

# Pseudomagnetska polja u grafenu

---

Grozić, Petra

Master's thesis / Diplomski rad

2018

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:400959>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-25**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

Petra Grozić

PSEUDOMAGNETSKA POLJA U GRAFENU

Diplomski rad

Zagreb, 2018.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ  
FIZIKA; SMJER NASTAVNIČKI

**Petra Grozić**

Diplomski rad

# **Pseudomagnetska polja u grafenu**

Voditelj diplomskog rada: doc. dr. sc. Danko Radić

Ocjena diplomskog rada: \_\_\_\_\_

Povjerenstvo: 1. \_\_\_\_\_

2. \_\_\_\_\_

3. \_\_\_\_\_

Datum polaganja: \_\_\_\_\_

Zagreb, 2018.

Prvenstveno bih se zahvalila svome mentoru, doc. dr. sc. Danku Radiću na neizmjernej pomoći u izradi ovog diplomskog rada, velikom strpljenju i na moralnoj podršci kad mi je trebala.

Zahvaljujem se i svojim roditeljima, koji su mi pružali podršku tijekom cijelog studija iako im nije bilo jasno zašto baš fizika.

Hvala svim prijateljima i bližnjima kojima nije bilo teško slušati o ovom radu i hvala Sari, jedinoj osobi uz koju mogu učiti i polagati ispite.

## Sažetak

Grafen je nedavno otkriveni dvodimenzionalni materijal vrlo zanimljivih svojstava. Cilj ovog diplomskog rada je proučiti utjecaj mehaničke deformacije na stvaranje efektivnog vektorskog potencijala koji generira pseudomagnetsko polje te istraživanje mogućnosti dobivanja uniformnih pseudomagnetskih polja.

Ključne riječi: grafen / pseudomagnetsko polje / vektorski potencijal / mehanička deformacija

# Pseudomagnetic fields in graphene

## **Abstract**

Graphene is a novel two-dimensional material with very interesting properties. The goal of this thesis is to study how mechanical strain affects the rise of an effective vector potential which generates a pseudomagnetic field and to explore the possibilities of generating a uniform pseudomagnetic field.

Keywords: graphene / pseudomagnetic field / vector potential / mechanical deformation

# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Općenito o grafenu</b>	<b>2</b>
2.1	Osnovna svojstva grafena . . . . .	2
2.2	Povijest grafena . . . . .	2
<b>3</b>	<b>Kristalna struktura grafena</b>	<b>4</b>
3.1	Kristalna rešetka grafena . . . . .	4
3.2	Recipročna rešetka . . . . .	5
<b>4</b>	<b>Grafen u aproksimaciji čvrste veze</b>	<b>8</b>
4.1	Linearizacija oko K-točaka . . . . .	10
<b>5</b>	<b>Teorija elasticiteta</b>	<b>12</b>
<b>6</b>	<b>Utjecaj deformacije</b>	<b>14</b>
6.1	Uvođenje deformacije kristalne rešetke . . . . .	14
6.2	Utjecaj deformacije na hamiltonijan . . . . .	14
6.3	Razvoj oko $K_1$ točke . . . . .	16
<b>7</b>	<b>Efektivni vektorski potencijal</b>	<b>20</b>
7.1	Vektorski potencijal u okolini $K_1$ točke . . . . .	20
7.2	Vektorski potencijal u okolini $K_2$ točke . . . . .	24
7.3	Pseudomagnetsko polje . . . . .	25
<b>8</b>	<b>Dobivanje homogenog magnetskog polja</b>	<b>27</b>
8.1	Dobivanje pseudomagnetskog polja trokutastom deformacijom . . . . .	27
8.2	Dobivanje pseudomagnetskog polja savijanjem trakica grafena . . . . .	29
<b>9</b>	<b>Zaključak</b>	<b>35</b>
<b>10</b>	<b>Metodički dio</b>	<b>36</b>
10.1	Nastavna priprema: Nastanak i vrste valova . . . . .	38
	<b>Literatura</b>	<b>47</b>

# 1 Uvod

Skoro svaki materijal kojeg srećemo u životu je trodimenzionalan. Tek nedavno se eksperimentalno krenulo s razumijevanjem kako se mijenjaju svojstva nekog materijala kada ga se "učini" dvodimenzionalnim. Karakteristike grafena jako se razlikuju od karakteristika grafita, koji predstavlja pripadno trodimenzionalno uređenje ugljika. Proučavanje grafena može nam pomoći u razumijevanju i predviđanju kako bi se mogli ponašati drugi materijali u dvodimenzionalnom obliku. [1]

Jedna od karakteristika grafena je da provodi struju, a njegova dvodimenzionalna struktura idealna je za potencijalni razvoj novih tipova minijaturiziranih računala i tranzistora. Takvi uređaji bi trebali zahtjevati malu količinu energije za rad, a činjenica da je grafen kao materijal fleksibilan, snažan i transparentan samo dalje pridonosi njegovim potencijalnim uporabama.

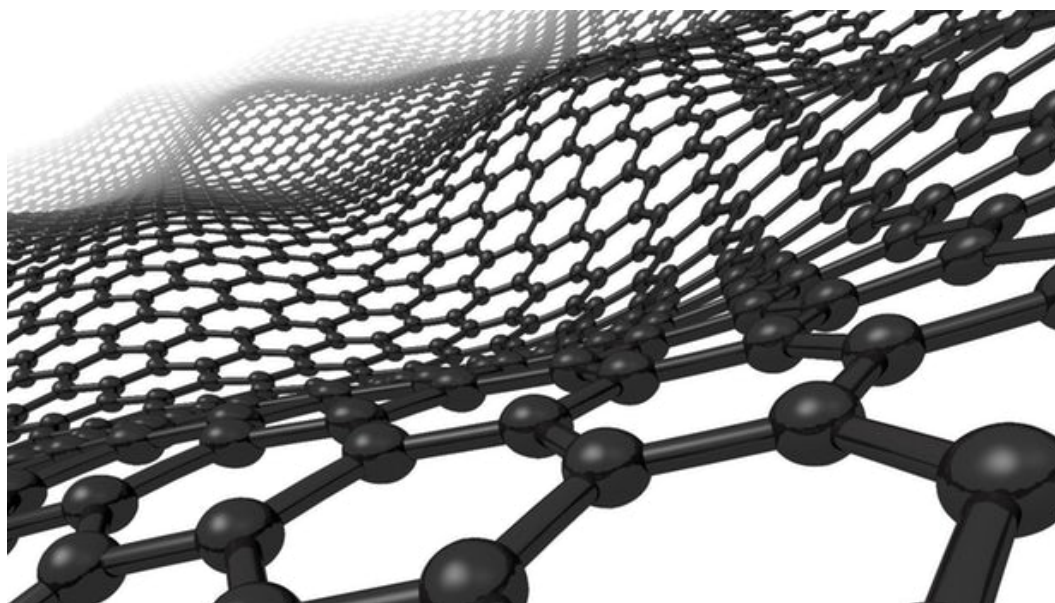


## 2 Općenito o grafenu

### 2.1 Osnovna svojstva grafena

Svatko tko je pisao mekanom olovkom se na svoju ruku uvjerio da je grafit jako mekani materijal. To je zato što se slojevi ugljika unutar grafita vrlo lako odvajaju. Za razliku od toga, atomi unutar tih slojeva vrlo su čvrsto vezani, što čini grafen vrlo čvrstim materijalom. Osim svoje iznimne čvrstoće, grafen karakterizira i velika savitljivost, može ga se rastegnuti i do 20-25 posto svoje originalne duljine bez da pukne. [2]

Intuitivno je da je materijal debeo samo jedan atomski sloj ujedno i veoma lagan, tako da bi procjena mase grafena koji bi bio potreban da se prekrije nogometno igralište bila svega oko jedan gram. [2] Grafen također karakterizira velika električna i termalna vodljivost. [2]



Slika 2.1: Ilustracija kristalne rešetke grafena, preuzeto sa [3]

### 2.2 Povijest grafena

Jednoslojni grafen teorijski je istraživao kanadski fizičar Philip Russel Wallace 1974. godine kao početnu točku za razumijevanje elektronskih svojstava trodimenzionalnog grafita. Samo ime grafen uveli su kemičari Hanns-Peter Boehm, Ralph Setton i Eberhard Stumpp kao kombinaciju riječi grafit i sufiksa -en, odnosivši se pritom na

policikličke aromatične ugljikovodike. Početni pokušaji da se proizvede jednoatomski tanak film grafita uključivali su tehnike ljuštenja. Dobiveni su uzorci tanki oko 10 nm. Jedan od prvih patenata koji je doveo do proizvodnje grafena bio je zatražen 2002, a odobren 2006. godine. Dvije godine kasnije, 2004, Geim i Novoselov dobili su kristalite debljine jednog atoma iz "bulk" grafita. Skidali su slojeve grafena s grafita i prebacivali ih na tanki sloj silicijevog dioksida ( $SiO_2$ ). Taj proces naziva se "Scotch tape tehnika" po ljepljivoj traci koju su koristili za odvajanje slojeva grafena od "bulk" grafita. Geim i Novoselov dobili su Nobelovu nagradu za fiziku 2010. godine za svoja istraživanja na polju grafena.



Slika 2.2: Andre Geim i Konstantin Novoselov, dobitnici Nobelove nagrade za fiziku 2010 , preuzeto sa [4]

### 3 Kristalna struktura grafena

Ugljik ima četiri valentna elektrona te preferira kovalentno vezanje za svoje bliske susjede. Uobičajene simetrije vezanja su tetraedarska, poput dijamanta, ili trigonska kao u grafenu. Trigonsku simetriju vezanja u prirodi nalazimo kod mnogo molekula poput benzena ili drugih aromatičnih ugljikovodika.

U grafenu na jednom atomu ugljika formiraju se tri  $sp^2$  hibridne orbitale koje se nalaze u ravnini. One se vežu sa istim takvim prvim susjedima. Te veze za prve susjede nazivaju se  $\sigma$  (sigma) vezama. Sigma veze su jake i imaju veliku energiju vezanja.  $\pi$  veza ostvaruje se preklapanjem nehibridiziranih p-orbitala koje su okomite na ravninu u kojoj su ostale tri hibridizirane orbitale.

U grafenu ugljikovi atomi izgrađuju honeycomb (saćastu) rešetku. Jedinična ćelija sadrži dva atoma ugljika.

#### 3.1 Kristalna rešetka grafena

Skiciramo li jediničnu ćeliju grafena, možemo definirati jedinične vektore rešetke,  $\vec{a}_1$  i  $\vec{a}_2$ , gdje nam  $d$  predstavlja udaljenost između dva susjedna atoma ugljika.

Za jedinične vektore vrijedi:

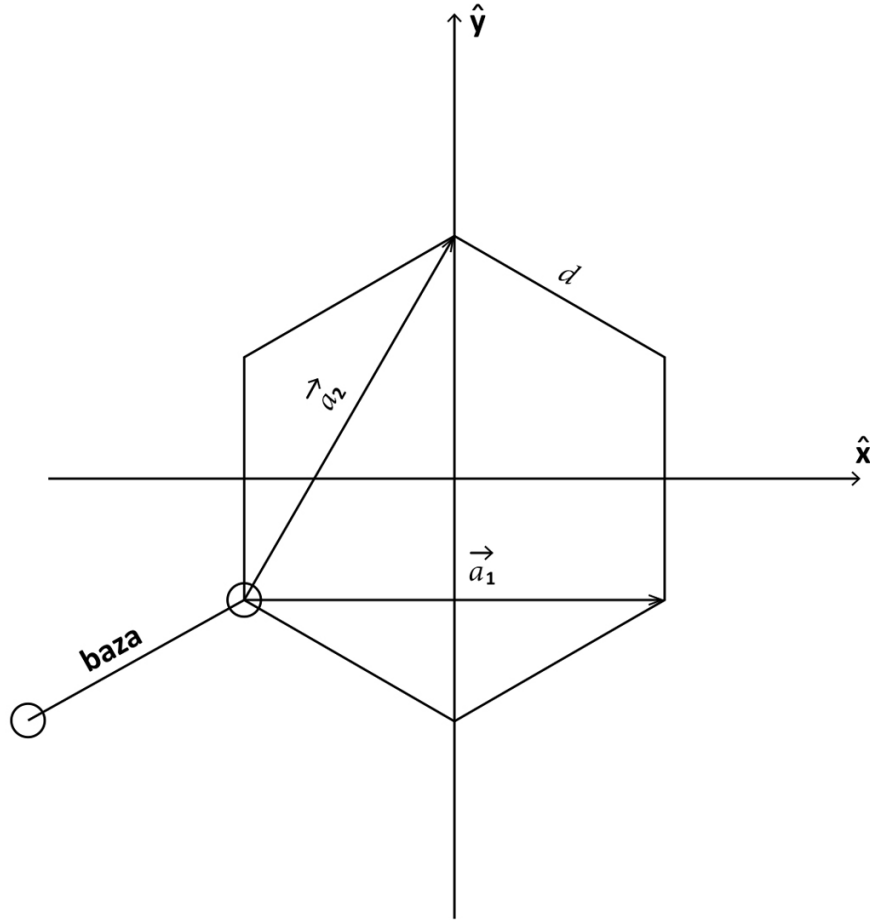
$$a \equiv |\vec{a}_i| = \sqrt{3}d \quad (3.1)$$

$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{3}d \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}d}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Koristeći vrijednosti jediničnih vektora dalje računamo volumen primitivne ćelije (u dvije dimenzije).

$$\Omega = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \frac{a^2\sqrt{3}}{2} \quad (3.4)$$



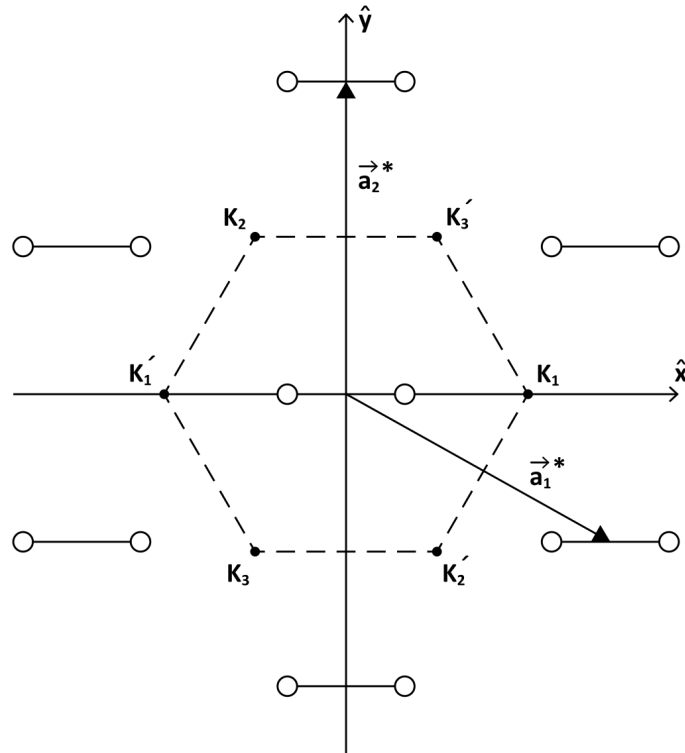
Slika 3.1: Primitivna ćelija grafena, na vrhovima šesterokuta su ugljikovi atomi. Vektori  $\vec{a}_1$  i  $\vec{a}_2$  definiraju jediničnu ćeliju grafena u dvije dimenzije. Međuatomska udaljenost je  $d$ .

### 3.2 Recipročna rešetka

Određujemo vektore recipročne rešetke kako bismo potom predložili izgled impulsnog prostora:

$$\vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{\Omega} \vec{a}_2 \times \hat{z} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

$$\vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{\Omega} \hat{z} \times \vec{a}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$



Slika 3.2: Jedinični vektori recipročne rešetke  $\vec{a}_1^*$  i  $\vec{a}_2^*$  te K-točke na kojima se nalazi kemijski potencijal.

gdje su:

$$a^* = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} = \frac{4\pi}{3d} = 2.9\text{\AA} \quad (3.7)$$

$$d^* = \frac{a^*}{\sqrt{3}} = \frac{4\pi}{3a} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d}. \quad (3.8)$$

K i K' točke prikazane na slici 3.2 su točke gdje se nalazi kemijski potencijal i gdje su locirana elektronska pobuđenja (termalno pobuđeni elektroni i šupljine nalaze se blizu kemijskog potencijala). Zanimljivo nam je razmatrati disperziju čestica u blizini

tih točaka.

Odgovarajući vektori recipročnog prostora koji određuju pozicije K-točaka:

$$\vec{K}_1 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$\vec{K}_2 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

$$\vec{K}_3 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} -1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

$$\vec{K}'_1 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$\vec{K}'_2 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} 1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

$$\vec{K}'_3 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

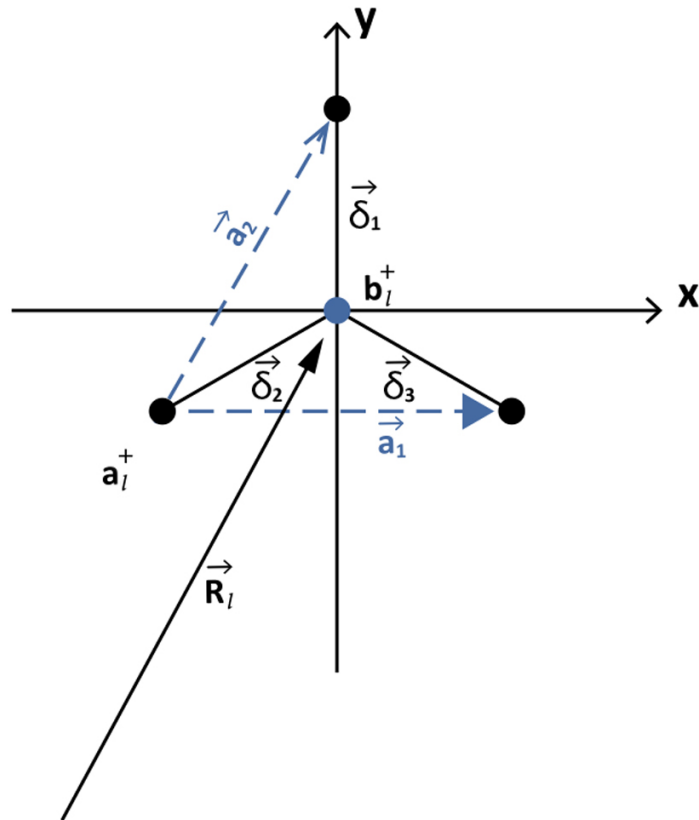
gdje je modul vektora  $\vec{K}$  jednak

$$K = d^* = \frac{a^*}{\sqrt{3}}. \quad (3.15)$$

Definiramo također vektore  $\vec{\delta}_i$  koji povezuje prve susjede;  $\vec{R}_l$  je vektor položaja čvora rešetke koji promatramo (slika3.2).

$$\vec{\delta}_1 = d \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

$$\vec{\delta}_{2,3} = \frac{d}{2} \begin{pmatrix} \mp\sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$



Slika 3.3: Susjedni atomi ugljika razmaknuti su za  $\vec{\delta}_i$ , vektor koji povezuje prve susjede. Vektor  $\vec{R}_l$  pokazuje na čvor kristalne rešetke kojeg promatramo.

## 4 Grafen u aproksimaciji čvrste veze

U primitivnoj ćeliji grafena nalaze se dva atoma ugljika. Pomoću formalizma druge kvantizacije možemo zapisati hamiltonijan sustava u aproksimaciji čvrste veze. U ovom opisu elektron dugo "kruži" oko matičnog čvora kristalne rešetke prije nego li ga napusti. Nazovimo dva atoma u bazi A i B te elektronske operatore stvaranja i poništenja na njima nazovimo  $a$  i  $b$ . Hamiltonijan sustava tada glasi:

$$H = \epsilon_0 \sum_l (a_l^\dagger a_l + b_l^\dagger b_l) - t \sum_l \sum_{j=1}^3 (a_{l+j}^\dagger b_l + b_l^\dagger a_{l+j}) \quad (4.1)$$

gdje je  $\epsilon_0$  atomska energija elektrona, a  $t$  je matrični element elektronskog tuneliranja između susjednih čvorova.

Elektron s atoma A preskače na svoja tri susjeda atoma B i obratno, vjerojatnošću proporcionalnom matričnom elementu preskoka  $t$ . Sumaciju u prvom dijelu hamil-

tonijana vršimo po čvorovima kristalne rešetke ( $l$ -sumacije), dok u drugom dijelu također sumiramo i po prvim susjedima ( $j$ -sumacija). Transformiramo li  $a_l$ ,  $b_l$ , te  $a_{l+j}$  i  $b_{l+j}$  iz direktnog u recipročni prostor,

$$\begin{pmatrix} a_l \\ b_l \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}_l} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

$$\begin{pmatrix} a_{l+j} \\ b_{l+j} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{R}_l + \vec{\delta}_j)} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

dobivamo drugi oblik Hamiltonijana u recipročnom prostoru

$$H = \epsilon_0 \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_j \sum_l e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}_l} (a_{\vec{k}'}^+ a_{\vec{k}} + b_{\vec{k}'}^+ b_{\vec{k}}) \quad (4.4)$$

$$-t \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_j \sum_l [e^{-i\vec{k}'(\vec{R}_l + \vec{\delta}_j)} e^{+i\vec{k}\vec{R}_l} a_{\vec{k}'}^+ b_{\vec{k}} + e^{-i\vec{k}'\vec{R}_l} e^{i\vec{k}(\vec{R}_l + \vec{\delta}_j)} b_{\vec{k}'}^+ a_{\vec{k}}] \quad (4.5)$$

U izrazu prepoznamo  $N\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} = \sum_l e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}_l}$  što daljnje pojednostavljuje hamiltonijan:

$$H = \epsilon_0 \sum_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}) - t \sum_{\vec{k}} (\gamma_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + \gamma_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}), \quad (4.6)$$

dok faktor  $\gamma_{\vec{k}}$  definiramo kao:

$$\gamma_{\vec{k}} \equiv \sum_{j=1}^3 e^{-i\vec{k}\vec{\delta}_j}. \quad (4.7)$$

Prebacivanje hamiltonijana u matrični oblik nam omogućuje jednostavnu dijagonalizaciju te izračunavanje elektronske disperzije

$$H = \sum_{\vec{k}} \begin{bmatrix} a_{\vec{k}}^+ & b_{\vec{k}}^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_0 & -t\gamma_{\vec{k}} \\ -t\gamma_{\vec{k}}^* & \epsilon_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{bmatrix}. \quad (4.8)$$



Rješavanjem problema svojstvenih vrijednosti  $H\psi_{\vec{k}} = E_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}$ , gdje je  $\psi_{\vec{k}} = [a_{\vec{k}}, b_{\vec{k}}]$ ,

$$\begin{vmatrix} \epsilon_0 - E_{\vec{k}} & -t\gamma_{\vec{k}} \\ -t\gamma_{\vec{k}}^* & \epsilon_0 - E_{\vec{k}} \end{vmatrix} = 0 \quad (4.9)$$

dobivamo krajnji izraz za elektronsku disperziju  $E_{\vec{k}}$ :

$$E_{\vec{k}} = \epsilon_0 \pm t|\gamma_{\vec{k}}|. \quad (4.10)$$

Preostaje nam samo izračunati apsolutnu vrijednost  $\gamma_{\vec{k}}$ , gdje je

$$\gamma = \sum_{j=1}^3 e^{-i\vec{k}\delta_j} = e^{-ik_y d} + e^{i\frac{1}{2}(\sqrt{3}k_x + k_y)d} + e^{-i\frac{1}{2}(\sqrt{3}k_x - k_y)d} \quad (4.11)$$

$$= e^{-ik_y d} + 2e^{i\frac{1}{2}k_y d} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x d\right) \quad (4.12)$$

te u konačnici dobivamo

$$|\gamma_{\vec{k}}| = \sqrt{3 + 2\cos(\sqrt{3}k_x d) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x d\right)\cos\left(\frac{3}{2}k_y d\right)}. \quad (4.13)$$

#### 4.1 Linearizacija oko K-točaka

Zanima nas konkretno što se događa oko rubova Fermijeva nivoa, tako da ćemo promatrati disperziju oko K-točaka u impulsnom prostoru u kojima je smješten Fermijev nivo, uzevši valni vektor  $\vec{k}$  koji se od vektora  $\vec{K}$  razlikuje za mali vektor  $\vec{q}$ . Promotrimo okolinu točke  $\vec{K}_1$

$$\vec{K} \equiv \vec{K}_1 = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

$$\vec{k} = \vec{K} + \vec{q} \quad (4.15)$$

$$|\vec{q}| \ll |\vec{K}| \quad (4.16)$$

Za tako postavljeni slučaj opet računamo  $\gamma_{\vec{k}}$ .

$$\gamma_{\vec{k}} = \sum_{j=1}^3 e^{-i\vec{k}\vec{\delta}_j} = \sum_{j=1}^3 e^{-i(\vec{K}+\vec{q})\vec{\delta}_j} = \sum_{j=1}^3 e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} e^{-i\vec{q}\vec{\delta}_j} \approx \sum_{j=1}^3 (1 - i\vec{q}\vec{\delta}_j) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} \quad (4.17)$$

Uvođenjem općenitog valnog vektora  $\vec{q}$

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

nakon sumiranja po prvim susjedima dobivamo konačni rezultat i izraz za  $\gamma$  te njegovu apsolutnu vrijednost

$$\gamma = -\frac{3}{2}(q_x + iq_y)d \quad (4.19)$$

$$|\gamma| = \frac{3}{2}\sqrt{q_x^2 + q_y^2}d = \frac{3}{2}|\vec{q}|d. \quad (4.20)$$

Tako konačno dobivamo elektronsku disperziju oko K-točke za grafen

$$E_{\vec{q}} = \pm \frac{3}{2}t|\vec{q}|d, \quad (4.21)$$

gdje smo uzeli:

$$\epsilon_0 \equiv 0. \quad (4.22)$$

Analogan rezultat dobivamo razmatramo li neku drugu K-točku umjesto  $K_1$ . Dobivamo disperziju koja pokazuje linearnu ovisnost o valnom vektoru u blizini K-točaka što je jedno od ključnih svojstava koja grafen čine zanimljivim za daljnje istraživanje.

## 5 Teorija elasticiteta

Mehanika čvrstih tijela, promatranih kao kontinuirane medije, čini teoriju elasticiteta. [6]

Primjenom sile, čvrsta tijela se u nekoj mjeri deformiraju, mijenjaju se oblikom i volumenom. Deformaciju nekog tijela matematički opisujemo na sljedeći način. Pozicija bilo koje točke tijela je definirana radij-vektorom  $\vec{r}$  u nekom koordinatnom sustavu. Kada je tijelo deformirano, svaka točka u tom tijelu je općenito pomaknuta. Razmatrajući neku određenu točku tijela, koja je na početku imala radij-vektor  $\vec{r}$ , a nakon deformacije njen položaj opisuje vektor  $\vec{r}'$  njezin pomak opisujemo razlikom konačnog i početnog radij-vektora  $\vec{r}' - \vec{r}$ , a taj pomak ćemo označavati s  $\vec{u}$ :

$$\vec{u} = \vec{r}' - \vec{r}. \quad (5.23)$$

Deformacija ili (eng. "strain") je definirana kao relativna promjena pozicija točaka unutar deformiranog tijela. Definiramo tenzor deformacije  $\epsilon$  kao

$$\epsilon_{ij} \equiv \begin{vmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} \end{vmatrix}, \quad (5.24)$$

gdje su komponente tenzora  $\epsilon_{ij}$  određene deformacijom kao

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (5.25)$$

Komponente tenzora  $\epsilon_{ij}$  su Youngovi moduli elastičnosti.

[6] U tijelu koje nije deformirano, molekule su posložene tako da odgovaraju stanju termičke ravnoteže. Svi dijelovi tijela su u mehaničkoj ravnoteži. To znači da ako se promatra neki komadić tijela, rezultanta svih sila na taj komadić je nula.

Kada dođe do deformacije, raspored molekula se mijenja i tijelo više nije u originalnom stanju ravnoteže, tada se javljaju sile koje pokušavaju dovesti tijelo u ravnotežu. Te unutrašnje sile koje se javljaju kod deformiranih tijela zovu se unutrašnje naprezanje. Ako nema deformacije, nema ni naprezanja.

Unutrašnje naprezanje javlja se zbog međumolekulskih sila, čija je odlika da su jako kratkog doseg. Njihov utjecaj doseže samo u susjedstvo pojedine molekule.

Promotrimo sad ukupnu silu na neki dio tijela. Ta sila je jednaka sumi svih sila na sve elemente volumena u tom dijelu tijela, pa ju možemo napisati kao:

$$\int \vec{F} dV \quad (5.26)$$

gdje je  $\vec{F}$  sila po jedinici volumena, a  $\vec{F} dV$  sila na element volumena  $dV$ . Vektor  $\vec{F}_i$  mora biti divergencija tenzora ranga dva, odnosno imati oblik [6]

$$\vec{F}_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}. \quad (5.27)$$

Devet komponenti  $\sigma_{ij}$  su komponente Kartezijanskog tenzora kojeg nazivamo Cauchyjev tenzor naprezanja

$$\vec{\sigma} = \sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}. \quad (5.28)$$

Prvi indeks  $i$  govori o tome da naprezanje djeluje na ravninu okomitu na  $X_i$ -tu os, a drugi indeks  $j$  govori o tome u kojem smjeru naprezanje djeluje (na primjer,  $\sigma_{xy}$  znači da je naprezanje djeluje na ravnini okomitoj na x-os, a djeluje duž y-osi). Komponenta naprezanja je pozitivna ako djeluje u pozitivnom smjeru koordinatne osi i ako ravnina na koju djeluje ima vektor normale koji pokazuje u pozitivnom smjeru. [5]

## 6 Utjecaj deformacije

### 6.1 Uvođenje deformacije kristalne rešetke

U ovom poglavlju uvest ćemo osnovnu mehaničku deformaciju kojoj možemo podložiti kristalnu rešetku grafena.

Ukoliko kristalnu rešetku grafena na neki način deformiramo, potrebno je je definirati vektor položaja čvora rešetke kojeg promatramo,  $\vec{R}_l$ , i deformaciju na tom položaju,  $\vec{u}(\vec{R}_l)$ , što daje novi položaj čvora  $l$ ;

$$\vec{R}'_l = \vec{R}_l + \vec{u}(\vec{R}_l). \quad (6.1)$$

Također, redefiniramo i jedinične vektore primitivne ćelije:

$$\vec{a}'_{1,2(l)} \approx (1 + \nabla \vec{u}(\vec{R}_l)) \vec{a}_{1,2(l)} \approx (1 + \epsilon(\vec{R}_l)) \vec{a}_{1,2(l)}, \quad (6.2)$$

gdje je  $\nabla \vec{u}(\vec{R}_l)$  potpuni tenzor gradijenta u Lagrange-ovom opisu, a  $\epsilon(\vec{R}_l)$  se odnosi na linearno naprezanje gdje zanemarujemo rotacije uzorka.

Zbog naprezanja se mijenjaju i vektori koji definiraju međusobnu udaljenost prvih susjeda u kristalnoj rešetci te ih nanovo definiramo:

$$\vec{\delta}'_{j(l)} \approx (1 + \epsilon(\vec{R}_l)) \vec{\delta}_j. \quad (6.3)$$

### 6.2 Utjecaj deformacije na hamiltonijan

Prije uvođenja deformacije, hamiltonijan sustava glasio je:

$$H = - \sum_{m,n} t_{m,n} a_m^+ b_n + h.c., \quad (6.4)$$

uz

$$\epsilon_0 \equiv 0. \quad (6.5)$$

Hamiltonijan našeg sustava uvođenjem deformacije mijenja se na dva načina.

Dolazi do promjene integrala preskoka, to jest tuneliranja elektrona sa jednog čvora kristalne rešetke na drugi. Frekvencija preskoka se mijenja pošto se promijenila međuatomska udaljenost. Dio hamiltonijana koji se odnosi na preskoke elektrona s jednog na drugi čvor zvat ćemo "  $H_{hopping}$  ". Novi faktor preskakanja određen je novom, modificiranom međuatomskom udaljenošću

$$t_{mn} = t(|\delta'_{j(m,n)}|) \equiv t_0 + \delta t_{j(m,n)}. \quad (6.6)$$

Hamiltonijan sustava također se mijenja promjenom u fazi elektronskih polja  $a_m, b_n$  zbog promjene u međuatomskim udaljenostima. Dio hamiltonijana koji se mijenja zbog promjene kristalne rešetke nazivat ćemo "  $H_{lattice}$  ".

Operatore stvaranja i poništenja elektrona na atomu  $a_m$  i  $b_n$  prebacimo Fourierovom transformacijom u recipročni prostor.

Za nedeformiranu kristalnu rešetku:

$$a_m \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{R}_l + \delta_j)} a_{\vec{k}} \quad (6.7)$$

$$b_n \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}_l} b_{\vec{k}} \quad (6.8)$$

$$t_l = t_0, \quad (6.9)$$

dok su za deofmiranu rešetku operatori stvaranja i poništenja:

$$a_m \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{R}'_l + \delta'_{j(l)})} a_{\vec{k}} \quad (6.10)$$

$$b_n \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}'_l} b_{\vec{k}} \quad (6.11)$$

$$t_l = t_0 + \delta t_{j(l)}. \quad (6.12)$$

Nakon što smo odredili kako su se promijenile međuatomske udaljenosti hamiltonijan poprima oblik

$$H = - \sum_{\vec{k}} \sum_j (t_0 + \delta t_j) e^{-i\vec{k}\vec{\delta}_j} a_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + h.c., \quad (6.13)$$

gdje je međusobna udaljenost između prvih susjeda dobivena pomoću tenzora deformacije

$$\vec{\delta}'_j = (1 + \epsilon)\vec{\delta}_j, \quad (6.14)$$

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} \end{bmatrix}. \quad (6.15)$$

### 6.3 Razvoj oko $K_1$ točke

Promatramo područje recipročnog prostora gdje se nalazi Fermijeva energija, tako da promatramo hamiltonijan za valni vektor koji je od  $K$ -točke s valnim vektorom  $\vec{K}$  udaljen za mali valni vektor  $\vec{q}$ ,

$$\vec{k} \equiv \vec{K} + \vec{q} \quad (6.16)$$

$$|\vec{q}| \ll \vec{K}. \quad (6.17)$$

Sumiramo samo po valnom vektoru  $\vec{q}$  obzirom da je  $\vec{K}$  konstantan:

$$H = - \sum_{\vec{q}} \sum_j (t_0 + \delta t_j) e^{-i(\vec{K}+\vec{q})(1+\epsilon)\vec{\delta}_j} a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + h.c.. \quad (6.18)$$

Vrijednosti  $\delta t_j$ , valnog vektora  $\vec{q}$  i tenzora linearnog naprezanja  $\epsilon$  su malene, tako da uzimamo u obzir samo linearne članove u tim veličinama (zanemarujemo potencije višeg reda i umnoške tih veličina). Nakon množenja eksponenata i razvijanja u red dobivamo izraz za hamiltonijan sustava:

$$H \approx - \sum_{\vec{q}} \sum_j (t_0 + \delta t_j) (1 - i\vec{q}\vec{\delta}_j - i\vec{K}\epsilon\vec{\delta}_j) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + h.c.. \quad (6.19)$$

Hamiltonijan možemo izraziti kao sumu tri karakteristična doprinosa

$$H \simeq -t_0 \sum_{\vec{q}} \sum_j (1 - i\vec{q}\vec{\delta}_j) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} \quad (6.20)$$

$$+ \sum_{\vec{q}} \sum_j \delta t_j e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} \quad (6.21)$$

$$+ t_0 \vec{K} \epsilon \sum_{\vec{q}} \sum_j \vec{\delta}_j e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} \quad (6.22)$$

gdje je prvi član osnovni hamiltonijan  $H_0$ , drugi član se odnosi na modificirane preskoke elektrona sa čvora na čvor,  $H_{hopping}$ , a treći član je vezan za deformaciju kristalne rešetke,  $H_{lattice}$

$$H = H_0 + H_{hopping} + H_{lattice}. \quad (6.23)$$

Iako  $H_{hopping}$  i  $H_{lattice}$  jednako doprinose hamiltonijanu [7], zbog jednostavnosti i praćenja trenutne literature ćemo promatrati samo članove  $H_0$  i  $H_{hopping}$ ,

$$H \simeq H_0 + H_{hopping}. \quad (6.24)$$

Promotrimo sada hamiltonijan u aproksimaciji prvih susjeda. Za takav slučaj imamo:  $|\vec{\delta}_j| = d$ . Hopping parametar preskakanja je modificiran naprezanjem kristalne rešetke. Novi parametar preskoka dobivamo uvođenjem modificirane međususedske udaljenosti  $|\vec{\delta}'_j|$

$$t(|\vec{\delta}'_j|) = t_0 e^{-\beta \frac{|\vec{\delta}'_j| - d}{d}} \approx t_0 - t_0 \beta \frac{|\vec{\delta}'_j| - d}{d} \equiv t_0 + \delta t_j. \quad (6.25)$$

Vjerojatnost preskoka s jednog na drugi susjedni atom eksponencijalno ovisi o međusobnoj udaljenosti atoma, a faktori  $\beta$  i  $t_0$  su utvrđeni 'ab initio' izračunom [8]



$$\beta \simeq 3$$

$$t_0 \simeq 2,7eV.$$

Zbog utjecaja deformacije potrebno je redefinirati vektore koji povezuju prve susjedne atome ugljika što na kraju mijenja i apsolutnu vrijednost tog vektora koji će se koristiti u daljnjem računu:

$$\vec{\delta}'_j = (1 + \epsilon)\vec{\delta}_j, \quad (6.26)$$

gdje je kvadrat modula  $\vec{\delta}'$ :

$$|\vec{\delta}'|^2 = (\vec{\delta}_j^T + \vec{\delta}_j^T \epsilon^T) \cdot (\vec{\delta}_j + \epsilon \vec{\delta}_j) \quad (6.27)$$

$$= \vec{\delta}_j^T \cdot \vec{\delta}_j + \vec{\delta}_j^T (\epsilon + \epsilon^T + \epsilon^T \epsilon) \vec{\delta}_j. \quad (6.28)$$

Skalarni produkt  $\vec{\delta}_j^T \cdot \vec{\delta}_j$  iznosi  $d^2$ , a izraz  $(\epsilon + \epsilon^T + \epsilon^T \epsilon) \approx 2\epsilon$ . Apsolutna vrijednost vektora koji povezuje prve susjede onda postaje:

$$|\vec{\delta}'| = \sqrt{d^2 + 2\vec{\delta}_j^T \epsilon \vec{\delta}_j} \quad (6.29)$$

$$= d\sqrt{1 + \frac{2}{d^2}\vec{\delta}_j^T \epsilon \vec{\delta}_j} \quad (6.30)$$

$$\approx d + \frac{1}{d}\vec{\delta}_j^T \epsilon \vec{\delta}_j. \quad (6.31)$$

Uvrstivši novu apsolutnu vrijednost  $|\vec{\delta}'|$  dobivamo konačni izraz za koji se mijenja matrični element preskoka  $t$

$$\delta t_j = -\frac{\beta t_0}{d^2} \vec{\delta}_j^T \epsilon \vec{\delta}_j. \quad (6.32)$$

Izrazimo dane promjene u prethodno određenom koordinatnom sustavu:

$$\begin{aligned}\vec{\delta}_1 &= d \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \vec{\delta}_{2,3} &= d \begin{pmatrix} \mp\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Promjena intervala preskoka za vektor  $\vec{\delta}_1$  će onda biti:

$$\delta t_1 = -\frac{\beta t_0}{d^2} d^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6.33)$$

$$= -\beta t_0 \epsilon_{yy}, \quad (6.34)$$

dok će promjena za vektore  $\vec{\delta}_2$  i  $\vec{\delta}_3$  biti:

$$\delta t_{2,3} = -\frac{\beta t_0}{d^2} \frac{d^2}{4} \begin{pmatrix} \mp\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mp\sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix} \quad (6.35)$$

$$= -\frac{\beta t_0}{4} (3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} \pm 2\sqrt{3}\epsilon_{xy}). \quad (6.36)$$

## 7 Efektivni vektorski potencijal

### 7.1 Vektorski potencijal u okolini $K_1$ točke

Promatramo okolinu  $K_1$  točke u recipročnom prostoru kao jednu od točaka gdje se nalazi Fermijeva energija. Koordinate te točke su:

$$\vec{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

dok su vektori koji povezuju  $K_1$  točku s prvim susjedima:

$$\vec{\delta}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} d$$

te

$$\vec{\delta}_{2,3} = \begin{pmatrix} \mp\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \frac{d}{2}.$$

Hamiltonijan glasi:

$$H = -t_0 \sum_{\vec{q}} \sum_{j=1}^3 \left(1 - i\vec{q}\vec{\delta}_j - \frac{\delta t_j}{t_0}\right) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + h.c. \quad (7.1)$$

$$= -t_0 \sum_{\vec{q}} \sum_{j=1}^3 \left(1 - i\vec{q}\vec{\delta}_j + \frac{\beta}{d^2} \delta_j^T \epsilon \vec{\delta}_j\right) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + h.c.. \quad (7.2)$$

Sumiramo li član  $\sum_{j=1}^3 e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j}$  po prvim susjedima dobivamo nulu, tako da hamiltonijan sustava glasi:

$$H = -t_0 \sum_{\vec{q}} \sum_{j=1}^3 \left(-i\vec{q}\vec{\delta}_j + \frac{\beta}{d^2} \delta_j^T \epsilon \vec{\delta}_j\right) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + h.c. \quad (7.3)$$

gdje definiramo:

$$\tilde{\gamma}_{\vec{q}} \equiv - \sum_{j=1}^3 (-i\vec{q}\vec{\delta}_j + \frac{\beta}{d^2} \delta_j^T \epsilon \vec{\delta}_j) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j}, \quad (7.4)$$

pa je hamiltonijan u skraćenom zapisu:

$$H = -t_0 \sum_{\vec{q}} \tilde{\gamma}_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} + h.c.. \quad (7.5)$$

Sumirajmo sada faktor  $\tilde{\gamma}_{\vec{q}}$ :

$$\tilde{\gamma}_{\vec{q}} = - \sum_{j=1}^3 (i\vec{q}\vec{\delta}_j - \frac{\beta}{d^2} \delta_j^T \epsilon \vec{\delta}_j) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} \quad (7.6)$$

$$= -(i\vec{q}\vec{\delta}_1 - \frac{\beta}{d^2} \delta_1^T \epsilon \vec{\delta}_1) - (i\vec{q}\vec{\delta}_2 - \frac{\beta}{d^2} \delta_2^T \epsilon \vec{\delta}_2) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_2} - (i\vec{q}\vec{\delta}_3 - \frac{\beta}{d^2} \delta_3^T \epsilon \vec{\delta}_3) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_3} \quad (7.7)$$

$$= -(iq_y d - \beta \epsilon_{yy}) e^0 \quad (7.8)$$

$$- (-i \frac{d}{2} (\sqrt{3}q_x + q_y) - \frac{\beta}{4} (3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + 2\sqrt{3}\epsilon_{xy})) e^{+i\frac{2\pi}{3}} \quad (7.9)$$

$$- (+i \frac{d}{2} (\sqrt{3}q_x - q_y) - \frac{\beta}{4} (3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\sqrt{3}\epsilon_{xy})) e^{-i\frac{2\pi}{3}} \quad (7.10)$$

$$= -\frac{d}{4} [4iq_y - 4\frac{\beta}{d}\epsilon_{yy} + i(\sqrt{3}q_x + q_y)(1 - i\sqrt{3})] \quad (7.11)$$

$$+ \frac{\beta}{2d} (3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + 2\sqrt{3}\epsilon_{xy})(1 - i\sqrt{3}) \quad (7.12)$$

$$- i(\sqrt{3}q_x - q_y)(1 + i\sqrt{3}) + \frac{\beta}{2d} (3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\sqrt{3}\epsilon_{xy})(1 + i\sqrt{3})] \quad (7.13)$$

$$= -\frac{d}{4} [6q_x + 6iq_y + \frac{\beta}{d} (3\epsilon_{xx} - 3\epsilon_{yy}) - i6\frac{\beta}{d}\epsilon_{xy}]. \quad (7.14)$$

Konačno, faktor  $\tilde{\gamma}_{\vec{q}}$  iznosi:

$$\tilde{\gamma}_{\vec{q}} = -\frac{3}{2} d \{ \tilde{q}_x + i\tilde{q}_y \}, \quad (7.15)$$

gdje su  $\tilde{q}_x$  i  $\tilde{q}_y$ :

$$\tilde{q}_x = q_x + \frac{1}{2} \frac{\beta}{d} (\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) \quad (7.16)$$

$$\tilde{q}_y = q_y - \frac{\beta}{d} \epsilon_{xy}. \quad (7.17)$$

U okviru linearne aproksimacije u impulsu oko K-točke, komponente tenzora deformacije, generirane naprezanjem kristalne rešetke, ulaze u hamiltonijan analogno vektorskom potencijalu to jest minimalnom supstitucijom  $\vec{q} \rightarrow \vec{q} - \frac{e}{\hbar} \vec{A}$ . U hamiltonijanu se sada nalaze promijenjeni valni vektori:

$$H = \frac{3}{2} t_0 d \sum_{\vec{q}} [\tilde{q}_x + i\tilde{q}_y] a_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + h.c.. \quad (7.18)$$

”Vektorski potencijal” generiran mehaničkim naprezanjem nazivamo pseudovektorskim potencijalom, a magnetsko polje generirano istim,  $\vec{B} = rot(\vec{A})$ , pseudomagnet-skim poljem. Komponente valnog vektora iznose:

$$\tilde{q}_x \equiv q_x - \frac{e}{\hbar} A_x \quad (7.19)$$

$$\tilde{q}_y \equiv q_y - \frac{e}{\hbar} A_y. \quad (7.20)$$

Iz tih relacija dobivamo komponente pseudovektorskog potencijala:

$$A_x = -\frac{\hbar \beta}{e d} \frac{\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}}{2} \quad (7.21)$$

$$A_y = \frac{\hbar \beta}{e d} \epsilon_{xy}, \quad (7.22)$$

pa je onda u vektorskom zapisu:

$$\vec{A} = \frac{\hbar \beta}{e d} \begin{pmatrix} -\frac{\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}}{2} \\ \epsilon_{xy} \end{pmatrix}. \quad (7.23)$$

Pseudomagnetno polje generirano mehaničkim naprezanjem kristalne rešetke ima

orbitalne učinke na dinamiku elektrona analogne fizikalnom "pravom" magnetskom polju. Razlika je što se Zeemanski ne veže na spin elektrona i što ne narušava simetriju hamiltonijana s obzirom na vremensku inverziju.

## 7.2 Vektorski potencijal u okolini $K_2$ točke

Promotrimo sada okolinu točke  $K_2$ , koordinate te točke su:

$$\vec{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d} \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix},$$

dok su vektori koji povezuju  $K_2$  točku s prvim susjedima:

$$\vec{\delta}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} d$$

te

$$\vec{\delta}_{2,3} = \begin{pmatrix} \mp\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \frac{d}{2}.$$

Sumirajući član  $\sum_{j=1}^3 e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j}$  po prvim susjedima opet dobivamo nulu, tako da nam preostaje izračunati faktor  $\tilde{\gamma}_{\vec{q}}$  kao i za  $K_2$  točku:

$$\tilde{\gamma}_{\vec{q}} = - \sum_{j=1}^3 \left( i\vec{q}\vec{\delta}_j - \frac{\beta}{d^2} \vec{\delta}_j^T \epsilon \vec{\delta}_j \right) e^{-i\vec{K}\vec{\delta}_j} \quad (7.24)$$

$$= -(iq_y d - \beta \epsilon_{yy}) e^{-i\frac{2\pi}{3}} \quad (7.25)$$

$$- \left( -i\frac{d}{2}(\sqrt{3}q_x + q_y) - \frac{\beta}{4}(3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + 2\sqrt{3}\epsilon_{xy}) \right) e^0 \quad (7.26)$$

$$- \left( +i\frac{d}{2}(\sqrt{3}q_x - q_y) - \frac{\beta}{4}(3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\sqrt{3}\epsilon_{xy}) \right) e^{i\frac{2\pi}{3}} \quad (7.27)$$

$$= -\frac{d}{4}[-2iq_y + 2\frac{\beta}{d}\epsilon_{yy} + 2\sqrt{3}q_y] \quad (7.28)$$

$$+ i2\sqrt{3}\epsilon_{yy} - i2(\sqrt{3}q_x + q_y) - \frac{\beta}{d}(3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + 2\sqrt{3}\epsilon_{xy}) - i(\sqrt{3}q_x - q_y) \quad (7.29)$$

$$- (3q_x - \sqrt{3}q_y) + \frac{1}{2}\frac{\beta}{d}(3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\sqrt{3}\epsilon_{xy}) - \frac{i\sqrt{3}}{2}\frac{\beta}{d}(3\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\sqrt{3}\epsilon_{xy}) \quad (7.30)$$

$$= \frac{d}{4} \left\{ 3\left[ q_x + \frac{\beta}{d}\frac{\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}}{2} \right] + 3i\left[ q_y - \frac{\beta}{d}\epsilon_{xy} \right] \right. \quad (7.31)$$

$$\left. + 3\sqrt{3}i\left[ q_x + \frac{\beta}{d}\frac{\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}}{2} \right] - 3\sqrt{3}\left[ q_y - \frac{\beta}{d}\epsilon_{xy} \right] \right\}. \quad (7.32)$$

U faktoru  $\tilde{\gamma}_{\vec{q}}$  prepoznavamo  $\tilde{q}_x$  i  $\tilde{q}_y$  koju su isti kao i za  $K_1$  točku:

$$\tilde{q}_x = q_x + \frac{1}{2} \frac{\beta}{d} (\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) \quad (7.33)$$

$$\tilde{q}_y = q_y - \frac{\beta}{d} \epsilon_{xy}. \quad (7.34)$$

Dakle, faktor  $\tilde{\gamma}_{\vec{q}}$  iznosi:

$$\tilde{\gamma}_{\vec{q}} = \frac{3}{4} d [(\tilde{q}_x + i\tilde{q}_y) + \sqrt{3}i(\tilde{q}_x + i\tilde{q}_y)] \quad (7.35)$$

Ovaj postupak možemo ponoviti za sve K-točke i dobit ćemo iste  $\tilde{q}_x$  i  $\tilde{q}_y$ , a time i isti vektorski potencijal.

### 7.3 Pseudomagnetsko polje

Magnetsko polje dobivamo primjenom operatora rotacije na vektorski potencijal

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (7.36)$$

$$= \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & 0 \end{vmatrix} = \hat{z} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \equiv (0 \ 0 \ B). \quad (7.37)$$

Rezultantno pseudomagnetsko polje okomito je na površinu grafena. Potpuniji izraz za dobiveno pseudomagnetsko polje, koristeći tenzor deformacije je onda:

$$B = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \quad (7.38)$$

$$\frac{\partial A_x}{\partial y} = -\frac{\hbar \beta}{e d} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} (\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) \quad (7.39)$$

$$\frac{\partial A_y}{\partial x} = \frac{\hbar \beta}{e d} \frac{\partial}{\partial x} \epsilon_{xy}, \quad (7.40)$$

gdje su  $\epsilon_{xx}$ ,  $\epsilon_{yy}$  i  $\epsilon_{xy}$ :



$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x(x, y)}{\partial x}, \quad (7.41)$$

$$\epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y(x, y)}{\partial y}, \quad (7.42)$$

$$\epsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x(x, y)}{\partial y} + \frac{\partial u_y(x, y)}{\partial x} \right). \quad (7.43)$$

## 8 Dobivanje homogenog magnetskog polja

### 8.1 Dobivanje pseudomagnetskog polja trokutastom deformacijom

Nakon što smo izračunali da se mehaničkom deformacijom grafena može dobiti magnetsko polje, zanima nas kakvu deformaciju moramo primijeniti na kristalnu rešetku grafena da resultantno magnetsko polje bude homogeno.

F. Guinea, M.I. Katsnelson i A.K. Geim otkrili su da je moguće generirati uniformno pseudomagnetsko polje jakosti ekvivalentne desecima Tesla uz pomoć naprezanja trokutaste simetrije [9].

Dvodimenzionalno polje naprezanja  $u_{i,j}(x, y)$  vodi na baždarno polje

$$\vec{A} = \frac{\beta}{d} \begin{pmatrix} u_{xx} - u_{yy} \\ -2u_{xy} \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

gdje je  $d$  konstanta rešetke, a  $\beta = -\partial \ln t / \partial \ln d \approx 2$ . Također,  $t$  je "hopping" parametar među prvim susjedima, a x-os je odabrana u "zig-zag" smjeru kristalne rešetke grafena. Odmah primjećujemo da pseudomagnetsko polje može biti dobiveno samo pomoću neuniformnog naprezanja. Za izotropno naprezanje jednačba (8.1) vodi na  $\vec{A} = 0$ , dok za uniformno naprezanje dobivamo  $\vec{A} = const$ , što također vodi do isčezavanja pseudopolja [9]. Koristeći polarne koordinate  $(r, \theta)$ , jednačbu (8.1) možemo napisati kao:

$$A_r = \frac{\beta}{d} \left[ \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) \cos 3\theta \right. \quad (8.2)$$

$$\left. + \left( -\frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{u_\theta}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) \sin 3\theta \right] \quad (8.3)$$

$$(8.4)$$

$$A_\theta = \frac{\beta}{d} \left[ \left( -\frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) \cos 3\theta \right. \quad (8.5)$$

$$\left. + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} - \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) \sin 3\theta \right] \quad (8.6)$$

što rezultira pseudomagnetskim poljem

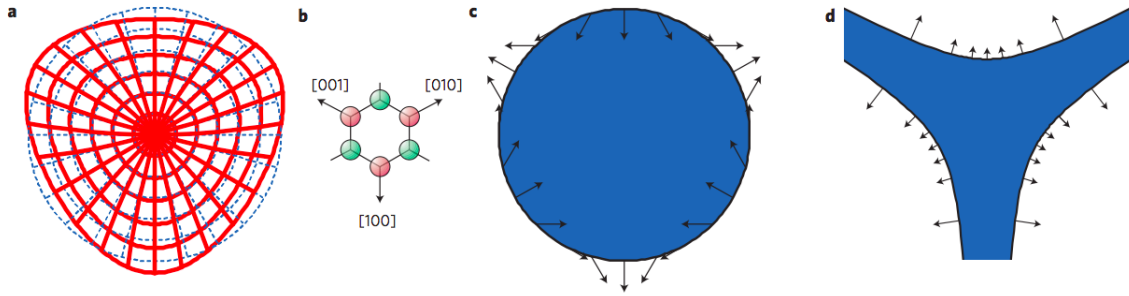
$$B = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = \frac{1}{r} \frac{\partial A_r}{\partial \theta} - \frac{\partial A_\theta}{\partial r} - \frac{A_\theta}{r}. \quad (8.7)$$

U radijalnoj reprezentaciji se lako pokaže da uniformno pseudomagnetsko polje dobivamo za:

$$u_r = cr^2 \sin 3\theta \quad (8.8)$$

$$u_\theta = cr^2 \cos 3\theta \quad (8.9)$$

gdje je  $c$  konstanta. Deformacija koju opisuju jednačba (8.8) i jednačba (8.9) i njegovo kristalografsko pozicioniranje su prikazani na slici 8.1 pod *a* i *b*, respektivno. Takva deformacija vodi do uniformnog pseudomagnetskog polja  $B = 8\beta c/d$  (u jedinicama  $\hbar/e \equiv 1$ ).



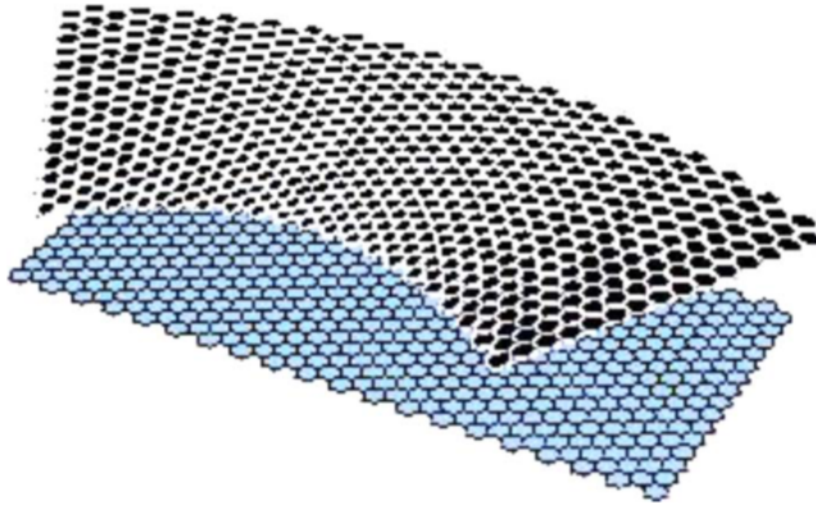
Slika 8.1: Dizajnirana deformacija može generirati uniformno pseudomagnetsko polje u grafenu. Pod a) Distorzija diska grafena koja je potrebna za generiranje uniformnog pseudomagnetskog polja. Originalan oblik diska prikazan je u plavoj boji. b) Orijentacija kristalne rešetke grafena u odnosu na deformaciju. Grafen je razvučen ili komprimiran uzduž ekvivalentnih kristalografskih smjerova  $\langle 100 \rangle$ . Dvije podrešetke grafena su prikazane u crvenoj i zelenoj boji. c) Distribucija sila koje bi se trebale primijeniti na rub diska da se stvori deformacija kao pod a). d) Taj oblik omogućuje generiranje pseudomagnetskog polja samo okomitim silama primijenjenim na rubove uzorka. Duljina strelica upućuje na potrebno lokalno naprezanje. (preuzeto sa [9])

Iako je opisana konfiguracija dobra za dobivanje pseudomagnetskih polja, nije baš praktična u smislu eksperimentalne realizacije istih zbog specifičnog oblika uzorka ili pak specifične konfiguracije sila koje bi se trebale primijeniti na uzorak u obliku diska.

Nadalje ću izložiti još jednu konfiguraciju kako dobiti homogeno pseudomagnetsko polje, a da je ipak nešto lakša za realizaciju.

## 8.2 Dobivanje pseudomagnetskog polja savijanjem trakica grafena

Jedna od ideja kako bi se moglo proizvesti skoro uniformno pseudomagnetsko polje je savijanje trakica grafena. To bi bilo izvedeno jednostavnim "in-plane" savijanjem, tj. deformacijom u ravnini u kojoj uzorak grafena leži.



Slika 8.2: Skica predložene geometrije savijanja koja bi generirala uniformno pseudomagnetsko polje. Pravokutnik grafena (donja slika) bi bio savijen u kružni luk (gornja). (preuzeto sa [10])

Koristeći koordinate koje su fiksirane u odnosu na saćastu rešetku grafena tako da x-os odgovara "zig-zag" smjeru, baždarno polje  $A$  možemo zapisati kao

$$A_x = \pm c \frac{\beta}{d} (u_{xx} - u_{yy}), \quad (8.10)$$

$$A_y = \mp c \frac{\beta}{d} u_{xy}, \quad (8.11)$$

gdje je  $\beta = -\partial \log(t) / \partial \log(a) \approx 2$ , a  $t \approx 3eV$  je elektronski "hopping" parametar između  $p_z$  orbitala susjednih atoma ugljika.  $d \approx 1.4\text{\AA}$  je udaljenost između prvih susjeda, a  $c$  je numerička konstanta koja ovisi o detaljima atomskih pomaka (displa-

cement) unutar jedinične ćelije, a  $u_{ij}$  je tenzor deformacije. Dva predznaka odnose se na dvije doline,  $K$  i  $K'$ , u Brillouinovoj zoni grafena.

U dvodimenzionalnim problema vezanim za elasticitet, pogodno je proučavati tenzor naprezanja,  $\sigma_{ij} = \partial\mathcal{F}/\partial u_{ij}$  gdje je  $\mathcal{F}$  elastična energija. Baždarno polje može se zapisati pomoću tenzora naprezanja kao

$$A_x = \pm c \frac{\beta}{2d\mu} (\sigma_{xx} - \sigma_{yy}), \quad (8.12)$$

$$A_x = \mp c \frac{\beta}{2d\mu} \sigma_{xy}, \quad (8.13)$$

gdje je  $\mu$  Laméov koeficijent. Moguće distribucije naprezanja koje opisuju dvodimenzionalne elastične sutave u ravnoteži, možemo zapisati pomoću kompleksnih varijabli  $z = x + iy$  i  $\bar{z} = x - iy$  kao

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 f(z, \bar{z})}{\partial y^2}, \quad (8.14)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\partial^2 f(z, \bar{z})}{\partial x^2}, \quad (8.15)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\partial^2 f(z, \bar{z})}{\partial x \partial y}, \quad (8.16)$$

gdje je  $f(z, \bar{z})$  ili realna ili imaginarna komponenta funkcije

$$\mathcal{F}(z, \bar{z}) = \mathcal{F}_1(z) + \bar{z}\mathcal{F}_2(z). \quad (8.17)$$

$\mathcal{F}_1(z)$  i  $\mathcal{F}_2(z)$  su analitičke funkcije. Obzirom da su i naprezanje i  $A$  dobiveni drugom derivacijom  $\mathcal{F}$ , dok je pseudomagnetsko polje  $B$  prva derivacija  $A$ , uniformno pseudomagnetsko polje zahtjeva da  $\mathcal{F}$  ima kubnu ovisnost o koordinati. Takva funkcija

mora imati slijedeću strukturu:

$$\mathcal{F}(x, y) = c_1(x + iy)^3 + c_2(x - iy)(x + iy)^2, \quad (8.18)$$

gdje su  $c_1$  i  $c_2$  proizvoljne konstante. Separiranjem realnog i imaginarnog dijela jednadžbe (8.18) nalazimo četiri moguće funkcije koje bi rezultirale uniformnim pseudomagnetskim poljem  $B$

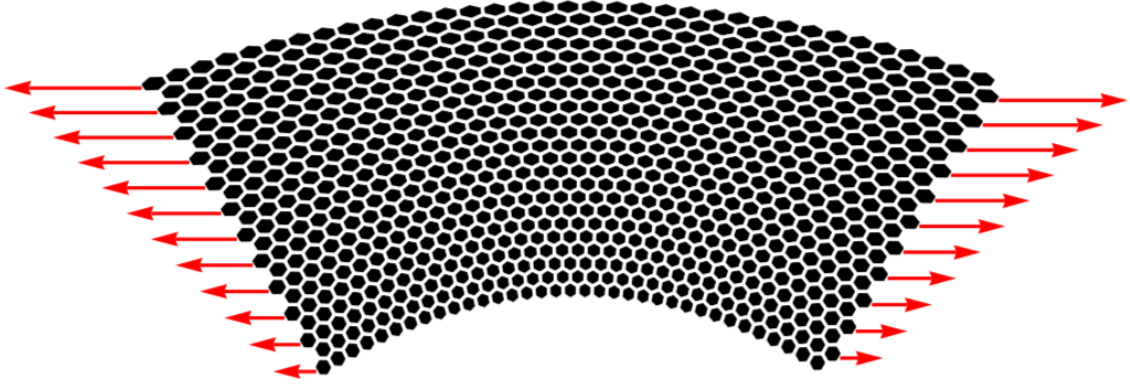
$$f(x, y) \propto \begin{cases} x^3 - 3xy^2 \\ x^3 + xy^2 \\ 3x^2y - y^3 \\ x^2y + y^3 \end{cases}. \quad (8.19)$$

Drugi par rješenja je ekvivalentan prvome zamjenom koordinatnih osi. Za orijentaciju kristalne rešetke koju smo koristili u jednadžbama (8.10) i (8.11), taj prvi par rješenja vodi na baždarno polje takvo da  $A_x \propto x$  i  $A_y \propto y$  po čemu je onda pseudomagnetsko polje  $B$  jednako nuli. Distribuciju naprezanja koja dovodi do uniformnog pseudomagnetskog polja možemo izraziti kao superpoziciju funkcija u redovima 3 i 4. Konfiguracija deformacije koja uključuje samo treću funkciju,  $f(x, y) \propto 3x^2y - y^3$  koja vodi na jedinstveno rješenje za oblik listića grafena gdje se takva distribucija naprezanja može dobiti isključivo normalnim silama. Na žalost, ta solucija nije jednostavno eksperimentalno izvediva. Daljnje mogućnosti nudi korištenje i treće u četvrte funkcije iz jednadžbe (8.18).

Daljnje ćemo izložiti deformacije potrebne da bi se stvorilo uniformno pseudomagnetsko polje  $B$  unutar pravokutnog listića grafena, širine  $W$  i duljine  $L$ , pomoću sila u ravnini uzorka primijenjenih na lijevom i desnom kraju kao što je skicirano na slici 8.2. Nedeformirani kristal zauzima područje  $-L/2 \leq x \leq L/2$ ,  $-W/2 \leq y \leq W/2$ . Napišimo sile na lijevoj (L) i desnoj (R) granici  $x = \pm L/2$  kao

$$F_x^{R,L} = f_0^{R,L} + f_1^{R,L}y, \quad (8.20)$$

$$F_y^{R,L} = 0. \quad (8.21)$$



Slika 8.3: Geometrija rastezanja koja vodi do uniformnog pseudomagnetskog polja unutar pravokutnog uzorka grafena. Sile se primijenjuju na dva suprotna kraja i njihov iznos pokazuju ucrtane strelice. (preuzeto sa [10])

Uvjet da su ukupna sila i ukupni moment sile nula zahtjeva da je  $f_0^R = -f_0^L = f_0$  i  $f_1^R = -f_1^L = f_1$  gdje su  $f_0$  i  $f_1$  konstante. Isčezavanje sila na gornjem i donjem rubu uzorka implicira da je tamo  $\sigma_{yy} = \sigma_{xy} = 0$ . Na lijevom i desnom kraju imamo

$$\sigma_{xx} = \sigma_0 \left( y + \frac{f_0}{f_1} \right), \quad (8.22)$$

$$\sigma_{xy} = 0, \quad (8.23)$$

gdje je  $\sigma_0$  konstanta koja ovisi o primijenjenim silama. Distribucija naprezanja unutar kristala, koja je kompatibilna s ovakvim rubnim uvjetima, generirana je funkcijom  $f(y) = C[y^3/3 + (f_0/f_1)(y^2/2)]$ . Tu funkciju možemo smatrati superpozicijom rješenja 3 i 4 izraza (8.19), koja vodi do uniformnog pseudomagnetskog polja  $B$  i konstantnog člana koji opisuje "uniaxial strain" i ne doprinosi dodatnom stvaranju pseudomagnetskog polja. Drugi član osigurava da je rešetka svuda rastegnuta, nema mogućnosti deformacija izvan njene ravnine. Unutar pravokutnog kristala,  $\sigma_{xx}$  ovisi samo o  $y$  na način opisan u jednadžbi (8.22), a  $\sigma_{yy} = \sigma_{xy} = 0$ . Od ove distribucije

naprezanja, dobivamo deformacije kristalne rešetke

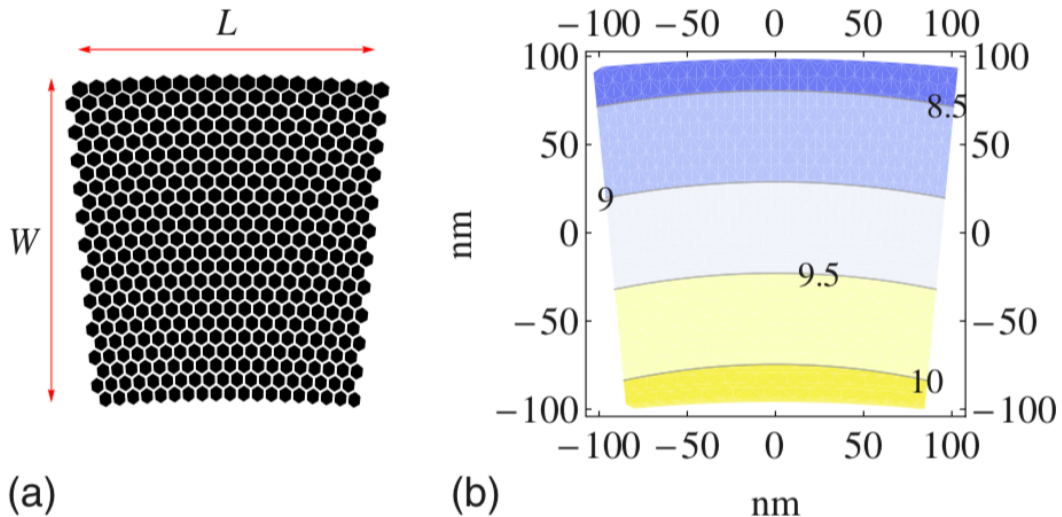
$$u_x = u_0(2xy + \frac{f_0}{f_1}x), \quad (8.24)$$

$$u_y = u_0[-x^2 - \frac{\lambda}{\lambda + 4\mu}(y^2 + \frac{f_0}{f_1}y)], \quad (8.25)$$

gdje je  $u_0$  konstanta koja definira maksimalno naprezanje. Ti odmaci od ravnoteže vode na zakrivljeni oblik prikazan na slici 8.2, koju su autori članka nacrtali koristeći Laméove koeficijente grafena,  $\lambda \approx 3.3eV\text{\AA}^{-2}$  i  $\mu \approx 9.4eV\text{\AA}^{-2}$ . Do maksimalne deformacije dolazi na gornjem i donjem rubu i može se procijeniti kao  $\bar{u}_{max} \approx u_0(W + f_0/f_1)$ . Pseudomagnetsko polje unutar kristala grafena je dano kao

$$B = c\beta \frac{2\Phi_0 u_0}{d} = c\beta \frac{\Phi_0 \bar{u}}{dW}, \quad (8.26)$$

gdje je  $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$ ,  $h$  je Planckova konstanta, a  $e$  jedinični naboj elektrona. Efektivna magnetska duljina je  $l_B = \sqrt{(aW)/(\beta\bar{u})}$ . Za  $W \approx 0.1$  mikron i  $\bar{u} \approx 10\%$  generirano efektivno polje je reda veličine  $20T$ . Eksperimentalno bi moglo biti teško stvoriti



Slika 8.4: Pravokutni uzorak grafena deformiran u luk. Radijusi donjeg i gornjeg ruba su  $R$  i  $R+W$ , respektivno. Plot je za  $R=5L=960\text{nm}$ . Maksimalna deformacija je  $10\%$ .(preuzeto sa [10])

točno takvu distribuciju stresa kao u izrazima (8.22) i (8.23). Unatoč tome, možemo



primijetiti da je oblik deformiranog kristala grafena prikazan na slici 8.2 liči na kružni luk. Dalje se razmatra geometrija u kojoj je spregnuti kristal grafena u obliku trakice savijen u kružni luk, kao što je skicirano u 8.2 i prikazano u više detalja na slici 8.2 pod a). Takva geometrija je standardna za za eksperimentalna istraživanja deformacije s jedinom razlikom u smjeru primjene savijanja.

Ako je radijus unutarnje kružnice koja definira donji rub grafena na slici 8.2 pod a)  $R$ , oblik deformiranog pravokutnika je dan sa

$$u_x(x, y) = (R + y)\sin\left[\frac{2x}{L}\arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right] - x, \quad (8.27)$$

$$u_y(x, y) = (R + y)\cos\left[\frac{2x}{L}\arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right] - R - y. \quad (8.28)$$

Nedeformirani pravokutni oblik se dobiva u granicama  $L/R \rightarrow 0$ . Pomaci u izrazima (8.27) i (8.28) mogu biti nazvijeni po potencijama  $R^{-1}$ , a vodeći članovi su:

$$u_x(x, y) = \frac{xy}{R}, \quad (8.29)$$

$$u_y(x, y) = -\frac{x^2}{2R}. \quad (8.30)$$

Ti pomaci nisu veći od maksimalnog  $(L, W)^2/R$ . Sljedeći članovi vode na korekcije vezane za maksimalni  $(L, W)^3/R^2$ . Deformacije u izrazima (8.29) i (8.30) podudaraju se s onima u jednadžbama (8.24) i (8.25) u limesu kad Poissonov omjer iščezava  $\lambda/(\lambda + 2\mu) \rightarrow 0$  i vode na uniformno  $B$  unutar uzorka. Maksimalna deformacija je  $L/2R$ . Za proizvoljnu vrijednost  $L/R$ , pseudomagnetsko polje je dano s

$$B(x, y) = -4c\frac{\beta\Phi_0}{dL}\arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\cos\left[\frac{2x}{L}\arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right] \times \left[1 - \frac{R + y}{L}\arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right]. \quad (8.31)$$

Za  $L/R \rightarrow 0$ , polje se svodi na  $B \approx -c(\beta\Phi_0)/(dR)$  što se slaže s izrazom (8.26). Relativne korekcije konstantnoj vrijednosti pseudomagnetskog polja su reda veličine  $L/2R$ , što je maksimalna deformacija. Primjer distribucije polja opisanog izrazom (8.31) je na slici 8.2 pod b).

## 9 Zaključak

Otkada je grafen prvi puta laboratorijski sintetiziran postao je mnogim znanstvenicima inspiracija za daljnje istraživanje njegovih posebnih svojstava, ali i za istraživanje drugih novih dvodimenzionalnih materijala. Jedno od veoma zanimljivih svojstava grafena je utjecaj mehaničke deformacije na elektronske nivoe poput magnetskog polja, što je bila glavna motivacija ovog rada.

U ovom radu smo početno definirali kristalnu strukturu grafena i definirali mu recipročnu rešetku, potom smo primijenili aproksimaciju čvrste veze kako bismo dobili elektronsku disperziju. Nakon linearizacije oko K-točaka dobivamo elektronsku disperziju koja linearno ovisi o valnom vektoru, što je karakterističan rezultat za grafen. Nadalje, pomoću korištenja teorije elasticiteta uveli smo mehaničku deformaciju kristalne rešetke grafena i promatrali smo njen utjecaj na krajnji hamiltonijan. Krajnji hamiltonijan zapisali smo u obliku poput hamiltonijana nedeformirane rešetke, ali s promijenjenim valnim vektorom. Promjenu valnog vektora opisali smo pomoću efektivnog vektorskog potencijala, poput magnetskog vektorskog potencijala, čija je rotacija pseudomagnetsko polje.

Nakon što smo dobili pseudopolje, koje bi na elektronske nivoe grafena moglo utjecati poput magnetskog polja, izložili smo rezultate iz dva članka [9] i [10] koji se bave mogućnošću dobivanja homogenog pseudomagnetskog polja dizajnom deformacije kristalne rešetke grafena.

## 10 Metodički dio

Valovi su posvuda. Bili oni svjesni toga ili ne, učenici se susreću s mnoštvom valnih pojava svaki dan. Valovi koji su već od prije učenicima poznati su zvučni valovi, radio valovi, valovi vidljive svjetlosti, mikrovalovi dok si podgrijavaju ručak, valovi na žici, pa i potresni valovi. Ovo je samo nekolicina primjera s kojima se svi danas susrećemo.

Proučavamo fiziku valova jer nam daje bogati uvid u fizikalni svijet koji pokušavamo razumjeti i opisati. Nakon početnog upoznavanja s harmoničkim oscilatorom i vrstama mehaničkog titranja poput gušenog i prisilnog titranja u trećem razredu gimnazije dolazi se do nastavne jedinice valova. Nakon samog uvođenja mehaničkog vala kao pojave te njegovog opisivanja, učenici će biti upoznati s fenomenima poput zvučnih valova, Dopplerovog efekta, rada policijskog radara i probijanja "zvučnog zida". Sve su te teme jako zanimljive učenicima, jer odmah vide njihovu konkretnu primjenjivost u životu. Nadalje, u četvrtom razredu gimnazije učenici se opet sreću s nastavnim jedinicama poput fotoelektričnog efekta, valnočestičnog modela elektromagnetskog zračenja i čestica tvari, modeli atoma i osnove spektroskopije, koje nije moguće usvojiti niti razumjeti bez prethodnog znanja o valnim pojavama.

Ogromna povezanost s drugim područjima fizike nastavnu jedinicu vezanu za valove čini jednom od važnih nastavnih jedinica u srednjoškolskom obrazovanju fizike.

Trenutno se nastava fizike većim dijelom temelji na tradicionalnom predavačkom tipu nastave gdje profesori drže klasična predavanja te se razumijevanje gradiva ne postiže tako često zbog pasivnosti učenika u nastavi. Istraživanja su pokazala da nastava fizike zahtjeva od učenika visoki intelektualni angažman što najčešće nije moguće postići tradicionalnim pristupom. Nastava fizike se počela poboljšavati pokušavajući uvesti interaktivnu i istraživački usmjerenu nastavu, oblik nastave koji je u ovoj pripremi predviđen za izvođenje sata.

Interaktivnost u nastavi nužna je za razvijanje razmišljanja, jer potiče verbalizaciju ideja (bilo govorom, bilo pisanjem), omogućava nastavniku uvid u stupanj razvijenosti učeničkih koncepata i eventualne učeničke poteškoće, te potiče aktivno učenje i produblјivanje razumijevanja kroz postavljanje dobro odabranih pitanja ključnih za razvoj razumijevanja određene teme. Interaktivnost također potiče intelektualni angažman učenika tijekom nastave i omogućava interveniranje nastavnika u razvoj

učeničkog razumijevanja još tijekom nastave. Time postaje moguće već na nastavi razvijati i provjeravati stupanj razvijenosti učeničkog razumijevanja ključnih ideja. [17]

Istraživački tip nastave utemeljen s jedne strane na široko prihvaćenom konstruktivističkom modelu učenja, prema kojem učenici samostalno (premda većinom nesvjesno) grade (konstruiraju) svoje znanje od svojih već postojećih znanja i novih informacija te, s druge strane, na činjenici da je fizika u svojoj biti istraživačka disciplina, što bi i nastava fizike trebala odražavati. Nastava se može smatrati istraživački usmjerenom, ako su učenici tijekom nastave potaknuti da: traže odgovore na znanstvena pitanja, formuliraju i testiraju hipoteze, osmišljaju i provode pokuse, samostalno zapisuju svoja predviđanja, opažanja i zaključke, prezentiraju drugima svoje rezultate i zaključke i argumentirano ih brane. [17]

## **10.1 Nastavna priprema: Nastanak i vrste valova**

Nastavna priprema na temu "Nastanak i vrste valova" predviđena je za dva školska sata za treći razred prirodoslovno-matematičke gimnazije. Vrsta nastave je interaktivna istraživački usmjerena nastava. Nastavni sat je zamišljen da se provodi frontalno. Nastavne metode koje se koriste tijekom provođenja sata su: demonstracija pokusa/simulacija, metoda razgovora-usmjerena rasprava, konceptualna pitanja s karticama i metoda pisanja/crtanja. Da bi se nastavni sat proveo u zamišljenom obliku, od nastavnih pomagala i sredstava je potrebno: ploča, dugačka metalna opruga, plastična čaša, kadica s vodom i grafoskop.

### **Učenik će nakon sata moći:**

- Opisati valne pojave i objasniti prijenos energije kod valova
- razlikovati i opisati vrste valova
- objasniti razliku između transverzalnog i longitudinalnog vala
- razlikovati gibanje čestice valnog sredstva i gibanje vala
- navesti i opisati temeljne veličine za opis vala kao što su valna duljina, period, brzina vala
- Matematički opisati putujući val te interpretirati značenje matematičkog zapisa vala

**Učenik će razvijati sposobnosti:** komunikacije, znanstvenog i logičkog zaključivanja, usmenog, pismenog i matematičkog izražavanja, istraživačkog pristupa problemima, apstraktnog razmišljanja, proporcionalnog zaključivanja, analiziranja, opažanja i opisivanja problema.

**Učenik će tijekom sata usvajati vrijednosti poput:** aktivnog sudjelovanja u nastavi, pozitivnog odnosa prema radu, uljudnosti i poštivanja drugih učenika, formiranja vlastitog mišljenja na temelju činjenica i argumentiranja istog, izražavanja vlastitog mišljenja i uvažavanja tuđeg.

**Uvodni dio sata: otvaranje problema, prikupljanje ideja, upoznavanje pojave**

**UVODNI PROBLEM:** Kako nastaju valovi? Što vidite kada bacite kamenčić u more?

**DEMONSTRACIJSKI POKUS:** Na grafoskop postavimo prozirnu kadicu s malo vode i kapnemo kap vode na površinu.

**Što opažate? Što sam stvorila kapanjem na površinu vode?** Učenici mogu obrazložiti opaženu pojavu s prethodnim znanjem o valovima iz osnovne škole i svakodnevnog života. Kapanjem se stvorio kružni val na površini vode u kadici. Razrednom raspravom dolazi se do toga da se poremećaj širi kroz medij. Nakon što su učenici opazili pojavu, zapisujemo naslov na ploču.

**Sada ćemo umjesto kapi iskoristiti ravnalo kako bismo proizveli poremećaj. Što očekujete sada?** Na elektromotor pričvrstimo ravnalo i njime zatitramo površinu vode. Učenici sada opažaju ravne valove na vodi.

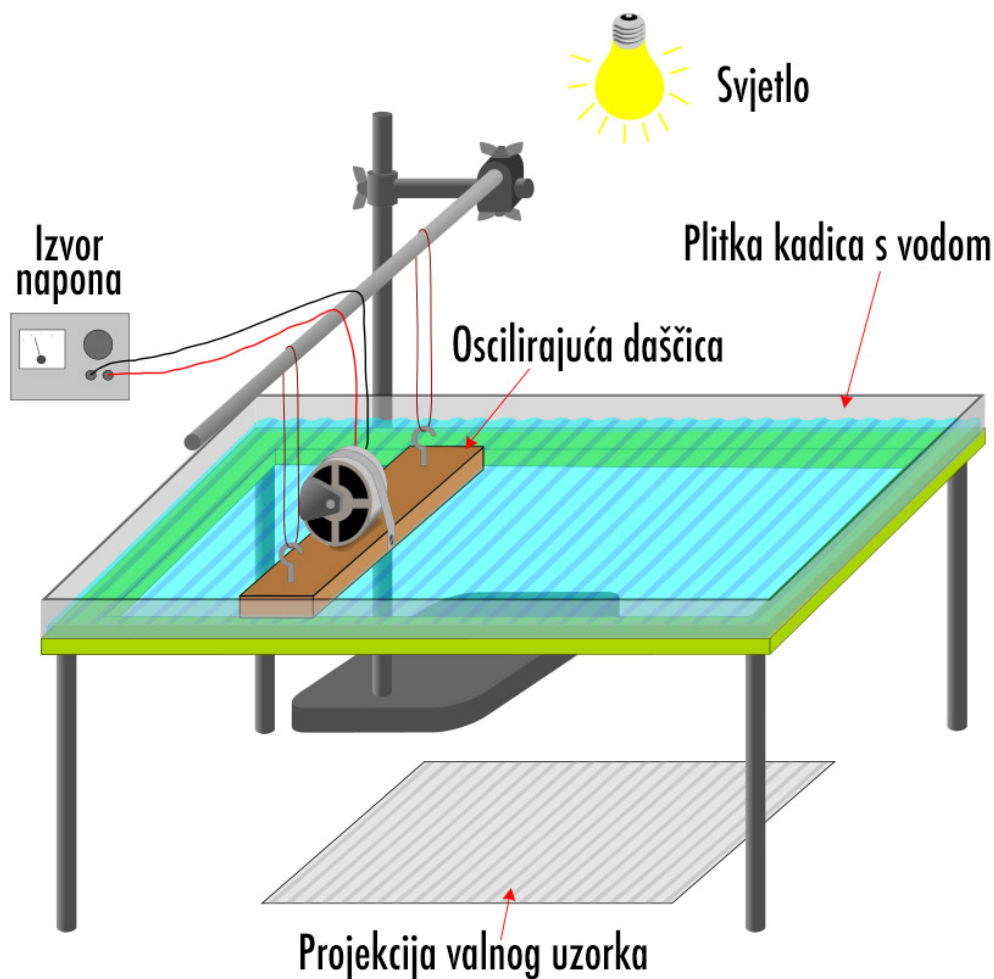
**Koje su karakteristične veličine kojima biste opisali harmonički oscilator?** Učenici nabrajaju, period, frekvencija, amplituda. . .

**Ako zavežemo harmonijski oscilator za kraj niti, što će se s njom dogoditi za trajanje jednog perioda? Skicirajte to.** Provjeravamo što su učenici nacrtali i potom palimo simulaciju sa stranice [https://phet.colorado.edu/sims/html/wave-on-a-string/latest/wave-on-a-string\\_en.html](https://phet.colorado.edu/sims/html/wave-on-a-string/latest/wave-on-a-string_en.html) gdje puštamo harmonički oscilator da "radi" točno jedan titraj i onda zaustavljamo. Učenici promatraju i ispravljaju po potrebi svoje skice. Učenici opažaju da se niti od izvora širi val. Imenuju pojavu i zapisuju u bilježnice. Definiramo veličinu koja će nam koristiti u opisu valova. Valna duljina  $\lambda$  je udaljenost na koju se val proširi za vrijeme jednog titraja izvora vala.

Brzinu kojom se val širi kroz medij označavat ćemo s  $v$ .

**Kako su povezani brzina širenja vala, frekvencija i valnu duljina? Koliki put prijeđe val za vrijeme jednog perioda?**

$$v = \lambda/T, v = \lambda f$$



Slika 10.1: Ilustracija eksperimentalnog postava plitke kadice s vodom koja se postavlja na grafoskop za prikaz nastanka ravnih i kružnih valova. Preuzeto sa [18]

*Središnji dio sata: konstrukcija modela – fizikalni i matematički opis pojave*

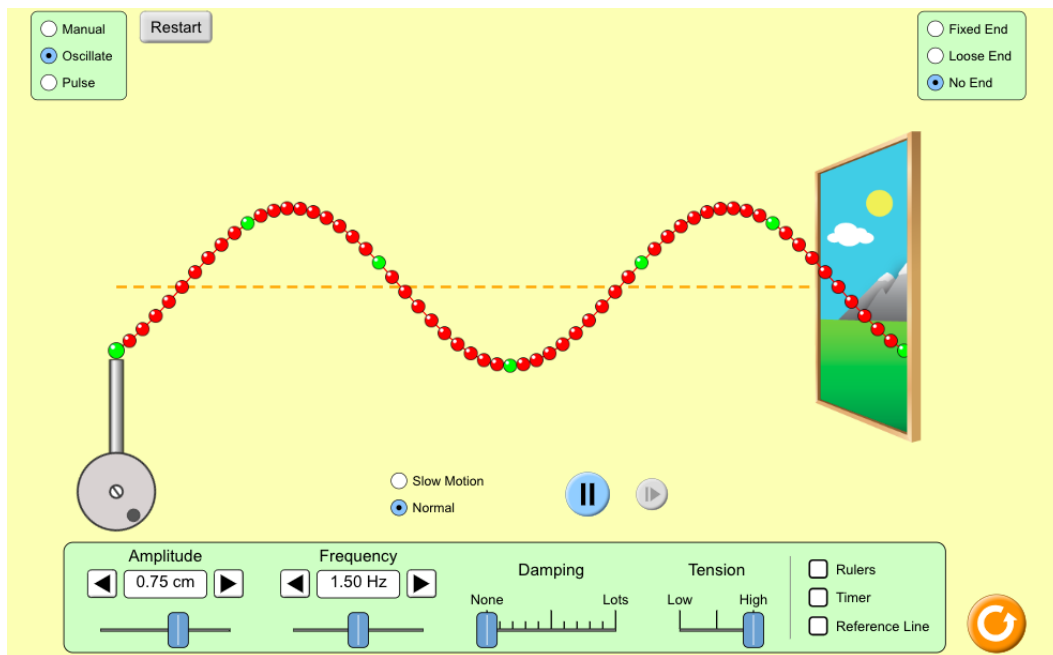
**1. ISTRAŽIVAČKO PITANJE:** Što valovi prenose?

**OPSERVAČKI POKUS:** Postavimo plastičnu čašu na pod pored razvučene dugačke opruge.

Što će se dogoditi s čašom ako sada napravim val na opruzi? Kako to objašnjavate? Učenici iznose svoje ideje. Čaša će «odletjeti», biti bačena u stranu. Opruga ju je udarila kako je val prošao po njoj.

Kako to da se čaša počela gibati, a mirovala je? Dobila je kinetičku energiju. Razrednom raspravom dolazi se do zaključka da valovi prenose energiju.

**2. ISTRAŽIVAČKO PITANJE:** Kakve vrste valova postoje?



Slika 10.2: Simulacija sa web stranice [https://phet.colorado.edu/sims/html/wave-on-a-string/latest/wave-on-a-string\\_en.html](https://phet.colorado.edu/sims/html/wave-on-a-string/latest/wave-on-a-string_en.html).

Iako je ova tema već "odrađena" u osnovnoj školi, učenici bi trebali još jednom ponoviti ovu raspravu. Zatražimo učenike da predlože još neki način kako da se proizvede val, a da nije na površini vode. Učenici predlažu svoje ideje i uz pomoć nekoliko učenika dobrovoljaca izvodimo pokus.

**POKUS 1:** Postavimo dugačku oprugu na pod i razvučemo ju po cijelom razredu uz pomoć učenika. Objasnimo kako ćemo zatitrati oprugu lijevo-desno i kako trebaju promatrati što vide duž opruge, pa to i zapisati.

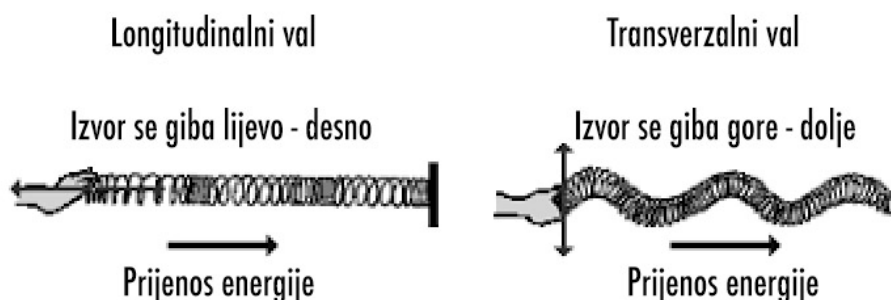
**Što ste opazili? Kakvog je oblika poremećaj kojeg smo dobili? Kako se giba poremećaj kojeg smo dobili? Je li se cijela opruga micala s jednog kraja na drugi?** Poremećaj kojeg smo dobili je u obliku brijega i dola, giba se duž opruge dok je opruga ostala tamo gdje je i bila. Jedan zavoj potom obilježimo obojanom vrpcom tako da ga svi učenici mogu vidjeti.

**Što predstavlja ova vrpca kojom smo obilježili dio opruge? Kako će se gibati oznaka kada do nje stigne val?** Vrpca predstavlja česticu sredstva vala, prikupljamo učeničke pretpostavke o tome kako će se gibati, te onda izvodimo pokus uz pomoć učenika dobrovoljca.

**Što ste opazili, kako se gibala oznaka kada je do nje stigao val?** Oznaka se micala lijevo-desno oko svojeg ravnotežnog položaja dok val prolazi dijelom opruge na kojem se ona nalazi.



U kojem se smjeru širi val, a u kojem smjeru se giba oznaka? Val se giba od nas pa duž opruge, dok se oznaka giba okomito na smjer širenja vala. Takav val koji ste sada opazili, gdje medij titra okomito na smjer širenja vala zvat ćemo transverzalni. Pišemo to na ploču.



Slika 10.3: Ilustracije longitudinalnog i transverznog vala na dugačkom opruzi. Od učenika se traži skica ovoga tipa. Preuzeto sa [19]

**POKUS 2:** Objasnimo učenicima kako ćemo sada naglo skupiti i rastegnuti oprugu u smjeru osi opruge. Tražimo da zapišu svoje pretpostavke o tome kako će se opruga ponašati, pa onda izvedemo pokus uz pomoć nekog drugog učenika dobrovoljca.

**Što ste opazili? Kako se giba poremećaj na opruzi? Kakvog je oblika val kojeg smo proizveli? Skicirajte.** Prikupljamo učenička opažanja, kad oprugu stisnemo i povučemo na tom mjestu nastane zgušnj enje zavoja, pa onda razrjeđenje zavoja. Ta zgušnj enja i razrjeđenja se šire dalje duž opruge. Skica se nalazi na 10.1. **Kako se gibala oznaka na opruzi? U kojem smjeru se širi val, a u kojem smjeru se gibaju oznake?** Oznaka na opruzi se giba u smjeru širenja vala. Oznake se gibaju naprijed-natrag, u smjeru u kojem se giba val.

Uvodimo naziv longitudinalni val, val u kojem sredstvo titra u smjeru širenja vala. **Jeste li čuli za neki longitudinalni val?** Najpoznatiji primjer longitudinalnog vala je zvučni val.

### 3. ISTRAŽIVAČKO PITANJE: Kako matematički opisati val?

**INTERAKTIVNI IZVOD:** U ovoj vrsti izvoda postavljmo učenicima početni problem i navodimo ih korak po korak da ga sami riješe. Sustav koji promatramo je harmonijski oscilator koji je pričvršćen za konop i titranjem proizvodi val na njemu.

Želimo odrediti elongaciju  $y$  čestice sredstva na položaju  $x$ , u trenutku  $t$ .

**Kako titra izvor?**  $y = A\cos(2\pi t/T)$

**Koliko će vremena trebati valu, brzine  $v$ , do neke točke sredstva udaljene od izvora za  $x$ ?**  $\Delta t = x/v$

**Usporedite elongaciju sredstva na položaju  $x$  u trenutku  $t$  s elongacijom izvora.**

**Kad je izvor imao tu elongaciju?** Elongacija na položaju  $x$  u trenutku  $t$  jednaka je elongaciji izvora u ranijem trenutku  $(t - x/v)$ .

Jednadžba vala koji putuje u +smjeru x-osi:

$$y(x, t) = A\cos\frac{2\pi}{T}\left(t - \frac{x}{v}\right) \quad (10.1)$$

**Čemu je jednak umnožak  $vT$ ?** Valnoj duljini  $\lambda$ .

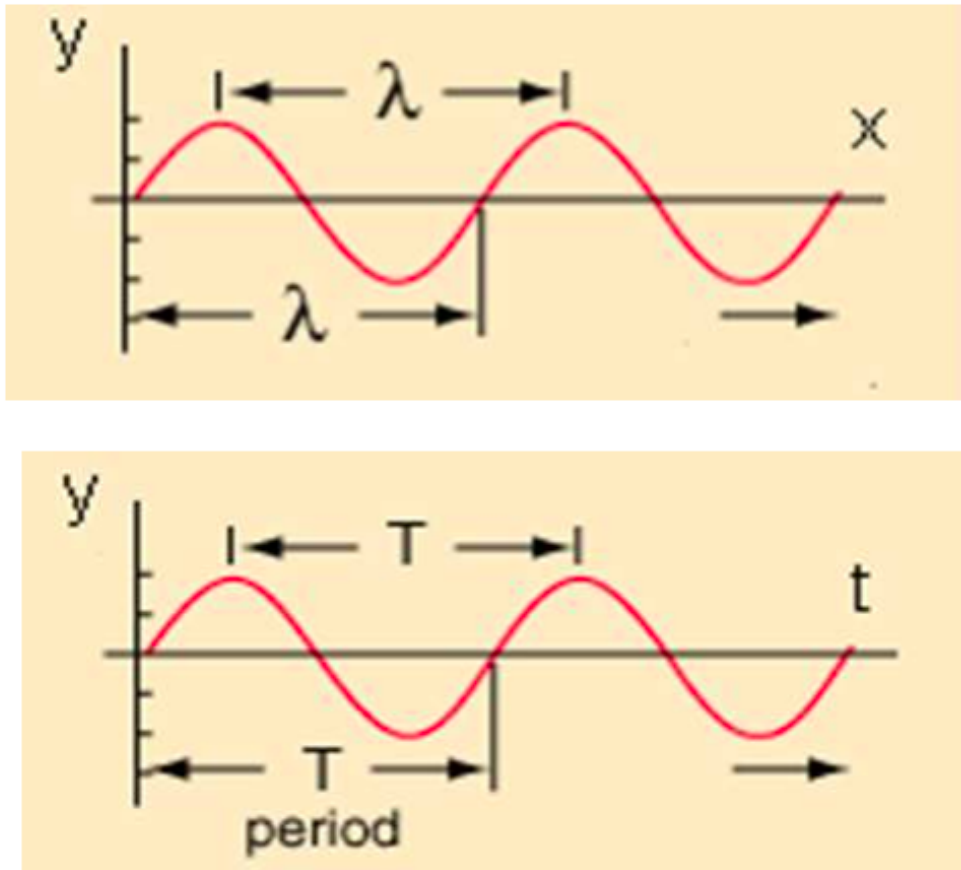
**Kako onda možemo još izraziti jednadžbu vala?**

$$y(x, t) = A\cos 2\pi\left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda}\right) \quad (10.2)$$

**Što se mijenja ako se val giba u  $-x$  smjeru?** Brzina mijenja predznak.

$$y(x, t) = A\cos 2\pi\left(\frac{t}{T} + \frac{x}{\lambda}\right) \quad (10.3)$$

**Što kaže ova jednadžba? Prikažite ju grafički.** Jednadžba vala govori nam koja je elongacija vala u točki  $x$  u trenutku  $t$ . Možemo ju prikazati grafički na dva načina. Možemo crtati ovisnost  $y(t)$  za fiksnu točku u prostoru ili možemo crtati  $y(x)$  za fiksni trenutak u vremenu.



Slika 10.4: Ilustracija  $y(x)$  i  $y(t)$  grafa za harmonijski val. Prva slika je za  $t = T/4$ , a druga za  $x = \lambda/4$  iz uvjeta  $2\pi x/\lambda = \pi/2$  odnosno  $2\pi t/T = \pi/2$ .

**Završni dio sata: primjena modela, provjera ostvarenosti obrazovnih ishoda**

Prvi zadatak je zamišljen kao konceptualno pitanje s karticama, druga dva zadatka su predviđena za rad učenika u parovima, dok je četvrti zadatak osmišljen da se učenike potakne na daljnje istraživanje i kao učenički projekt.

**ZADATAK** Elongacija  $y$ , progresivnog vala koji se giba u pozitivnom smjeru  $x$  osi, u bilo kojem trenutku  $t$  dana je jednadžbom:  $y = y_0 \sin 2\pi(bt - cx)$  Koja od navedenih kombinacija točno opisuje valnu duljinu  $\lambda$  i frekvenciju  $f$  tog vala? Tablica podataka je na slici 10.5.

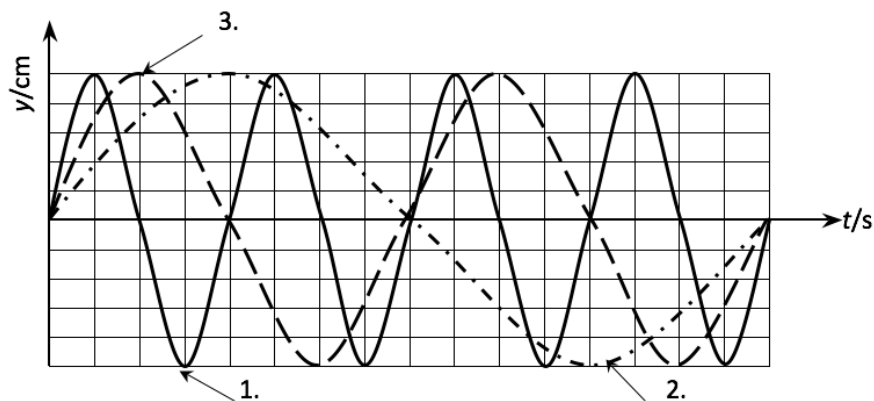
**ZADATAK** Tri vala šire se duž tri potpuno jednake žice. Na slici su prikazane elongacije jedne čestice žice u ovisnosti o vremenu za svaki od valova od 1. do 3. Poredajte valne duljine valova po veličini. Slika se nalazi na 10.6.

Zadatak provjerava obrazovne ishode:

odgovor	$\lambda$	$f$
a)	$2\pi c$	$2\pi b$
b)	$a$	$b$
c)	$c$	$b/2\pi$
d)	$1/c$	$b$
e)	$1/a$	$2\pi/b$

Slika 10.5: Tablica prikazana učenicima u zadatku.

- navesti i opisati temeljne veličine za opis vala kao što su valna duljina, period, brzina vala
- Matematički opisati putujući val te interpretirati značenje matematičkog zapisa vala



Slika 10.6: Graf iz kojeg učenici moraju poredati valne duljine prikazanih valova po veličini

**ZADATAK** Izvor vala titra prema jednadžbi  $y = 2\sin(t)$ . Sve veličine su iskazane u SI sustavu. Val se širi duž homogenog sredstva u pozitivnom smjeru x osi stalnom faznom brzinom od  $100\text{m/s}$ .

- Koliki je period titranja izvora vala?
- Kolika je valna duljina?
- Napišite jednadžbu vala.

R: a) 2s b) 200mc)  $y = 2\sin(t-x/100)$ .

Zadatak provjerava obrazovne ishode:

- navesti i opisati temeljne veličine za opis vala kao što su valna duljina, period, brzina vala
- Matematički opisati putujući val te interpretirati značenje matematičkog zapisa vala

**PROJEKTNI ZADATAK** Kakav je zvuk val? Osmislite projekt kako biste dokazali da je zvuk baš takva vrsta vala. Pribor koji vam je na raspolaganju je balon, plastična cijev, gumica (ili ljepilo) i svjećica!

Ovaj zadatak provjerava jesu li učenici usvojili skoro sve nove koncepte iz nastavne jedinice i potiče na kreativno razmišljanje. Učenici trebaju napraviti "bubanj" od plastične cijevi kojemu će opna biti balon. Kada udare u bubanj, svi će čuti zvuk. Promatrat će u koju stranu će se plamen svjećice odmaknuti, to će im reći u kojem smjeru titra medij. Podatak o smjeru širenja vala imaju jer su sami udarili bubanj i znaju u kojem je to bilo smjeru.

Zadatak provjerava obrazovne ishode:

- razlikovati i opisati vrste valova
- objasniti razliku između transverzalnog i longitudinalnog vala
- razlikovati gibanje čestice valnog sredstva i gibanje vala

## Bibliography

- [1] Why Is Graphene Important? (21.8.2018.)  
<https://www.thoughtco.com/why-is-graphene-important-603950>
- [2] Graphene -A Simple introduction (20.8.2018.)  
<https://www.explainthatstuff.com/graphene.html>
- [3] New Atlas: Could graphene ripples be tapped into as a clean, limitless energy source? (20.8.2018.)  
<https://newatlas.com/graphene-motion-limitless-energy/52319/>
- [4] (21.8.2018.) <https://scienceofparkinsons.com/tag/andre-geim/>
- [5] (22.8.2018.) Cauchy stress tensor
- [6] L.D. Landau and E.M. Lifshitz : Theory of elasticity, Second Revised and Enlarged edition : Course of Theoretical Physics, Vol. 7  
Institute of Physical Problems  
USSR Academy of Sciences
- [7] Alexander L. Kitt, Vitor M. Pereira, Anna K. Swan, and Bennett B. Goldberg:  
Lattice-corrected strain-induced vector potentials in graphene  
Phys. Rev. B 85, 115432 (2012)
- [8] R M Ribeiro et al: Strained graphene: tight-binding and density functional calculations  
New J. Phys. 11 115002 (2009)
- [9] F. Guinea; M.I. Katsnelson; A.K. Geim : Energy gaps and zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering.  
Nature Physics 6, 30-33 (2010)
- [10] F. Guinea; A.K. Geim; M.I. Katsnelson; K.S. Novoselov : Generation quantizing pseudomagnetic fields by bending graphene ribbons.  
Phys. Rev. B 81, 035408 (2010)
- [11] (28.8.2018.) <http://www.westerville.k12.oh.us/userfiles/4161/Classes/9094/Slinky>

- [12] (28.8.2018.) [https : //phet.colorado.edu/sims/html/wave – on – a – string/latest/wave – on – a – string\\_en.html](https://phet.colorado.edu/sims/html/wave-on-a-string/latest/wave-on-a-string_en.html)
- [13] Jakov Labor: FIZIKA 3 Udžbenik za treći razred gimnazije, 2. izdanje  
Alfa, Zagreb, 2008.
- [14] Jakov Labor: FIZIKA 3 Udžbenik za treći razred srednjih strukovnih škola s četverogodišnjim programom fizike, 1. izdanje  
Alfa, Zagreb, 2009.
- [15] Nada Brković: FIZIKA 3 Udžbenik za treći razred gimnazija A inačica programa, LUK d.o.o. , Zagreb, 1998.
- [16] Dr. sc. Rudolf Krsnik: FIZIKA 3 Udžbenik za treći razred gimnazije B-inačica programa  
Školska Knjiga, Zagreb, 1998.
- [17] Planinić, M. (2015). Istraživački usmjerena nastava fizike – kako je približiti školskoj zbilji?, Zbornik XII. hrvatskog simpozija o nastavi fizike, Zagreb: HFD, 8 – 15.
- [18] Ripple tank (30.8.2018.)[https : //en.wikipedia.org/wiki/Ripple\\_tank](https://en.wikipedia.org/wiki/Ripple_tank)
- [19] <http://www.westerville.k12.oh.us/userfiles/4161/Classes/9094/Slinky>
- [20] Brković, Nada; Zbirka zadataka iz fizike, Zagreb 2001