

ИВАН С. РАДОВИЋ¹
ЉУПЧО Р. ХАЏИЈЕВСКИ¹
НАТАША М. БИБИЋ¹
ЗОРАН Л. МИШКОВИЋ²

¹Институт за нуклеарне науке
«Винча», Београд, Србија
²Департаман за примењену
математику, Универзитет
Вотерлу, Вотерлу, Онтарио,
Канада

НАУЧНИ РАД

УДК 537.565:546.26:62:519.6

DOI: 10.2298/HEMIND0903151R

ИНТЕРАКЦИЈЕ БРЗИХ ЈОНА СА ГРАФЕНОМ*

У овом раду испитивана је интеракција брзих јона (брзине веће од Bohr-ове) са графеном. Побуђења електронског гаса у графену описана су дводимензионим (2D) хидродинамичким моделом (једнофлуидни и двофлуидни). Израчунајте су, аналитички и нумерички, зауставна сила и сила лика на јон који се креће паралелно површини графена. Нумерички резултати показују да у двофлуидном моделу, за разлику од једнофлуидног модела, присуство нискоенергијског квазиакустичног плазмона условљава резонантне карактеристике на брзинама блиским изв. «акустичној» брзини, што је у сагласности са резултатима добијеним за каналисање јонског тока у угљеничним нанотрубама.

Графен представља слој sp^2 -везаних атома угљеника у равни, густо пакованих у дводимензиону (2D) решетку типа пчелињег саћа (*honeycomb lattice*) [1]. Осим што је 2D градивни елемент угљеничних материјала свих других димензија (може бити умотан у 0D фулерен, савијен у 1D нанотруба или насланган у 3D графит, тзв. високо оријентисан пиролитички графит), графен привлачи велику пажњу истраживача због својих веома интересантних особина и широке области потенцијалних примена, нарочито за развој врло брзих електронских компоненти [2,3].

У овом раду испитивана је интеракција брзих јона (брзине веће од Bohr-ове) са графеном, при чему се јон креће паралелно његовој површини. За ову специјалну геометрију одлучили смо се, поред тога што нам олакшава анализу, ради проширења резултата добијених при расејању честица под малим углом са чврстих површина [4] на случај графена као мете.

Иначе, ефекти правца кретања наелектрисаних честица, при интеракцији са материјалима чији је графен саставни део, испитивани су у склопу каналисања нискоенергијских јона кроз угљеничне нанотрубе [5–8], као и у случају интеракције јона и молекула са високо оријентисаним пиролитичким графитом, укључујући имплантацију јона и молекула [9,10], каналисање јона [11] и емисију секундарних електрона индуковану јонима [12] и молекулима [13].

ТЕОРИЈА

Атом угљеника има четири валентна електрона, два s и два p . У графену су валентни електрони sp^2 -хи-

бридизовани. Једна s и две p орбитале учествују у хибридизацији. Настају три међусобно еквивалентне σ орбитале, у истој равни, при чему угао између орбитала износи 120° . Четврти електрон даје π орбиталу, усмерену под правим углом у односу на раван σ орбитала.

Да би описали високоенергијска колективна побуђења електронског гаса у графену, настала услед интеракција са брзим јонима, користимо 2D полукласичан хидродинамички модел заснован на «желе» апроксимацији (*jellium approximation*) за позитивна јонска наелектрисања у графену [14–16]. Користимо тзв. једнофлуидни и двофлуидни хидродинамички модел. Једнофлуидни модел, због једноставности, користимо за проучавање нелинеарних ефеката. Двофлуидни модел користимо за проучавање линеарних ефеката. У једнофлуидном моделу претпостављамо да наелектрисани флуид садржи сва четири валентна електрона по атому угљеника. Код двофлуидног модела разматрамо два одвојена 2D флуида, σ флуид и π флуид, који садрже три, односно један неспарени електрон по атому угљеника.

Одлучили смо се за хидродинамички модел из неколико разлога. Већ је показано [17] да је овај модел дао коректне резултате за зауставну силу и силу лика, при проучавању нелинеарних ефеката, у случају интеракције брзих јона са једнослојним угљеничним нанотрубама. Осим тога, показано је да третирање σ и π електрона као два интерагујућа флуида даје задовољавајуће резултате за цепање плазмонских грана у видљивој и UV области фреквенција, и код фулерена [15] и код једнослојних угљеничних нанотруба [16]. Показано је да је хидродинамички модел веома успешан за квалитативну анализу хибридизације плазмона [18]. Аналитичка једноставност овог модела нарочито долази до изражаја при решавању граничних услова који се јављају као последица присуства диелектричне средине [19], што је често случај са графеном [20,21].

*Рад саопштен на скупу „Седми семинар младих истраживача“, Београд, 22–24. децембар 2008.

Аутор за преписку: И. Радовић, Лабораторија за атомску физику, Институт за нуклеарне науке «Винча», п. пр. 522, 11001 Београд, Србија.

Е-пошта: iradovic@vinca.rs

Рад примљен: 22. децембар 2008.

Рад прихваћен: 19. јануар 2009.

У свим изразима, који следе у хидродинамичком моделу, користимо атомске јединице (а.у.). Оне представљају систем јединица у коме је *Bohr*-ов радијус, a_0 , јединица дужине, маса електрона, m_e , јединица масе, елементарно наелектрисање, e , јединица наелектрисања и редукована Planck-ова константа, \hbar , јединица ангуларног момента. Такође, у атомским јединицама узима се да је константа *Coulomb*-овог закона једнака јединици, односно $1/4\pi\epsilon_0 = 1$.

У једнофлуидном моделу валентне електроне графена разматрамо као гас слободних електрона, равномерно распоређен у xy равни, равнотежне површинске бројне густине $n_0 = 0,428$.

Посматрамо јон наелектрисања Q који се креће брзином v , паралелно површини графена, на растојању $z_0 > 0$. Користимо 3D *Descartes*-ов координатни систем, $r = (R, z)$, где је $R = (x, y)$ координата било које тачке у xy равни (раван графенског слоја), а z је компонента r нормална на слој, односно растојање од слоја. Присуство наелектрисаног јона доводи до пертурбације хомогеног електронског гаса који можемо посматрати као наелектрисани флуид са пољем брзине $u(\vec{R}, t)$ и површинском бројном густином $n(\vec{R}, t)$.

Електронска побуђења графенског слоја описују се једначином континуитета:

$$\frac{\partial n(\vec{R}, t)}{\partial t} + \nabla_{\parallel} \cdot [n(\vec{R}, t)\vec{u}(\vec{R}, t)] = 0 \quad (1)$$

једначином кретања:

$$\frac{\partial u(\vec{R}, t)}{\partial t} + [\vec{u}(\vec{R}, t) \cdot \nabla_{\parallel}]u(\vec{R}, t) = \nabla_{\parallel} \Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)|_{z=0} - \pi \nabla_{\parallel} n(\vec{R}, t) - \gamma u(\vec{R}, t) \quad (2)$$

и *Poisson*-овом једначином:

$$\nabla^2 \Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = -4\pi \{ \rho_{ext}(\vec{R}, z, t) - [n(\vec{R}, t) - n_0] \delta(z) \} \quad (3)$$

Оператор $\nabla_{\parallel} = \partial/\partial R$ у једначинама (1) и (2) диференцира само у xy равни (раван графенског слоја) [22,23], док диференцијални оператор ∇ , у једначини (3), нема ограничења. Величина $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \Phi_{ext}(\vec{R}, z, t) + \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)$ представља укупни скаларни потенцијал који потиче од спољашњег (јон наелектрисања Q) и индукованог наелектрисања, док је γ коефицијент трења за који узимамо да је бесконачно мала позитивна величина. На десној страни *Poisson*-ове једначине, у великој загради, први члан представља густину спољашњег наелектрисања, а други члан густину индукованог наелектрисања.

Полазимо од система једначина (1)–(3). Примењујемо теорију пертурбација [17,24], при чему претпостављамо да је густина спољашњег наелектрисања, ρ_{ext} , довољно мала, тако да је можемо писати у

облику $\rho_{ext}(\vec{R}, z, t) = \lambda \rho_{ext}^{(1)}(\vec{R}, z, t) + \dots$, где је λ мали параметар. Величине $n(\vec{R}, t)$, $u(\vec{R}, t)$ и $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$ развијамо у редове на следећи начин:

$$n(\vec{R}, t) = n_0 + \lambda n_1(\vec{R}, t) + \lambda^2 n_2(\vec{R}, t) + \dots \quad (4)$$

$$\vec{u}(\vec{R}, t) = \lambda \vec{u}_1(\vec{R}, t) + \lambda^2 \vec{u}_2(\vec{R}, t) + \dots \quad (5)$$

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \lambda \Phi_{tot}^{(1)}(\vec{R}, z, t) + \lambda^2 \Phi_{tot}^{(2)}(\vec{R}, z, t) + \dots \quad (6)$$

У једначинама (5) и (6) искористили смо да је у непертурбисаном стању (без присуства спољашњег наелектрисања) $u_0 = 0$ и $\Phi_{tot}^{(0)} = 0$. Очигледно је да је у једначини (6) $\Phi_{tot}^{(1)}(\vec{R}, z, t) = \Phi_{ext}^{(1)}(\vec{R}, z, t) + \Phi_{ind}^{(1)}(\vec{R}, z, t)$ и $\Phi_{tot}^{(2)}(\vec{R}, z, t) \equiv \Phi_{ind}^{(2)}(\vec{R}, z, t)$, јер је, по претпоставци, $\rho_{ext}(\vec{R}, z, t) = \lambda \rho_{ext}^{(1)}(\vec{R}, z, t) + \dots$

Заменом израза (4)–(6) у систем једначина (1)–(3), уз занемаривање чланова степена већег од λ^2 , добијамо два система једначина (за први и други ред теорије пертурбација), из којих одређујемо индуковани потенцијал (у првом реду, односно његову корекцију у другом реду), а на основу тих вредности зауставну силу и силу лика, са тачношћу до другог реда.

У двофлуидном моделу разматрамо два одвојена 2D флуида, σ флуид и π флуид, «слепљена» на истој површини графена. У овом случају је $n_0 = n_{\sigma}^0 + n_{\pi}^0$, где је $n_{\sigma}^0 = 0,321$, односно $n_{\pi}^0 = 0,107$, равнотежна површинска бројна густина која се односи на три σ електрона, односно један π електрон, по атому угљеника, респективно.

Посматрамо јон наелектрисања Q који се креће брзином v , паралелно површини графена, на растојању $z_0 > 0$ (овде апроксимирамо да је растојање пројектила од оба флуида исто). Аналогно систему једначина (1)–(3) код једнофлуидног модела, овде решавамо следећа два система једначина (индекс $i = \{\sigma, \pi\}$ сугерише о ком флуиду је реч):

$$\frac{\partial n_i(\vec{R}, t)}{\partial t} + \nabla_{\parallel} \cdot [n_i(\vec{R}, t)\vec{u}_i(\vec{R}, t)] = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial u_i(\vec{R}, t)}{\partial t} + [\vec{u}_i(\vec{R}, t) \cdot \nabla_{\parallel}]u_i(\vec{R}, t) = \nabla_{\parallel} \Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)|_{z=0} - \pi \nabla_{\parallel} n_i(\vec{R}, t) - \gamma_i u_i(\vec{R}, t) \quad (8)$$

$$\nabla^2 \Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = -4\pi \{ \rho_{ext}(\vec{R}, z, t) - [n(\vec{R}, t) - n_0] \delta(z) \} \quad (9)$$

при чему је $n(\vec{R}, t) = n_{\sigma}(\vec{R}, t) + n_{\pi}(\vec{R}, t)$.

Полазимо од система једначина (7)–(9). Као и у једнофлуидном моделу, примењујемо теорију пертурбација, с тим што се овде задржавамо само на првом реду јер испитујемо само линеарне ефекте. Дакле, примењујемо теорију пертурбација уз претпоставку да је густина спољашњег наелектрисања ρ_{ext} довољно мала, тако да је можемо писати у облику

$\rho_{ext}(\vec{R}, z, t) = \lambda \rho_{ext}^{(1)}(\vec{R}, z, t) + \dots$, при чему је λ мали параметар. Величине $n_i(R, t)$, $u_i(R, t)$ и $\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t)$ развијамо у редове на следећи начин:

$$n_i(\vec{R}, t) = n_i^0 + \lambda n_i^{(1)}(\vec{R}, t) + \dots \quad (10)$$

$$\vec{u}_i(\vec{R}, t) = \lambda \vec{u}_i^{(1)}(\vec{R}, t) + \dots \quad (11)$$

$$\Phi_{tot}(\vec{R}, z, t) = \lambda \Phi_{tot}^{(1)}(\vec{R}, z, t) + \dots \quad (12)$$

при чему смо у једначинама (11)–(12) искористили да је у непертурбисаном стању (без присуства пројектила) $\vec{u}_i^{(0)} = 0$ и $\Phi_{tot}^{(0)} = 0$.

Заменом израза (10)–(12) у системе једначина (7)–(9), уз занемаривање чланова степена већег од λ , добијамо два система једначина (за први ред теорије пертурбација, за оба флуида), из којих одређујемо индуковани потенцијал за систем од два флуида, а на основу те вредности зауставну силу и силу lika, са тачношћу до првог реда.

Величине које карактеришу интеракције јона са графеном су зауставна сила и сила lika. Зауставна сила је сила која описује губитак енергије и директно се супротставља кретању. У случају интеракције јона, наелектрисања Q и брзине v , са графеном, следећег је облика:

$$F_s = -Q \frac{v}{v} \cdot \nabla \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t) \Big|_{\vec{R}=\vec{v}t, z=z_0} \quad (13)$$

Сила lika је конзервативна сила која настоји да «савије» путању јона ка површини графена. Установљено је да има главну улогу при проучавању каналисања јона кроз угљеничне наноцеви [25] и при расејању под малим углом са површине графена [26]. Изражава се на следећи начин:

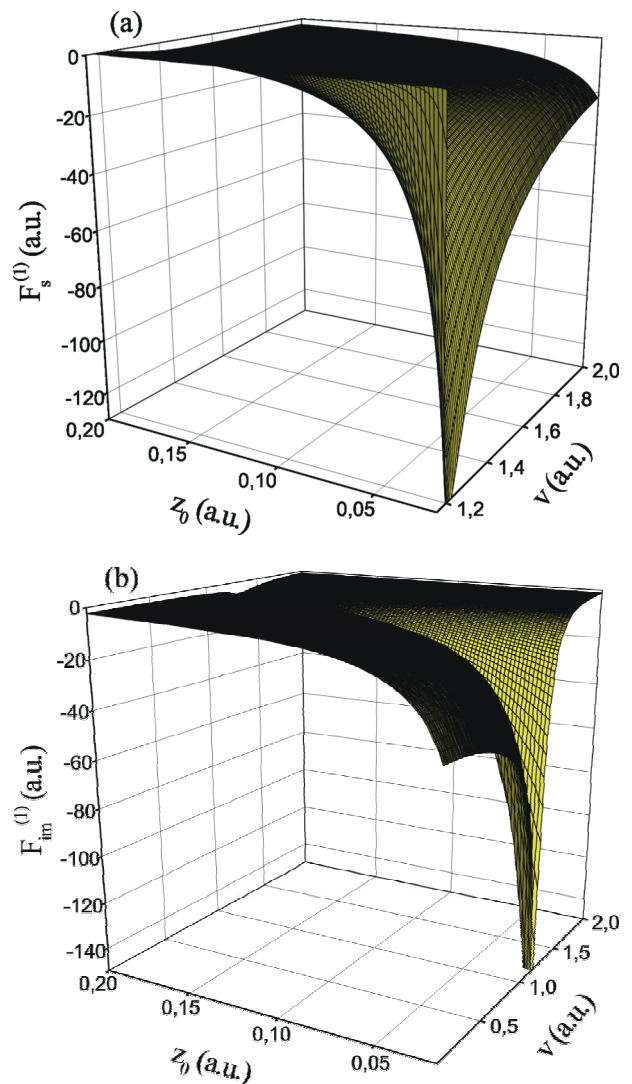
$$F_{im} = -Q \frac{\partial \Phi_{ind}(\vec{R}, z, t)}{\partial z} \Big|_{\vec{R}=\vec{v}t, z=z_0} \quad (14)$$

РЕЗУЛТАТИ И ДИСКУСИЈА

При испитивању интеракција брзих јона са графеном, у хидродинамичком моделу, циљ је да се пореде резултати за јоне са резултатима добијеним у случају каналисања јона кроз угљеничне наноцеви, затим да се испитају нелинеарни ефекти и, коначно, да се пореде резултати добијени у једнофлуидном и двофлуидном моделу.

Код једнофлуидног модела испитивани су линеарни (први ред теорије пертурбација) и нелинеарни (други ред теорије пертурбација) ефекти. На сликама 1а и 1б приказани су нумерички резултати за интеракцију протона ($Q = 1$) са графеном. Са слике видимо да, при константној брзини протона,

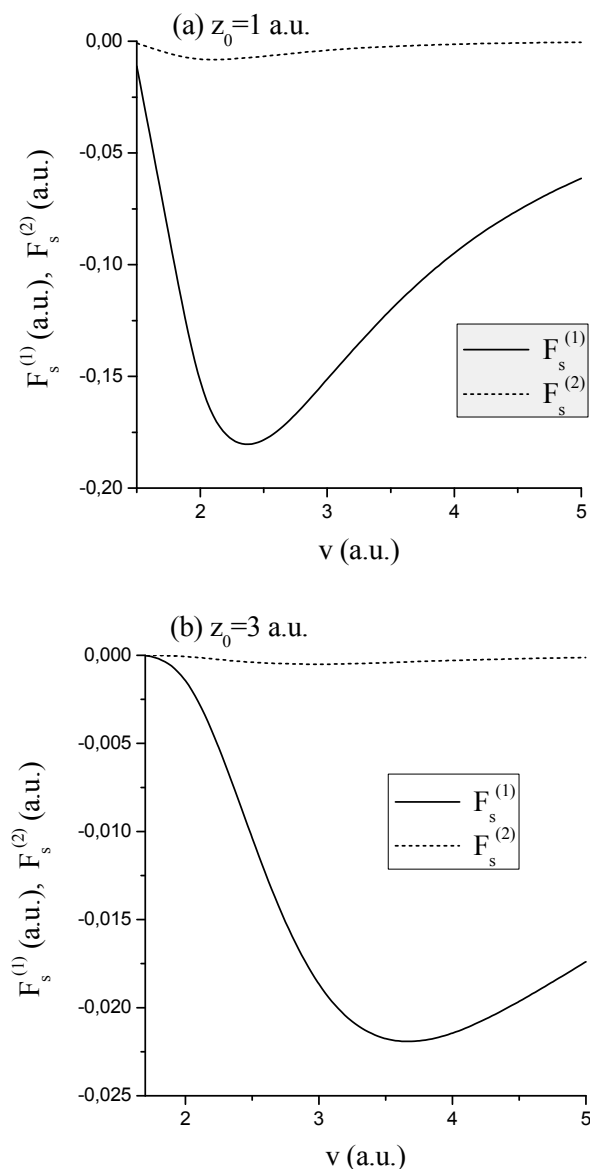
зауставна сила и сила lika расту са његовим приближавањем површини графена. Са порастом брзине, при константном растојању, обе силе расту, достижу максимум и монотono опадају. На слици 1 може се још приметити да, са порастом растојања, максималне вредности ових сила померају се ка већим брзинама. Треба још напоменути да у случају зависности зауставне силе од брзине (слика 1а) имамо праг (*threshold*) за вредност брзине $v_{th} \approx 1,16$ а.у., што је карактеристика механизма плазмонских ексцитација енергијског губитка.



Слика 1. Зависност зауставне силе $F_s^{(1)}$ (a) и силе lika $F_{im}^{(1)}$ (b) од брзине протона v и његовог растојања z_0 од површине графена.
Figure 1. The stopping force $F_s^{(1)}$ (a) and the image force $F_{im}^{(1)}$ (b) versus the position z_0 and the velocity v for a proton moving parallel to the graphene sheet.

На сликама 2а и 2б приказана је зависност линеарне зауставне силе $F_s^{(1)}$ и корекције $F_s^{(2)}$ од брзине протона v , за два различита растојања од повр-

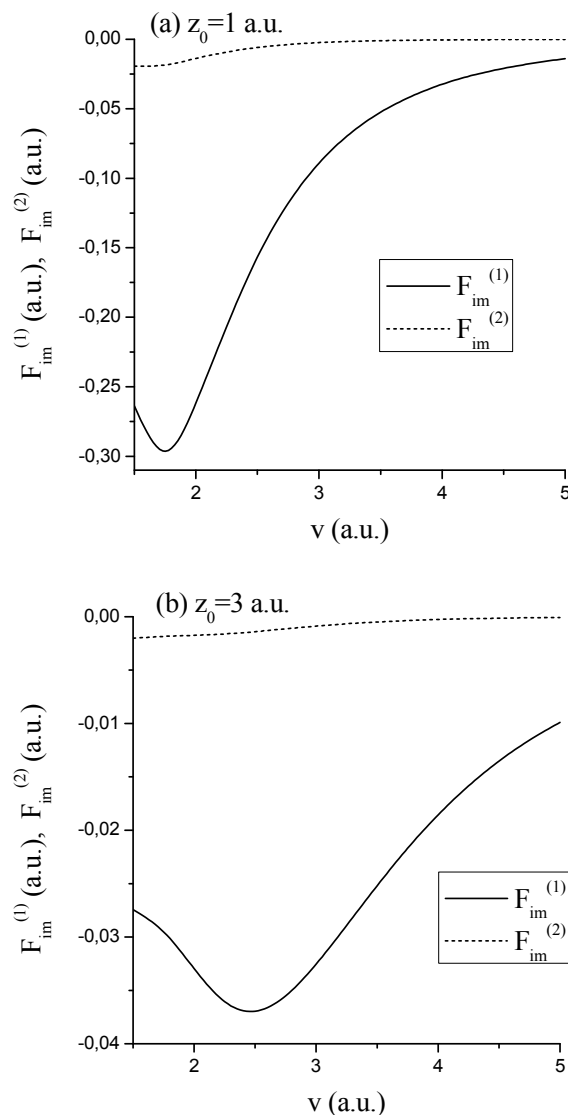
шине графена: (a) $z_0 = 1 \text{ a.u.}$ и (b) $z_0 = 3 \text{ a.u.}$ Као што се и очекивало, величине ових сила битно се смањују са повећањем растојања, а максималне вредности померају се ка већим брзинама. Са слике 2 видимо да су ефекти другог реда најизраженији за брзине при којима линеарне зауставне силе достижу максималне вредности. На растојањима блиским површини графена ефекти другог реда износе око 10% од укупне вредности зауставне силе и, са повећањем растојања, значајно се смањују.



Слика 2. Зависност линеарне зауставне силе $F_s^{(1)}$ и корекције $F_s^{(2)}$ од брзине протона v , за два различита растојања од површине графена: (a) $z_0 = 1 \text{ a.u.}$ и (b) $z_0 = 3 \text{ a.u.}$

Figure 2. The linear stopping force $F_s^{(1)}$ and the correction $F_s^{(2)}$ versus the proton velocity v , for two positions: (a) $z_0 = 1 \text{ a.u.}$ and (b) $z_0 = 3 \text{ a.u.}$

На сликама 3а и 3б приказана је зависност линеарне силе lika $F_{im}^{(1)}$ и корекције $F_{im}^{(2)}$ од брзине протона v , за два различита растојања од површине графена: $z_0 = 1 \text{ a.u.}$ (a) и $z_0 = 3 \text{ a.u.}$ (b). Поредићи слике 2 и 3, видимо да криве зависности испољавају, генерално, сличну тенденцију. Међутим, за разлику од зауставних сила, код сила lika су ефекти другог реда најизраженији при малим брзинама. Достижу 10% од укупне вредности силе lika и не може се рећи да се значајно смањују са повећањем растојања.



Слика 3. Зависност линеарне силе lika $F_{im}^{(1)}$ и корекције $F_{im}^{(2)}$ од брзине протона v , за два различита растојања од површине графена: (a) $z_0 = 1 \text{ a.u.}$ и (b) $z_0 = 3 \text{ a.u.}$

Figure 3. The linear image force $F_{im}^{(1)}$ and the correction $F_{im}^{(2)}$ versus the proton velocity v , for two positions: (a) $z_0 = 1 \text{ a.u.}$ and (b) $z_0 = 3 \text{ a.u.}$

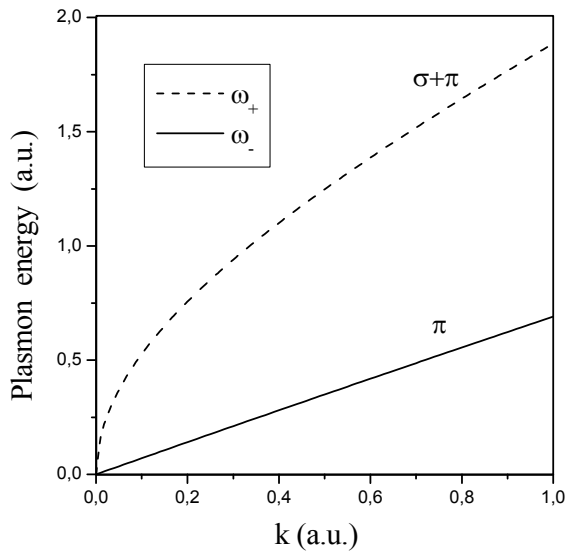
Генерално говорећи, ефекти другог реда су слаби, као што се и очекује за брзе јоне ван гаса електрона, али се њихова бројна вредност може лако ме-

риту у експериментима расејања јона под малим углом са површине графена, по аналогији са добро познатим Winter-овим експериментима [4].

За разлику од једнофлуидног модела где су испитивани линеарни и нелинеарни ефекти, у двофлуидном моделу разматрамо само линеарне ефекте (први ред теорије пертурбација).

Двофлуидни модел даје нешто прецизнију, мада и даље квалитативну слику колективних електронских ексцитација, окарактерисану са две гране плазмонских осцилација [15,16]. Такве осцилације експериментално су уочене у систему угљеничних наноцеви са једноструким зидовима, помоћу EELS (*Electron Energy Loss Spectroscopy*) методе, и описане су као нискофреквентни π плазмони и високофреквентни $\sigma+\pi$ плазмони [27].

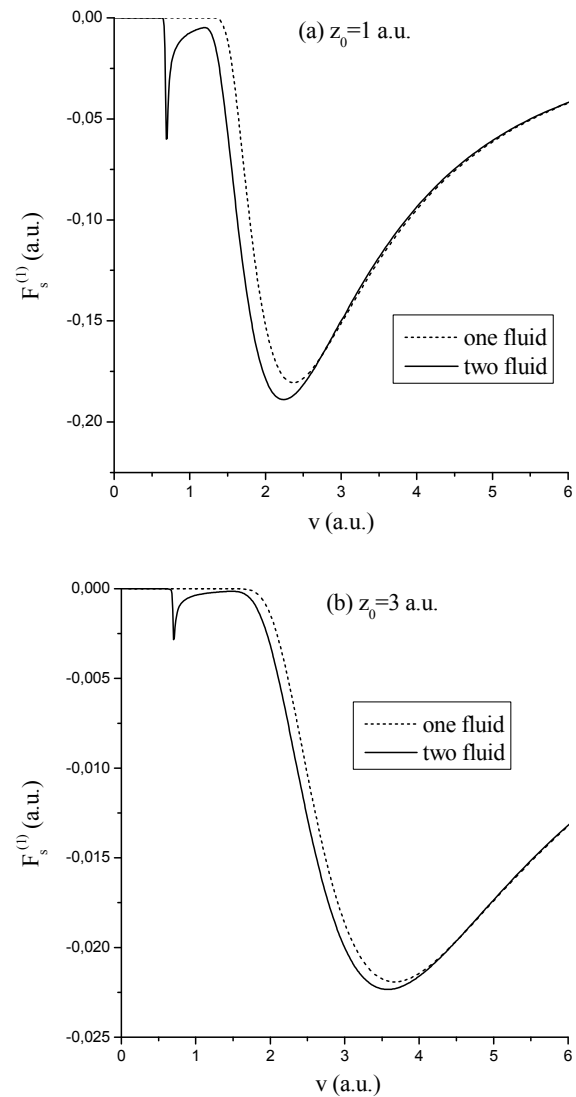
На слици 4 приказане су дисперзионе криве у односу на импулс. Као што видимо, доња грана је линеарна и може се повезати са тзв. π плазмоном, који се може окарактерисати и као квазиакустични плазмон. С друге стране, може се проверити да је горња грана такође и идентична са плазменом дисперзијом у једнофлуидном моделу, па је назив $\sigma+\pi$ плазмон сасвим оправдан.



Слика 4. Дисперзионе криве које одговарају $\sigma+\pi$ и π плазмонима у односу на импулс.
Figure 4. Dispersion curves which correspond to the $\sigma+\pi$ and π plasmons shown versus momentum.

Што се тиче поређења резултата у једнофлуидном и двофлуидном моделу, на сликама 5a, 5b, 6a и 6b приказане су зависности зауставне силе $F_s^{(1)}$ и силе лика $F_{im}^{(1)}$, респективно, од брзине протона v , у једнофлуидном и двофлуидном моделу, за два различита растојања од површине графена: $z_0 = 1$ a.u. (a) и $z_0 = 3$ a.u. (b). Са слика видимо да, за разлику

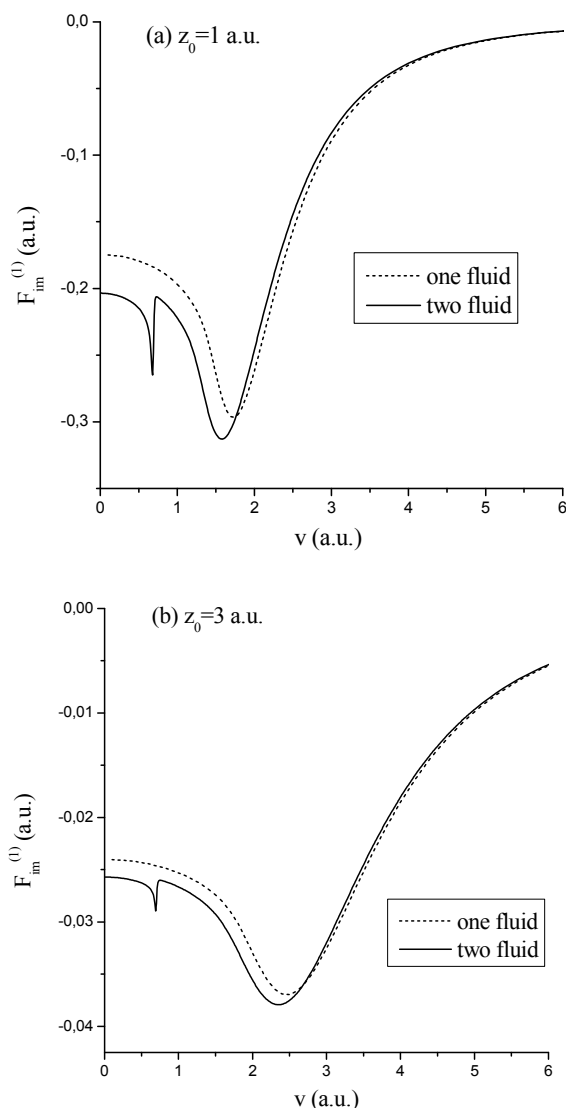
од једнофлуидног модела, код двофлуидног модела присуство нискоенергијског квазиакустичног плазмона условљава резонантне карактеристике на брзинама блиским тзв. «акустичној» брзини $v_a \approx 0,71$ a.u., што је у сагласности са резултатима добијеним за каналсање протона у угљеничним наноцевима [16]. Са слика видимо и да, при већим брзинама, за обе силе, ова два модела дају практично исте резултате. Као што се и очекивало, величине ових сила битно се смањују са повећањем растојања, а максималне вредности померају се ка већим брзинама.



Слика 5. Зависност зауставне силе $F_s^{(1)}$ од брзине протона v , у једнофлуидном (*one fluid*) и двофлуидном (*two fluid*) моделу, за два различита растојања од површине графена: (a) $z_0 = 1$ a.u. и (b) $z_0 = 3$ a.u.
Figure 5. The stopping force $F_s^{(1)}$ versus the proton velocity v in the cases of one-fluid and two-fluid model, for two positions: (a) $z_0 = 1$ a.u. and (b) $z_0 = 3$ a.u.

Са слике 6 можемо приметити разлику између ова два модела, за вредности силе лика при мањим

брзинама. Иако је ово последица особених карактеристика статичког екранирања (*static screening*) у линеаризованом *Thomas-Fermi*-јевом моделу [28], треба рећи да је наш хидродинамички модел графена мање поуздан за јоне мањих брзина, јер не узима у обзир дисперзију енергије у π електронској зони. Недавно је показано [29] да, када се ово узме у обзир, статичко екранирање у унутрашњости графена не може бити третирано линеаризованим *Thomas-Fermi*-јевим моделом.



Слика 6. Зависност силе лика $F_{im}^{(1)}$ од брзине протона v , у једнофлуидном (*one fluid*) и двофлуидном (*two fluid*) моделу, за два различита растојања од површине графена: (a) $z_0 = 1$ a.u. и (b) $z_0 = 3$ a.u.
Figure 6. The image force $F_{im}^{(1)}$ versus the proton velocity v , in the cases of one-fluid and two-fluid model, for two positions: (a) $z_0 = 1$ a.u. and (b) $z_0 = 3$ a.u.

ЗАКЉУЧАК

На основу приказаних резултата могу се донети следећи закључци.

Ефекти другог реда су слаби, као што се и очекује за брзе јоне ван гаса електрона, али се њихова бројна вредност може лако мерити.

У двофлуидном моделу, за разлику од једнофлуидног модела, присуство нискоенергијског квазиакустичног плазмона условљава резонантне карактеристике на брзинама блиским тзв. «акустичној» брзини, што је у сагласности са резултатима добијеним за каналисање протона у угљеничним нанотцевима. При већим брзинама, за обе силе, ова два модела дају практично исте резултате. Разлика се јавља за вредности силе лика при мањим брзинама.

Захвалница

Аутори се захваљују Министарству за науку и технолошки развој Републике Србије на финансијској помоћи у току израде овог рада (пројекат 141013). З.Л. Мишковић захваљује на подршци коју је пружио *Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada*.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Science* **306** (2004) 666–669.
- [2] A.K. Geim, P. Kim, *Sci. Am.* (April 2008) 90–97.
- [3] A.K. Geim, K.S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6** (2007) 183–191.
- [4] H. Winter, *Phys. Rep.* **367** (2002) 387–582.
- [5] A.V. Krasheninnikov, K. Nordlund, *Phys. Rev. B* **71** (2005) 245408 (4 pp).
- [6] C.S. Moura, L. Amaral, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 13515–13518.
- [7] W. Zhang, Z. Zhu, Z. Hu, Z. Wang, F. Zhang, *Nanotechnology* **16** (2005) 2681–2684.
- [8] Z.L. Mišković, *Radiat. Eff. Defects Solids* **162** (2007) 185–205.
- [9] G. Ramos, B.M.U. Scherzer, *Nucl. Instrum. Methods B* **85** (1995) 479–483.
- [10] G. Ramos, B.M.U. Scherzer, *Nucl. Instrum. Methods B* **174** (2001) 329–336.
- [11] E. Yagi, T. Iwata, T. Urai, K. Ogiwara, *J. Nucl. Mater.* **334** (2004) 9–12.
- [12] S. Cernusca, M. Fürsätz, H.P. Winter, F. Aumayr, *Europhys. Lett.* **70** (2005) 768–774.
- [13] T. Kaneko, H. Kudo, S. Tomita, R. Uchiyama, *J. Phys. Soc. Japan* **75** (2006) 034717 (6 pp).
- [14] A.L. Fetter, *Ann. Phys.* **81** (1973) 367–393.
- [15] G. Barton, C. Eberlein, *J. Chem. Phys.* **95** (1991) 1512–1517.
- [16] D.J. Mowbray, Z.L. Mišković, F.O. Goodman, Y.-N. Wang, *Phys. Rev. B* **70** (2004) 195418 (7 pp).

- [17] O.H. Crawford, J.J. Dorado, F. Flores, Nucl. Instrum. Methods B **96** (1995) 610–618.
- [18] E. Prodan, C. Radloff, N.J. Halas, P. Nordlander, Science **302** (2003) 419–422.
- [19] D.J. Mowbray, Z.L. Mišković, F.O. Goodman, Phys. Rev. B **74** (2006) 195435 (13 pp).
- [20] G. Bertoni, L. Calmels, A. Altibelli, V. Serin, Phys. Rev. B **71** (2005) 075402 (8 pp).
- [21] M. Ishigami, J.H. Chen, W.G. Cullen, M.S. Fuhrer, E.D. Williams, Nano Lett. **7** (2007) 1643–1648.
- [22] Y.-N. Wang, Z.L. Mišković, Phys. Rev. A **69** (2004) 022901 (6 pp).
- [23] D.J. Mowbray, Z.L. Mišković, F.O. Goodman, Y.-N. Wang, Phys. Lett. A **329** (2004) 94–99.
- [24] Y.-H. Song, Y.-N. Wang, Z.L. Mišković, Phys. Lett. A **285** (2001) 183–190.
- [25] D. Borka, S. Petrović, N. Nešković, D.J. Mowbray, Z.L. Mišković, Phys. Rev. A **73** (2006) 062902 (8 pp).
- [26] J. Zuloaga, Z.L. Mišković, F.O. Goodman, Nucl. Instrum. Methods B **256** (2007) 162–166.
- [27] T. Pichler, M. Knupfer, M.S. Golden, J. Fink, A. Rinzler and R.E. Smalley, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 4729–4732.
- [28] A.P. Favaro, K. Capelle, J.V.B. Ferreira, Phys. Rev. B **73** (2006) 045133 (7 pp).
- [29] M.I. Katsnelson, Phys. Rev. B **74** (2006) 201401(R, 3pp).

SUMMARY

INTERACTIONS OF FAST IONS WITH GRAPHENE

Ivan S. Radović¹, Ljupčo R. Hadžievski¹, Nataša M. Bibić¹, Zoran L. Mišković²

¹VINČA Institute of Nuclear Sciences, P.O. Box 522, 11001 Belgrade, Serbia

²Department of Applied Mathematics, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada

(Scientific paper)

In this work, we study the interactions of fast ions with graphene describing the excitations of the electron gas in graphene by a two-dimensional (2D) hydrodynamic model (one-fluid and two-fluid model). The two-fluid model reproduces qualitatively the split of plasmon dispersions into the low-frequency π -electron branch and the high-frequency $\sigma+\pi$ -electron branch. We calculate the stopping force and the image force on an ion moving parallel to a single sheet of graphene. Numerical results show that the presence of the low-energy, quasicoustic plasmon in the two-fluid model gives rise to resonant features at low velocities around its “acoustic” speed, which are not seen in the one-fluid model. The two models give virtually indistinguishable results for both forces at high speeds. Marked differences between the two models in the values of image forces at low speeds can be seen. Numerical results show that the magnitudes of both the stopping and image forces exhibit typical resonance-shaped velocity dependencies, with the peak positions moving to higher velocities for higher distances and with the overall magnitudes decreasing sharply with increasing distances. The second order corrections are found to be small, as expected for fast ions outside the electron gas, but their relative magnitudes should be easily discernible in experiments on ion grazing scattering from graphene. One notices effects which are similar to those obtained earlier for proton channeling in carbon nanotubes.

Кључне речи: Графен • Хидродинамички модел • Заустанва сила • Сила лика

Key words: Graphene • Hydrodynamic Model • Stopping Force • Image Force