Када угао нагиба достигне вредност $\theta = 871.38 \text{ mrad}$, чворови e_1 , e_2 , e'_2 и d_3 се узајамно пониште τ_e бифуркацијом. Дуга I_4 се сажме у тачку и нестаје.

Као и до сад, линије дуге обухватају области у којима је кривина редукованог потенцијала интеракције позитивна. Прорачуни су показали да су индекси дуга O , O' и $\pm I_5$ једнаки $+1$, док су индекси дуга $\pm I_4$ једнаки нули.

Дугин образац и мултиплицитет у равни углова расејања су у случају нагиба $\theta = 880 \text{ mrad}$ и $\theta = 900 \text{ mrad}$ приказани на сликама 7.10(а) и 7.10(б), респективно. Унутрашњи део дугиног обрасца сачињен од линија $\pm \bar{I}_5$ је непромењен. Спољашњи део дугиног обрасца претрпи значајну промену. Уместо симетричног пара \bar{O} и \bar{O}' , сада постоји линија дуге \bar{O}_1 , позната као хипопед [147] и линија дуге налик на усне \bar{O}_2 . Мултиплицитет инверзног пресликавања закону расејања је значајно измењен. Мултиплицитет тачака у унутрашњости дуге \bar{O}_1 је 2. Већи део области која се налази у пресеку троугаоних линија $\pm \bar{I}_5$ има мултиплицитет 4 или 6. Мултиплицитет има највишу вредност 8 и то у околини координатног почетка.

Одговарајући дугин образац у равни ударног параметра је приказан на слици 7.10(а'). Унутрашњи део дугиног обрасца чине дуге $\pm I_5$. Број и распоред чворова дуга је непромењен у односу на случај приказан на слици 7.9(б'). Сходно увећањима датим у горњем и доњем углу слике, закључује се да спољашњи део дугиног обрасца чини дуга облика елипсе са четири чвора O_2 , и дуга са осам чворова O_1 . Образац је настао спајањем линија O и O' из суседних елементарних ћелија графена. Ова претпоставка је проверена анализом еволуције ових линија дуге. У опсегу углова нагиба $\theta \in [850, 900]$ mrad. Је испитано кретање чворова f_1 и $\pm f_2$ линије O и чворова f'_1 и $\pm f'_2$ линије O' . Израчунате путање чворова су приказане на сликама 7.10(в) и 7.10(г). На почетку еволуције се сви чворови дуга крећу према темену елементарне ћелије графена. Уочено је да се чворови $\pm f_2$ и $\pm f'_2$ крећу брже него чворови f_1 и f'_1 . Када угао нагиба достигне вредност $\theta = 871.91$ mrad тачке $\pm f_2$ и $\pm f'_2$ се додирну. Наступа хиперболичка коњугациона бифуркација. Тачке $\pm f_2$ и $\pm f'_2$ се узајамно поништавају услед чега настају парови тачака $\pm f_3$ и $\pm f_4$. Слика 7.10(а) показује да се чворови $\pm f_3$, $\pm g$, $\pm g'$, h и h' пресликавају у чворове хипопеда \bar{O}_1 . Чворови $\pm f_4$ и пар чворова f_1 и f'_1 образују дугу O_2 . Ова крива се законом расејања пресликава у дугу \bar{O}_2 приказану на слици 7.10(а). Са повећањем вредности угла нагиба θ , дуга O_2 се сажима.



Слика 7.10. (а) и (б) Дугин образац у равни углова расејања и мултиплицитет пресликавања за $\theta = 880$ mrad и $\theta = 900$ mrad, респективно. (а') и (б') Одговарајући дугини обрасци у равни ударног параметра. (в) и (г) Бифуркације чворова дуга O_1 и O_2 . Области позитивне и негативне кривине редукованог потенцијала су обојене у цијан и плаво, респективно. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet .

Када угао θ достигне вредност $\theta = 886.81$ mrad, чворови дуге се узајамно пониште у елиптичкој коњугационој бифуркацији и дуга O_2 нестаје. На сликама 7.10(б) и 7.10(б') је приказан остатак дугиног обрасца. Коначна расподела мултиплицитета је веома слична случају приказаном на слици 7.10(а). Нестанак дуге \bar{O}_2 се одражава и на мултиплицитет. У пресеку дуга $\pm \bar{I}_5$ сада је мултиплицитет 6.

Закривљеност редукованог потенцијала у унутрашњости линије дуге је у досадашњој анализи била позитивна. Очито ово није правило. На сликама 7.10(а') и 7.10(в) се може видети да дуга O_2 затвара област негативне закривљености редукованог потенцијала са једном седластом тачком. Седласта тачка је хиперболичка критична тачка потенцијала и стога је индекс дуге O_2 једнак -1. Прорачуни су показали да су индекси осталих линија дуге једнаки +1.

Приметити да је нестанак дуге O_2 праћен нестанком и обухваћене седласте критичне тачке редукованог потенцијала. Место седласте критичне тачке заузима нови максимум редукованог потенцијала интеракције. Током овог процеса, нестају и два максимума у унутрашњости линије дуге O_1 . Закључује се да је елиптичка коњугациона бифуркација линије дуге праћена бифуркацијом критичних тачака редукованог потенцијала интеракције.

7.2.5. Решавање инверзног проблема

Резултати прорачуна сведоче да је линије дуге могуће поделити у две класе: спољашње и унутрашње линије дуге. Прву класу чине дуге које обухватају максимуме редукованог потенцијала интеракције. Ове дуге су образоване путањама протона који су расејани у малој околини атома. Другу класу чине линије дуге које обухватају минимуме и седласте тачке редукованог потенцијала интеракције. Унутрашње линије дуге образују протони на чије расејање значајно утиче више атома кристала. Облик ових линија је могуће описно објаснити. Седласте тачке привлаче унутрашње линије дуге док их екстремуми редукованог потенцијала одбијају. Да ли се на основу измерене угаоне расподеле може нешто закључити о топологији редукованог потенцијала и одговарајућим дугиним линијама, испитано је у овом поглављу.

Уочити дугине максимуме угаоне расподеле може бити изазован експериментални подухват. Коначна резолуција, засићење детектора и шум који узрокује сметње у излазном сигналу су само неке од могућих узрока потешкоћа у мерењу ефекта дугиног расејања протона на 2Д кристалима. Међутим важна одлика линија дуге је да одвајају области различитог мултиплицитета. Стога се линије дуге испољавају као оштри и асиметрични пикови у угаоној расподели. Морфолошка анализа се заснива на изучавању облика а не тачног положаја линија дуге или вредности мултиплицитета. Начела морфолошке анализе су:

Н1: Због глаткости редукованог потенцијала интеракције, линије дуге у равни ударног параметра су криве без сингуларних тачака.

Н2: Закривљеност редукованог потенцијала интеракције је у околини екстремума позитивна, док је у околини седластих тачака негативна.

Н3: Индекс екстремума је +1, индекс седласте критичне тачке је -1, а индекс линије дуге у равни ударног параметра једнак је збиру индекса критичних тачака које припадају унутрашњости линије дуге.

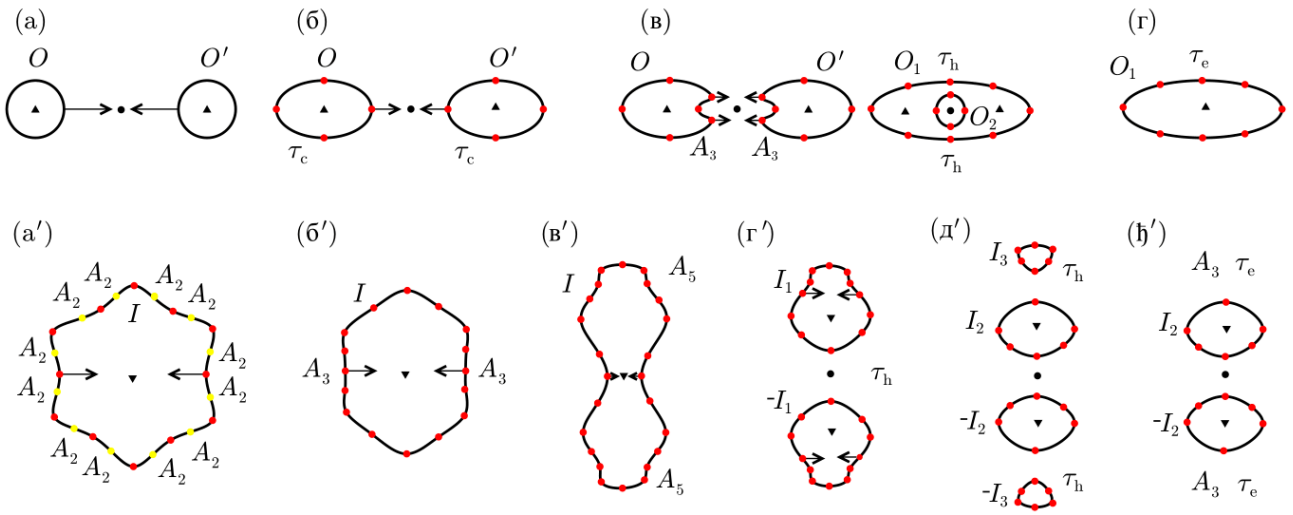
Н4: Постоје чворови линије дуге у равни ударног параметра који се законом расејања пресликавају у околине сингуларитета или чворова угаоне линије дуге.

Прва два начела основна тврђења из геометрије дводимензионалних површи. Трећи исказ је тврђење теорије индекса. Четврто начело је подробно испитано у овом поглављу.

На самом почетку приметити да је на основу угаоне расподеле немогуће утврдити да ли је линија дуге позитивно или негативно оријентисана крива. Стога број намотаја угаоне линије дуге саджи само информацију о апсолутној вредности индекса одговарајуће дуге у равни ударног параметра. У наставку је описано како се на основу резултата експеримента може утврдити облик дуга у равни ударног параметра распоред критичних тачака редукованог потенцијала интеракције. Ради једноставности, претпостављено је да постоји савршен однос између значајних тачака дуге у равни ударног параметра и дуге у равни углова расејања.

Претпостављено је да су тумачи резултата мерења упознати са основним бифуркацијама, бифуркацијама конусних пресека, равнотежним и бифуркационим скуповима основних катастрофа коранка 2. Посматрајући дугин образац у случају нормалне инциденције снопа протона, приказан на слици 7.7(a), експериментално би се могло уочити да све линије дуге обухватају координатни почетак и да је свакој број намотаја једнак 1. То значи да све линије дуге у равни ударног параметра обухватају тачно једну критичну тачку редукованог потенцијала интеракције. Велика вредност пречника дуге \bar{O} упућује на закључак да ову криву образују протони који се расејавају у малој околини појединачних атома угљеника. Кружна симетрија дуге \bar{O} је одраз кружне симетрије потенцијала интеракције у околини атома. Последице дуга у равни ударног параметра O окружује један максимум потенцијала. Закривљеност редукованог потенцијала је у околини ове тачке позитивна. Стога је индекс дуге O једнак +1. Крива \bar{O} нема чворове. Сходно начелу Н4, чворове нема ни крива O . Закључује се да је дуга O кружница. Како унутар једне елементарне ћелије графена постоје два атома угљеника, није тешко закључити да морају постојати две такве дуге O и O' , које се законом расејања пресликавају у исту криву \bar{O} .

Унутрашња линија \bar{I} поседује симетрију C_6 . Разумно је претпоставити да и прелик ове криве, дуга I , има исту симетрију. Стога функција кривине дуге I нужно има 12 екстремума и 12 превојних тачака. Симетријски иредуцибилан лук ове криве саджи највише један максимум и један минимум кривине. Лик овог лука је симетријски иредуцибилан део дуге \bar{I} , сачињен од лептира и једног глатког лука угаоне дуге. Последице иредуцибилан лук дуге \bar{I} саджи три сингуларитета, који потичу од лептира, и један чвор који се налази на страници дуге. На основу начела Н4, иредуцибилни лук дуге I мора имати бар четири чвора. Како су сви лептири узајамно симетрични, такви морају бити и одговарајући преликови у равни ударног параметра. Дуга у равни ударног параметра је стога глатка крива сачињена од шест лукова са по четири чвора. Закључује се да је C_{12} група симетрије дуге I . Најједноставније разрешење ове противречности је претпоставка да су све превојне тачке функције кривине заправо двоструко дегенерисане критичне тачке функције кривине. Преостало је питање да ли се може ишта рећи о знаку функције кривине линије дуге I . Строго говорећи, на ово питање се не може одговорити посматрањем само угаоне линије дуге \bar{I} . Ако су параметри система α и β такви да тачка (α, β) припада области која је са леве стране ограничена правом $\alpha = 1/3$, а са десне стране оивичена кривом нулте дискриминанте D_θ дуга у равни ударног параметра има строго позитивну кривину, док дуга у равни углова расејања саджи три рога. Јасно развијена и симетрична угаона дуга са три рога изискује $\alpha < 0$ и $\beta = 0$. Тада дуга у равни ударног параметра поседује један чвор негативне кривине. Стога лук дуге у равни ударног параметра највероватније има један чвор негативне кривине. Симетрија редукованог потенцијала је C_6 искључиво у околини минимума који се налази у средишту елементарне ћелије. То значи да линија дуге I затвара област позитивне кривине редукованог потенцијала и да је индекс дуге I једнак +1. Преостале критичне тачке редукованог потенцијала се налазе унутар области у којој је



Слика 7.11.(а)-(г) Цртеж преображаја и бифуркација спољашњег дела дугиног обрасца са променом вредности угла нагиба θ . (а')-(ђ') Цртеж преображаја и бифуркација унутрашњег дела дугиног обрасца са променом вредности угла нагиба θ . Стрелицама су обележене тачке које се узајамно приближавају. Тачкама црвене и жуте боје су обележене критичне и превојне тачке кривине линије дуге, респективно. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet .

закривљеност потенцијала негативна. Стога је реч о седластим тачкама. Број и распоред седластих тачака је могуће одредити ослањајући се на једноставно правило које поштују дводимензионалне површи: између свака два минимума се налази једна седласта тачка. Због симетрије потенцијала, осам седластих тачака је распоређено по средиштима линија које повезују минимуме потенцијала из суседних елементарних ћелија. Нацрт овако предвиђеног дугиног обрасца у равни ударног параметра је приказан на сликама 7.11(а) и 7.11(а').

Усвојена је претпоставка да веома мале промене облика угаоне линије дуге, попут приказаних у доњем делу слика 7.7(б), 7.8(в'), 7.8(г'), 7.8(д) и 7.10(а), није могуће експериментално опазити. Мерење овако малих промена изискује незасићен детектор веома високе резолуције.

Преображај дуга \bar{O} и \bar{O}' се може описати на следећи начин. Са повећањем вредности угла нагиба се укида дегенерација кружне линије дуге \bar{O} услед чега настају две дуге облика елипсе \bar{O} и \bar{O}' са по четири чвора. Дуге \bar{O} и \bar{O}' се потом додирују, чиме настају две дуге \bar{O}_1 и \bar{O}_2 . Дуга \bar{O}_1 има облик хипопеда (слика 7.10(б)) и осам чворова, док дуга \bar{O}_2 нестаје са даљим повећањем угла нагиба.

У наставку су примењена начела морфолошке анализе на овај опис еволуције дугиног обрасца. Средишта опажених спољашњих линија дуге се подударују са координатним почетком и број намотаја им је +1. Према начелима Н1 и Н4, преликови дуга \bar{O} и \bar{O}' морају такође бити криве са по четири чвора, настале деформацијом кружнице. Најједноставнији процес који одговара преображају кружнице у елипсу јесте бифуркација конусног пресека τ_c . Овако одређен облик линије дуге у равни ударног параметра је нацртан на слици 7.11(б).

Интеракција две елипсе O и O' није једноставан процес. Индекс обе дуге је +1, јер обе окружују по један максимум редукованог потенцијала интеракције. Додир елипса коњугационом бифуркацијом τ_h узрокује настанак дуге O_1 са четири чвора. Ова дуга обухвата два максимума редукованог потенцијала. Стога би индекс ове линије дуге O_1 морао бити једнак +2. Овај закључак је противречан запажању да је број намотаја дуге \bar{O}_1 једнак +1 и да дуга има осам чворова. То значи да дуга O_1 затвара област у којој се налазе два максимума и једна седласта тачка. Рефлексиона симетрија угаоног дугиног обрасца изискује да се додатно седло налази тачно у средишту дужи која спаја два максимума редукованог потенцијала. На тај начин, сједињавањем две области позитивне кривине нужно је образовано острво негативне

кривине редукованог потенцијала у околини седласте тачке. Постојање области негативне кривине унутар области позитивне кривине потенцијала изискује постојање границе дуж које је закривљеност потенцијала једнака нули. Другим речима, постоји додатна линија дуге. Ова линија дуге обухвата област унутар које се налази само једна седласта тачка и стога је индекс ове дуге једнак -1 . Управо ова линија дуге, образована сједињавањем две спољашње линије дуге, пресликава се законом расејања у дугу \bar{O}_2 .

Није могуће са сигурношћу одредити непознат облик дуге O_2 . Ипак, могуће је начинити разумну претпоставку. Дуге у равни ударног параметара су одређене бројем и распоредом чворова. Окамова оштрица [148] се у овој анализи своди на усвајање оног објашњења које изискује најмањи број најједноставнијих бифуркација.

Сходно томе, могуће је закључити да линија дуге O_2 има четири чвора. Према начелу Н4, лик ове линије \bar{O}_2 , може бити или елипса са четири чвора или крива облика усана са два рога и два чвора. Хиперболички облик потенцијала у околини седласте тачке је последица глатког зашивања потенцијала између два суседна максимума. Расејање на седлу се може схватити и као *синергијско* расејање протона на пару атома (оба атома значајно утичу на процес расејања). Апостериори, синергијско расејање је увек праћено настанком дуге са роговима. Стога је могуће закључити да линија дуге \bar{O}_2 највероватније има облик усана. Сједињење дуга O и O' изискује бар две коњугационе бифуркације τ_h . Стога непосредно пре додира дуга O и O' , одговарајући чворови (чије је кретање обележено стрелицама на слици 7.11(б)) претрпе бифуркације, гранајући се на горње, средишње и доње чворове. Ако у тачки додира горњи и доњи чворови претрпе коњугационе бифуркације τ_h , настале дуге O_1 и O_2 садржаће 8 и 4 чворова, респективно. На тај начин дуге O_1 и O_2 могу бити преликови хипопеда \bar{O}_1 са осам чворова и криве са два чвора и два сингуларитета облика усана \bar{O}_2 . Остале могућности захтевају више бифуркација. Овако изведен облик дугиног обрасца у равни ударног параметра је приказан на слици 7.11(в).

Са повећањем угла нагиба нестаје дуга O_2 . Процес је праћен је елиптичком коњугационом бифуркацијом, током које се сва четири чвора узајамно поништавају. Последишно нестаје и седласта тачка обухваћена дугом O_2 . Како број намотаја дуге \bar{O}_1 остаје непромењен, унутар дуге O_1 мора бити само један екстремум редукованог потенцијала. То значи да су критичне тачке потенцијала, два максимума и једна седласта тачка, узајамно поништене виљушка бифуркацијом. Производ ове бифуркације је нови максимум редукованог потенцијала. Коначан облик дугиног обрасца у равни ударног параметра је нацртан на слици 7.11(г).

Користећи иста начела је могуће одредити облик унутрашњег дела дугиног обрасца у равни ударног параметра. Преображај унутрашњег дела дугиног обрасца у равни углова расејања се може описати на следећи начин. Прво се одмотају четири лептира. Потом настану четири чвора у близини врха и близини дна дуге \bar{I} . Потом деобом дуге \bar{I} настају две четвороугаоне линије дуге $\pm\bar{I}_1$ са четири рога и осам чворова. До сада све угаоне линије дуге обухватају координатни почетак и имају број намотаја 1. Повећањем вредности угла нагиба, дуге $\pm\bar{I}_1$ се поделе на две троугаоне дуге $\pm\bar{I}_2$ и $\pm\bar{I}_3$ са по три рога и три чвора. Два већа троугла $\pm\bar{I}_2$ обухватају координатни почетак и имају број намотаја 1. Два мања троугла $\pm\bar{I}_3$ су симетрично отклоњени у вертикалном правцу и не обухватају координатни почетак. Стога је број намотаја дуга $\pm\bar{I}_3$ једнак нули. Додатним повећањем вредности угла нагиба дуге $\pm\bar{I}_3$ нестају.

За $\theta = 0$, функција кривине дуге I поседује 12 дегенерисаних превојних тачака. Одмотавањем сваког лептира дуге \bar{I} се број сингуларитета смањи за 2. Према начелу Н4 је и број чворова преликова одмотаних лептира такође мањи за 2. Реч је о преображају дегенерисаних превојних тачака у недегенерисане превојне тачке кривине дуге I . Два чвора дуге I које се налазе на u оси се морају поделити на по три нова чвора како би се очували лептири дуге \bar{I} дуж хоризонталне осе. Описане бифуркације преобразе дугу I у криву са 16 чворова која је нацртана на слици 7.11(б'). Додатним повећањем угла нагиба настају по

четири нова чвора при врху и дну дуге \bar{I} . Две 1-5 бифуркације A_5 чворова при врху и дну дуге I су најједноставније објашњење описане промене. Овако одређен облик и распоред чворова дуге I приказани су на слици 7.11(в').

Током описане промене, средишњи рогови дуге \bar{I} који леже на у осе се приближавају. у оса је оса рефлексионе симетрије дугиног обрасца и стога се средишњи чворови дуге I такође приближавају, што је на сликама 7.11(а'), 7.11(б') и 7.11(в') означено стрелицама. За одговарајућу вредност угла нагиба, хоризонтални чворови се додирују. Уколико у тачки додира наступи хиперболичка коњугациона бифуркација, нови дугин образац у равни ударног параметар чине две дуге $\pm I_1$ са по 12 чворова, што одговара збиру чворова и рогова код уочених угаоних дуга $\pm \bar{I}_1$. Број намотаја дуга $\pm \bar{I}_1$ је једнак 1. Стога свака од дуга $\pm I_1$ нужно обухвата бар једну критичну тачку редукованог потенцијала. Два процеса могу до тога довести. Минимум у унутрашњости линије I претрпи бифуркацију након чега могу настати две седласте критичне тачке одвојене новим минимумом, или два нова минимума раздвојена једном седластом критичном тачком. Приметити да линија дуге I затвара област позитивне кривине, изван које је закривљеност потенцијала негативна. Геометрија редукованог потенцијала се може сликовито описати као острво позитивне кривине у мору негативне кривине. У првом случају, дуге $\pm I_1$ окружују седласте тачке и ограничавају две области са негативном кривином потенцијала од окружења у коме је кривина позитивна. Оваква геометрија редукованог потенцијала изискује постојање додатне линије дуге која би ограничавала област позитивне кривине унутар које се налазе дуге $\pm I_1$. Додатна дуге није примећена и стога се овакав опис промене потенцијала мора одбацити. У другом случају, нове линије дуге $\pm I_1$ окружују области унутар којих се налазе нови минимуми. Настанком нове седласте критичне тачке, море негативне кривине се "излива" и дели острво позитивне кривине, оивичено дугом I , на два мања острва ограничена дугама $\pm I_1$. Овај опис је сагласан са бројем опажених угаоних линија дуге. Овако одређен облик линија дуге у равни ударног параметра је нацртан на слици 7.11(г').

Веће вредности угла нагиба узрокују деобу линија $\pm \bar{I}_1$ на две троугаоне дуге $\pm \bar{I}_2$ и $\pm \bar{I}_3$ са по три рога и три чвора. Према начелу H_4 , преликови ових линија су дуге са по шест чворова. Потребно је уочити да настале дуге имају истоветан распоред и број значајних тачака као дуге моделоване катастрофом D_4 (елиптичким средиштем). Деоба четвороугаоне дуге на две троугаоне дуге је последица додира средишњих чворова. На слици 7.11(г') је кретање ових чворова означено стрелицама. Након додира датих чворова наступа хиперболичка коњугациона бифуркација. Мање троугаоне дуге $\pm \bar{I}_3$ не окружују координатни почетак, што значи да одговарајући преликови не обухватају критичне тачке редукованог потенцијала. Дуге $\pm I_2$ обухватају минимуме редукованог потенцијала интеракције. Одређен облик дугиног обрасца у равни ударног параметра је нацртан на слици 7.11(д').

Повећањем вредности угла нагиба, мање троугаоне дуге $\pm \bar{I}_3$ нестају. То значи да се свих шест чворова одговарајућих преликова $\pm I_3$, узајамно приближавају. Шест чворова се може поништити у два корака. Инверзном виљушка бифуркацијом се број чворова смањи са шест на четири. Потом се елиптичком коњугационом бифуркацијом узајамно пониште преостала четири чвора. Цртеж овако одређеног дугиног обрасца у равни ударног параметра је дат на слици 7.11(ђ').

Већ је наглашено да су спољашње линије дуге образоване протонима који се расејавају у непосредној околини појединачних атома кристала. Последично, спољашње линије дуге садрже информацију о атомима који граде кристалну решетку. С друге стране, унутрашње линије дуге садрже информацију о узајамном распореду атома у кристалу. Приметити да спољашњи и унутрашњи део дугиног обрасца не интерагују међусобно. Ово својство дугиног обрасца чини морфолошку анализу погодном за карактеризацију материјала налик графену. Приметимо да су квалитативно тачни дугин образац и облик редукованог потенцијала изведени ослањајући се само на облик угаоног дугиног обрасца. Описан поступак изискује прорачун само линија дуге, по чему се уведена морфолошка анализа истиче изузетном рачунском ефикасношћу.

На крају је вредно истаћи значај развијене морфолошке анализе са становишта примене. Испитан је утицај различитих оријентација графена на облик дугиног обрасца. Строго говорећи, анализирана је зависност облика дуге од топологије редукованог потенцијала интеракције. У размотреним случајевима су различите топологије редукованог потенцијала одраз различитих пројекција атома графена на трансверзалну раван упадног снопа протона. Ово је управо одлика структурно различитих кристала. То значи да је испитана промена морфологије дугиног обрасца узрокована континуалном променом просторног распореда атома угљеника. У глави 6 је показано на који начин се развијена морфолошка анализа угаоне расподеле може употребити за карактеризацију и одређивање густине дефеката графена.

7.2.6. Утицај структуре на дугин образац

У претходном поглављу је испитан утицај различитих оријентација савреног графена на дугин образац. У овом поглављу су представљени резултати подробне анализе утицаја структуре кристала на дугин образац и расподелу трансмитованих протона. Морфолошка анализа дугиног обрасца би могла послужити као основа нове методе за карактеризацију структуре и структурних дефеката дводимензионалних материјала [149].

Утицај структуре на морфологију дугиног обрасца је испитан анализом дугиног расејања протона на графену са различитим врстама структурних дефеката. Потенцијал интеракције протона и графена је изграђен помоћу Дојл-Тарнеровог модела потенцијала интеракције протона и атома угљеника. Применом импулсне апроксимације, закон расејања је сведен на градијентно пресликавање скупа ударних параметара на скуп углова расејања (6.8). Израчунате угаоне расподеле трансмитованих протона су испитане морфолошким поступком. Спроведена је продубна анализа дугиног обрасца у равни ударног параметра и равни углова расејања. Показано је да су линије дуге у равни ударног параметра привучене оближњим седластим критичним тачкама редукованог потенцијала интеракције, док су одбијене од стране максимума редукованог потенцијала. Овиме је објашњена зависност дугиног обрасца од прерасподеле максимума редукованог потенцијала интеракције услед присуства дефеката у решеци.

7.2.6.1. Моделовање графена са тачкастим дефектима

У стварним узорцима графена је савршен кристални поредак нарушен присуством дефеката. Свака локална промена распореда атома графена назива се *тачкасти дефекат*. Тачкасти дефекти се грубо могу поделити на три групе: *шупљине*, *адатоми* и *тополошки дефекти* [150,151]. Поред тачкастих дефеката, графен може садржати и *линијске дефекте*. Најједноставнији линијски дефекти су *линије дислокације*, које одвајају области савреног кристалног поретка. На рубу дислокације се налази тзв. 5-7 пар, сачињен од петоугаоног и седмоугаоног угљеничног прстена [151]. Линијски дефекти могу настати додиром више тачкастих дефеката, чиме се може образовати више различито оријентисаних области графена [151]. Поред поменутих врста дефеката, обод сваког коначног узорка графена могу образовати различито распоређени атоми угљеника. Ова врста нарушења савреног кристалног поретка је позната као *дефекат границе* [151].

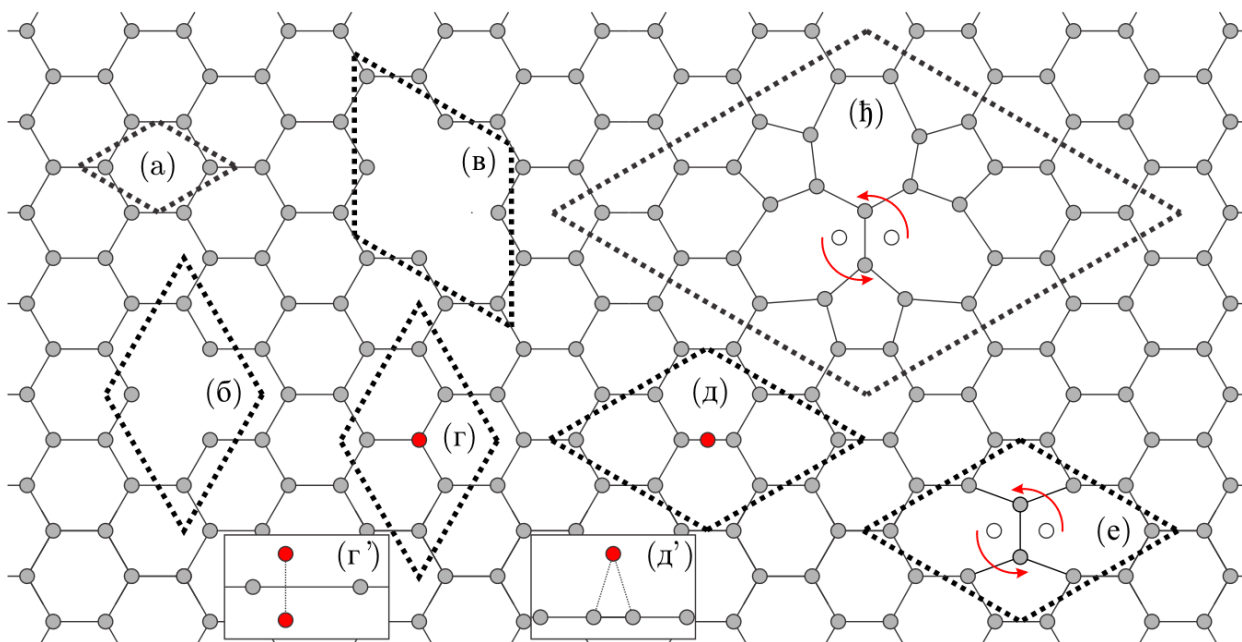
На слици 7.12(a) је приказана елементарна ћелија графена уз најједноставније и најстабилније дефекте графена. *Моноваканција* (шупљина) настаје релаксацијом решетке графена након уклањања једног атома угљеника и приказана је у делу слике 7.12(б). *Диваканција* је приказана у делу слике 7.12(в). Ова врста дефекта настаје уклањањем два

суседна атома угљеника, или додиром две моноваканције [152]. Ваканције вишег реда се образују на сличан начин.

На површини могу бити присутни додатни атоми угљеника. Код најстабилнијих конфигурација, додатни атом се налази тачно изнад атома графена или изнад везе два суседна атома [151]. Први случај је познат као *адатом*, док је други познат као *мост*. Одговарајући погледи на дате дефекте су приказани на слици 7.12 детаљима (г), (г'), (д) и (д'), респективно. Код сложенијих дефеката ове врсте је присутно више додатних атома угљеника или других примеса [153]. Вредно је поменути да не постоје стабилне конфигурације графена са интерстицијалним адатомом [151].

Трећу велику класу тачкастих дефеката чине *тополошки дефекти*. Ова врста дефекта не настаје додавањем или уклањањем атома угљеника, већ променом положаја постојећих атома графена. Најчешће је посредни ротација пара атома [154]. На пример, ротацијом пара атома који су на детаљу 7.12(е) приказани белим круговима четири шестоугаона прстена графена се преобразе у два петоугаона и два седмоугаона прстена. На тај начин настаје *Стоун-Вејлсов* или *55-77* дефекат [151]. Сложенији тополошки дефекти могу настати тополошком променом решетке већ несавршеног графена. Примера ради, диваканција праћена Стоун-Вејлсовим дефектом гради сложени дефекат сачињен од три петоугаоника и три седмоугаоника. Овај дефекат је приказан је на детаљу 7.12(ђ) и назива се *555-777* дефекат [155].

Најмања суперћелија решетке која садржи само један дефекат и којом је могуће периодично поплочати раван тако да дефекти узајамно не интерагују назива се *ћелија дефекта*. Ћелије дефеката су на детаљима 7.12(а)-(е) оивичене тачкастим линијама црне боје. Површина ћелије дефекта је обележена са S_d . Површина елементарне ћелије савршеног графена је $S_u = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$, где су \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 примитивни вектори кристалне решетке савршеног графена. У случају моноваканције, адатома и Стоун-Вејлсовог дефекта, површина ћелије S_d износи $3S_u$, $3S_u$ и $4S_u$, респективно. Пројекције положаја атома одговарајућих ћелија дефекта на раван графена су дате у Табели 7.1. Уређени парови у табели 7.1 су пројекције положаја атома на раван графена. Координатни почетак референтног система се налази у средишту ћелије дефекта, док су базисни вектори примитивни вектори графена.



Слика 7.12. Једнослојни графен са најстабилнијим врстама тачкастих дефеката. Атоми угљеника су представљени сивим круговима. (а) Јединична ћелија графена; најмања суперћелија кристала која садржи (б) моноваканцију, (в) диваканцију, (г) адатом и (д) мост дефект (погледи са стране су приказани на сликама (г') и (д')), (ђ) 555-777 дефекат и (е) Стоун-Вејлсов дефекат.

Табела 7.1. Координате пројекција положаја атома унутар ћелије дефекта на раван графена, изражене у базису јединичних вектора \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 .

	атом 1	атом 2	атом 3	атом 4	атом 5	атом 6	атом 7	атом 8
моноваканција	$\left(\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}\right)$	$\left(-\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right)$	$(1, -1)$	$(-1, 1)$	$\left(-\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}\right)$			
адатом	$(0, 0)$	$(0, 0)$	$\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$	$(1, -1)$	$(-1, 1)$	$\left(-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}\right)$	$\left(\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}\right)$	
Стоун-Вејлс	$\left(\frac{5}{6}, -\frac{1}{6}\right)$	$\left(-\frac{1}{6}, \frac{5}{6}\right)$	$\left(\frac{5}{6}, \frac{5}{6}\right)$	$\left(\frac{1}{6}, -\frac{5}{6}\right)$	$\left(-\frac{5}{6}, \frac{1}{6}\right)$	$\left(-\frac{5}{6}, -\frac{5}{6}\right)$	$\left(\frac{\sqrt{3}}{6}, -\frac{\sqrt{3}}{6}\right)$	$\left(-\frac{\sqrt{3}}{6}, \frac{\sqrt{3}}{6}\right)$

Уведене ћелије дефекта не сачињавају атоми у релаксираном стању. Ово геометријско поједностављење је дозвољено с обзиром да је дугин образац структурно стабилан. Другим речима, мале промене у положајима атома обично узрокују малу промену дугиног обрасца без промене тополошких својства. Стога се закључци спроведене морфолошке анализе могу лако пренети и на реалистичнији случај.

Несавршен графен је моделован решетком коју чине ћелије дефекта између којих се налазе елементарне ћелије савршеног графена. Средња густина дефеката је дефинисана изразом:

$$\rho_d = \frac{N_d}{S_g}, \quad (7.11)$$

где је N_d укупан број дефеката, а S_g површина графена.

Поред ћелија дефеката приказаних на слици 7.12, размотрене су и неправилне суперћелије које такође садрже по један дефекат. Утврђено је да решетке са максималном густином таквих суперћелија нужно садрже линијске дефекте. С друге стране, решетке са мањом густином неправилних суперћелија је могуће образовати периодичним понављањем ћелија приказаних на слици 7.12.

7.2.6.2. Дугино расејање протона на графену са дефектима

У овом поглављу је испитан утицај шупљина, адатома и Стоун-Вејлсових дефеката на дугино расејање протона енергије 5 keV. Наведене врсте дефеката су одабране из два разлога. Први разлог је једноставност и учестаност појављивања наведених дефеката. Поред тога, реч је о представницима различитих класа дефеката. Добро познавање особина дугиног обрасца у случају наведених врста дефеката је предуслов за објашњење својстава дугиног обрасца у случају сложенијих дефеката. Дугино расејање протона на суперћелијама са диваканцијама, мостовима, и 555-777 дефектима се може спровести на сличан начин.

Трансмисија протона је моделована импулсном апроксимацијом. По претпоставци, упадни снап протона равномерно прекрива површину графена са дефектима. Стога, све док дефекти узајамно не интерагују и док је густина дефеката ρ_d непроменљива, тачан просторни распоред дефеката није важан. Различити просторни распореди ћелија дефекта образују исту угаону расподелу $Y(\theta)$. Како су са становишта угаоне расподеле правилни и неправилни распореди ћелија дефекта истоветни, омогућено је битно поједностављење

прорачуна. Приликом рачунања угаоне расподеле, коришћена је велика рачунска суперћелија сачињена од једне ћелије дефекта која је окружена елементарним ћелијама савршеног графена. У овој поставци, густина дефекта се своди на израз:

$$\rho_d = \frac{1}{S_s}, \quad (7.12)$$

где је S_s површина рачунске суперћелије. У нашим прорачунима су размотрене густине дефеката у опсегу од нуле до $1/S_d$.

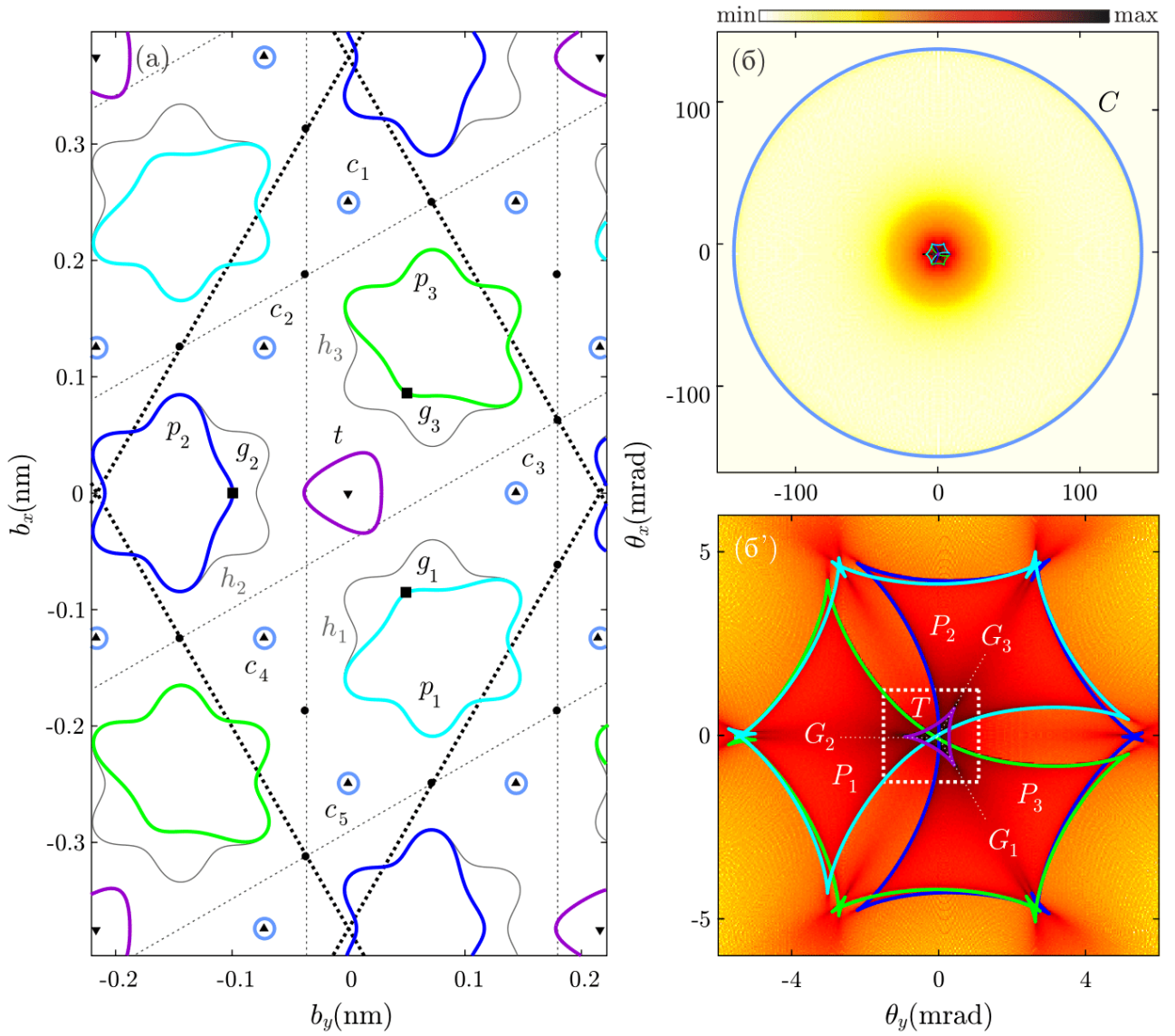
У случају нормалне инциденције снопа протона дугин образац графена чине два дела, спољашњи и унутрашњи. Прве линије дуге образују ударни параметри који обухватају максимуме редукованог потенцијала. Други део дугиног обрасца чине линије дуге које обухватају минимуме редукованог потенцијала. Вредно је поменути да је закривљеност редукованог потенцијала знатно већа у околини максимума него у околини минимума. Из тог разлога спољашње линије дуге у равни ударног параметра снажно зависе од облика редукованог потенцијала у малој околини појединачних атома. У општем случају, спољашње линије дуге имају облик елипсе и садрже информацију о саставу кристала. Збир “репова” атомских потенцијала образује минимуме и седласте тачке потенцијала графена. Промена редукованог потенцијала $\varphi(\mathbf{b})$ је знатно мања у околини минимума, него што је то случај у околини максимума потенцијала. Стога на облик линија дуге у околини минимума утичу оближњи максимуми и седласте критичне тачке редукованог потенцијала $\varphi(\mathbf{b})$.

У поглављу 7.2.4 је показано да су линије дуге у равни ударног параметра одбијене од стране максимума, а привучене од стране седластих критичних тачака редукованог потенцијала интеракције. Из тог разлога, распоред чворова линије дуге у равни ударног параметра одражава структуру кристала. Стога се ове линије дуге називају *структурне линије дуге*. У наставку су представљени резултати анализе структурних дуга у случају моноваканција, Стоун-Вејлс и адатом дефеката графена.

Моноваканција

На слици 7.13(a) је приказан дугин образац у равни ударног параметра у случају највеће густине моноваканција. Граница ћелије дефекта је обележена испрекиданом линијом црне боје. Моноваканција образује глобални минимум редукованог потенцијала у средишту ћелије дефекта. Положај глобалног минимума се подудара са тачком у којој се у случају савршеног графена налази максимум окружен са три седласте тачке. Остале критичне тачке редукованог потенцијала чини 5 максимума и 10 седластих тачака чији се положаји подударају с положајима одговарајућих критичних тачака у случају савршеног графена. Промена структуре графена узрокује преображај три структурне линије дуге h_1 , h_2 и h_3 (исцртане танким сивим линијама) у петоугаоне линије дуге p_1 , p_2 и p_3 . С друге стране, присуство ове врсте дефекта нема утицај на пет композитних линија дуге c_1 , c_2 , c_3 , c_4 и c_5 .

Облик петоугаоних структурних линија дуге се може објаснити једноставним катастрофичним моделом редукованог потенцијала. На слици 7.14 су приказане еквипотенцијалне криве редукованог потенцијала интеракције $\varphi(\mathbf{b})$ у случају моноваканције у околини две седласте инфлексione тачке, смештене на пресеку праве $b_x = 0$ и линија дуге t и p_2 са слике 7.13(a). На слици 7.14 су ове инфлексione тачке обележене са i_1 и i_2 . У малој околини тачке i_1 и i_2 је дефинисан координатни систем (b_1, b_2) .

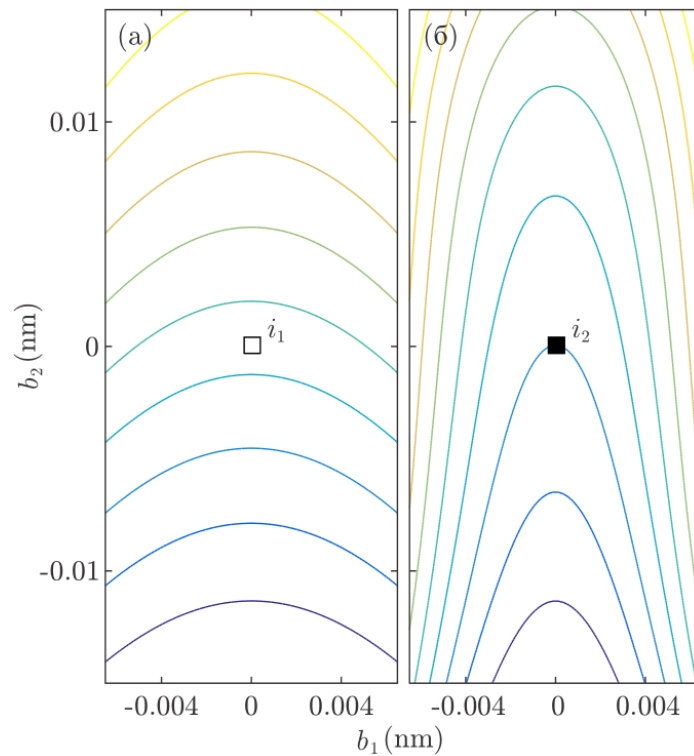


Слика 7.13. (а) Кривама тамно плаве, плаве, светло плаве, зелене и љубичасте боје су обележене линије дуге у равни ударног параметра у случају графена са моноваканцијама, густине $1/3S_u$. Максимуми, минимуми, седласте тачке и духови критичних тачака редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown , \bullet и \blacksquare . Обод ћелије савршеног графена је обележен испрекиданом линијом црне боје. Границе ћелије дефекта су исцртане дебелим испрекиданим линијама црне боје. (б) Угаона расподела трансмитованих протона. Угаоне дуге су приказане кривама одговарајуће боје. (б') Приказ дугиног обрасца и угаоне расподеле у околини координатног почетка.

Редуковани потенцијал интеракције је у околини ових тачака моделован катастрофом A_2 коранка 2 [156]:

$$\varphi(\mathbf{b}) \approx \alpha b_2 + \frac{\beta}{3} b_2^3 + \frac{\gamma}{2} b_1^2 + \varphi_0, \quad (7.13)$$

где су α , β и γ параметри модела и $\varphi_0 = \varphi(0,0)$. Инфлексионо седло постоји уколико је $\alpha \cdot \beta > 0$, $\gamma > 0$. За $\alpha = 0$ инфлексионо седло постаје двоструко дегенерисана критична тачка, која за $\alpha \cdot \beta < 0$, $\gamma > 0$ нестаје, услед чега настаје минимум и седласта критична тачка. Вредности параметара модела су одређене фитовањем израчунатог потенцијала. За потенцијал у околини тачке i_1 су одговарајуће вредности параметара: $U_0 = 0.4965$ eV, $\alpha = 3.0695$ eV/nm, $\beta = -1.5334 \times 10^3$ eV/nm³ и $\gamma = 471.8732$ eV/nm³.

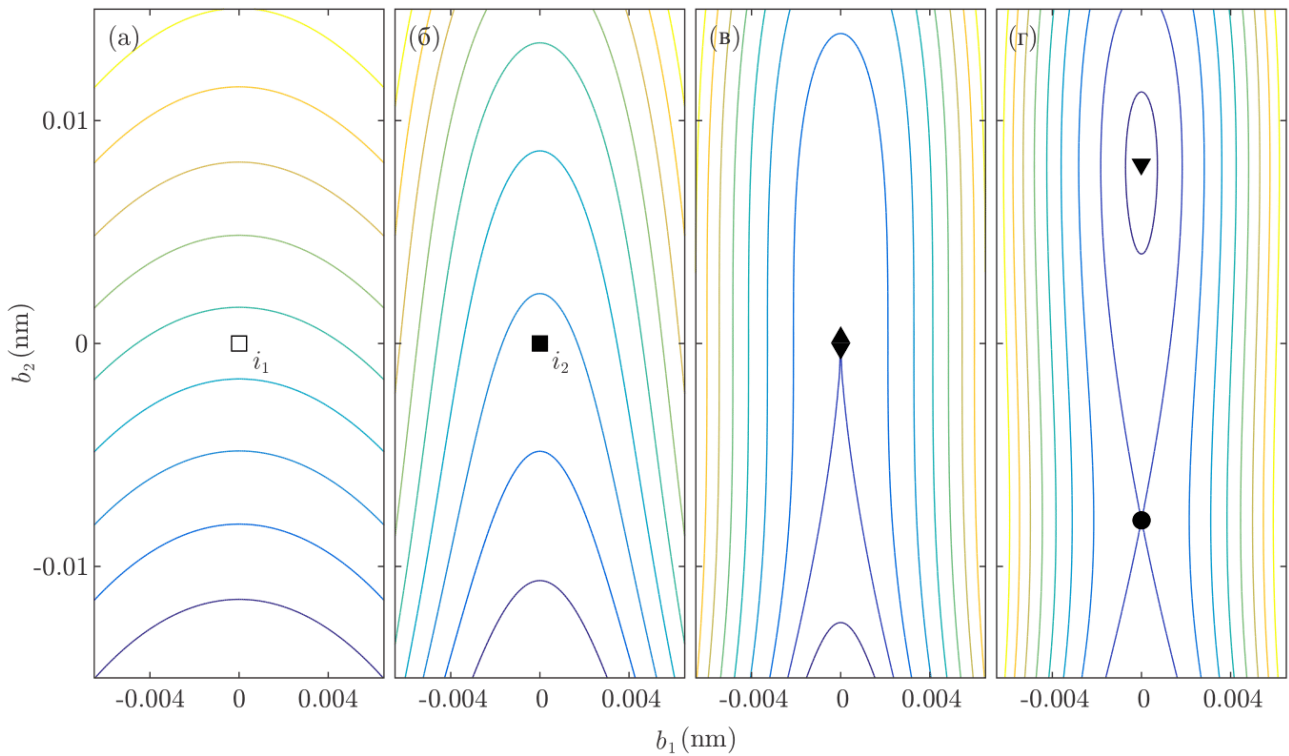


Слика 7.14. Еквипотенцијалне криве редукованог потенцијала интеракције $\varphi(\mathbf{b})$ у околини пресека негативне b_y осе и (а) линије дуге t и (б) линије дуге p_2 са слике 7.13 (а) (Прилагођено на основу података из референце [149]).

Одговарајуће вредности параметара у околини тачке i_2 су: $U_0 = 0.6012$ eV, $\alpha = 0.3572$ eV/nm, $\beta = 1.4188 \times 10^3$ eV/nm³ и $\gamma = 566.0088$ eV/nm³. Еквипотенцијалне криве добијених модела су приказане на слици 7.15(а) и слици 7.15(б), респективно. Сlike показују да модел (7.13), са становишта еквипотенцијалних кривих, представља одличну квалитативну и квантитативну апроксимацију тачног потенцијала. Приметити да је вредност параметра $\alpha = 0.3572$ eV/nm. модела потенцијала у околини тачке i_2 , веома мала. Еквипотенцијалне криве овог модела су практично неразличиве од критичног случаја ($\alpha = 0$) приказаног на слици 7.15(в). У случају негативне вредности параметра $\alpha = -0.0893$ eV/nm (нарочито одабране како би густина еквипотенцијалних кривих била иста), топологија еквипотенцијалних кривих је битно другачија, што је очито са слике 7.15(г).

За сваку малу и ненулту резолуцију енергије ε , постоји мали интервал $0 < \alpha \ll 1$, такав да су контуре потенцијала $\varphi(\mathbf{b})$ неразличиве од оних у случају $\alpha = 0$. Посматрано са становишта нелинеарне динамике, ако је вредност параметра α довољно мала, честици је потребно необично много времена за пролазак кроз област простора унутар које се налази инфлексиона седласта тачка потенцијала [157]. Утицај ишчезле критичне тачке на кретање честице и фазни портрет се описује као деловање духа *дегенетисане критичне тачке* [158]. Из овог разлога је седласта инфлексиона тачка i_2 на слици 7.13(а) означена са g_2 .

Приметити да A_2 бифуркација описује како настаје или нестаје екстремум на самој контури нулте кривине потенцијала. Према теорији индекса, постојање дегенерисане критичне тачке потенцијала се одражава преласком угаоне линије дуге преко координатног почетка [134]. Испитане су све инфлексионе седласте тачке редукованог потенцијала. Једино у случају тачака на дугама p_1 , p_2 и p_3 , које су на слици 7.13(а) обележене црним квадратима и означене са g_1 , g_2 и g_3 , је вредност коефицијента уз линеарни члан фитованог модела веома мали и позитиван број.

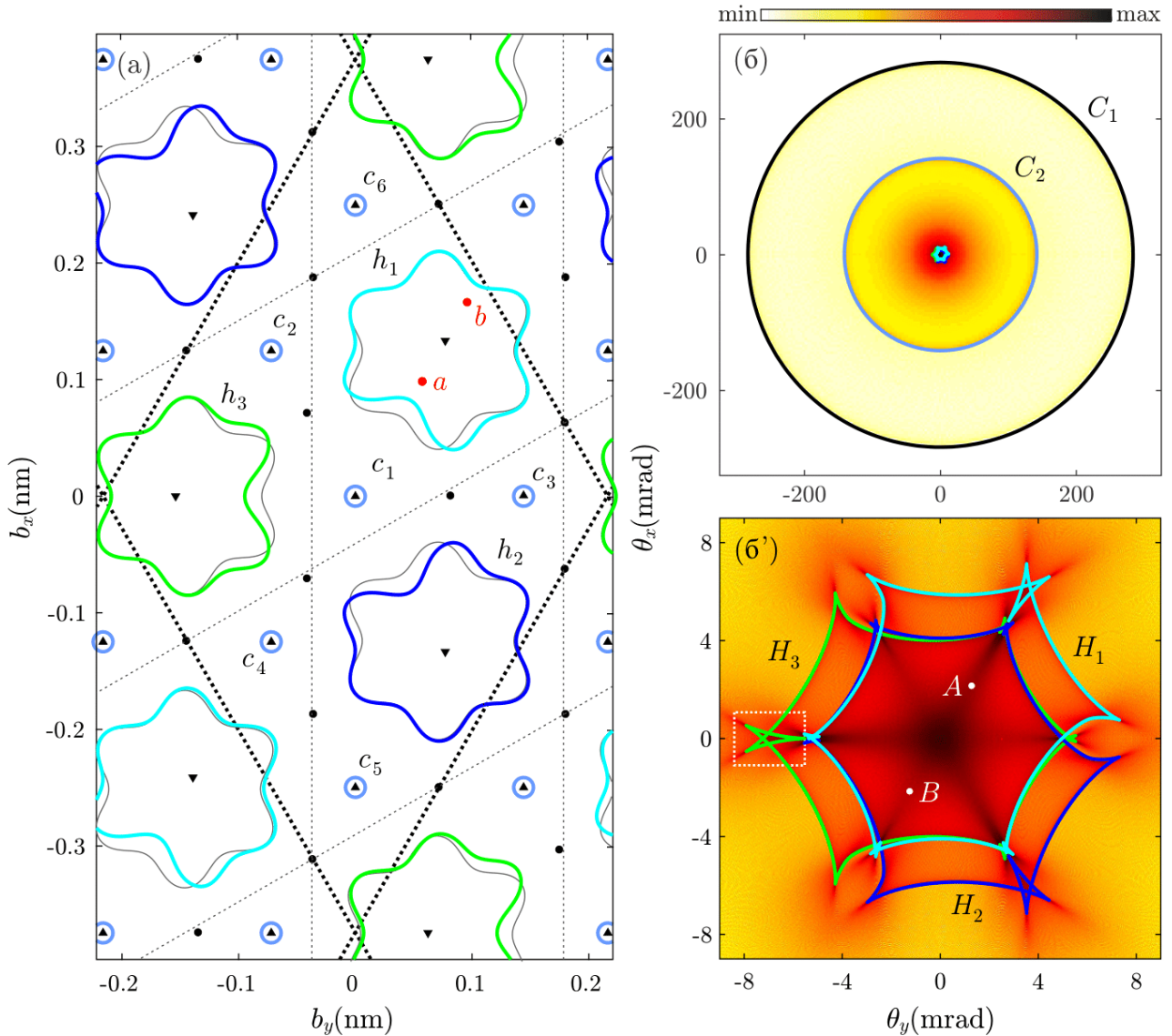


Слика 7.15. (а), (б) Еквипотенцијалне криве катастрофичног модела редукованог потенцијала у околини инфлексоне седласте тачке i_1 и i_2 , респективно. (в), (г) Еквипотенцијалне криве катастрофичног модела редукованог потенцијала у околини тачке i_2 за $\alpha = 0$ и $\alpha = -0.0893$ eV/nm, респективно (Прилагођено на основу података из референце [149]).

Дух дегенерисане критичне тачке се може посматрати као присуство пара критичних тачака, једног минимума и једне седласте критичне тачке. Облик структурних линија дуге на слици 7.13(а) је могуће објаснити ослањајући се на овакво тумачење духова критичних тачака редукованог потенцијала. Глобални минимум у средишту ћелије дефекта је окружен са три максимума и три духа седласте тачке. Стога линија дуге у околини минимума мора имати троугаону симетрију. Духови минимума на линијама дуге p_1 , p_2 и p_3 су окружени са пет максимума, четири седласте критичне тачке и једним духом седласте критичне тачке. Последице линије дуге p_1 , p_2 и p_3 имају облик петоугаоне криве.

Ликови описаних линија дуге у равни углова расејања су приказани на сликама 7.13(б) и 7.13(б'). Како је и очекивано, композитне линије дуге c_1 , c_2 , c_3 , c_4 и c_5 су пресликане у спољашњу линију дуге C . Дуга C је у овом смислу петроструко дегенерисана. Структурна линија дуге троугаоног облика t је прсликана у дугу троугаоног облика са три рога T . Све наведене угаоне линије дуге окружују координатни почетак равни углова расејања. С друге стране, ликови петоугаоних линија дуге p_1 , p_2 и p_3 су криве P_1 , P_2 и P_3 које не обухватају координатни почетак. Линије дуге P_1 , P_2 и P_3 су најмање удаљене од координатног почетка у тачкама G_1 , G_2 и G_3 , које представљају ликове духова g_1 , g_2 и g_3 . Ово је још једна потврда да је реч о ликовима духова двоструко дегенерисаних критичних тачака. Испитивање је показало да су издвојени рогови или средишњи рогови лептира ових угаоних линија дуге, заправо ликови чворова линија дуге у равни ударног параметра који одговарају минимумима функције кривине. На сликама 7.13(б) и 7.13(б') су приказане и одговарајуће угаоне расподеле. Преовладавајући максимуми расподеле се подударују са дугиним максимумима.

На слици 7.16(a) је приказан дугин образац унутар равни ударног параметра у случају највеће густине адатома, као и расподела критичних тачака редукованог потенцијала. Присуство адатома не мења значајно број и распоред критичних тачака редукованог потенцијала. Максимум редукованог потенцијала смештен у средишту ћелије дефекта је израженији него у случају савреног графена, а оближњи минимуми и седласте критичне тачке су благо отклоњене у односу на случај графена без дефекта. Полупречник композитне дуге c_1 , која окружује адатом, једнак је полупречницима линија дуге c_2, c_3, c_4, c_5 и c_6 , које су истоветне композитним дугама у случају савреног графена.



Слика 7.16. (а) Кривама тамно плаве, плаве, светло плаве и зелене боје су обележене линије дуге у равни ударног параметра у случају графена са адатомима. Густина адатома је: $\rho_a = 1/S_a = 1/4S_u$. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet , респективно. Обод јединичне ћелије савреног графена је обележен испрекиданом танком линијом црне боје. Границе ћелије дефекта су исцртане дебљим испрекиданим линијама црне боје. (б) Угаона расподела трансмитованих протона. Ликови линија дуге из равни ударног параметра су приказане кривама одговарајуће боје. (б') Увеличан приказ дугиног обрасца и угаоне расподеле у околини координатног почетка (Прилагођено на основу података из референце [149]).

Облик структурних линија дуге h_1 , h_2 и h_3 је мало промењен услед присуства адатома. Дугин образац у равни углова расејања је приказан на сликама 7.16(б) и 7.16(б'). Композитна линија дуге c_1 је преликана у линију дуге C_1 облика кружнице чији је пречник 566.6 mrad. Дуге c_2 , c_3 , c_4 , c_5 и c_6 , су законом расејања преликане у кружну дугу C_2 пречника 282.9 mrad. Важно је приметити да је пречник линије дуге C_2 тачно два пута већи од пречника кружнице C_1 . Намеће се питање могућности карактеризација примеса у графену. Утврђено је да уколико би унутар кристалне равни графена била присутна примеса чији је атомски број два пута већи од угљениковог ($Z_2 = 12$, што одговара атому магнезијума), пречник одговарајуће композитне линије дуге би износио 141.1 mrad. Пречник кружнице C_1 знатно већи и стога заиста представља композитну линију дуге, на основу које је могуће одредити врсту примесе. Структурне линије дуге h_1 , h_2 и h_3 се законом расејања преликавају у црвену, плаву и зелену шестоугаону линију H_1 , H_2 и H_3 , респективно. Структурне линије дуге H_1 , H_2 и H_3 се пружају дуж правца који су одређени следећим вредностима поларног угла $\pi/3$, π и $5\pi/3$, респективно. Сваку од три криве H_1 , H_2 и H_3 чини један већи лептир, три мања лептира и по два рога.

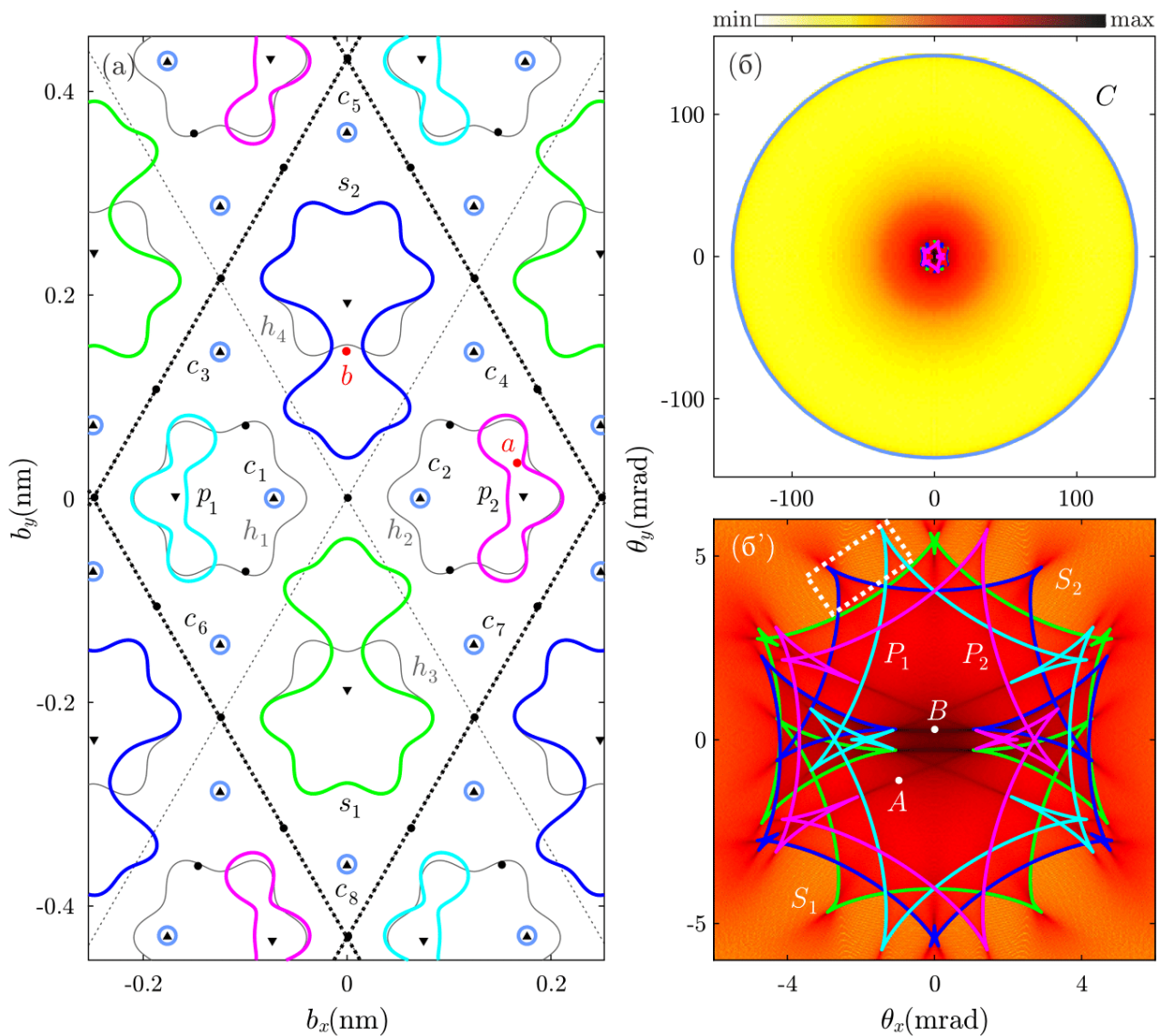
Стоун-Вејлсов дефекат

На слици 7.17(а) је приказан дугин образац у равни ударног параметра и распоред критичних тачака редукованог потенцијала у случају највеће густине Стоун-Вејлсових дефеката. Постоји осам композитних дуга c_1, \dots, c_8 , које окружују осам максимума потенцијала. Присуство Стоун-Вејлсовог дефекта, односно ротација пара угљеникових атома, битно се одражава на расподелу минимума и седластих критичних тачака потенцијала савршеног графена. Минимуми потенцијала графена без дефеката, смештени у средиштима дуга h_1, \dots, h_4 , су отклоњени улево, удесно, нагоре и надолу, респективно. Два пара седластих критичних тачака у близини средишта ћелије дефекта су са обода померени у унутрашњост елементарних ћелија савршеног графена.

Дефекат битно мења окружење дуга h_1, \dots, h_4 савршеног графена. Уместо шест максимума и шест седластих тачака редукованог потенцијала, структурне линије дуге на слици 7.17(а) окружује по пет или по седам максимума и седластих критичних тачака. Стога су структурне линије дуге h_1, \dots, h_4 преобразене удве петоугаоне линије p_1 и p_2 и две седмоугаоне линије s_1 и s_2 , респективно.

Ликови описаних линија дуге у равни углова расејања су приказани на слици 7.17(б) и 7.17(б'). Композитне линије дуге c_1, \dots, c_8 , су преликане у осмоструко дегенерисану линију дуге кружног облика C . Петоугаоне линије p_1 и p_2 су преликане у две петоугаоне дуге P_1 и P_2 са по два рога, два лептира и једним вигвам обрасцем [156] у чворовима. Седмоугаоне криве s_1 и s_2 су преликане у две седмоугаоне линије дуге S_1 и S_2 , у чијим чворовима се налазе по два рога и по пет лептира. И у овом случају важи правило да се чворови дуга у равни ударног параметра који одговарају минимумима функције кривине преликавају у тачке веома блиске роговима угаоне линије дуге.

На сликама 7.17(б) и 7.17(б') су приказане и угаоне расподеле трансмитованих протона. Најистакнутији максимуми угаоне расподеле се подударају са линијама дуге. Угаона расподела садржи четири гребена који повезују наспрамне лептире и вигваме петоугаоних дуга P_1 и P_2 , и два гребена дуж правца на коме леже наспрамни лептири дуга S_1 и S_2 .



Слика 7.17. (а) Кривама тамно плаве, плаве, светло плаве, зелене и ружичасте боје су обележене линије дуге у равни ударног параметра у случају графена са Стоун-Вејлсовим дефектима. Густина Стоун-Вејлсових дефеката је: $\rho_d = 1/4S_u$. Максимуми, минимуми и седласте тачке редукованог потенцијала су обележени са \blacktriangle , \blacktriangledown и \bullet , респективно. Обод јединичне ћелије савршеног графена је обележен испрекиданом танком линијом црне боје. Границе ћелије дефекта су исцртане дебљим испрекиданим линијама црне боје. (б) Угаона расподела трансмитованих протона. Ликови линија дуге из равни ударног параметра су приказане кривама одговарајуће боје. (б') Увеличан приказ дугиног обрасца и угаоне расподеле у околини координатног почетка (Прилагођено на основу података из референце [149]).

7.3. Несингуларни максимуми угаоне расподеле

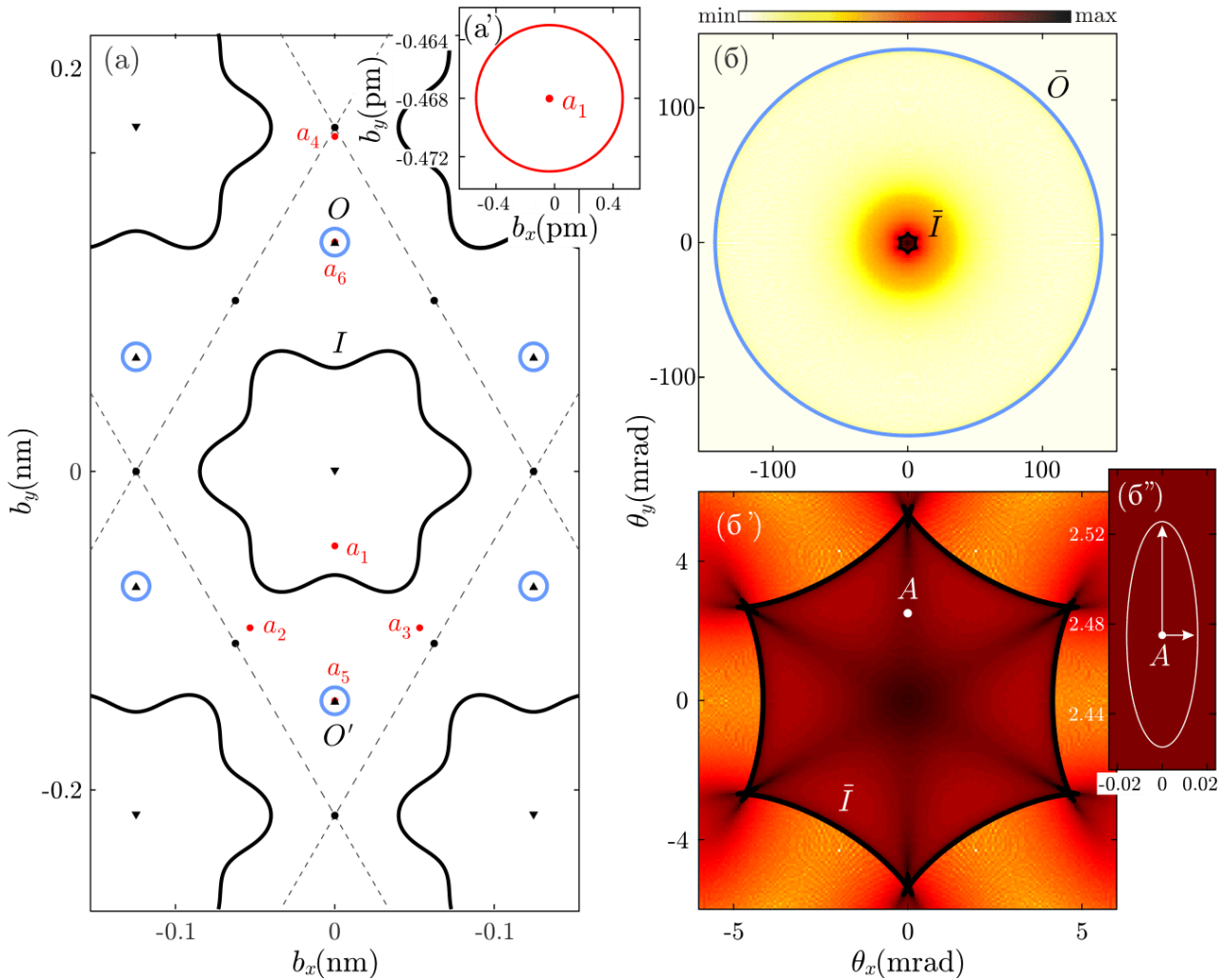
Линије дуге припадају класи сингуларних екстремума угаоне расподеле. Са повећањем упадног броја честица сингуларни максимум расподеле постаје ужи и виши. Примећено је да угаоне расподеле поседују и гребене који представљају несингуларне максимуме. На слици 7.18(б) је приказана угаона расподела протона трансмитованих кроз графен у нормалној инциденцији, израчуната применом импулсне апроксимације. Максимум у средишту координатног система је образован нерасејаним протонима. Приметити да је вредност угаоне

расподеле велика и дуж “гребена” који се пружају главним дијагоналама угаоне линије дуге \bar{I} . Преостали максимуми се подударају с линијама дуге.

Нека је као и до сада закон расејања моделован градијентним пресликавањем (6.8). Посматрајмо тачку која се налази на средини горњег вертикалног гребена угаоне расподеле. На слици 7.18(б') је ова тачка обележена и означена словом A . Испитано је линеаризовано пресликавање (6.8) у околини преликова тачке A , који су на слици 7.18(а) обележени црвеним тачкама и означени са a_1, a_2, \dots, a_6 . Главне осе деформације у околини шест црвених тачака $\mathbf{b}_{a_1}, \mathbf{b}_{a_2}, \dots, \mathbf{b}_{a_6}$, су решења система једначина [159]:

$$J_{\theta}(\mathbf{b}_{a_m}) \cdot \mathbf{u}_n^{(m)} = j_n^{(m)} \mathbf{u}_n^{(m)}, \quad n = 1, 2; \quad m = 1, 2, \dots, 6. \quad (7.14)$$

$j_n^{(m)}$ и $\mathbf{u}_n^{(m)}$ су својствене вредности и нормирани својствени вектори Јакобијеве матрице J_{θ} у тачки \mathbf{b}_{a_m} , респективно.



Слика 7.18. (а) Дугин образац у равни ударног параметра сачињен од црних и светло плавих линија. Максимуми, минимуми и седласте критичне тачке редукованог потенцијала интеракције су обележени са ▲, ▼ и ●, респективно. Обод елементарне ћелије графена је исцртан испрекиданом сивом линијом. (б) Угаона расподела трансмитованих протона чије су вредности изражене преливом топлих боја. Ликови линија дуге из равни ударног параметра су представљени кривама одговарајуће боје. (б') Увеличан приказ угаоне расподеле у околини координатног почетка равни углова расејања. (а') Увеличан приказ равни ударног параметра у околини тачке a_1 и одговарајућа кружница, чији је лик у равни углова расејања приказан на слици (б'').

Круг у равни ударног параметра полупречника R са средиштем у тачки \mathbf{b}_{a_m} се законом расејања пресликава у елипсу у равни углова расејања чије је средиште тачка $\theta(\mathbf{b}_{a_m})$. Вектори $\mathbf{u}_1^{(m)}$ и $\mathbf{u}_2^{(m)}$ одређују оријентацију елипсе, док су $j_1^{(m)}R$ и $j_2^{(m)}R$ полуосе елипсе. На слици 7.18(а') је приказан круг полупречника $R = 0.5 \text{ pm}$, са средиштем у тачки a_1 . Лик ове кружнице у равни углова расејања је приказан на слици 7.18(б''). Правци стрелица на слици 7.18(б'') се подударају с оријентацијом велике и мале осе елипсе, односно правцима вектора $\mathbf{u}_1^{(1)}$ и $\mathbf{u}_2^{(1)}$. Највећи допринос диференцијалном пресеку потиче од околине тачке a_1 . Кружница са средиштем у тачки a_1 се пресликава у елипсу чија је површина 19.1646, 19.1646, 26.0991, 247520 и 247520 пута мања од површина елипси које су придружене тачкама a_2, \dots, a_6 , респективно. Испитивање које је спроведено у случају другачијег положаја тачке A је довело до истог закључка. Може се закључити да гребен угаоне расподеле покрива област углова расејања у чијем прелику је Јакобијан закона расејања скоро сингуларан.

У примеру расподела протона трансмитованих кроз графен са адатомима на слици 7.16(б') се поред дугиних максимума истичу и "гребени" угаоне расподеле, дуж којих је број расејаних протона велик. Гребени се пружају од нултог угла расејања премавећим и мањим лептирима одговарајућих линија дуге H_1, H_2 и H_3 . Правци ширих гребена су дати следећим вредностима поларног угла: $\pi/3, \pi$ и $5\pi/3$, док се ужи гребени простиру дуж праваца чији су поларни углови: $0, 2\pi/3$ и $4\pi/3$. Ова врста максимума угаоне расподеле се може објаснити на исти начин као у случају гребена на слици 7.18(б'). Одабрана је тачка на средишту сваког гребена. Одређени су преликови ове тачке, из којих је издвојена тачка у којој је производ својствених вредности Јакобијана закона расејања најмањи. Као и у случају савршеног графена, својствени вектори Јакобијана су паралелни са правцима гребена. На средини ширег и ужег гребена који се пружају под углом $\pi/3$, одабране су тачке A и B (видети слику 7.16(б')). Највећи допринос угаоној расподели у тачкама A и B потиче од преликова који су на слици 7.16(а) обележени са a и b . Тачке a и b леже на правој која спаја максимум редукованог потенцијала обухваћен линијом дуге s_1 и минимум у унутрашњости линије дуге h_1 . Преовлађујући преликови средишта осталих гребена су ротационо еквивалентни размотрним преликовима, тј. могу се одредити ротацијом тачака a и b за $\pi/3$ и $2\pi/3$ и смештене су унутар дуга h_2 и h_3 .

Гребени угаоне расподеле протона трансмитованих кроз графен са Стоун-Вејлсовим дефектима су испитани на исти начин као и у претходним случајевима. Највећи допринос угаоној расподели у околини тачке A и B са слике 7.17(б') потиче из околине тачака a и b унутар дуга p_2 и s_2 у равни ударног параметра, респективно (видети слику 7.17(а)). Стога је закључено да су гребени расподеле придружени дугама P_1 и P_2 понајвише образовани путањама чији ударни параметри образују појас линија дуге p_1 и p_2 . Исти закључак се односи и на гребене који се пружају између сингуларитета дуга S_1 и S_2 . Велики принос расејаних протона дуж ових гребена понајвише потиче од путањама са ударним параметрима у околини појаса линија дуга s_1 и s_2 .

Глава 8

Примена морфолошке анализе за карактеризацију 2Д кристала

У овој глави је представљена могућа примена морфолошке анализе угаоне расподеле трансмитованих протона за карактеризацију 2Д кристала. У првом поглављу је показано на који начин се из анализе облика и величине линија дуге може одредити матрица коваријансе отклона атома услед термалних вибрација. У другом поглављу су представљени резултати прорачуна зависности величине композитне дуге од редног броја атома. Добијена зависност би могла омогућити одређивање врсте атома који граде дводимензионалну кристалну решетку. У последњем поглављу је показано на који начин би се могла спровести карактеризација тачкастих дефеката графена из морфолошке анализе структурних линија дуге.

8.1. Одређивање матрице коваријансе

Мерење коваријансе термалних вибрација атома графена и дводимензионалних кристала је изазован подухват. У поглављу 4.2 је истакнуто изразито неслагање између резултата теоријских прорачуна и експерименталних мерења варијансе отклона атома услед термалних флукуација графена. Стога су нове методе за мерење коваријансе отклона атома преко потребне. У овом поглављу је представљен поступак који би могао послужити у те сврхе.

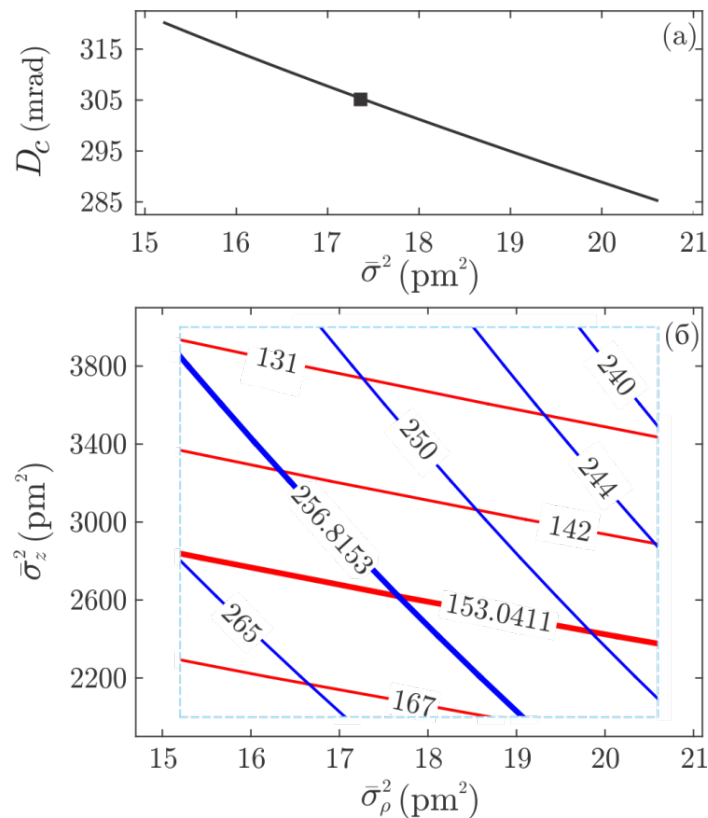
У прилогу А и поглављу 7.1 је показано да постоји једнозначна веза између величине и облика спољашње линије дуге и матрице коваријансе. Могуће је одредити матрицу коваријансе ослањајући се само на облик и величину спољашњег дела дугиног обрасца.

Нека је правац нормале на површину графена познат. Дефинисан је референтни систем (x, y, z) такав да се нормала на графен подудара са z -осом. Матрица коваријансе је симетрична и позитивно дефинитна матрица. Такве матрице се одговарајућом ротацијом могу довести у дијагонални облик $\bar{\Sigma} = \text{diag}(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2)$. Другим речима, постоји референтни систем у коме је кретање атома некорелисано. На крају анализе је могуће извршити инверзну трансформацију и потребне величине изразити у почетном референтном систему (x, y, z) . Ротација у односу на \bar{z} -осу је задата поларним и азимуталним угловима $\bar{\theta}$ и $\bar{\phi}$. Угао $\bar{\theta} = 0$ дефинише трећи својствени правац матрице коваријансе. Матрице 3×3 се могу поделити у три класе: скаларне матрице са једном троструко дегенерисаном својственом вредношћу $\bar{\Sigma} = \bar{\sigma}I$; матрице са једном двоструко дегенерисаном својственом вредношћу $\bar{\Sigma} = \text{diag}(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$; матрице код којих су све три својствене вредности узајамно различите $\bar{\Sigma} = \text{diag}(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2)$. Наведена три облика дијагоналних матрица су представници три различите ротационо-инваријантне класе. Својствени вектори матрице Σ одређују три узајамно нормална правца.

На основу установљене зависности облика спољашњег дела дугиног обрасца од матрице коваријансе би се експериментално могло закључити којој класи ротационо инваријантних матрица припада коваријанса термалних вибрација атома угљеника. Ако је коваријанса скаларна матрица $\bar{\Sigma} = \bar{\sigma}I$, спољашња линија дуге је кружница, независно од оријентације узорка графена у односу на правац упадног снопа. Сходно томе, пречник спољашње линије

дуге D_c нужно зависи само од варијансе отклона атома од равнотежних положаја $\bar{\sigma}$. Зависност пречника спољашње линије дуге D_c од варијансе $\bar{\sigma}^2$ приказана на слици 8.1(a) представља интерполацију нумерички израчунатих пречника за 10 једнако удаљених вредности варијансе. Минимална вредност варијансе 15.20 pm^2 одговара варијанси термалних вибрација на апсолутној нули према Дебајевом моделу. Максимална размотрена вредност варијансе износи 20.60 pm^2 . Квадратом је означен пречник спољашње линије дуге која је приказана на слици 7.2(a) $D_c = 305.27 \text{ mrad}$. Зависност пречника од варијансе изотропних термалних вибрација је монотono опадајућа функција. Стога је уз помоћу графика 8.1(a) могуће једнозначно одредити варијансу термалних вибрација. У случају дуге приказане на слици 7.2(a) графички одређена вредност варијансе износи $\bar{\sigma}^2 = 17.37 \text{ pm}^2$.

Нека је коваријанса термалних вибрација атома $\bar{\Sigma} = \text{diag}(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$. У случају произвољне оријентације графена спољашња линија дуге поседује облик елипсе. Уколико је правац снопа протона паралелан са својственим вектором који одговара својственој вредности $\bar{\sigma}_z^2$, линија дуге је кружница. Параметри елипсе D_e^M и D_e^m зависе од $\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2$ и угла нагиба $\bar{\theta}$. Одређивање непознатих варијанси $\bar{\sigma}_\rho^2$ и $\bar{\sigma}_z^2$ изискује два мерења. У овој анализи су употребљени пречник дуге у случају $\bar{\theta} = 0$ и мања полуоса дуге у случају графена нагнутог за $\bar{\theta} = 0.065\pi \text{ rad}$. Односно, пречник D_c кружнице са слике 7.3(a) и мањи пречник D_e^m дуге са слике 7.3(б).



Слика 8.1 (а) зависност пречника дуге D_c од варијансе $\bar{\sigma}^2$ у случају $\theta = 0$. Симболом \blacksquare је означена вредност која одговара пречнику дуге на слици 7.2(a). (б) Плавим линијама су приказане контуре функције $D_c(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ која представља пречник дуге у случају $\theta = 0 \text{ rad}$. Црвеним кривама су приказане контуре функције $D_e^m(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$, која представља мањи пречник дуге облика елипсе у случају графена нагнутог за $\theta = 0.065\pi \text{ rad}$. Област прорачуна је оивичена испрекиданим линијама светло плаве боје. Вредности функција су исказане у mrad . Плавим и црвеним линијама веће дебљине су приказане контуре које одговарају вредностима пречника дуга c и e са слика 7.3(a) и 7.3(б).

На тај начин је постављен систем две једначине $D_c = D_c(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ и $D_e^m = D_e^m(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$, у коме су непознате само варијансе $\bar{\sigma}_\rho^2$ и $\bar{\sigma}_z^2$. Проблем је могуће решити нумеричким израчунавањем вредности D_c и D_e^m у свакој тачки конфигурационог простора $(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$. Међутим, постоји ефикаснији начин. Зависност функција $D_c(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ и $D_e^m(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ од променљиве $\bar{\sigma}_z^2$ је изразито слаба на подскупу $[15.20, 20.60] \text{ pm}^2 \times [2000, 4000] \text{ pm}^2$. Захваљујући овом увиђању, драстично је смањен број потребних прорачуна. Вредности D_c и D_e^m су израчунате на прикладно одабраној мрежи сачињеној од 81 тачке. Утврђено је да дводимензионална интерполација функција $D_c(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ и $D_e^m(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ унутар области од значаја $[15.20, 20.60] \text{ pm}^2 \times [2000, 4000] \text{ pm}^2$ има одличну тачност. На слици 8.1(б) су плавим и црвеним линијама приказане контуре функција $D_c(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ и $D_e^m(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$, респективно. Линијама веће дебљине су приказане контуре које одговарају пречнику дуге са слике 7.3(а) и мањем пречнику дуге са слике 7.3(б), респективно. Приметити да у домену од интереса свакој вредност функција $D_c(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ и $D_e^m(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2)$ одговара само једна контура; штавише, одговарајуће контуре се секу у тачно једној тачки. Пресек контура $D_c = 256.81 \text{ mrad}$ и $D_e^m = 153.04 \text{ mrad}$ садржи само једну тачку $(\bar{\sigma}_\rho^2, \bar{\sigma}_z^2) = (17.67, 2619.10) \text{ pm}^2$.

Нека је коваријанса $\bar{\Sigma} = \text{diag}(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2)$. У случају произвољне оријентације узорка графена спољашња линија дуге је нагнута елипса. Параметри елипсе D_e^M, D_e^m и угао нагиба елипсе Ψ су функције од $\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2$ и угла $\bar{\theta}$ и $\bar{\Phi}$. Одређивање вредности променљивих $\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2$ и $\bar{\sigma}_z^2$ изискује бар три различита мерења. Једноставности ради, одабране су три функције: D_e^M која представља већи пречник елипсе са слике 7.4(а), D_e^m која представља мањи пречник елипсе са слике 7.4(б) и већи пречник елипсе D_e^M елипсе са слике 7.4(в), који су за потребе даље анализе преименовани у D_e^M, D_e^m и \mathfrak{D}_e^M , респективно. Дефинисан је систем три једначине:

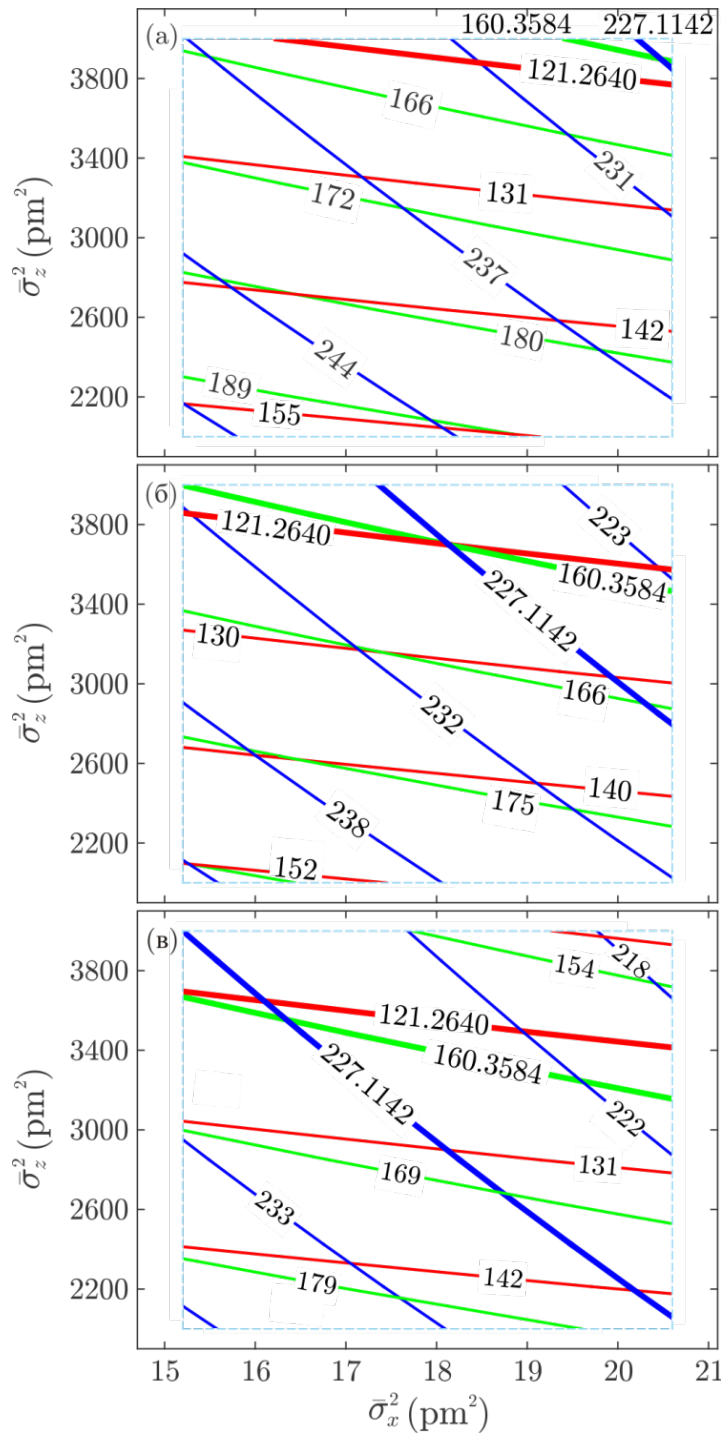
$$D_e^M = D_e^M(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2),$$

$$D_e^m = D_e^m(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2), \quad (8.1)$$

$$\mathfrak{D}_e^M = \mathfrak{D}_e^M(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2),$$

са три непознате $\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2$ и $\bar{\sigma}_z^2$. На сликама 8.2(а), 8.2(б) и 8.2(в) су приказани пресеци простора $(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2)$ за три различите вредности координате $\bar{\sigma}_y^2$: $\bar{\sigma}_y^2 = 30.00 \text{ pm}^2$, $\bar{\sigma}_y^2 = 35.45 \text{ pm}^2$ и $\bar{\sigma}_y^2 = 40.00 \text{ pm}^2$, респективно. У приказаним пресецима се изоповрши функција (8.1) свдеде на криве. Ове изокриве функција D_e^M, D_e^m и \mathfrak{D}_e^M су у одговарајућим пресецима приказане линијама плаве, црвене и зелене боје, респективно. Линијама веће дебљине су приказане изокриве које одговарају вредностима параметара елипса са слика 7.4(а), 7.4(б) и 7.4(в). Приметити да у сва три пресека, свакој вредности размотрених функција одговара тачно једна изокрива. Пресек три изокриве је нужно једна тачка. У пресеку изокрива $D_e^M = 227.11 \text{ mrad}$, $D_e^m = 121.26 \text{ mrad}$ и $\mathfrak{D}_e^M = 160.36 \text{ mrad}$ се налази тачка $(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2) = (18.14, 35.45, 3698.18) \text{ pm}^2$.

Матрица коваријансе у почетном координатном систему Σ се налази применом инверзне ротације. Матрица коваријансе Σ у општем случају није дијагонална матрица. На тај начин, мерењем само линија дуге, могуће је одредити варијансе и коефицијенте корелације термалних вибрација атома угљеника у графену.



Слика 8.2 Линејама плаве, црвене и зелене боје су приказани пресеци кроз еквиповрши пречника дуге $D_e^M(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2)$ у случају $\theta = 0$, функције $D_e^m(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2)$ у случају нагнутог графена за $\theta = 0.065\pi$ rad и $\mathcal{D}_e^M(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2)$ у случају нагнутог за угао $\theta = 0.065\pi$ rad и за угао $\Phi = 0.25\pi$ rad заротираног графена. Пресеци простора $(\bar{\sigma}_x^2, \bar{\sigma}_y^2, \bar{\sigma}_z^2)$ дуж $\bar{\sigma}_y^2 = 30.00$ pm², $\bar{\sigma}_y^2 = 35.45$ pm² и $\bar{\sigma}_y^2 = 40.00$ pm² су приказани на сликама (а), (б) и (в), респективно. Област прорачуна је оивичена испрекиданим линијама светло плаве боје. Вредности функција су исказане у mrad. Плавим, црвеним и зеленим линијама веће дебљине су приказане контуре које одговарају вредностима пречника дуга са слика 7.4(а), 7.4(б) и 7.4(в).

Грешци описаног поступка одређивања матрице коваријансе највише доприносе два чиниоца. Системска грешка потиче од избора модела потенцијала интеракције протона и атома угљеника који је накнадно и усредњен ради моделовања термалних вибрација.

Термално усредњавање потенцијала је прошло бројне провере; реч је уобичајеној претпоставци која се усваја приликом тумачења експерименталних расејања X-зракова или неутрона. Стога је кључан одабир прикладног модела потенцијала интеракције протона и атома угљеника. У поглављу 7.2.2 је показано да облик и величина унутрашње линије дуге h показују снажну зависност од модела потенцијала интеракције. Резултати приказани у овој глави указују да је унутрашња линија дуга практично независна од термалних вибрација атома угљеника. Закључујемо да се анализом унутрашњег дела дугиног обрасца може утврдити прикладан модел потенцијала интеракције. Овако одабран модел се потом може употребити за одређивање матрице коваријансе термалних вибрација ослањајући се само на анализу облика и величине одговарајућих спољашњих линија дуге. На тај начин се грешка модела потенцијала може умањити.

Други значајан допринос грешци предложеног поступка је експериментална неодређеност положаја линије дуге. Губици енергије протона, флукуације у углу расејања протона и дивергенција упадног снопа протона утичу на ширину линије дуге. У прилогу Б је применом импулсне апроксимације процењен утицај угаона дивергенција упадног снопа на ширину линије дуге. Укупна грешка се може умањити уколико се може контролисати угаона дивергенција снопа протона.

8.2. Карактеризација атомског састава кристала

У поглављу 7.2.3 је показано да спољашњи део дугиног обрасца садржи информацију о врсти атома који граде дводимензионалну решетку. Спољашњи део дугиног обрасца чине композитне линије дуге образоване протонима који се расејавају у околини појединачних атома. Број елемената који граде дводимензионалне кристале није велик. Међутим, једнослојни материјали могу садржати различите врсте атома у облику примеса.

У овом поглављу су представљени резултати прорачуна пречника композитних линија дуге коју образују протони расејани на хомоатомским кристалним структурама на собној температури. У прорачунима су употребљени протони енергије 5 keV.

1	1 - Симбол елемента	Li	Na	K	Rb	Cs	Be	Mg	B	Ca	Al			
2	2 - Пречник дуге (rad)	0.0244	0.0344	0.0458	0.0519	0.0618	0.1067	0.1411	0.1833	0.1931	0.2076			
C	Sr	In	Ba	Zn	S	P	Ga	Pb	Si	Hg	Ti	V	Mn	Cu
0.2851	0.2921	0.3671	0.4051	0.4065	0.4117	0.4206	0.4458	0.4483	0.4493	0.4709	0.4777	0.5349	0.5550	0.5674
Sc	Ni	Fe	As	Cr	Co	Bi	Ag	Sb	Cd	Ge	Sn	Mo	Au	U
0.5718	0.6009	0.6010	0.6011	0.6214	0.6703	0.7487	0.7708	0.7843	0.8091	0.9266	1.0570	1.2710	1.3525	3.1762

Слика 8.3. Резултати прорачуна композитних линија дуге које образују протони расејани на Дебајевом хомоатомском кристалу на собној температури. Пречник композитне линије дуге исписан је унутар сивог правоугаоника испод симбола одговарајућег хемијског елемента. Мерењем пречника композитне линије дуге са резолуцијом од 1 mrad могуће је једнозначно идентификовати елементе чији су симболи исписани унутар плавих квадрата. Композитне дуге елемената чији су симболи исписани унутар поља магента или црвене боје се узајамно разликују за мање од 1 mrad.

Потенцијал интеракције протона и атома је конструисан помоћу Дојл-Тарнеровог модела. Термалне вибрације атома су ради једноставности моделоване Дебајевом теоријом. Вредности Дебајевих температура су преузете из референце [160]. Размотрене су искључиво кристалне структуре сачињене од атома за које су доступни параметри Дојл-Тарнеровог модела потенцијала интеракције.

На слици 8.3 су симболи хемијских елеманата исписани у пољима плаве, магента и црвене боје. Испод сваког хемијског елемента је у правоугаоном пољу сиве боје исписана вредност пречника одговарајуће спољашње, тј. композитне линије дуге које образују расејани протони. Уколико је симбол хемијског елемента исписан унутар правоугаоника плаве боје, пречник одговарајуће композитне линије дуге се од пречника осталих спољашњих дуга осталих елемената разликује за више од 1 mrad. Композитне дуге атома Pb и Si се разликују за 1 mrad. Стога су симболи ова два елемента истакнути у приљубљеним пољима боје магенте. Композитне дуге атома Ni, Fe и As се разликују за 0.1 mrad. Стога су симболи ова три елемента истакнути у приљубљеним пољима црвене боје.

Израчуната вредност пречника композитне дуге за угљеник је једнака пречнику композитне дуге као у случају графена. Израчуната вредност пречника композитне дуге за бор је другачија од вредности која је израчуната у случају композитне дуге у дводимензионалном кристалу бор-нитрида. Ова разлика је последица разлике Дебајевих температура дводимензионалног бор-нитрида и тродимензионалног кристала бора. Исти ефекат је запажен приликом прорачуна линија дуге у графену са различитим варијансама отклона атома. Представљени резултати сугеришу да мерење пречника композитне линије дуге може послужити за карактеризацију састава или примеса кристала.

8.3. Карактеризација дефеката графена

Присуство дефеката се може неповољно одразити на механичка и електрична својства графена [150, 151, 161, 162]. С друге стране, дефекти могу имати позитиван утицај. Контролисаним увођењем дефеката је могуће изменити особине графена по жељи. Стога је карактеризација дефеката графена од великог значаја за нанотехнологију. Уобичајене методе за карактеризацију дефеката графена су микро-Раманова спектроскопија, спектроскопија блиског поља (СБП) и трансмисиона електронска микроскопија високе резолуције (ТЕМВР). У првој глави је већ било речи о овим техникама. Осврнимо се укратко на неке недостатке поменутих метода у погледу карактеризације дефеката у графену. Када је реч о карактеризацији дефеката графена, вредно је истаћи да је самом Рамановом спектроскопијом често немогуће разликовати различите врсте дефеката [161, 163, 164]. СБП је врста микроскопије скенирајућом сондом (МСС), која је угубо описана у поглављу 2.2. СБП омогућава приказ графена и то са просторном резолуцијом реда нанометра. Техника се заснива на интеракцији светлости и вибрационих модова материјала. Ипак, попут Раманове спектроскопије, ни овај поступак није савршен и није у могућности да разлучи различите врсте дефеката [161]. Ненадмашна резолуција ТЕМВР омогућава одређивање различитих врста неправилности кристалне решетке. Релативно високе енергије електрона потребне за остваривање високе резолуције узрокују и настанак нових дефеката. Стога ни ТЕМВР није беспрекорна метода за карактеризацију дефеката графена [159, 165, 166]. Штавише, тумачење добијених слика није једноставан поступак. Примера ради, аутори референци [167, 168] предлажу коришћење вештачких неуралних мрежа у те сврхе, док су аутори референце [169] развили нов приступ заснован на теорији графова.

Очито постојеће методе за карактеризацију графена нису без ограничења. У овом поглављу је представљен поступак, заснован на морфолошкој анализи угаоне расподеле трансмитованих протона, који би могао омогућити утврђивање присуства и разликовање врста дефеката у графену.

Почетна енергија протона износи 5 keV. Према ЗБЛ теорији губитка енергије, при трансмисији кроз графен протони ове енергије у средњем губе 22 eV, од чега свега 0.63 eV одговара губитку услед судара са језгрима. Средња енергија коју један протон пренесе на кретање атома угљеника је за ред величине мања од енергије која је потребна за настанак Стоун-Вејлсових дефеката (4.5 keV) и моноваканција (7.3 keV). За образовање осталих врста дефеката су потребне веће енергије [151]. Дефекти превасходно настају у чеоним сударима протона са атомима. Вероватноћа ових догађаја је веома мала. Стога, све док је флуенс протона ове енергије довољно мали, производња дефеката у графену се може занемарити.

Слике 7.13, 7.16, 7.17 и 7.18 сведоче да је дугин образац, који има пресудан утицај на угаону расподелу, сасвим другачији услед присуства дефеката у графену. У равни ударног параметра је линија дуге одбијена суседним максимумима и привучена оближњим седластим критичним тачкама или духовима седластих критичних тачака редукованог потенцијала. Чворови линије дуге, настали описаним привлачењем и одбијањем, пресликавају се у рокове, тј. сингуларитете угаоне линије дуге. Композитне линије дуге су кружнице.

Као што је показано, прераспоред критичних тачака редукованог потенцијала интеракције битно утиче на преображај дугиног обрасца и одговарајуће угаоне расподеле трансмитованих протона. Промене које узрокују различите врсте дефеката су битно другачије. Ако је само једна врста дефеката присутна у графену, једноставним испитивањем угаоне расподеле је могуће утврдити врсту дефеката.

Придружимо дефектима чији су дугини обрасци приказани на сликама 7.13, 7.16 и 7.17 бројеве: $\mu = 1, 2$ и 3 , респективно. Нека је $Y_{\rho_d}^{(\mu)}(\theta)$ нормирана угаона расподела протона трансмитованих кроз узорак који садржи дефекте врсте μ и густине ρ_d . Нормирана угаона расподела протона трансмитованих кроз савршен графен, приказан на слици 7.18, означена је са Y_0 . Стога важи идентитет: $Y_0^{(\mu)}(\theta) = Y_0, \forall \mu$. Угаоне расподеле приказане на сликама 7.13, 7.16 и 7.17 се стога могу означити са $Y_{\rho_m}^{(\mu)}(\theta)$, где је ρ_m највећа густина дефеката врсте μ . У суперћелији величине NS_u која садржи један дефекат, налази се $N - S_d/S_u$ елементарних ћелија савршеног графена и одговарајућа густина дефеката је $\rho_d = 1/NS_u$. Стога се угаона расподела $Y_{\rho_d}^{(\mu)}(\theta)$ може израчунати приближним изразом

$$Y_{\rho_d}^{(\mu)}(\theta) \approx Y_0(\theta) + \frac{1}{N} \frac{S_d}{S_u} \left(Y_{\rho_m}^{(\mu)}(\theta) - Y_0(\theta) \right). \quad (8.2)$$

Из тога следи да је довољно израчунати интеграл квадрата разлике расподела $Y_{\rho_d}^{(\mu)}(\theta)$ и Y_0 :

$$\int \left(Y_{\rho_d}^{(\mu)}(\theta) - Y_0(\theta) \right)^2 d^2\theta \approx \left(\frac{S_d}{NS_u} \right)^2 \int \left(Y_{\rho_m}^{(\mu)}(\theta) - Y_0(\theta) \right)^2 d^2\theta, \quad (8.3)$$

како би се одредила густина дефеката, јер је интеграл $\int \left(Y_{\rho_m}^{(\mu)}(\theta) - Y_0(\theta) \right)^2 d^2\theta$ константа, независна од густине дефеката дате врсте.

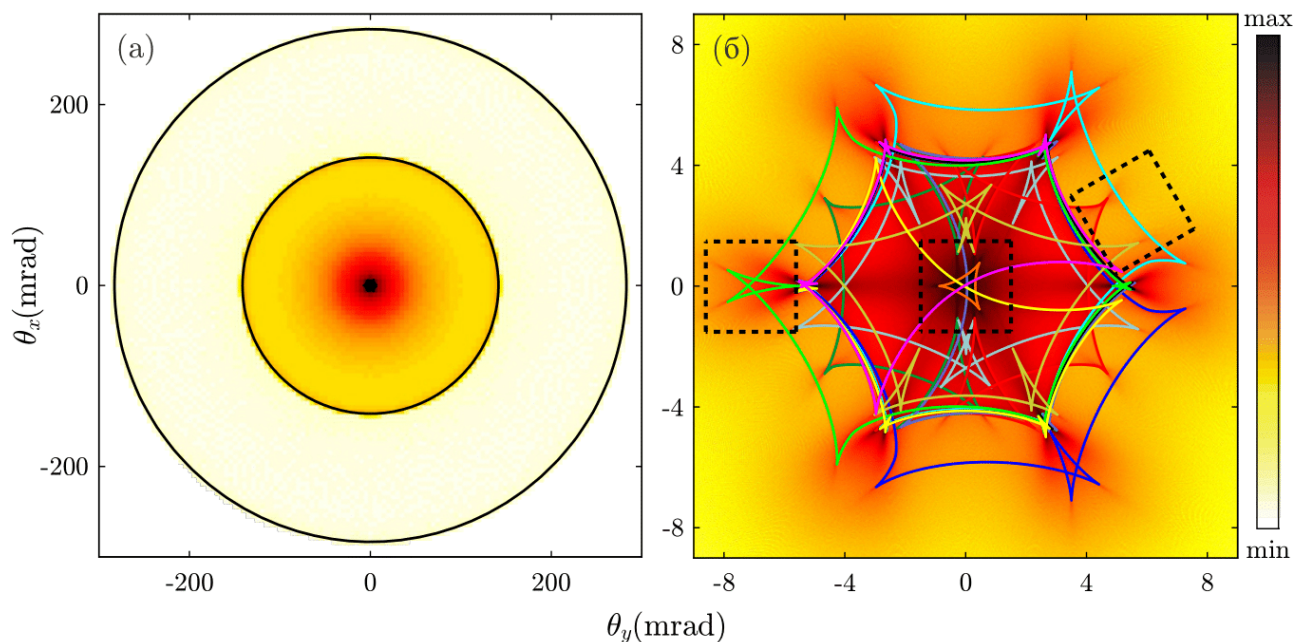
Инверзни проблем

У наставку су представљени резултати испитивања графена који садржи више од једне врсте дефекта и показано је како се на основу угаоне расподеле може утврдити густина присутних

дефеката. На слици 8.4 је приказан дугин образац и одговарајућа угаона расподела протона трансмитованих кроз графен са једном моноваканцијом, једним адатомом и једним Стоун-Вејлсовим дефектом на површини $18S_u$. Густина сваке врсте дефекта је стога $1/18S_u$. Израчуната угаона расподела веома личи на збир расподела приказаних на сликама 7.13, 7.16, 7.17 и 7.18. Заправо, расподела приказана на слици 8.4 се може одлично апроксимирати отежињеним збиром угаоних расподела протона расејаних на елементарној ћелији савршеног графена и ћелији моноваканције, адатома и Стоун-Вејлсовог дефекта.

Нека у је број могућих вредности густине дефекта (у одређеном интервалу од значаја) једнак N_d . Скуп могућих комбинација дефеката је тродимензионална мрежа $\rho_d^{(1)} \times \rho_d^{(2)} \times \rho_d^{(3)}$, сачињена од N_d^3 тачака. Непознате густине дефеката се могу одредити систематским испитивањем целог конфигурационог простора. Потребно је спровести N_d^3 нумеричких прорачуна трансмисије. Потом је могуће израчунати норму разлике измерене и израчунатих угаоних расподела. Глобални минимум овако израчунате функције одговара непознатој комбинацији дефеката одговарајућих густина. Описан поступак је еквивалентан алгоритму за одређивање глобалног минимума произвољне функције, који не узима у обзир особености функције која се испитује. Последишно је зависност времена извршења процедуре од броја улазних података приближно пропорционална са N_d^3 , односно рачунска комплексност алгоритма је $O(N_d^3)$. Из тог разлога овај једноставан приступ није нарочито учинковит. Штавише, овакви алгоритми нису прикладни за испитивање глобалних минимума система код којих у малој околини глобалног минимума постоји више локалних минимума.

У наставку је показано како се рачунска комплексност може свести на $O(3N_d)$, узимајући у обзир облик угаоне расподеле $Y_{\rho_d}^{(\mu)}$. Значајно поједностављење је засновано на чињеници да су дугини максимуми сингуларни. То значи да се са повећањем броја упадних протона, висина дугиног максимума повећава, а ширина смањује. Ово није својство обичног несингуларног максимума расподеле (чији је настанак објашњен у поглављу.7.3). Ако је број протона довољно велик, сингуларни максимум је у одговарајућој области угла расејања најизраженији део расподеле.



Слика 8.4 (а) Угаона расподела протона трансмитованих кроз графен са једнаком густином моноваканција, адатома и Стоун-Вејлсових дефеката. (б) Увеличан приказ угаоне расподеле и линија дуге у околини координатног почетка равни углова расејања. Правоугаоници нацртани испрекиданом линијама црне боје истичу карактеристичне особине угаоне расподеле које су последица присуства моноваканција, адатома и Стоун-Вејлсових дефеката у графену.

На основу слика 7.13, 7.16 и 7.17 је могуће за сваку врсту дефекта утврдити карактеристичан део дугиног обрасца. Карактеристични сегмент сваког дугиног обрасца је одабран уз услов да је у области углава расејања којој припада, облик расподеле која одговара савршеном графену што једноставнији. Штавише, издвојени карактеристични делови дугиног обрасца су такви да се области углава расејања којима припадају не преклапају. На тај начин је омогућено независно испитивање сваке врсте дефекта, чиме је рачунска комплексност снижена са $O(N_d^3)$ на $O(3N_d)$.

Карактеристични део дугиног обрасца у случају моноваканције је средишњи троугао, уоквирен испрекиданом линијом облика квадрата на слици 7.13(б'). У случају адатома је карактеристични део обрасца лептир смештен изван структурне линије дуге савршеног графена и оивичен испрекиданом линијом беле боје на слици 7.16(б'). Карактеристични део дугиног обрасца који одговара Стоун-Вејлсовом дефекту чине два рога смештена унутар испрекидане криве облика квадрата на слици 7.17(б'). Сва три карактеристична обрасца су јасно видљиви и оивичени испрекиданим линијама црне боје на слици 8.4(б).

Густину μ дефекта је могуће одредити рачунањем угаоне расподеле $Y_{\rho_d}^{(\mu)}$, за различите вредности густине ρ_d , на правилној мрежи која покрива карактеристични детаљ дугиног обрасца. Ортогоналне векторе који разапињу дату мрежу означимо са θ_1 и θ_2 . Дефинисана је променљива:

$$\zeta_\mu^2(\rho_d) = \frac{1}{N_1 N_2} \sum_{n=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \left(1 - \frac{Y_{\rho_d}^{(\mu)}(\theta_{nm})}{Y_0(\theta_{nm})} \right)^2, \quad (8.4)$$

где је $\theta_{nm} = \theta_c + n\theta_1 + m\theta_2$, θ_c је вектор положаја средишта карактеристичног правоугаоника за дату врсту дефекта, бројевима N_1 и N_2 је задат број тачака на мрежи у правцу вектора θ_1 и θ_2 , респективно. Величина ζ_μ је корен средњег квадрата релативне разлике одброја протона трансмитованих кроз графен са и без дефеката. ζ_μ је показатељ различитости угаоних расподела $Y_{\rho_d}^{(\mu)}$ и Y_0 у области од значаја. $\zeta_\mu(\rho_d)$ је монотono растућа функција са минималном вредношћу 0 и максималном вредношћу $\zeta_\mu(\rho_m)$.

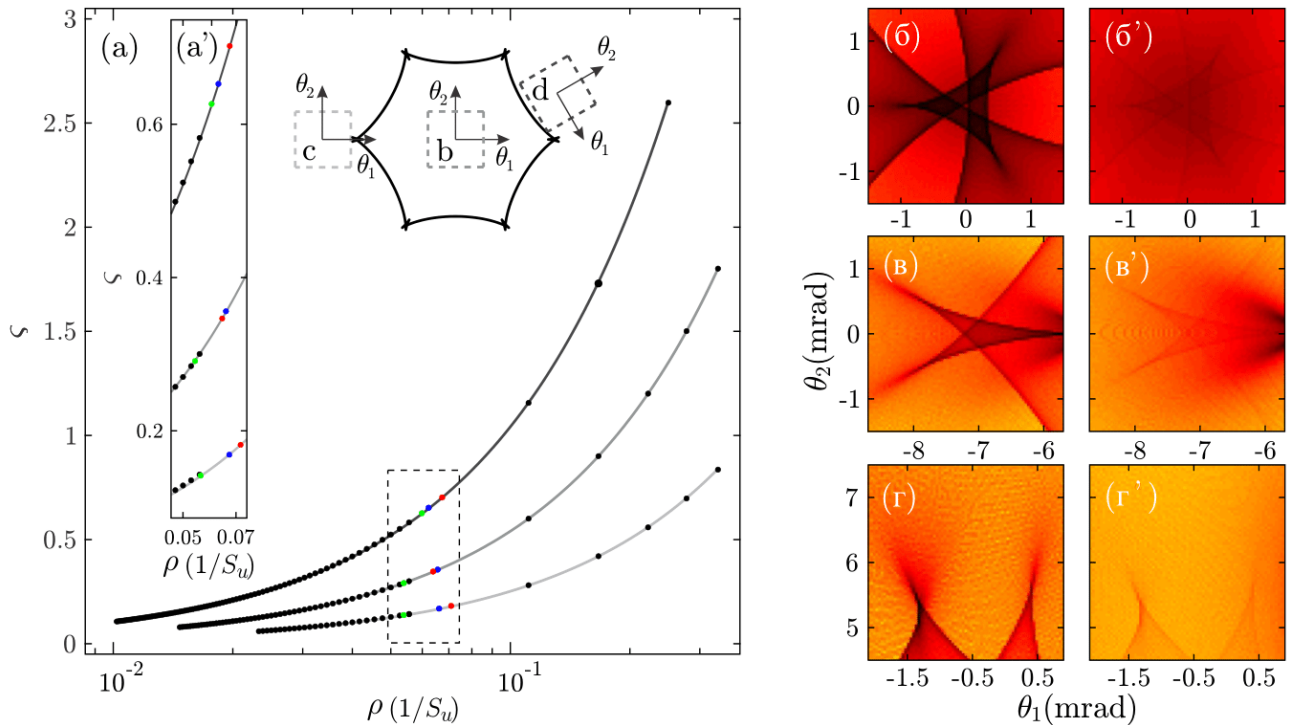
На слици 8.5(а) је приказан цртеж дугиног обрасца у случају графена без дефеката и одговарајуће карактеристичне области оивичене квадратима. У свим прорачунима је рачунску мрежу чинило 75×75 тачака. Израчунате зависности $\zeta_\mu(\rho_d)$ за $\mu = 1, 2$ и 3 , приказане су на слици 8.5(а) црним тачкама. Апсциса на слици 8.5(а) представља различите вредности густине дефекта изражене у логаритамској размери. Добијене зависности су одлично поновљене линеарном функцијом: $\zeta_\mu(\rho_d) = k_\mu \rho_d$ (најмања вредност коефицијента корелације, којом је изражена ваљаност фита износи 0.9999). Линијама тамне, светле и бледе сиве боје су на слици 8.5(а) приказане зависности: $\zeta_\mu(\log \rho_d) = k_\mu \log \rho_d$, које представљају калибрационе криве за случај моноваканције, адатома и Стоун-Вејлсовог дефекта.

Крајњим тачкама на десној страни сваке зависности су представљене максималне густине дефеката. Одговарајуће расподеле у оквиру карактеристичних области углава расејања су приказане на сликама 8.5(б)- 8.5(г). Важно је поменути да бројна вредност величине ζ_μ не одражава облик сигнала који квантификује. Информација о облику је садржана у смишљеном суужењу домена угаоне расподеле на карактеристичне правоугаонике. Из тог разлога у случају веома малих густина дефеката није једноставно разлучити да ли допринос величини ζ_μ потиче од дефеката, статистичких флукуација или шума. Прорачуни су обустављени када се унутар карактеристичног правоугаоника нису могли голим оком разазнати облици својствени дугином обрасцу дате врсте дефекта. На сликама 8.5(б'), 8.5(в') и 8.5(г') су приказане угаоне расподеле у случају најмањих густина дефеката које се могу опазити. На слици 8.5(а) су ове вредности густина дефеката и

одговарајуће вредности величине ζ_μ представљене крајње левим тачкама црне боје. Најниже вредности величине ζ_μ у случају моноваканције, адатома и Стоун-Вејлсовог дефекта износе: 0.0795, 0.0598 и 0.1069, респективно. Одговарајуће минималне густине дефеката које се могу одредити су 0.2730 nm^{-2} , 0.4318 nm^{-2} и 0.1893 nm^{-2} , односно $1/68S_u$, $1/43S_u$ и $1/98S_u$. Строго посматрано, доња граница осетљивости понајвише зависи од резолуције слике, динамичког опсега и односа сигнала и шума. Штавише, ако се у поступку употреби систем за обраду слике који је напреднији од вида човека, доњу границу осетљивости је могуће додатно померити према нижим вредностима.

У наставку је показано како се добијене калибрационе криве могу употребити за карактеризацију графена коме одговара расподела приказана на слици 8.4. Размотрен је графен који садржи једнак број дефеката све три врсте. Моделован узорак садржи дефекте на најмањој могућој удаљености. Са становишта карактеризације, овакав модел графена са дефектима представља најизазовнији могући случај. То значи да је грешка која се прави применом морфолошке анализе на сваки други модел несавршеног графена мања.

Корен средњег квадрата релативне разлике расподеле са слике 8.4 и угаоне расподеле $Y_0(\theta_{nm})$, на одговарајућим карактеристичним доменима моноваканције, адатома и Стоун-Вејлсовог дефекта износи $\zeta_1 = 0.3466$, $\zeta_2 = 0.1817$ и $\zeta_3 = 0.7021$, респективно. Употребом калибрационих линија је утврђено да одговарајуће густине дефеката износе: $\rho_d^{(1)} = 1.1804 \text{ nm}^{-2}$, $\rho_d^{(2)} = 1.3365 \text{ nm}^{-2}$, $\rho_d^{(3)} = 1.2579 \text{ nm}^{-2}$, респективно. Важе приближне једнакости: $\rho_d^{(1)} \approx 1/16S_u$, $\rho_d^{(2)} \approx 1/14S_u$ и $\rho_d^{(3)} \approx 1/15S_u$.



Слика 8.5 (а) Калибрационе криве за одређивање густине непознате врсте дефекта у графену. Израчунате вредности величине ζ за одговарајуће вредности густине дефеката су приказане тачкама црне боје. Криве тамно сиве, сиве и светло сиве боје су одговарајући фитови у случају моноваканција, адатома и Стоун-Вејлсових дефеката, респективно. (а') Увеличан приказкалибрационих кривих у околини тачке $\rho_d = 1/18S_u$. Угаоне расподеле у оквиру карактеристичног правоугаоника у случају највеће густине дефеката (б)-(г) и најмање густине дефеката која се може опазити (б')-(г') (Прилагођено на основу података из референце [149]).

Грешке утврђених густина моноваканција, адатома и Стоун-Вејлсових дефеката износе 15%, 30% и 22%, респективно. Слика 8.5(а') представља увеличан приказ калибрационих линија у околини тачке $\rho_d = 1/18S_u$. На слици 8.5(а') су резултати описане анализе представљени тачкама црвене боје.

Важно је поменути да размотрени узорак графена садржи нефизички велику количину дефеката. Слика 8.4(б) сведочи да је у оквиру карактеристичног правоугаоника одређене врсте дефекта, допринос угаоној расподели који потиче од осталих врста дефеката графена занемарљив. За мање вредности укупне густине дефеката је овај неповољни допринос још мањи. То је потврђено испитивањем узорка који садржи једну моноваканцију и један адатом унутар рачунске ћелије из претходног примера. Добијени подаци су на слици 8.5(а') приказани тачкама плаве боје. У овом случају су грешке одређивања густине моноваканција и адатома 2% и 1%, респективно. Испитан је и узорак исте величине као претходни који садржи један адатом и један Стоун-Вејлсов дефекат. Добијени подаци су на слици 8.5(а') приказани тачкама зелене боје. Грешке одређивања густине адатома и Стоун-Вејлсових дефеката износе 20% и 13%, респективно.

Слика 8.5(а') потврђује да и веома мало смањење укупне густине дефеката значајно умањује грешку овог једноставног поступка карактеризације. У првом случају је грешка умањена приближно 10 пута, а у другом приближно 3 пута.

Вредно је истаћи да размотрени узорци садрже веома велику густину дефеката. У случају густина дефеката више одговарају стварним узорцима, очекује се да грешка ове једноставне методе за карактеризацију дефеката графена буде знатно мања од утврђене средње релативне грешке од 22.33%.

Облик и положај дугиног обрасца су кључни за карактеризацију густине и врсте дефеката графена. У прилогу Б је показано да је померај дугиног максимума једнак стандардној девијацији упадног снопа σ_θ , док је ширина пика приближно $2.7\sigma_\theta$. То значи да дивергенција упадног снопа протона не утиче значајно на облик дугиног обрасца уколико је удаљеност блиских линија дуге већа од $2.7\sigma_\theta$. Примера ради, у случају микроснопа протона чије је $\sigma_\theta = 0.25 \text{ mrad}$, неодређеност у положају одговарајућих линија дуге износи $\pm 5 \%$.

Глава 9

Закључци

Представљени су резултати испитивања угаоних расподела протона трансмитованих кроз дводимензионални кристал. Почетна енергија трансмитованих протона је 5 keV. Дифракциони ефекти су занемарљиво мали и стога је расејање моделовано класичном механиком. Графен је најбоље проучен дводимензионални кристал. У том смислу је графен најзначајнији представник ове класе наноматеријала. Из тог разлога је прво спроведена анализа угаоне расподеле протона трансмитованих кроз графен. Накнадно је спроведена и анализа дугиног расејања протона на хетероатомском аналогу графена-дводимензионалном хексагоналном кристалу бор-нитрида.

Коваријансе отклона атома услед термалних флукуација графена су израчунате применом Дебајевог модела и LAMMPS-а, симулатора класичне молекулске динамике. Угаоне расподеле трансмитованих протона су рачунате решавањем једначина кретања. Утврђено је да се дугино расејање протона енергије 5 keV-а може одлично моделовати применом импулсне апроксимације. Трансмисија је тада моделована градијентним пресликавањем скупа почетних положаја у скуп углова расејања. У том случају је расејање у потпуности одређено скаларном функцијом ударног параметра протона - редукованим потенцијалом интеракције.

Утврђено је да маса, енергија и наелектрисање протона не одређују облик већ искључиво величину угаоне расподеле. С друге стране, оријентација 2Д кристала значајно утиче на облик дугиног обрасца. Стога је подробно изучен преображај дугиног обрасца услед промене упадног правца снопа протона.

Дугин образац чине чине спољашње и унутрашње линије дуге. Спољашње линије дуге образују протони расејани у малој околини максимума редукованог потенцијала интеракције. Максимуми редукованог потенцијала се подудару са положајима атома. Стога спољашње линије дуге показују снажну зависност од редног броја атома кристала и коваријансе отклона атома услед термалних флукуација. Анализом облика и величине спољашње дуге је могуће утврдити састав кристала и одредити матрицу коваријансе отклона атома Σ . Показано је да се спољашње линије дуге могу моделовати елипсама, које су нормалне пројекције елипсоида Σ^{-1} на трансверзалну раван упадног снопа. Установљено је да облик и величина спољашње линије дуге једнозначно одређују матрицу Σ . Штавише, развијен поступак је примењив и у случају потпуно анизотропног и корелисаног кретања атома кристала. Остварени резултати би могли бити употребљени за одређивање зависности матрице Σ од температуре. Термалне вибрације атома кристала не утичу на облик или величину унутрашњих линија дуге.

Унутрашње линије дуге образују протони који се расејавају у околини седластих критичних тачака или минимума редукованог потенцијала интеракције. За разлику од спољашњих дуга, унутрашње линије дуге могу бити сингуларне криве. Утврђено је да чворовима или сингуларитетима линија дуге у равни углова расејања одговарају чворови линија дуге у равни ударног параметра. Просторни распоред чворова дуге у равни ударног параметра одражава распоред оближњих критичних тачака редукованог потенцијала. Критичне тачке су одређене просторним распоредом атома у кристалу. На облик унутрашњих дуга стога снажно утиче структура кристала. Унутрашње линије дуге окружују праве минимуме или духове минимума редукованог потенцијала интеракције. Оближњи максимуми одбијају унутрашње линије дуге, док су привучене правим или духовима седластих критичних тачака редукованог потенцијала.

Испитана је трансмисија протона кроз графен са моноваканцијама, адатомима и Стоун-Вејлсовим дефектима. Утврђено је да и у присуству дефеката дугин образац има пресудан утицај на облик угаоне расподеле расејаних протона. Утврђено је да свака врста дефекта образује јединствен дугин образац. У случају моноваканција је уочено да на облик унутрашње дуге утичу духови дегенерисаних критичних тачака редукованог потенцијала интеракције. Одређена је промена угаоне расподеле са променом густине дефеката. Израчунате су калибрационе криве које омогућавају одређивање врсте и густине априори непознатих дефеката графена. Установљено је да угаоне расподеле протона трансмитованих кроз савршен графен и графен са адатомима и Стоун-Вејлсовим дефектима поседују несингуларне максимуме. Несингуларни максимуми угаоне расподеле граде једнодимензионе структуре које подсећају на гребене. Утврђено је да ове максимуме образују протони који се расејавају у тачкама у којима је Јакобијан закона расејања скоро сингуларан. Правци ових структура су колинеарни са својственим векторима Јакобијана закона расејања у одговарајућим тачкама.

На основу реченог је јасно да морфолошка анализа дугиног обрасца може послужити као основ нове технике за карактеризацију дводимензионалних кристала.

Литература

- [1] K. S. Novoselov, et al., *Electric field effect in atomically thin carbon films*. Science **306**, 5696, 666-669 (2004).
- [2] K. Cao, S. Feng, Y. Han, et al., *Elastic straining of free-standing monolayer graphene*. Nat. Commun. **11**, 1 (2020).
- [3] M. I. Katsnelson, *Graphene: carbon in two dimensions*. Cambridge University Press (2012).
- [4] G. Fiori et al., *Electronics based on two-dimensional materials*. Nature Nanotechnology **9**, 1063 (2014).
- [5] N. Mohanty, V. Berry. *Graphene-based Single-Bacterium Resolution Biodevice and DNA-Transistor: Interfacing Graphene-Derivatives with Nano and Micro Scale Biocomponents*. Nano Letters **8**, 12, 4469–4476 (2008).
- [6] T. Yiang, et al., *Furin-Mediated Sequential Delivery of Anticancer Cytokine and Small-Molecule Drug Shuttled by Graphene*. Advanced Materials **27**, 6, 1021-1028 (2014).
- [7] A. Castellanos-Gomez, *Why all the fuss about 2D semiconductors?*. Nat. Photonics **10**, 202–204 (2016).
- [8] M. Yankowitz, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. San-Jose, B. J. Leroy. *Pressure-induced commensurate stacking of graphene on boron nitride*. Nat. Commun. **7** (2016).
- [9] L. H. Li, et al., *Strong Oxidation Resistance of Atomically Thin Boron Nitride Nanosheets*. ACS Nano **8**, 2, 1457-1462 (2014).
- [10] L. H. Li, et al., *Nanosheets: Boron Nitride Nanosheets for Metal Protection*. Advanced Materials Interfaces **1**, 8 (2014).
- [11] Z. Liu, et al., *Ultrathin high-temperature oxidation-resistant coatings of hexagonal boron nitride*. Nature Communications **4** (2013).
- [12] X. Chen, et al., *High-quality sandwiched black phosphorus heterostructure and its quantum oscillations*. Nature Communications **6**, 1 (2015).
- [13] Q. Cai, et al., *Molecule-Induced Conformational Change in Boron Nitride Nanosheets with Enhanced Surface Adsorption*. Advanced Functional Materials **26**, 45, 8202-8210 (2016).
- [14] L. H. Li, Y. Chen. *Atomically Thin Boron Nitride: Unique Properties and Applications*. Advanced Functional Materials **26**, 16, 2594-2608 (2016).
- [15] Y. Lin, J. W. Connell. *Advances in 2D boron nitride nanostructures: nanosheets, nanoribbons, nanomeshes, and hybrids with graphene*. Nanoscale **4**, 22 (2012).
- [16] S. Hu, et al., *Proton transport through one-atom-thick crystals*. Nature **516**, 7530 (2014).

- [17] R. Roldan, J. A. Silva-Guillen, M. P. Lopez-Sancho, F. Guinea, E. Cappelluti and P. Ordejon. *Electronic properties of single-layer and multilayer transition metal dichalcogenides MX_2 ($M = Mo, W$ and $X = S, Se$).* Ann. Phys. **526**, 9, 347-357 (2014).
- [18] A. Castellanos-Gomez. *Black Phosphorus: Narrow Gap, Wide Applications.* J. Phys. Chem. Lett. **6**, 21 (2015).
- [19] J. Quereda, et al., *Strong Modulation of Optical Properties in Black Phosphorus through Strain-Engineered Rippling.* Nano Lett. **16** (2016).
- [20] Y. Liu, et al., *Van der Waals heterostructures and devices.* Nat. Rev. Mater. **1**, 16042 (2016).
- [21] L. D. Landau, E. M. Lifshitz. *Course of Theoretical Physics Vol. 5, Statistical Physics Part 1.* Butterworth-Heinemann (1980).
- [22] N. D. Mermin, *Crystalline order in two dimensions.* Phys. Rev. **176**, 250 (1968).
- [23] J. A. Venables, G. D. T. Spiller, M. Hanbucken. *Nucleation and growth of thin films.* Rep. Prog. Phys. **47**, 399 (1984).
- [24] J. W. Evans, P. A. Thiel, M. C. Bartelt. *Morphological evolution during epitaxial thin film growth Formation of 2D islands and 3D mounds.* Sur. Sci. Rep. **61**, 1, 1-128 (2006).
- [25] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, S. Roth. *The structure of suspended graphene sheets.* Nature **446**, 7131 (2007).
- [26] C. S. Allen, E. Liberti, J. S. Kim, Q. Xu, Y. Fan, K. He, A. W. Robertson, H. W. Zandbergen, J. H. Warner, A. I. Kirkland. *Temperature dependence of atomic vibrations in mono-layer graphene.* Journal of Applied Physics **118**, 7 (2015).
- [27] A. Fasolino, J. H. Los, M. I. Katsnelson. *Intrinsic ripples in graphene.* Nat. Mater. **6**, 858–861 (2007).
- [28] R. C. Thompson-Flagg, M. J. B. Moura and M. Marder. *Rippling of graphene.* Europhysics Letters **85**, 4 (2009).
- [29] S. C. Xu, S. Irle, D. G. Musaev, M. C. Lin. *Quantum chemical study of the dissociative adsorption of OH and H₂O on pristine and defective graphite (0001) surfaces: Reaction mechanisms and kinetics.* J. Phys. Chem. C **111**, 3, 1355-1365 (2007).
- [30] A. OHare, F.V. Kusmartsev, K. I. Kugel. *A stable "flat" form of two-dimensional crystals: could graphene, silicene, germanene be minigap semiconductors.* Nano Lett. **12**, 2, 1045-1052 (2012).
- [31] I. Jung et al., *Simple Approach for High-Contrast Optical Imaging and Characterization of Graphene- Based Sheets.* Nano Lett. **7**, 12, 3569-3575 (2007).
- [32] H. Li et al., *Optical Identification of Single- and Few-Layer MoS₂ Sheets.* Small **8**, 5, 682-686 (2012).
- [33] H. Li et al., *Rapid and Reliable Thickness Identification of Two-Dimensional Nanosheets Using Optical Microscopy.* ACS Nano **7**, 11, 10344-10353 (2013).

- [34] M. Benameur, et al., *Visibility of Dichalcogenide Nanolayers*. *Nanotechnology* **22**, 125706 (2011).
- [35] L. A. Bottomley. *Scanning Probe Microscopy*. *Anal. Chem.* **70**, 12, 425-3443 (1998).
- [36] F. Adams, C. Barbante. *Comprehensive Analytical Chemistry*. Elsevier, New York, (2015).
- [37] G. Binnig, H. Rohrer. *Scanning tunneling microscopy*. *Helvetica Physica Acta* **55**, (1982).
- [38] G. Binnig, C. F. Quate, C. Gerber. *Atomic force microscope*, *Physical Review Letters* **56**, 930 (1986).
- [39] C. Musumeci. *Advanced Scanning Probe Microscopy of Graphene and Other 2D Materials*. *Crystals* **7**, 7 (2017).
- [40] C. W. Oatley, W. C. Nixon, R. F. W. Pease, *Scanning Electron Microscopy*, *Adv. Electron. Phys.* **21**, 181-247 (1966).
- [41] P. B. Hirsch. *Electron Microscopy of Thin Crystals*. Krieger (1977).
- [42] J. Lee, X. Zheng, R. C. Roberts, P. X.-L. Feng. *Scanning electron microscopy characterization of structural features in suspended and non-suspended graphene by customized CVD growth*. *Diamond and Related Materials* **54**, 64-73 (2015).
- [43] D. B. Williams, C. B. Carter. *Transmission Electron Microscopy*. Plenum Press, New York (1996).
- [44] A. Castellanos-Gomez, et al. *Isolation and Characterization of Few-Layer Black Phosphorus*. *2D Mater.* **1**, 2014.
- [45] X. Huang et al., *Synthesis of Hexagonal Close-Packed Gold Nanostructures*. *Nat. Commun.* **2** (2011).
- [46] A. V. Crewe. *Scanning Transmission Electron Microscopy*. *J. Microsc.* **100**, 3, 247-259 (1974).
- [47] N. Dellby et al., *Progress in Aberration-Corrected Scanning Transmission Electron Microscopy*. *Journal of Electron Microscopy* **50**, 3, 177-185 (2001).
- [48] P. E. Batson, N. Dellby, O. L. Krivanek. *Sub-ångstrom Resolution Using Aberration Corrected Electron Optics*. *Nature* **418**, 617-620 (2002).
- [49] M. Varela, et al., *Materials Characterization in the Aberration-Corrected Scanning Transmission Electron Microscope*. *Annu. Rev. Mater. Res.* **35**, 539-569 (2005).
- [50] O. L. Krivanek et al., *Atom-by-Atom Structural and Chemical Analysis by Annular Dark-Field Electron Microscopy*. *Nature* **464**, 571-574 (2010).
- [51] R. Koppera et al., *Phase-Engineered Low-Resistance Contacts for Ultrathin MoS₂ Transistors*. *Nat. Mater.* **13**, 1128-1134 (2014).
- [52] Z. L. Wang. *Transmission Electron Microscopy of Shape-Controlled Nanocrystals and Their Assemblies*. *J. Phys. Chem. B* **104**, 6, 1153-1175 (2000).
- [53] Y.- C. Lin et al., *Atomic Mechanism of the Semiconducting-to-Metallic Phase Transition in Single-Layered MoS₂* *Nat. Nanotechnol.* **9**, 5 (2014).

- [54] W. H. Weber, R. Merlin. *Raman Scattering in Materials Sciences*. Springer (2000).
- [55] M. A. Renucci, J. B. Renucci, M. Cardona. *Light Scattering in Solids*. Flammarion, Paris (1971).
- [56] B. Jusserand, J. Sapriel. Phys. Rev. B **24**, 7194 (1981).
- [57] R. Carles, A. Zwick, M. A. Renucci, J. B. Renucci. *A new experimental method for the determination of the one phonon density of states in GaAs*. Solid State Commun. **41**, 7, 557-560 (1982).
- [58] G. P. Srivastava. *The Physics of Phonons*. Adam Hilger, Bristol (1990).
- [59] G. Lucovsky, A. Mooradian, W. Taylor, G. B. Wright. Solid State Commun **5**, 113-117 (1967).
- [60] W. H. Weber, B. K. Yang, M. Krishnamurthy. *The Ge-C local mode in epitaxial GeC and Ge-rich GeSiC alloys*. Appl. Phys. Lett. **73**, 5 (1998).
- [61] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus. *Intercalation compounds of graphite*. Advan. Phys. **30**, 2, 139-326 (1981).
- [62] X. Zhang et al., *Phonon and Raman Scattering of Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides from Monolayer, Multilayer to Bulk Material*. Chem. Soc. Rev. **44**, 9 (2015).
- [63] A. C. Ferrari, D. M. Basko. *Raman Spectroscopy as a Versatile Tool for Studying the Properties of Graphene*. Nat. Nanotechnol. **8**, 235-246 (2013).
- [64] A. C. Ferrari. *Raman Spectroscopy of Graphene and Graphite: Disorder, Electron-Phonon Coupling, Doping and Nonadiabatic Effects*. Solid State Commun. **143**, 1, 47-57 (2007).
- [65] Z. Ni et al., *Raman Spectroscopy and Imaging of Graphene*. Nano Res. **1**, 273-291 (2008).
- [66] C. Lee et al., *Anomalous Lattice Vibrations of Single- and Few-Layer MoS₂*. ACS Nano **4**, 5, 2695-2700 (2010).
- [67] H. Geiger, E. Marsden. *Deflection of α particles through large angles*. Phil. Mag. **25** (1913).
- [68] M. B. Breese, D. N. Jamieson, P. J. King. *Materials Analysis Using a Nuclear Microprobe*. Wiley, New York (1996).
- [69] D. V. Morgan. *Channeling Theory, Observations and Applications*. Wiley, New York (1974).
- [70] L. C. Feldman, J. W. Mayer, S. T. Picraux. *Materials Analysis by Ion Channeling*. Academic Press, New York (1982).
- [71] Z. Y. Dang, M. Motapohtula, Y. S. Ow, T. Venkatesan, M. B. Breese, M. A. Rana, A. Osman. *Fabrication of large-area ultra-thin single crystal silicon membranes*. Appl. Phys. Lett. **99**, 223105 (2011).
- [72] M. Motapohtula, Z. Y. Dang, T. Venkatesan, M. B. Breese. *Axial ion channeling patterns from ultra-thin silicon membranes*. Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B **283** (2012).
- [73] M. Motapohtula, Z. Y. Dang, T. Venkatesan, M. B. Breese, M. A. Rana, A. Osman. *Influence of the narrow {111} planes on axial and planar ion channeling*. Phys. Rev. Lett. **108**, 195502 (2012).

- [74] M. Motapothula, Z. Y. Dang, T. Venkatesan, M. B. Breese. *A study of ion channeling patterns at minor axes in silicon*. Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B **330**, 24 (2014).
- [75] J. R. Taylor. *Scattering Theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions*. J. Wiley & Sons (1972).
- [76] H. M. Nussenzveig. *Diffraction effects in semiclassical scattering*. Cambridge University Press (1992).
- [77] L. D. Landau, E. M. Lifshitz. *Mechanics*. Butterworth-Heinemann (1976).
- [78] T. Poston, I. Stewart. *Catastrophe: Theory and Its Applications*. Pitman Publishing, London (1978).
- [79] O. B. Firsov. *Determination of the forces acting between atoms using the differential effective cross-section for elastic scattering*. Zh. Eksp. Teor. Fiz. **24** (1953).
- [80] E. A. Mason. *Scattering of low velocity molecular beams in gases*. J. Chem. Phys. **26**, 667 (1957).
- [81] K. W. Ford, J. A. Wheeler. *Semiclassical description of scattering*. Ann. Phys. **7**, 3, 259-286 (1959).
- [82] K. W. Ford, J. A. Wheeler. *Application of semiclassical scattering analysis*. Ann. Phys. **7**, 3, 287-322 (1959).
- [83] D. Beck. *Wide-angle scattering in molecular beams. The rainbow effect*. J. Chem. Phys. **37**, 12 (1962).
- [84] D. A. Goldberg, S. M. Smith. *Criteria for the elimination of discrete ambiguities in nuclear optical potentials*. Phys. Rev. Lett. **29**, 500 (1972).
- [85] R. A. Oman. *Numerical experiments on scattering of noble gases from single-crystal silver*. J. Chem. Phys. **48**, 3919 (1968).
- [86] J. N. Smith Jr, D. R. O'Keefe, H. Saltsburg, P. L. Palmer. *Preferential scattering of Ar from LiF: Correlation with lattice properties*. J. Chem. Phys. **50**, 4667 (1969).
- [87] J. D. McClure. *Surface rainbows: A similitude between classical and diffractive scattering of atoms from crystalline surfaces*. J. Chem. Phys. **52**, 2712 (1970).
- [88] G. Boato, et al., *Diffraction and rainbow in atom-surface scattering*. J. Phys. C **6** (1973).
- [89] D. S. Gemmell. *Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals*. Rev. Mod. Phys. **46**, 129-227 (1974).
- [90] N. Nešković. *Rainbow effect in ion channeling* Phys. Rev. B **33**, 6030 (1986).
- [91] H. F. Krause, S. Datz, P. F. Dittner, J. Gomez del Campo, P. D. Miller, C. D. Moak, N. Nešković, P. L. Pepmiller. *Rainbow effect in axial ion channeling*. Phys. Rev. B **33**, 9, 6036-6044 (1986).
- [92] S. Petrović, N. Nešković, M. Ćosić, M. Motapothula, M.B.H. Breese. *Proton-silicon interaction potential extracted from high-resolution measurements of crystal rainbows* Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **360**, 23-29 (2015).

- [93] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark. *The Stopping and Range of Ions in Solids*. Pergamon Press, New York (1985).
- [94] J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, J. P. Biersack. *The Stopping and range of ions in matter*. Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B **268**, 11, 1818-1823 (2010).
- [95] G. Moliere. *Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I: Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld*. Z. Naturforsch **2a**, 133-145 (1947).
- [96] N. Nešković, S. Petrović, M. Ćosić. *Rainbows in Channeling of Charged Particles in Crystals and Nanotubes*. Springer (2017).
- [97] H. F. Krause, et al., *Angular distribution of ions axially channeled in a very thin crystal: Experimental and theoretical results*. Phys. Rev. A **49**, 283 (1994).
- [98] L. Miletić, S. Petrović, N. Nešković. *Decay of zero-degree focusing of channeled ions*. Nucl. Instr. and Meth. B **115**, 1, 337-339 (1996).
- [99] L. Miletić, S. Petrović, N. Nešković. *Energy dependence of zero-degree focusing of channeled ions*. Radiat. Eff. Def. Solids **141**, 1, 235-243 (1997).
- [100] L. Živković, S. Petrović, S. Kossionides, N. Nešković. *Zero-degree focusing of channeled ions and crystal rainbows*. Phys. Lett. A **286**, 4, 292-298 (2001).
- [101] Y. N. Demkov, J. D. Meyer. *A sub-atomic microscope, superfocusing in channeling and close encounter atomic and nuclear reactions*. Eur. Phys. J. B **42**, 361-365 (2004).
- [102] N. Nešković, S. Petrović, D. Borka. *Superfocusing of channeled protons and crystal rainbows*. Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B **267**, 16, 2616-2620 (2009).
- [103] S. Petrović, N. Nešković, V. Berec, M. Ćosić. *Superfocusing of channeled protons and subatomic measurement resolution*. Phys. Rev. A **85**, 032901 (2012).
- [104] R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus. *The Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press (1998).
- [105] A. Jorio, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus. *Carbon Nanotubes Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (2008).
- [106] S. Petrović, D. Borka, N. Nešković. *Rainbows in transmission of high energy protons through carbon nanotubes*. Eur. Phys. J. B **44**, 41-45 (2005).
- [107] S. Petrović, I. Telečki, D. Borka, N. Nešković. *Angular distributions of high energy protons channeled in long (10, 10) single-wall carbon nanotubes*. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **267**, 14 2365-2368 (2009).
- [108] C. Dwyer, M. Guthold, M. Falvo, S. Washburn, R. Superfine, D. Erie. *DNA-functionalized single-walled carbon nanotubes* Nanotechnology **13**, 601-4 (2002).
- [109] M. Ćosić, S. Petrović, S. Bellucci. *Rainbow channeling of protons in very short carbon nanotubes with aligned stonewales defects*. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **367**, 37-45 (2016).

- [110] S. Petrović, M. Ćosić, N. Nešković. *Quantum rainbow channeling of positrons in very short carbon nanotubes*. Physical Review A **88**, 012902 (2013).
- [111] M. Ćosić, S. Petrović, N. Nešković. *Quantum rainbow characterization of short chiral carbon nanotubes*. Nucl Instrum Meth B **323**, 30-35 (2014).
- [112] S. Zhao, W. Kang, J. Xue, X. Zhang, P. Zhang. *Comparison of electronic energy loss in graphene and BN sheet by means of time-dependent density functional theory*. J Phys Condens Matter. **27**, 2 (2015).
- [113] M. Ćosić, S. Petrović, N. Nesković. *The forward rainbow scattering of low energy protons by a graphene sheet*, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **422**, 54 (2018).
- [114] O. Lehtinen, J. Kotakoski, A. V. Krashennnikov, A. Tolvanen, K. Nordlund, J. Keinonen. *Effects of ion bombardment on a two-dimensional target: Atomistic simulations of graphene irradiation*. Phys. Rev. B **81**, 153401 (2010).
- [115] E. Gruber. *Ultrafast electronic response of graphene to a strong and localized electric field*. Nature Communications **7**, 13948 (2016).
- [116] R. Wilhelm, E. Gruber, R. Ritter, R. Heller, S. Facsko, F. Aumayr. *Charge Exchange and Energy Loss of Slow Highly Charged Ions in 1 nm Thick Carbon Nanomembranes* Phys. Rev. Lett. **112**, 153201 (2014).
- [117] D. Jalabert. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **19**, (2012).
- [118] M. Ćosić, M. Hadžijojić, S. Petrović, R. Rymzhanov, S. Bellucci. *Investigation of the graphene thermal motion by rainbow Scattering*. Carbon **145**, 161-174 (2019).
- [119] R. Tromp, M. Copel, M. Reuter, M.H. von Hoegen, J. Speidell, R. Koudijs. Rev. Sci. Instrum. **62**, 2679 (1991).
- [120] R. Tromp, H. Kersten, E. Granneman, F. Saris. *A new UHV system for channeling/blocking analysis of solid surfaces and interfaces* Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **4**, 1 (1984).
- [121] R. Smeenk, H. K. R. M. Tromp, A. Boerboom, F. Saris. *Angle resolved detection of charged particles with a novel type toroidal electrostatic analyser*. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. **195**, 581-586 (1982).
- [122] P. Doyle, P. Turner. *Relativistic Hartree-Fock X-ray and electron scattering factors*. Acta Cryst. A **24**, 390-397 (1968).
- [123] M. Coulthard. *A relativistic Hartree-Fock atomic field calculation*. Proc. Phys. Soc. **91** (1967).
- [124] I. P. Grant. *Relativistic self-consistent fields*. Proc. Phys. Soc. A **262**, 555-76 (1961).
- [125] X. Artru, S. P. Fomin, N. F. Shulga, K. A. Ispirian, N. K. Zhevago. *Carbon nanotubes and fullerites in high-energy and X-ray physics*. Phys. Rep. **412**, 2, 89-189 (2005).
- [126] B. V. Gnedenko, A. N. Kolmogorov. *Limit Distributions for Sums of Independent Random Variables*. Addison-Wesley, Massachusetts (1968).

- [127] A. C. Rencher. *Methods of Multivariate Analysis*. John Wiley and Sons (2002).
- [128] B. R. Appleton, C. Erginsoy, W. M. Gibson. *Channeling Effects in the Energy Loss of 3-11-MeV Protons in Silicon and Germanium Single Crystals*. Phys. Rev. **161**, 330 (1967).
- [129] J. Lindhard. *Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles*. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk **34**, 14 (1965).
- [130] S. Plimpton. *Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics*. J. Comput. Phys. **117**, 1, 1-19 (1995).
- [131] S. J. Stuart. *A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions*. J. Chem. Phys. **112**, 6472 (2000).
- [132] P. L. Doussal, L. Radzihovsky. *Self-consistent theory of polymerized membranes*. Phys. Rev. Lett. **69**, 1209 (1992).
- [133] N. Nešković. *Efekt duge i teorija katastrofa*. SFIN IV(1) (1991).
- [134] M. Ćosić, M. Hadžijojić, S. Petrović, R. Rymzhanov. *Morphological study of the rainbow scattering of protons by graphene*. Chaos **31**, 093115 (2021).
- [135] I. N. Bronshtein, K.A. Semendyayev, G. Musiol, H. Muehlig. *Handbook of Matematics*. Springer (2005).
- [136] W. Fulton. *Algebraic Topology*. Springer, New York (1991).
- [137] S. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos*. Taylor & Francis (2015).
- [138] H. Goldstein, C. Poole, J. Safko. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley (2001).
- [139] N. Nešković, G. Kapetanović, S. Petrović, B. Perović. *The X9 catastrophe as the organizing center of crystal rainbows*. Phys. Lett. A **179**, 4, 343-347 (1993).
- [140] I. Stewart. *Galois Theory*. Chapman & Hall/CRC (2004).
- [141] B. L. van der Waerden. *Modern Algebra*. Frederick Ungar Publishing Co. New York (1949).
- [142] M. Abramowitz, I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series 55, (1964).
- [143] L. H. Li, Y. Chen. *Atomically Thin Boron Nitride: Unique Properties and Applications*. Adv. Funct. Mater. **26**, 16, 2594-2608 (2016).
- [144] A. Nag, K. Raidongia, K. P. Hembram, R. Datta, U. V. Waghmare, C. N. Rao. *Graphene analogues of BN: novel synthesis and properties*. ACS Nano **4**, 3 (2010).
- [145] T. Tohei, A. Kuwabara, F. Oba, I. Tanaka. *Debye temperature and stiffness of carbon and boron nitrid polymorph from first principles calculations*. Phys. Rev. B **73**, 064304 (2006).
- [146] J. Callahan. Am. Math. Mon. **84** (1977).

- [147] J. D. Lawrence. *Catalog of Special Plane Curves*. Dover Publications, Inc. (1972).
- [148] J. Schaffer. *Australas. J. Philos.* **93**, 4, 644-664 (2015).
- [149] M. Hadžijojić, M. Čosić, R. Rymzhanov. *Morphological Analysis of the Rainbow Patterns Created by Point Defects of Graphene*. *J. Phys. Chem. C* **125**, 38, 21030-21043 (2021).
- [150] W. Tiao et al., *A Review on Lattice Defects in Graphene: Types, Generation, Effects and Regulation*. *Micromachines* **8**, 5 (2017).
- [151] F. Banhart, J. Kotakoski, A. V. Krasheninnikov. *Structural Defects in Graphene*. *ACS Nano* **5**, 1, 26-41 (2011).
- [152] A. V. Krasheninnikov et al. *Bending the Rules: Contrasting Vacancy Energetics and Migration in Graphite and Carbon Nanotubes*. *Chem. Phys. Lett.* **418**, 1, 132-136 (2006).
- [153] A. V. Krasheninnikov et al. *Embedding Transition-Metal Atoms in Graphene: Structure, Bonding, and Magnetism*. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 126807 (2009).
- [154] A. J. Stone, D. J. Wales. *Theoretical Studies of Icosahedral C₆₀ and Some Related Species*. *Chem. Phys. Lett.* **128**, 5, 501-503 (1986).
- [155] G. D. Lee et al. *Diffusion, Coalescence, and Reconstruction of Vacancy Defects in Graphene Layers*. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 205501 (2005).
- [156] V. I. Arnold. *Catastrophe Theory*. Springer, New York (1986).
- [157] S. H. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*. Perseus Books Reading, Massachusetts (2015).
- [158] S. H. Strogatz, R. M. Westervelt. *Predicted power laws for delayed switching of charge-density waves*. *Phys. Rev. B* **40**, 10501 (1989).
- [159] S. Wang, A. Robertson J. H. Warner. *Atomic structure of defects and dopants in 2D layered transition metal dichalcogenides*. *Chem. Soc. Rev.* **47**, 17 (2018).
- [160] C. Y. Ho, R. W. Powell, P. E. Liley. *Thermal Conductivity of the Elements: A Comprehensive Review*. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **3** (1974).
- [161] P. T. Araujo, M. Terrones, M. S. Dresselhaus. *Defects and impurities in graphene-like materials*. *Mater. Today* **15**, 3, 98-109 (2012).
- [162] J. Jiang et al. *Defect Engineering in 2D Materials: Precise Manipulation and Improved Functionalities*. *Research* (2019).
- [163] S. Li, M. Liu, X. Qiu. *Scanning Probe Microscopy of Topological Structure Induced Electronic States of Graphene*. *Small Methods* **4**, 3 (2020).
- [164] H. T. Chin, et al. *Impact of growth rate on graphene lattice-defect formation within a single crystalline domain*. *Sci. Rep.* **8**, 4046 (2018).
- [165] C. Hofer et al. *Revealing the 3D structure of graphene defects*. *2D Mater.* **5**, 4 (2018).

- [166] L. Zhang et al. *Graphene Defects Trap Atomic Ni Species for Hydrogen and Oxygen Evolution Reactions*. Chem. **4**, 2, 285-297 (2018).
- [167] M. Ziatdinov, et al. *Building and exploring libraries of atomic defects in graphene: Scanning transmission electron and scanning tunneling microscopy study*. Sci. Adv. **5**, 9 (2019).
- [168] B. Zheng, G. X. Gu. *Machine Learning-Based Detection of Graphene Defects with Atomic Precision*. Nano-Micro Lett. **12**, 181 (2020).
- [169] O. S. Ovchinnikov et al. *Detection of defects in atomic-resolution images of materials using cycle analysis*. Struct. Chem. Imaging **6**, 3 (2020).

Прилози

Прилог А

Модел спољашње линије дуге

У овом поглављу је представљен модел спољашње линије дуге. Усвојен је правоугли координатни систем такав да се (x, y) раван подударе са равни графена. Правац упадног снопа протона је одређен поларним углом θ и азимутним углом Φ . У околини атома је могуће Дојл-Тарнеров потенцијал интеракције апроксимирати доминантним чланом развоја:

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + \alpha \exp\left(-\frac{1}{4} \mathbf{r}^T \mathbf{Y}^{-1} \mathbf{r}\right), \quad (\text{A.1})$$

где је V_0 константа, \mathbf{Y}^{-1} је инверз матрице \mathbf{Y} која је дата изразом:

$$\mathbf{Y} = \beta \mathbf{I} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}, \quad (\text{A.2})$$

α и β су параметри модела, а $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_x^2, \sigma_y^2, \sigma_z^2)$ и $\mathbf{r} = (x, y)$. Израз (A.1) је довољно добра апроксимација потенцијала интеракције само у блиској околини атома кристала. У координатном систему придруженом снопу протона, потенцијал интеракције је дат изразом који је по облику истоветан изразу (A.1), али је матрица коваријансе сада дата изразом $\bar{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{R}_z(\Phi)^T \mathbf{R}_y(\theta)^T \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{R}_z(\Phi) \mathbf{R}_y(\theta)$, где \mathbf{R}_z и \mathbf{R}_y представљају матрице ротације око z и y осе, респективно. Углови расејања су у импулсној апроксимацији дати изразом:

$$\boldsymbol{\theta} = -\frac{1}{2E} \nabla_{\rho} \int V(\mathbf{r}) dz, \quad (\text{A.3})$$

где је $\boldsymbol{\theta} = (\theta_x, \theta_y)$, $\mathbf{b} = (x, y)$, $\nabla_{\rho} = (\partial_x, \partial_y)$ и E кинетичка енергија протона. Десна страна једнакости (A.3) се може израчунати аналитички. Закон расејања гласи:

$$\boldsymbol{\theta} = \frac{a}{4E} \mathbf{B} \cdot \mathbf{b} \exp\left(-\frac{1}{4} \mathbf{b}^T \mathbf{B} \mathbf{b}\right), \quad (\text{A.4})$$

где су $a = \alpha(\omega \det \mathbf{Y})^{-1/2}$, $\mathbf{B} = \boldsymbol{\Omega} - \frac{1}{\omega} \boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\gamma}^T$. Матрица \mathbf{B} је пројекција матрице:

$$\mathbf{Y}^{-1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Omega} & \boldsymbol{\gamma} \\ \boldsymbol{\gamma}^T & \omega \end{pmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

на (x, y) раван. Закон расејања (A.4) представља пресликавање скупа ударних параметара \mathbf{b} у скуп углова расејања $\boldsymbol{\theta}$. Линије дуге у скупу ударних параметара су сингуларитети Јакобијана $J_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{b})$ пресликавања $\mathbf{b} \rightarrow \boldsymbol{\theta}$. Како је:

$$\det J_{\theta}(\mathbf{b}) = \frac{a^2}{4E^2} \det \mathbf{B} - \frac{a^2}{8E^2} \mathbf{b}^T \mathbf{B} \mathbf{b} \det \mathbf{B}, \quad (\text{A.6})$$

линије дуге су решења једначине:

$$(2 - \mathbf{b}^T \mathbf{B} \mathbf{b}) \det \mathbf{B} = 0, \quad (\text{A.7})$$

односно елипсе:

$$\mathbf{b}^T \mathbf{B} \mathbf{b} = 2. \quad (\text{A.8})$$

Линија дуге у скупу углова расејања се налази применом закона расејања и такође је реч о елипси:

$$\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\theta} = \frac{a^2}{8eE^2}, \quad (\text{A.9})$$

где је са e обележена основа природног логаритма. Коначни резултат има једноставно тумачење. Дуга $\mathbf{b}^T \mathbf{B} \mathbf{b} = 2$ је скалирана нормална пројекција елипсоида $\mathbf{r}^T \boldsymbol{\Upsilon}^{-1} \mathbf{r} = 1$ на трансверзалну раван. Како је:

$$\boldsymbol{\Upsilon} = \beta \mathbf{I} + \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\Sigma}}, \quad (\text{A.10})$$

а матрица $\beta \mathbf{I}$ је инваријантна на ротације, облик линије дуге је одређен матрицом $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}$. Ако матрица $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}$ има једну троструко дегенерисану својствену вредност, пројектована елипса је нужно кружница. Ако матрица $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}$ има једну двоструко дегенерисану својствену вредност, односно две различите својствене вредности, одговарајућа нормална пројекција је елипса. Ако матрица $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}$ има три различите својствене вредности, одговарајућа нормална пројекција је нагнута елипса. Сличан закључак се односи и на линију дуге у скупу углова расејања; угаоне линије дуге су скалиране нормалне пројекције елипсоида који је придружен матрици $\boldsymbol{\Upsilon}^{-1}$.

Развијен модел спољашње линије дуге би се могао омогућити одређивање коваријансе термалних вибрација и врсте атома који граде кристалну решетку. Према изразу (А.9) линија дуге је елипса. Облик и величина ове елипсе зависе од модела потенцијала интеракције протона и атома, али и од коваријансе отклоне атома услед термалних флукуација кристала. Спољашње линије дуге су кружнице у случају нормалне инциденције протона трансмитованих кроз графен. Облик линије дуге је могуће објаснити уз помоћ развијеног модела. Сферна симетрија усвојеног Дојл-Тарнеровог модела и једнаке варијансе у x и у y чине да је пројекција елипсоида $\mathbf{r}^T \boldsymbol{\Upsilon}^{-1} \mathbf{r} = 1$ на трансверзалну раван кружница. Градијентним пресликавањем (А.3) се ова кружница пресликава у кружницу у равни углова расејања која одговара угаоној линији дуге. Како су термалне вибрације атома у случају неограниченог графена анизотропне, пројекција

елипсоида $\mathbf{r}^T \mathbf{Y}^{-1} \mathbf{r} = 1$ је кружница искључиво у случају нормалне инциденције снопа. Нагиб графена у односу на правац упадног снопа узрокује нагиб трансверзалне равни у односу на елипсоид $\mathbf{r}^T \mathbf{Y}^{-1} \mathbf{r} = 1$, а тиме и преображај пројекције из кружнице у елипсу. Описана промена се може опазити и на сликама сликама 7.3 и 7.4.

Прилог Б

Утицај дивергенције упадног снопа на дугин образац

У наставку су приказани резултати испитивања утицаја ненулте дивергенције упадног угла протона на дугин образац и угаону расподелу протона трансмитованих кроз 2Д кристал.

Нека је закон расејања моделован градијентним пресликавањем скупа ударних параметара \mathbf{b} у скуп углова расејања θ :

$$\theta = -\frac{1}{2E_k} \nabla \varphi(\mathbf{b}), \quad (\text{Б.1})$$

Нека је расподела по ударним параметрима и почетним брзинама упадног снопа протона Гаусова. Једноставности ради је претпостављено да су обе ове расподеле аксијално симетричне. Величина елементарне ћелије графена и сродних 2Д кристала је занемарљиво мала у односу на пречник снопа. Стога се расподела протона по ударним параметрима може сматрати униформном. Упадни правац протона је одређен поларним углом θ и азимутом Φ . Претпостављено је да одступање правца упадног протона од z осе подлеже аксијално симетричној расподели са малом вредношћу угаоне дивергенције. Расподела упадних углова је производ униформне расподеле $u(\Phi) = 1/2\pi$ и Рејлијеве расподеле:

$$r_\sigma(\theta) = \frac{\theta}{\sigma_\theta^2} \exp\left[-\frac{\theta^2}{2\sigma_\theta^2}\right], \quad (\text{Б.2})$$

где је параметар σ_θ мали. У лабораторијском систему референце, угао расејања θ је функција ударног параметра \mathbf{b} , поларног угла θ и азимутног угла Φ . Потребно је решити једначине кретања у координатном систему у коме је почетна брзина протона паралелна са нормалом на графен. То је могуће извести ротацијом лабораторијског координатног система око y осе за угао θ матрицом:

$$\mathbf{T}_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (\text{Б.3})$$

и потом ротацијом за угао Φ око z -осе матрицом:

$$\mathbf{T}_\Phi = \begin{pmatrix} \cos \Phi & -\sin \Phi & 0 \\ \sin \Phi & \cos \Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{Б.4})$$

z' оса овако заротираног координатног система је паралелна са упадним правцем протона.

Углови расејања протона у овом координатном систему θ' су израчунати решавањем једначине (Б.1), где су вектори положаја атома \mathbf{R}'_n и ударни параметри \mathbf{b}' , пројекције ротираних вектора $\mathbf{T}_\phi \mathbf{T}_\theta \mathbf{R}_n$ и $\mathbf{T}_\phi \mathbf{T}_\theta \mathbf{b}$ на $x'Oy'$ одређене применом матрице:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{Б.5})$$

Углови расејања протона у лабораторијском систему референце су дати изразом:

$$\boldsymbol{\theta}(\mathbf{b}; \theta, \phi) = \mathbf{T}_\theta^T \mathbf{T}_\phi^T \boldsymbol{\theta}'(\mathbf{b}'). \quad (\text{Б.6})$$

Средња вредност и матрица коваријансе угла расејања су дати изразима:

$$\bar{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{b}) = \int \boldsymbol{\theta}(\mathbf{b}; \theta, \phi) r_{\sigma_\theta}(\theta) u(\phi) d\theta d\phi, \quad (\text{Б.7})$$

$$\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{b}) = \int [\boldsymbol{\theta}(\mathbf{b}; \theta, \phi) - \bar{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{b})][\boldsymbol{\theta}(\mathbf{b}; \theta, \phi) - \bar{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{b})]^T r_{\sigma_\theta}(\theta) u(\phi) d\theta d\phi. \quad (\text{Б.8})$$

Ако је σ_θ мало, изразе (Б.7) и (Б.8) је могуће израчунати приближно. Приметити да су вредности угла θ које значајно доприносе интегралима (Б.7) и (Б.8) такође мале. Важно је поменути да се у опсегу малих вредности угла нагиба θ , ротација упадног правца протона за угао ϕ одражава на скуп углова расејања (последично и дугин образац) као ротација око координатног почетка у равни (θ'_x, θ'_y) за исти угао ϕ . Уведен је нови координатни систем O'' , такав да се оса y'' подударе са y осом лабораторијског координатног система. Закон расејања (Б.1) има најједноставнији облик управо у систему O'' , јер је тада $\phi = 0$. Угао расејања у ротираним координатном систему $\boldsymbol{\theta}'(\mathbf{b}')$ је дат изразом:

$$\boldsymbol{\theta}'(\mathbf{b}') = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \boldsymbol{\theta}''(\mathbf{b}''), \quad (\text{Б.9})$$

где је $\boldsymbol{\theta}''$ угао расејања у помоћном координатном систему O'' . Из добијених израза је могуће извести закон расејања. Функција $\boldsymbol{\theta}(\mathbf{b}; \theta, \phi)$ се може развити у степени ред:

$$\boldsymbol{\theta}(\mathbf{b}; \theta, \phi) = \mathbf{a}_0(\phi, \mathbf{b}) + \mathbf{a}_1(\phi, \mathbf{b})\theta + \mathbf{a}_2(\phi, \mathbf{b})\theta^2 + \sigma(\theta^3), \quad (\text{Б.10})$$

где су \mathbf{a}_0 , \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 векторске величине. Заменом једначине (Б.10) у једначину (Б.7) и употребом следећих израза [142]:

$$\int_0^{2\pi} \sin^m \Phi \cos^n \Phi d\Phi = \frac{n-1}{m+1} \int_0^{2\pi} \sin^m \Phi \cos^{n-2} \Phi d\Phi, \quad (\text{Б.11})$$

$$\int_0^{\infty} r_{\sigma_\theta}(\theta) d\theta = 1, \quad \int_0^{\infty} r_{\sigma_\theta}(\theta) \theta d\theta = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma_\theta, \quad \int_0^{\infty} r_{\sigma_\theta}(\theta) \theta^2 d\theta = 2\sigma_\theta^2,$$

средња вредност угла расејања се своди на:

$$\bar{\theta}(\mathbf{b}) = \theta_0 + \sigma_\theta^2 \left[\frac{3}{2} \theta_0 + 2\theta_1 + \sigma(|\theta_0|^3) \right], \quad (\text{Б.12})$$

где је $\theta_0 = \theta(\mathbf{b}; 0, 0)$ угао расејања протона са нормалном инциденцијом, односно паралелног снопа, док је θ_1 сложен израз и важи $\theta_1 \approx \theta_0$. Стога је други члан у развоју угла расејања $\bar{\theta}(\mathbf{b})$ занемарљив у поређењу са првим и важи:

$$\bar{\theta}(\mathbf{b}) \approx \theta_0. \quad (\text{Б.13})$$

Матрица коваријансе Σ се налази заменом једначина (Б.10) и (Б.12) у израз (Б.8). Након израчунавања се добија:

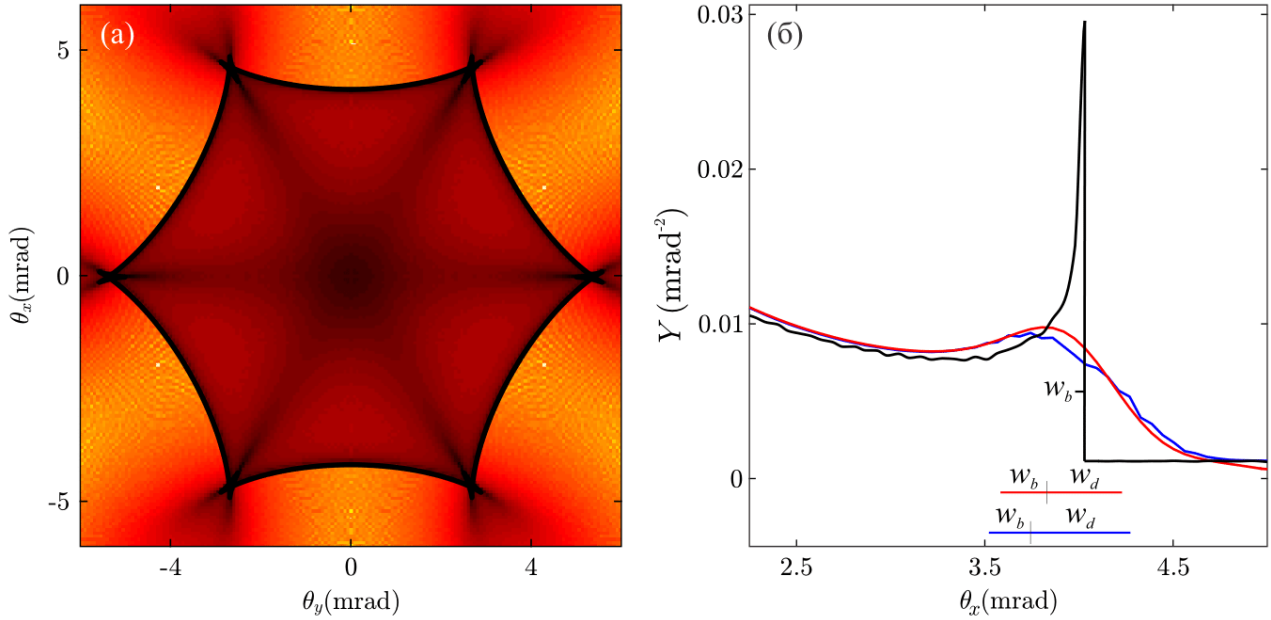
$$\Sigma(\mathbf{b}) = \sigma_\theta^2 \mathbf{I} + \sigma_\theta^2 (2 + |\theta_0|^2) \theta_0 \cdot \theta_0^T. \quad (\text{Б.14})$$

Приметити да су сви чланови који зависе од θ_1 нестали. У случају малих вредности углова расејања, вандијагонална поправка матрице коваријансе је сразмерна малој величини четвртог степена по углу и стога се може занемарити. Тада је:

$$\Sigma(\mathbf{b}) \approx \sigma_\theta^2 \mathbf{I}. \quad (\text{Б.15})$$

Овај резултат показује да флукуације у упадном углу, узрокују прераспделу протона. Ако се у случају паралелног упадног снопа, протон расејава под углом $\theta_0(\mathbf{b})$, дивергенција узрокује прераспделу по околиним вредностима углова расејања сходно Гаусовој распдели:

$$g(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}_0, \Sigma) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\det \Sigma}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_0)^T \Sigma^{-1} (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_0) \right]. \quad (\text{Б.16})$$



Слика Б.1 (а) Увеличан приказ средишњег дела угаоне расподеле протона трансмитованих кроз савршен графен. (б) Вертикални пресек угаоне расподеле са слике (а) је приказан црном линијом. Црвене и плаве линије приказују теоријски пресек и пресек добијен нумеричким прорачуном, респективно, у случају упадног снопа са угаоном дивергенцијом $\sigma_\theta = 0.25$ mrad. Линијама w_b и w_d су обележене ширине светле и тамне стране дугиних максимума, респективно.

Угаона расподела Y након прерасподеле је дата изразом:

$$\bar{Y} = \int Y(\theta_0) g(\theta, \theta_0, \Sigma) d\theta_0. \quad (\text{Б.17})$$

Анализа је допуњена нумеричким прорачунима. Размотрена је трансмисија снопа протона угаоне дивергенције $\sigma_\theta = 0.25$ mrad кроз графен. Ова вредност угаоне дивергенције је достижна применом микроснопа. Црном линијом је на слици Б.1(б) приказан $\theta_y = 0$ пресек угаоне расподеле са слике Б.1(а) у околини горњег дугиног максимума. Црвеном линијом је приказана расподела \bar{Y} дата изразом (Б.17). Плавом линијом је приказан $\theta_y = 0$ пресек угаоне расподеле која је добијена сабирањем расподела протона трансмитованих кроз графен, нагнут и заротиран за 300 различитих вредности углава θ и Φ које равномерно прекривају (θ, Φ) раван.

Ширина дугиног пика је одређена сабирањем две величине: полуширине на полувисини са светле стране дуге w_b и полуширине на полувисини тамне стране дуге w_d (видети слику Б.1(б)). Ширина дугиног максимума је у случају паралелног снопа једнака ширини на светлој страни дуге и износи 0.070 mrad. У случају стварног снопа протона су дугини максимума нижи. Дугин максимум који одговара црвеној криви је у односу на максимум црне криве отклоњен улево за 0.234 mrad и има ширину 0.649 mrad. Дугин максимум плаве расподеле је отклоњен улево за 0.292 mrad и има ширину 0.702 mrad. Одлично слагање између црвене и плаве криве потврђује да је прерасподела углава расејања заиста независна од ударног параметра и сходно томе једнака за све тачке у равни углава расејања.

Приметити да је отклон дугиног максимума приближно једнак σ_θ , док је ширина пика приближно $2.7\sigma_\theta$. Може се закључити да дивергенција упадног снопа протона не утиче на облик дугиног обрасца уколико је удаљеност оближњих дугиних линија већа од $2.7\sigma_\theta$. Уколико је угаона дивергенција $\sigma_\theta = 0.25$ mrad одговарајућа неодређеност у положају линије дуге је $\pm 5\%$.

Биографија аутора

Миливоје Хацијојић рођен је 27. априла 1987. године у Панчеву у Србији. Дипломирао је године 2013. на Физичком факултету Универзитета у Београду, на студијском програму “Теоријска физика” са просечном оценом у току студија 9.39. Године 2013. је започео мастер академске студије на катедри за теоријску физику Физичког факултета Универзитета у Београду. Године 2015. је одбранио рад са насловом “Т-дуалност бозонске струне на 2-торусу преко комплексних параметара”, чиме је стекао звање мастер физичара, са просечном оценом током студија 9,33. Уписао је докторске студије школске 2015/2016 године на Физичком факултету Универзитета у Београду на студијском програму “Квантна поља, честице и гравитација”. У оквиру овог студијског програма је положио испите: “Теорија струна” код проф. др. Бранислава Саздовића и “Суперсиметрије” код проф. др. Воје Радовановића. Од новембра 2016. године Миливоје Хацијојић је запослен у Лабораторији за физику Института за нуклеарне науке “Винча”. Школске 2017/2018 године почиње докторске студије на студијском програму ”Физика атома и молекула”. За ментора током докторских студија је изабран др Марко Ћосић. У звање истраживача сарадника изабран је године 2019. Сарадник је на истраживачким пројектима “Комплексне и катастрофичне појаве у физици и биологији”, “Физика и хемија са јонским сноповима” и “Каналисање наелектрисаних честица у материјалима”. Аутор је 2 рада који су објављени у међународним часописима изузетних вредности (M21a) и 2 рада који су објављени у врхунским међународним часописима (M21).

Изјаве

Изјава о ауторству

Име и презиме аутора: Миливоје Хаџијојић

Број индекса: 2015/8022

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом:

ИСПИТИВАЊЕ ДВОДИМЕНЗИОНАЛНИХ КРИСТАЛА КОРИШЋЕЊЕМ ЕФЕКТА
ДУГИНОГ РАСЕЈАЊА

- 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, _____

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора: Миливоје Хацијојић

Број индекса: 2015/8022

Студијски програм: Физика атома и молекула

Наслов рада: Испитивање дводимензионалних кристала коришћењем ефекта дугиног
расејања

Ментор: Марко Ћосић

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, _____

Изјава о коришћењу

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

ИСПИТИВАЊЕ ДВОДИМЕНЗИОНАЛНИХ КРИСТАЛА КОРИШЋЕЊЕМ ЕФЕКТА ДУГИНОГ РАСЕЈАЊА

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, _____

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.