

RAZMATRANJA ENERGIJA ADSORPCIJE ATOMA EUROPIJA NA LATERALNIM HETEROSTRUKTURAMA GRAFENA I HEKSAGONALNOG BOROVOG NITRIDA

Dušić, Vanja

Master's thesis / Diplomski rad

2020

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Physics / Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za fiziku**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:160:010659>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2025-02-17**



Repository / Repozitorij:

[Repository of Department of Physics in Osijek](#)



SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU

ODJEL ZA FIZIKU



VANJA DUŠIĆ

**RAZMATRANJA ENERGIJA ADSORPCIJE ATOMA
EUROPIJA NA LATERALNIM
HETEROSTRUKTURAMA GRAFENA I
HEKSAGONALNOG BOROVOG NITRIDA**

Diplomski rad

Osijek, 2020.

SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU

ODJEL ZA FIZIKU



VANJA DUŠIĆ

**RAZMATRANJA ENERGIJA ADSORPCIJE ATOMA
EUROPIJA NA LATERALNIM
HETEROSTRUKTURAMA GRAFENA I
HEKSAGONALNOG BOROVOG NITRIDA**

Diplomski rad

predložen Odjelu za fiziku Sveučilišta J. J. Strossmayera u Osijeku radi stjecanja zvanja magistra
edukacije fizike i informatike

Osijek, 2020.

Ovaj diplomski rad izrađen je u Osijeku pod vodstvom mentorice doc. dr. sc. Maje Varge Pajtler u sklopu Sveučilišnog diplomskog studija Fizike i informatike na Odjelu za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku.

Zahvale

Zahvaljujem se svojoj mentorici doc. dr. sc. Maji Vargi Pajtler na strpljenju, susretljivosti, pomoći i vodstvu te na brojnim savjetima koji su mi olakšali izradu ovoga rada. Neizmjerno sam zahvalan što je unatoč svome rasporedu uvijek imala dovoljno vremena za razgovor i što mi je pomogla u ostvarenju ciljeva.

Zahvaljujem se svojim kolegicama i kolegama na pomoći te se posebno zahvaljujem kolegi, prijatelju i kumu Dejanu Gemeriju koji mi je bio velika potpora tijekom studija.

Zahvaljujem se svojoj obitelji i prijateljima na pruženoj podršci.

Zahvaljujem se svojoj supruzi Lauri na razumijevanju i ljubavi. Uz njenu sam pomoć i podršku lakše prebrodio sve izazove koji su se našli ispred mene.

Najveću zahvalnost izražavam svojim roditeljima Branimiru i Sanji Dušić koji su vjerovali u mene i uvijek bili potpora u svim trenucima. Hvala im na strpljenju, savjetima i ljubavi. Bez njihove pomoći moja se postignuća nikada ne bi ostvarila.

V. D.

Sadržaj

1. UVOD	1
2. NANOMATERIJALI	2
2.1. OSNOVNO O NANOMATERIJALIMA I NJIHOVA PODJELA.....	2
2.2. PRIMJENA NANOMATERIJALA I NJIHOVA SVOJSTVA.....	5
3. TEORIJA FUNKCIONALNA GUSTOĆE	7
3.1. UVOD.....	7
3.2. HOHENBERG – KOHNOVI TEOREMI.....	8
3.3. KOHN – SHAMOVE JEDNADŽBE.....	9
3.4. BAZA RAVNIH VALOVA.....	11
3.5. UZORKOVANJE PRVE BRILLOUINOVE ZONE.....	11
3.6. PSEUDOPOTENCIJALI.....	12
4. RAČUNALNA PODRŠKA	14
5. GRAFEN	15
6. HEKSAGONALNI BOROVI NITRID (HBN)	16
7. LATERALNE HETEROSTRUKTURE GRAFENA I BOROVOG NITRIDA	17
8. REZULTATI	19
8.1. PARAMETRI KONVERGENCIJE.....	19
8.2. ENERGIJA ADSORPCIJE U ODNOSU NA RAZLIČITE POLOŽAJE ATOMA EUROPIJA.....	20
8.3. ENERGIJA ADSORPCIJE U OVISNOSTI O ŠIRINI TRAKICE I KONCENTRACIJI ADSORBIRANIH ATOMA EUROPIJA.....	24
9. ZAKLJUČAK	41
DODATAK A – SCF ULAZNA DATOTEKA	43
DODATAK B – TABLICE REZULTATA	44
LITERATURA	53
ŽIVOTOPIS	55

RAZMATRANJA ENERGIJA ADSORPCIJE ATOMA EUROPIJA NA LATERALNIM HETEROSTRUKTURAMA GRAFENA I HEKSAGONALNOG BOROVOG NITRIDA

VANJA DUŠIĆ

Sažetak

Ovo se istraživanje temelji na teoriji funkcionala gustoće, a područje koje smo proučavali jesu 2D materijali. Grafen i heksagonalni borov nitrid, koji čine temelj za istraživanje, jesu 2D materijali koji zajedno čine heterostrukturu na koju smo dodavali atom europija i nakon toga određivali energiju adsorpcije. Istraživanje smo proveli u tri koraka. U prvom smo koraku odredili maksimalnu energiju ravnih valova i broj k-točaka jer su nam ti parametri bili ključni za ostale proračune. U drugom smo koraku odredili ovisnost energije adsorpcije o položaju iznad nanotrakice na kojem se nalazi atom europija. U trećem koraku, odredili smo kako se mijenja energija adsorpcije u ovisnosti o širini trakice i koncentraciji adsorbiranih atoma europija. Za sve proračune koristili smo se računalnim softverom Quantum ESPRESSO. Rad je podijeljen u nekoliko poglavlja u kojima ćemo raspraviti o nanomaterijalima, teoriji funkcionala gustoće, korištenoj računalnoj podršci i dakako o detaljima proračuna na kojima se temelji zaključak rada.

(55 stranica, 31 slika, 18 tablica, 23 literaturnih navoda)

Rad je pohranjen u knjižnici Odjela za fiziku

Ključne riječi: nanotrakice / 2D materijali / teorija funkcionala gustoće / europij

Mentor: doc. dr. sc. Maja Varga Pajtler

Ocjenjivači: doc. dr. sc. Denis Stanić; doc. dr. sc. Maja Varga Pajtler, mr. sc. Slavko Petrinšak

Rad prihvaćen: 23. listopada 2020.

ENERGY CONSIDERATIONS OF ATOM EUROPIUM ADSORPTION ON LATERAL HETEROSTRUCTURES OF GRAPHENE AND HEXAGONAL BORON NITRIDE

VANJA DUŠIĆ

Abstract

This research is based on density functional theory, and the studied area of research are 2D materials. Graphene and hexagonal boron nitride, which form the basis of the research, are 2D materials that together create the heterostructure to which we added a europium atom and then determined the adsorption energy. The research was conducted through three steps. In the first step, we defined the maximum energy of the plane waves and the number of k-points because these parameters were crucial for our further calculations. In the second step, we determined the relationship between the adsorption energy and the position above the nanoribbon at which the europium atom takes place. In the third step, we resolved how the adsorption energy changes depend on the width and the concentration of adsorbed europium atoms. We used Quantum ESPRESSO computer software for all calculations. The paper is divided into several chapters in which we will discuss nanomaterials, density functional theory, computer support used, as well as the calculation details and the conclusion.

(55 pages, 31 figures, 18 tables, 23 references)

Thesis deposited in Department of Physics library

Keywords: nanoribbons / 2D materials / density functional theory / europium

Supervisor: Maja Varga Pajtler, PhD

Reviewers: Denis Stanić, PhD; Maja Varga Pajtler, PhD; Slavko Petrinšak, MSc

Thesis accepted: 23rd October 2020

1. Uvod

Razvoj kvantne fizike utjecao je na razvoj područja koje se bavi proučavanjem nanomaterijala. Nanomaterijali su oni materijali kojima je barem jedna dimenzija izražena na nanometarskoj skali. Na takvoj skali promatraju se promjene fizikalnih i kemijskih svojstava materijala koje su povezane s brojem atoma ili molekula od kojih su izgrađeni materijali.

Ukoliko se nanomaterijal rasprostire samo u jednoj ravnini, tada govorimo o dvodimenzionalnim (2D) materijalima. Takvi se materijali dakle sastoje samo od jednog sloja ili više manjih slojeva koji su međusobno povezani van der Waalsovima silama. Grafen je prvi proizvedeni dvodimenzionalni materijal koji su znanstvenici uspjeli izolirati tek 2004. godine unatoč tomu što su do toga trenutka napravljena brojna teorijska istraživanja na grafitu.

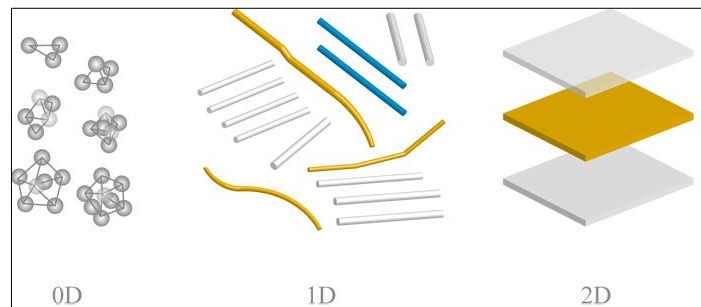
Grafen kao i još jedan 2D materijal, heksagonalni borov nitrid čine dio istraživanja ovog rada. Njegova je struktura jako slična strukturi grafena. Kažemo da ima heksagonalnu strukturu koja ujedno predstavlja jednu od najstabilnijih kristalnih struktura. Otkriven je samo godinu dana nakon grafena, 2005. godine na Sveučilištu u Manchesteru. Zajedno ta dva materijala, grafen i heksagonalni borov nitrid (skraćeno hBN), čine promatranu heterostrukturu za koju ćemo razmatrati energije adsorpcije atoma europija. Za početak promatrat ćemo kako se ona mijenja u odnosu na položaj atoma europija; proučavat ćemo dvije vrste rubova, tj. dva različita spoja dvaju materijala – spoj duž naslonjač smjera (armchair) i duž cik-cak (zig-zag) smjera. Nakon toga promatrat ćemo kako se mijenja energija adsorpcije u ovisnosti o širini trake i koncentraciji adsorbiranih atoma europija. Razmatranje ćemo moći provesti na temelju teorijskih proračuna primjenom teorije funkcionala gustoće i uz pomoć računalne podrške bez koje se proračuni ne bi mogli izvršiti.

Ovaj ćemo rad podijeliti na nekoliko poglavlja. U njima ćemo raspraviti o nanomaterijalima i njihovim općenitim svojstvima gdje ćemo pažnju posvetiti 2D materijalima, teoriji funkcionala gustoće, računalnoj podršci te nanotrakicama heksagonalnog borovog nitrida. Na kraju ćemo opisati detalje proračuna te iznijeti i raspraviti o rezultatima istraživanja.

2. Nanomaterijali

2.1. Osnovno o nanomaterijalima i njihova podjela

Nanomaterijali jesu materijali kojima je barem jedna od dimenzija izražena u nanometarskoj skali. U ovisnosti o skali, razlikujemo nekoliko vrsta nanomaterijala. Ukoliko je samo jedna od tri postojeće prostorne dimenzije izražena u nanometarskoj skali, tada govorimo od dvodimenzionalnim, tj. 2D materijalima. Ukoliko su dvije prostorne koordinate izražene u nanometarskoj skali, tada govorimo o 1D materijalima, a ukoliko su sve tri prostorne koordinate izražene u nanometarskoj skali, tada govorimo od 0D materijalima [1]. Na Slici 1 možemo vidjeti navedenu podjelu [2].



Slika 1: Podjela nanomaterijala - 0D, 1D, 2D [2].

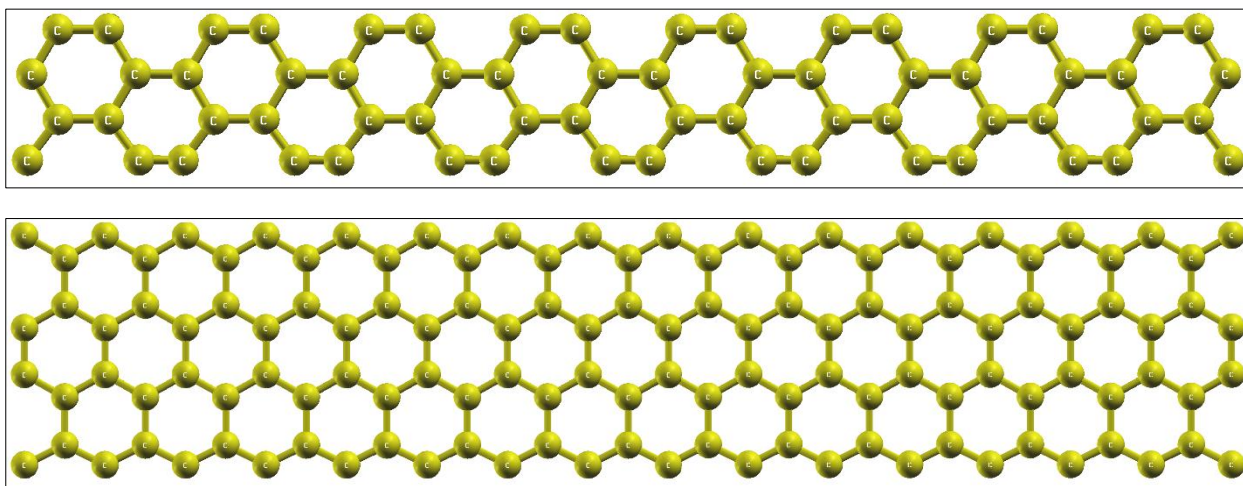
0D materijali jesu materijali kod kojih su nanočestice međusobno izolirane, a primjer mogu biti nanočestice zlata koje se koriste za prijenos citostatika, tj. lijekova za uništavanje tumora te nanočestice željezovog oksida koje se koriste za uklanjanje arsena iz pitke vode [2, 3].

1D materijali su nanocjevčice, tj. nanovlakna koja su građena od materijala kao što su ugljik te kadmijev sulfid, a primjenu pronalaze u elektroničkim komponentama [2, 3].

2D materijali, kao što možemo vidjeti na Slici 1, izgledaju kao tanki filmovi, tj. premazi, a sastoje se najčešće od jednog sloja atoma. Također se mogu sastojati od malog broja slojeva koji su u tom slučaju međusobno povezani van der Waalsovima silama [4].

Brojna teorijska istraživanja grafita dovela su 2004. godine do toga da su znanstvenici uspjeli izolirati samo jedan sloj grafita po prvi puta u povijesti. To je prvi slučaj da je eksperimentalno dobiven dvodimenzionalni materijal koji se naziva grafen. Na temelju toga, brojni su sljedeće otkriveni materijali dobili ime na isti način, dodavanjem sufiksa -en (npr. silicen, germanen, fosforen) [1, 3].

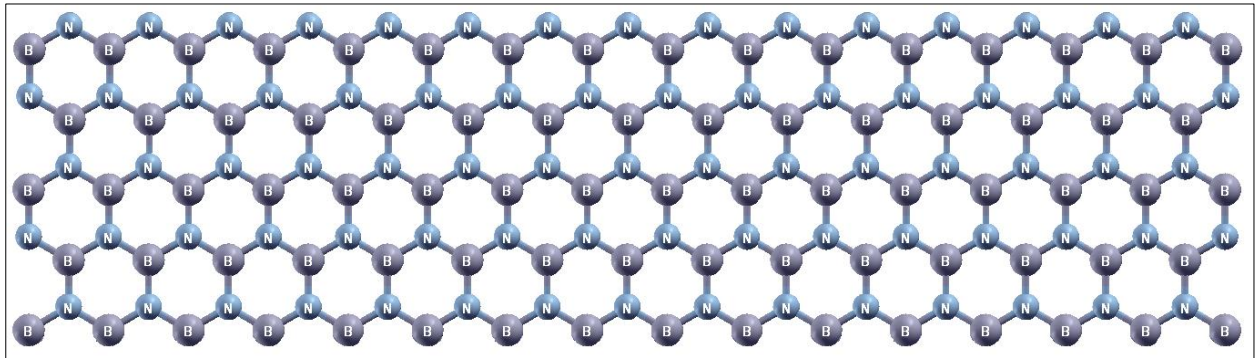
Grafen, koji ćemo proučavati u ovome radu, je 2D materijal koji se sastoji od atoma ugljika koji su međusobno povezani jednostrukim i dvostrukim kovalentnim vezama. Takve veze stvaraju heksagonalnu strukturu. Ona je nalik saćama gdje su atomi ugljika međusobno povezani tako da čine šesterokute [3]. Na Slici 2 prikazane su nanotrakice grafena s različitim vrstama rubova (naslonjač, eng. armchair i cik-cak, eng. zig-zag rubovi).



Slika 2: Nanotrakice grafena s različitim vrstama rubova (naslonjač, eng. armchair – gore i cik-cak, eng. zig-zag - dolje).

Ubrzo nakon otkrića grafena, objavljen je veliki broj istraživanja njegovih svojstava [1]. Naravno, počeli su se tada istraživati i novi materijali, nakon čega su i sintetizirani, a bili su debljine jednog ili više slojeva. Takve materijale možemo podijeliti u više skupina. Jednu skupinu čine elementarni 2D materijali, a u nju ubrajamo dvodimenzionalni germanij, silicij, fosfor i bor, dok drugu skupinu čine dihalogenidi prijelaznih metala. To su spojevi opće formule MX_2 , gdje je M neki od prijelaznih metala (primjerice molibden, volfram, renij, niobij itd.), a X neki od halkogenih elemenata (npr. sumpor, selen ili telurij) [4]. Također važan primjer jesu monohalkogenidi kao što su GaSe (galij-selen) i SnSe (kositar-selen) [3].

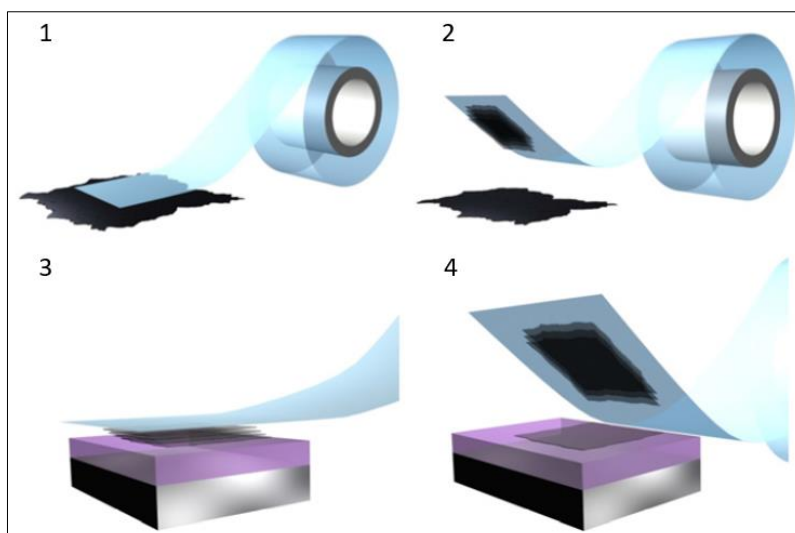
Posebno važan primjer koji moramo istaknuti je heksagonalni borov nitrid (hBN) jer ćemo upravo njega, uz grafen, istraživati u ovom radu. Izgled heksagonalnog borovog nitrida možemo vidjeti na Slici 3.



Slika 3: Heksagonalni borov nitrid.

Ako spojimo više slojeva različitih 2D materijala, tada takav spoj nazivamo heterostrukturom. Razlikujemo vertikalne i lateralne heterostrukture. Kod vertikalnih heterostruktura slojevi materijala nalaze se jedan iznad drugoga, a međusobno su povezani slabim van der Waalsovima, dok se kod lateralnih heterostruktura materijali slažu jedan pored drugoga. U ovom radu bit će opisano istraživanje lateralne heterostrukture grafena i heksagonalnog borovog nitrida.

2D materijali mogu se sintetizirati na nekoliko načina. Razlikujemo mehaničko odvajanje slojeva, kemijsko taloženje para i koloidnu sintezu i dr. [1, 5]. Upravo je metoda mehaničkim odvajanjem slojeva posebne vrste grafita omogućila nastanak grafena. To se dogodilo jer se navedeni grafit odljepljivao s adhezivne vrpce na kojoj su nalazile mikroskopske čestice grafita, među kojima su neke bile debljine samo jednog sloja atoma. Takav proces možemo usporediti s pisanjem grafitne olovke po papiru. S obzirom da se navedenom metodom nisu mogle proizvesti veće količine 2D materijala, vremenom su razvijene naprednije tehnike [1]. Na Slici 4 možemo vidjeti primjer mehaničkog odvajanja slojeva u 4 koraka. U prvom koraku adhezivna vrpca prisloni se na materijal i nakon toga odvaja. U drugom koraku vidimo da na vrpci ostaje nekoliko slojeva materijala. U trećem koraku adhezivnu vrpce s nekoliko slojeva materijala prislonimo na željenu podlogu. U posljednjem, četvrtom koraku nakon skidanja adhezivne vrpce na podlozi ostaje samo jedan sloj materijala [5].



Slika 4: Mehaničko odvajanje slojeva [5].

Sljedeća metoda koju smo već spomenuli je kemijsko taloženje para. U toj metodi plinoviti reaktanti reagiraju kemijski sa zagrijanim supstratom, tj. zagrijanom podlogom, što uzrokuje nastanak 2D materijala na podlozi. Navedenom metodom, tj. razgradnjom plinovitih ugljikovodika dobivaju se čisti slojevi grafena. Upravo je to razlog zašto je metoda kemijskog taloženja para naprednija od mehaničkog odvajanja slojeva. Nedostatak tog procesa je potreban nizak tlak i visoka temperatura.

Posljednja metoda koju smo također naveli jest koloidna sinteza. Tom metodom nastaju slojevi odvajanjem od 3D materijala. Naime, na veze između slojeva 3D materijala dodaju se reagensi koji uzrokuju slabljenje van der Waalsovih sila, što uzrokuje odvajanje pojedinih slojeva od materijala. Na taj se način dobivaju mali uzorci, tj. koloidi koji se centrifugiranjem ili nekim drugim procesom mogu odvajati, čime nastaju jednoslojni 2D materijali [1]. Naravno, metode koje smo naveli samo su neke od mnogih drugih metoda, ali u ovom radu predmet istraživanja nisu metode sintetiziranja pa zbog toga nećemo ulaziti u detalje.

2.2. Primjena nanomaterijala i njihova svojstva

Primjena nanomaterijala je doista različita. Zanimljivo je istaknuti da se upravo u trenutnoj situaciji kada svijetom vlada pandemija Covid-19 znanstvenici koriste nanočesticama zlata kako bi razvili test za brzu dijagnozu zaraze virusom Covid-19 [6].

Glavna područja u kojima se koriste nanočestice jesu medicina, očuvanje okoliša te elektronika. Neki od primjera kako se nanočestice koriste u području medicine: uništavanje tumora prostate i mozga, razvijanje cjepiva protiv raka kože, borba protiv Alzheimerove bolesti, učinkovitije liječenje kroničnih bakterijskih infekcija, analiza strukture molekula DNA i RNA te proteina itd. [6].

Neki od primjera kako se nanočestice koriste u području očuvanja okoliša: uklanjanje metalnih iona iz vode, razgradnja ulja na biorazgradive spojeve, razgradnja zagađivača u zraku, pročišćivanje podzemnih voda od ugljikovog tetraklorida, uklanjanje arsena iz izvora vode itd. [6].

Navedimo također nekoliko primjera kako se nanočestice koriste u području elektronike: koriste se kao fotokatalizatori, služe za poboljšanje rada LED dioda, koriste se za izgradnju sunčevih kolektora; čvrstoća i rastezljivost 2D materijala koriste se za izradu elektroničkih uređaja poput mobitela ili tableta, također se koriste za izradu PN spojeva i upravljačkih elektroda FET tranzistora itd. [6].

2D materijali imaju mnoga poželjna svojstva, ali ona koja se najviše proučavaju su elektronska, optička i elastična svojstva. Prema elektronskim svojstvima, oni mogu biti supravodiči, vodiči, poluvodiči, ali i izolatori. Ponovno spomenimo grafen kao zanimljivi primjer. Grafen je polumetal, tj. poluvodič bez energetskog procjepa – zbog svoje elektronske strukture koja pokazuje da se kod njega vodljiva i valentna vrpca dodiruju u samo jednoj točki. Takva je struktura vrlo osjetljiva na vanjske utjecaje (npr. električna polja i mehaničke deformacije) koji mogu učiniti da grafen prijeđe iz poluvodiča u vodič, ali i obratno. No upravo ta osjetljivost daje mogućnost grafenu da se koristi u području elektronike za izradu senzora [1].

Primjenu u elektronici omogućavaju također i različita optička svojstva. Primjerice, neki su materijali vrlo osjetljivi na svjetlost što omogućuje razvoj senzora i učinkovitih LED lampi [1].

Spomenimo također da mnogi 2D materijali podnose vrlo visoke tlakove te rastezanja bez pucanja što znači da imaju dobra elastična svojstva. To je moguće jer su atomi povezani jakim kovalentnim vezama. Najbolji je primjer grafen, ali uz njega slična svojstva imaju i drugi 2D materijali, npr. fosforeni [4].

3. Teorija funkcionala gustoće

3.1. Uvod

Svojstva koja smo naveli u prethodnom poglavlju određena su uglavnom elektronskom strukturom atoma. U tom slučaju, da bismo odredili svojstva, moramo točno odrediti i elektronsku strukturu. No to predstavlja veliki problem zbog dvije činjenice [7].

Prvi je problem udaljenost između elektrona u atomima, koja je manja od de Broglieove valne duljine elektrona pri temperaturama manjim od 10^4 K, što rezultira preklapanjem valnih funkcija elektrona, zbog čega se umjesto zakona klasične fizike moraju primijeniti zakoni kvantne fizike [7].

Drugi je problem taj što za sustav koji ima više od jednog elektrona ne možemo riješiti Schrödingerovu jednadžbu. Povećanjem broja elektrona u sustavu, raste i težina rješavanja problema. Upravo se zbog toga za određivanje elektronske strukture koriste metode aproksimiranja [7].

Rješavanjem vremenski neovisne Schrödingerove jednadžbe koja je dana sljedećim oblikom:

$$\hat{H}\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n) = E\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n), \quad (3.1)$$

gdje je \hat{H} hamiltonijan sustava, $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n)$ valna funkcija, a E ukupna energija sustava, možemo odrediti svojstva nerelativističkog kvantnog sustava. Hamiltonijan sustava sastoji se od kinetičke energije jezgri i elektrona, potencijalne energije Coulombovog međusobnog odbijanja jezgri, potencijalne energije Coulombovog međusobnog odbijanja elektrona te potencijalne energije Coulombovog privlačenja između jezgri i elektrona. S obzirom na to da sadrži veliki broj varijabli, lako je zaključiti da Schrödingerova jednadžba (3.1) nije egzaktno rješiva [7].

Da bi se moglo doći do rješenja, kao što smo već rekli, morale su se razviti metode aproksimacije. Prva koju ćemo istaknuti naziva se Born – Oppenheimerova aproksimacija. Još se naziva i adijabatska aproksimacija jer elektroni ne izmjenjuju energiju s jezgrama. Ona se koristi za konstruiranje valne funkcije sustava koji se sastoji od više elektrona. Navedenom metodom uspješno su riješeni sustavi koji imaju u sebi malo elektrona (npr. molekula vodika H_2). No i dalje

ta metoda nije bila funkcionalna, tj. njome se nije moglo doći do rješenja ako je broj elektrona bio puno veći jer je tada i broj parametara rastao eksponencijalno [8].

Sljedeća metoda koju ćemo spomenuti, a koja se koristi u mnogim istraživanjima, pa tako i u ovom radu, je teorija funkcionala gustoće, u engleskom govornom području poznata pod imenom density functional theory ili skraćeno DFT. Dok se druge metode temelje na valnoj funkciji elektrona, teorija funkcionala gustoće za glavnu varijablu uzima gustoću elektrona $n(\vec{r})$, koja ovisi samo o tri prostorne varijable, bez obzira na broj elektrona u sustavu. Gustoća elektrona veličina je koja opisuje prostornu raspodjelu elektrona.

Temelj teorije funkcionala gustoće nastao je 1964. godine kada su francusko-američki fizičar Pierre Hohenberg i austrijsko-američki fizičar i teorijski kemičar Walter Kohn objavili rad pod imenom *Inhomogeneous Electron Gas* (Nehomogeni elektronski plin) u poznatom časopisu Physical Review. Samo godinu dana poslije, 1965. godine Walter Kohn i kinesko-američki fizičar Lu Jeu Sham objavljuju rad pod imenom *Self-Consistent Equations Including Exchange Correlation Effects*, također u časopisu Physical Review. Upravo ta dva rada omogućila su temelj za daljnji razvitak teorije funkcionala gustoće. Prvi rad daje teorijsku osnovu, dok drugi rad predlaže način kako riješiti problem. Danas za tvrdnje i zaključke koji su izneseni u tim radovima kažemo da su teoremi na kojima se temelji teorija funkcionala gustoće. U nastavku ćemo reći nešto više o teoremima [10, 11].

Danas, nakon toliko godina brojnih teorijskih i eksperimentalnih istraživanja za teoriju funkcionala gustoće i dalje tvrdimo da je najuspješnija metoda koja nam služi za otkrivanje novih svojstava. Kažemo da je uspješna jer je jednostavna, univerzalna, a pokazala se doista pouzdanom. Sve više fizičara i kemičara koji se bave istraživanjima u području materijala proširuju znanja o navedenoj metodi jer im ona olakšava proces. Unatoč tomu što nam ova metoda ne nudi točna rješenja, već aproksimativna, ona i dalje predstavlja najuspješniju metodu [8, 9].

3.2. Hohenberg – Kohnovi teoremi

Kao što smo već ranije spomenuli, teorija funkcionala gustoće temelji se na dva teorema, a objavili su ih Hohenberg i Kohn 1964. godine u časopisu Physical Review.

Prvi teorem kaže da je energija osnovnog stanja iz Schrödingerove jednadžbe jedinstveni funkcional gustoće elektrona. [7, 8].

Drugi teorem kaže da je gustoća elektrona koja minimizira energiju cjelokupnog funkcionala ona gustoća elektrona koja odgovara potpunom rješenju Schrödingerove jednadžbe.

Za svaki vanjski potencijal $v(\vec{r})$ možemo definirati funkcional $E[n(\vec{r})]$, a zapisujemo ga na sljedeći način:

$$E[n(\vec{r})] = \int n(\vec{r})v(\vec{r})d\vec{r} + F[n(\vec{r})], \quad (3.2)$$

gdje $v(\vec{r})$ predstavlja vanjski potencijal, a $F[n(\vec{r})]$ nepoznati funkcional koji ovisi samo o gustoći elektrona, ali ne i o vanjskom potencijalu [7].

Nepoznati funkcional $F[n(\vec{r})]$ možemo iskazati sljedećim izrazom:

$$F[n(\vec{r})] = T[n(\vec{r})] + U[n(\vec{r})], \quad (3.3)$$

gdje $T[n(\vec{r})]$ predstavlja kinetičku energiju elektrona, a $U[n(\vec{r})]$ potencijalnu energiju njihove interakcije [8].

Iako teoremi imaju veliku važnost, oni ipak nisu ponudili način na koji se može izračunati gustoća sustava. Godinu dana nakon, 1965. godine Kohn i Sham objavili su članak koji je ponudio metodu koja će poslužiti u računanju problema koji se temelje na teoriji funkcionala gustoće.

3.3. Kohn – Shamove jednadžbe

Kohn – Shamove jednadžbe bile su poboljšanje već postojećih Hartreejevih iterativnih jednadžbi. Prema Hartreejevoj metodi, svaki se elektron giba u potencijalu, koji je prikazan sljedećim izrazom:

$$v_H(\vec{r}) = -\frac{Z}{r} + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}', \quad (3.4)$$

gdje je prvi član potencijal jezgre atomskog broja Z , a drugi član potencijal ostalih elektrona predstavljen prosječnom gustoćom elektrona $n(\vec{r})$ [3, 8].

Glavna je ideja bila pojednostaviti problem međudjelovanja većeg broja elektrona na način da se elektroni promatraju kao čestice koje neće međudjelovati, ali se nalaze u efektivnom potencijalu. Tako se problem sveo na sustav s jednom česticom koji je u odnosu na sustav s više čestica ipak rješiv.

U tom je slučaju ukupna energija sustava dana sljedećim izrazom:

$$E[n(\vec{r})] = \int n(\vec{r})v(\vec{r})d\vec{r} + T_S[n(\vec{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' + E_{XC}[n(\vec{r})], \quad (3.5)$$

gdje je prvi član vanjski potencijal, drugi član kinetička energija koju bi elektroni imali da ne interagiraju, treći je član Hartreejeva energija elektrostatskog odbijanja elektrona, a četvrti je član funkcional energije izmjene i korelacije koji sadrži razliku između kinetičke energije interagirajućih i neinteragirajućih elektrona te kvantne doprinose energiji odbijanja elektrona [3, 7, 8].

Ukoliko znamo gustoću elektrona $n(\vec{r})$, možemo odrediti prva tri člana jednadžbe, dok za četvrti član jednadžbe moramo koristiti metode aproksimacije jer nije poznat točan iznos energije izmjene i korelacije. Iako je nepoznata energija relativno malena u odnosu na druge doprinose energije, svejedno ju ne možemo zanemariti [3, 7, 8].

Efektivni je potencijal u kojem se gibaju elektroni dan izrazom:

$$v_{eff}(\vec{r}) = v(\vec{r}) + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' + v_{XC}(\vec{r}), \quad (3.6)$$

gdje je $v_{XC}(\vec{r})$ potencijal izmjene i korelacije. Tada Schrödingerova jednadžba ima oblik:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{eff}(\vec{r}) \right] \varphi_j(\vec{r}) = \varepsilon_j \varphi_j(\vec{r}) \quad [8]. \quad (3.7)$$

Energija osnovnog stanja dana je sljedećim izrazom:

$$E = \sum_{j=1}^N \varepsilon_j + E_{XC}[n(\vec{r})] - \int v_{XC}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} - \frac{1}{2} \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}'. \quad [8] \quad (3.8)$$

Jednadžba oblika (3.7) naziva se Kohn – Shamova jednadžba koja se rješavaju iterativno. Prvi je korak aproksimirati gustoću elektrona pri osnovnom stanju $n(\vec{r})$. Drugi je korak odrediti efektivni potencijal $v_{eff}(\vec{r})$ iz izraza (3.6.). Nakon toga odrede se svojstvene funkcije elektrona $\varphi_j(\vec{r})$ iz izraza (3.7). U konačnici sumiramo i dobivamo novu gustoću elektrona koja bi trebala biti jednaka onoj početnoj gustoći elektrona koju smo aproksimirali. Ako nam se ne dogodi jedankost, ponavljat ćemo postupak s novom gustoćom elektrona dok ne dobijemo valjani rezultat [3, 7, 8].

3.4. Baza ravnih valova

Ukoliko je riječ o elektronima u kristalima, valne funkcije elektrona $\varphi_j(\vec{r})$ mogu se predstaviti ravnim valovima, a to je moguće zbog Blochovog teorema. Prema Blochovom teoremu valna funkcija elektrona u periodičnom potencijalu dana je umnoškom periodične funkcije i ravnog vala. Također vrijedi da se valne funkcije elektrona mogu zapisati u obliku linearne kombinacije ravnih valova [7]. Pri tome je kinetička energija ravnih valova dana sljedećim izrazom:

$$E_K = \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2, \quad (3.9)$$

gdje je \hbar reducirana Planckova konstanta, \vec{k} valni vektor ograničen na prvu Brillouinovu zonu recipročne rešetke (o njoj ćemo nešto više u nastavku), a \vec{G} valni vektor recipročne kristalne rešetke [12].

Za točan rezultat potreban nam je beskonačni broj valova, ali kako to nije moguće, u obzir uzimamo samo one valove čija je kinetička energija manja ili jednaka odabranoj maksimalnoj energiji koju označavamo s E_{cut} . To znači da mora vrijediti:

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2 \leq E_{cut} \quad [13]. \quad (3.10)$$

Prilikom računanja uzimamo onoliko veliku vrijednost za E_{cut} koliko nam je potrebno da nam rezultati budu valjani. Računanje ponavljamo i pritom povećavamo E_{cut} sve dok svojstva koja nas zanimaju ne konvergiraju [13].

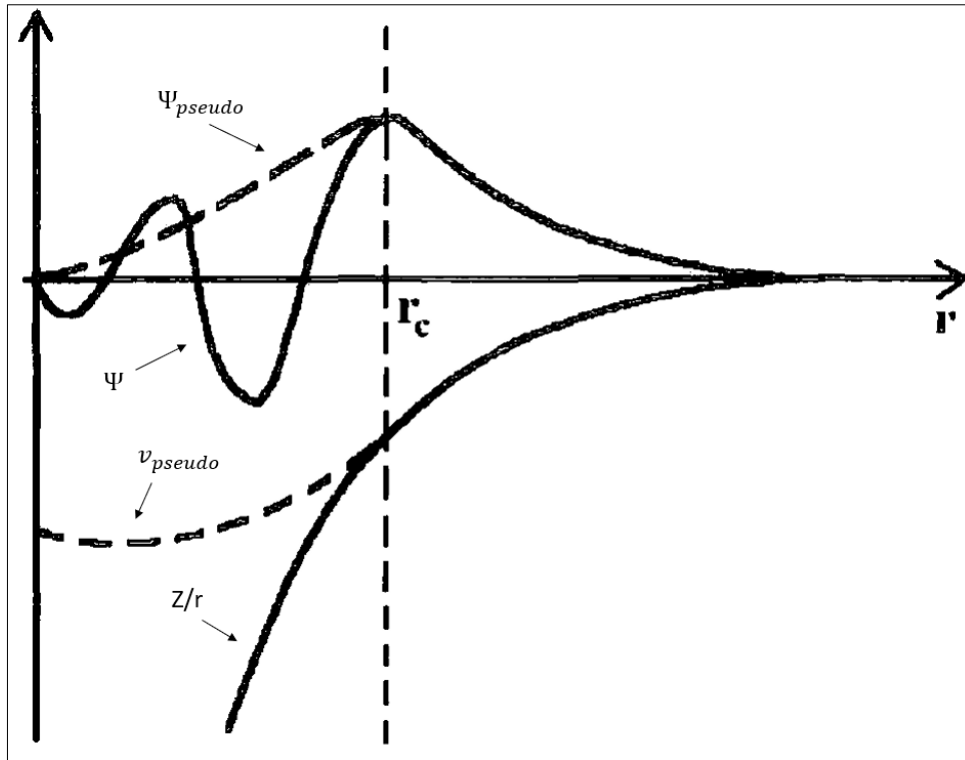
3.5. Uzorkovanje prve Brillouinove zone

Blochov teorem omogućio nam je da računanje valnih funkcija elektrona zamijenimo proračunom za prvu Brillouinovu zonu. Problem nastaje kada znamo da u toj zoni imamo beskonačan broj točaka. Rješenje je da se za male udaljenosti u prvoj Brillouinovoj zoni valne funkcije ne mijenjaju. Zbog toga, umjesto integriranja po beskonačnom broju točaka, mi ćemo sumirati valne funkcije za konačni broj točaka koje nazivamo k-točke.

Najjednostavnija metoda kojom možemo odabrati k-točke naziva se Monkhorst – Packova metoda. Prema toj se metodi k-točke jednoliko raspoređuju po Brillouinovoj zoni [3, 7]. Prilikom računanja isprobavamo različite brojeve k-točaka i u konačnici uzmemo onaj broj k-točaka iznad kojeg rezultati željeno konvergiraju.

3.6. Pseudopotencijali

Elektrone u atomu koji su udaljeniji od jezgre nazivamo valentnim elektronima. Ti elektroni imaju najviše utjecaja na kemijska, mehanička i električna svojstva jer ona ovise o gibanju valentnih elektrona. Kako bismo dobili što točniju valnu funkciju, u obzir se moraju uzeti svi elektroni, što u konačnici čini valnu funkciju prekomplikiranom. Upravo zbog toga koriste se pseudopotencijali, što znači da zamjenjujemo kombinirani potencijal jezgre i unutrašnjih elektronskih ljusaka s pseudopotencijalom v_{pseudo} . On je na manjim udaljenostima od jezgre manjeg iznosa od stvarnog potencijala Z/r , dok na dovoljnoj udaljenosti od jezgre postaje identičan stvarnom potencijalu. Valne funkcije valentnih elektrona dobivene iz pseudopotencijala Ψ_{pseudo} jednake su stvarnim valnim funkcijama Ψ izvan odabranog polumjera r_c . S druge strane, unutar polumjera r_c oscilacija krivulje (Slika 5) zamijenjena je glatkom krivuljom [3, 7, 13]. Shematski prikaz pseudopotencijala možemo vidjeti na Slici 5 [7].



Slika 5: Shematski prikaz psuedopotencijala. Isprekidanim linijama prikazani su pseudopotencijal v_{pseudo} i odgovarajuća valna funkcija Ψ_{pseudo} , a punim linijama prikazani su stvarni potencijal Z/r i pripadajuća valna funkcija Ψ . Na slici također možemo vidjeti da izvan polumjera r_c nema razlike između stvarnih i pseudo-veličina.

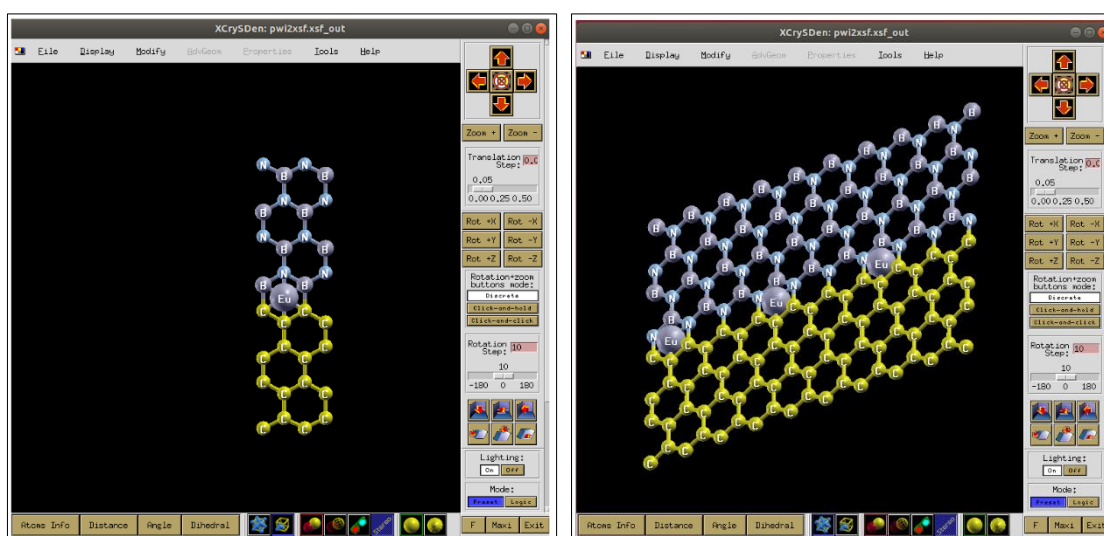
[7]

4. Računalna podrška

Za sve izračune koji su napravljeni za ovaj rad, koristili smo besplatni softver Quantum ESPRESSO. Taj softver predstavlja paket u koji su implementirani teorija funkcionala gustoće, ravni valovi i pseudopotencijali. On se koristi za izračune elektronskih struktura i modeliranje materijala. Također nam može služiti za izračunavanje elektronske gustoće stanja, kristalne strukture duž kemijskih veza, Fermijeve površine, fononskih frekvencija i gustoća stanja, termodinamičkih svojstava, preraspodjelu naboja itd. Pseudopotencijali koji su korišteni za sve račune u ovom radu preuzeti su sa servera Quantum ESPRESSA [14].

Za grafički prikaz različitih podataka koristili smo se programom koji se naziva XCrySDen. Taj program služi za vizualizaciju kristalne i molekularne strukture [15]. Sučelje programa XCrySDen prikazano je na Slici 6.

Za račune u ovome radu koristili smo se računalnim klasterom Isabella. Računalni klaster sustav je računala umreženih korištenjem brze lokalne mreže pomoću koje računala međusobno komuniciraju. Računalni klaster Isabella pripada u klastere s visokom učinkovitošću, a sastoji se od 3100 procesorskih jezgri i 12 grafičkih procesora te služi kao zajednički resurs svih znanstvenika u Hrvatskoj za brojne znanstveno-istraživačke projekte [16]. Primjer jedne ulazne datoteke možemo vidjeti u Dodatku A.



Slika 6: XCrySDen - prikaz izgleda sučelja programa za vizualizaciju kristalnih i molekularnih struktura.

5. Grafen

Prije nego je grafen eksperimentalno otkriven, vjerovalo se da 2D kristali ne mogu biti stabilni. No kada su znanstvenici uspjeli sintetizirati 2004. godine jedan sloj grafita širine atoma i kada su izveli cijeli niz istraživanja, to je promijenilo početnu hipotezu o nestabilnosti 2D kristala. Struktura ovog 2D materijala je stabilna zbog svoje heksagonalne geometrije gdje su atomi ugljika međusobno povezani jednostrukim i dvostrukim kovalentim vezama. Raspored atoma ugljika određuje o kakvoj se vrsti ruba radi – naslonjač ili cik-cak vrsti ruba (vrste rubova detaljnije ćemo opisati kasnije u radu). Grafen je najtanji i najčvršći nanomaterijal, a zbog svojih svojstava koristi se u širokoj primjeni – primjerice u izradi nanoelektroničkih uređaja ili za izradu spremišta energije [17].

Najbolji mogući grafen jest jednoslojni grafen načinjen od 2D kristala koji čine heksagonalnu strukturu rešetke. Veza između dva atoma ugljika duljine je 0,142 nm, a debljina sloja otprilike iznosi 0,35 nm. Može se sintetizirati na brojne načine – mehaničkim odvajanjem slojeva, kemijskim taloženjem para, katalizom metala i mnogim drugim [17].

Njegova elastičnost i sposobnost toplinske provodljivosti samo su neki od pokazatelja izvrsnih mehaničkih svojstava. Dobar je vodič topline, a prema elektronskim svojstvima može ga se svrstati u grupu metala i poluvodiča. Njegova je vodljivost najveća među svim poznatim materijalima. Zbog svojih optičkih svojstava jednoslojni je grafen bezbojan pa ga moramo promatrati na supstratu. Prema istraživanjima, apsorpcija vidljive svjetlosti iznosi 2,3 %, a propusnost vidljive svjetlosti iznosi 97,7 %. Promatrajući magnetska svojstva grafena, znanstvenici su otkrili da u određenim slučajevima grafen može biti paramagnetičan, a čak i feromagnetičan [17].

6. Heksagonalni borov nitrid (hBN)

Već smo ranije u ovome radu spomenuli da je struktura heksagonalnog borovog nitrída (hBN) vrlo slična strukturi grafena. Ona je nalik saćama pa zbog toga možemo reći da se radi o saćastoj strukturi. Sastoji se od atoma bora i atoma dušika koji su međusobno povezani kovalentnim vezama i jedna je od najstabilnijih struktura.

Kristale heksagonalnog borovog nitrída otkrili su Nagashima i njegovi suradnici još davne 1995. godine, ali dvodimenzionalni hBN sintetizirali su znanstvenici sa Sveučilišta u Manchesteru 2005. godine metodom mehaničkog odvajanja slojeva. Osim na ovaj način, hBN se može sintetizirati npr. mehaničkim odvajanjem slojeva, kemijskim taloženjem para, sintezom vodenih otapala itd. [17].

Heksagonalni borov nitrid ima glatku površinu, nisku dielektričnu konstantu, stabilan je na visokim temperaturama, ima visoku toplinsku vodljivost itd. Upravo mu ta svojstva daju mogućnost da se koristi kao supstrat za grafen. Tako su ga Dean i njegovi suradnici [17] po prvi puta iskoristili kada su izrađivali grafenske tranzistore. Brojna istraživanja nakon toga pokazala su da je heksagonalni borov nitrid idealni supstrat za grafen zato što zadržava njegova geometrijska i električna svojstva [17].

Zbog svojih električnih svojstava pripada skupini izolatora. Brojni rezultati eksperimentalnih i teorijskih istraživanja pokazuju da je Youngov model elastičnosti visok, što ukazuje na to da je vrlo elastičan materijal. U odnosu na većinu metala i keramičkih materijala, na sobnoj temperaturi toplinska vodljivost heksagonalnog borovog nitrída puno je veća. Kada govorimo o optičkim svojstvima, brojna eksperimentalna i teorijska istraživanja pokazuju da hBN nema adsorpciju svjetlosti u infracrvenom i vidljivom području, ali zato ima u području ultraljubičastog spektra. Nema magnetska svojstva, ali uz proces dopiranja drugim elementima, može doći do spontane magnetizacije [17].

Do sada smo nabrojali brojna svojstva heksagonalnog borovog nitrída. Bitno je navesti da se također istražuje koje se promjene događaju kada se materijalu dodaju atomi. Primjerice, znanstvenici su promatrali koje se modifikacije heksagonalnog borovog nitrída događaju kada mu se doda atom cezija pri različitim temperaturama, što u konačnici vodi prema adsorpciji atoma. Slična istraživanja provedena su i s atomima litija i kalija [18].

7. Lateralne heterostrukture grafena i borovog nitrida

Spajanjem više slojeva različitih 2D materijala nastaju heterostrukture. Već smo ranije spomenuli da se kod vertikalnih heterostruktura slojevi materijala nalaze se jedan iznad drugoga, dok se kod lateralnih slažu jedan pored drugoga. Spajanje 2D materijala u heterostrukture ključan je korak u razvijanju tehnologije malih dimenzija. Taj se proces radi kako bi se dobili tanki i fleksibilni sustavi koji imaju poboljšana svojstva. Primjer tomu jesu heterostrukture grafena i heksagonalnog borovog nitrida, koje se mogu koristiti za izradu naprednih tranzistora, dioda i fotonaponskih uređaja. Ona predstavlja jednu od najzanimljivijih heterostruktura u znanosti jer oba 2D materijala imaju heksagonalnu strukturu sa sličnim parametrima rešetke, ali se prema elektronskoj strukturi bitno razlikuju. Dok grafen predstavlja izvrstan vodič, borov nitrid predstavlja izolator. Unatoč brojim istraživanjima tijekom mnogo godina, spajanje 2D materijala u nove i kompliciranije strukture i dalje predstavlja izazov [19].

Grafen se luminiscentno pobuđuje u vidljivom području, dok se hBN pobuđuje samo u ultraljubičastom području. Zbog toga ta dva materijala imaju jako mali utjecaj jedan na drugoga u smislu optičkih svojstava. No kada govorimo o električnim svojstvima, istraživanja su pokazala da se kombinacijom tih dvaju materijala dobivaju bolja električna svojstva pri visokim temperaturama i u prisustvu jakog električnog polja [17].

Navedimo nekoliko primjera primjene heterostruktura grafena i hBN-a – FET tranzistori, LED diode, solarne ćelije, senzori itd. Istraživanja tih materijala u područjima infracrvene svjetlosti, vidljive svjetlosti i ultra ljubičaste svjetlosti mogla bi omogućiti razvijanje naprednih fotonaponskih uređaja [17].

Do sada su napravljena broja istraživanja vertikalnih heterostruktura grafena i borovog nitrida. Čak su znanstvenici uspjeli izraditi zanimljiv prikaz sove kombiniranjem dvaju navedenih materijala, koja predstavlja simbol Rice Sveučilišta iz Houstona. Prikaz možemo vidjeti na Slici 7.



Slika 7: Sova nastala zanimljivom kombinacijom grafena i borovog nitrida [20].

No ideja ovog istraživanja ipak se temelji na proučavanju lateralne heterostrukture grafena i heksagonalnog borovog nitrida. U nastavku, prikazat ćemo kako je izgledao proces u kojem smo proučavali energije adsorpcije atoma europija kada se on doda lateralnim heterostrukturama grafena i heksagonalnog borovog nitrida.

8. Rezultati

Proračuni ovog istraživanja podijeljeni su u tri cjeline, a izvodili su se za naslonjač i cik-cak vrstu spoja između grafena i heksagonalnog borovog nitrida. Zbog toga će u nastavku tekst biti podijeljen na tri dijela, gdje će se u svakom prikazati rezultati za obje vrste spoja.

U prvoj cjelini odredit će se parametri konvergencije – maksimalna energija ravnih valova (E_{cut}) i broj k-točaka kojim se uzorkuje prva Brillouinova zona koji su nam potrebni za izvođenje ostalih koraka proračuna.

U drugoj cjelini promatrat će se kako se mijenja energija adsorpcije u odnosu na različite položaje atoma europija na lateralnoj heterostrukturi grafena i heksagonalnog borovog nitrida.

U trećoj cjelini promatrat će se kako se mijenja energija adsorpcije u ovisnosti o širini trakice, udaljenosti od trakice i koncentraciji adsorbiranih atoma europija za odabrane položaje atoma. U tom smo koraku koristili neb-metodu (eng. nudged elastic band). Ona se najčešće koristi za pronalaženje minimalnih energijskih puteva između atoma i trakice. Mi smo koristili neb-metodu za jednostavnije računanje energija promatranih sustava, tj. uzimali smo u obzir samo jednu putanju (pravocrtnu, i to u smjeru okomito na trakicu) atoma europija u odnosu na trakicu.

8.1. Parametri konvergencije

U prvom dijelu istraživanja, potrebno je bilo odrediti maksimalnu energiju ravnih valova (varijabla *ecut*) i broj k-točaka kojim se uzorkuje prva Brillouinova zona, uz koje će ukupna energija atoma u elementarnoj ćeliji zadovoljavajuće konvergirati. Kriterij konvergencije bio je da su razlike energija u odnosu na konvergiranu energiju manje od 10^{-3} Ry.

Konvergencija za naslonjač vrstu ruba postignuta je za sljedeće parametre – *ecut* = 110 i mrežu k-točaka 14 x 1 x 1. Konvergencija za cik-cak vrstu ruba s istaknutim atomom bora postignuta je za *ecut* = 110 i mrežu k-točaka 14 x 1 x 1, a s istaknutim atomom dušika za – *ecut* = 120 i mreža k-točaka 16 x 1 x 1.

Pseudopotencijali koje smo koristili za atom europija su ultrasoft potencijali s PBE parametrizacijom (Perdew-Burke-Ernzerhof). Broj valentnih elektrona za pseudopotencijale pojedinih atoma su: 5 (N), 3 (B), 4 (C), 7 (Eu).

Vakuum između periodičkih slika u y-smjeru i z-smjeru iznosi 20 Å.

8.2. Energija adsorpcije u odnosu na različite položaje atoma europija

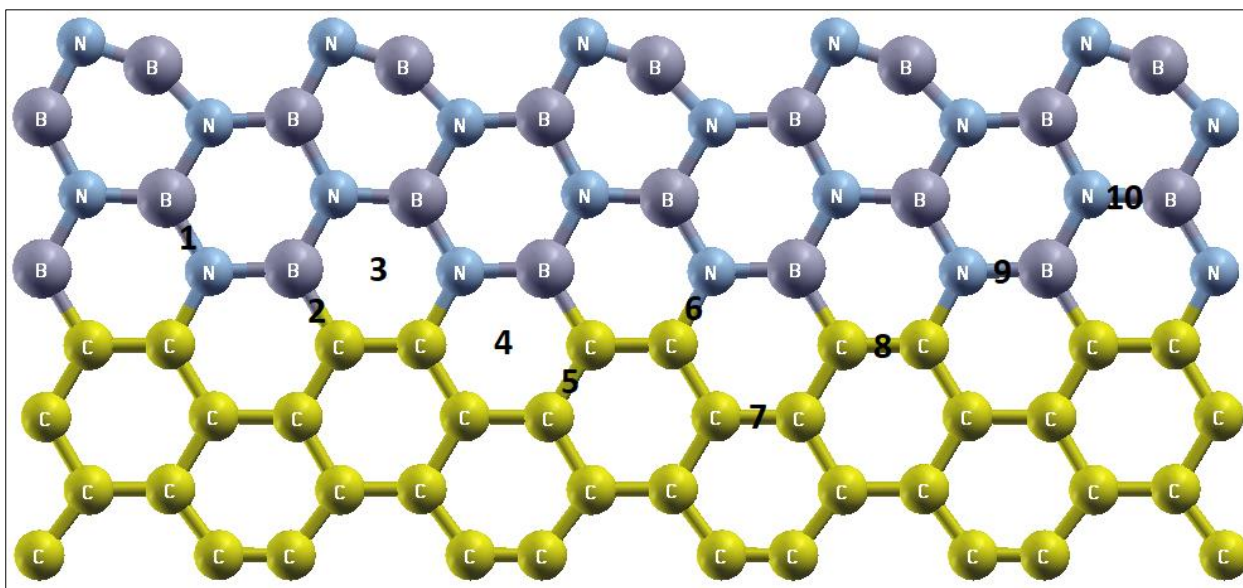
Jedan od ciljeva istraživanja bio nam je odrediti energije adsorpcije atoma europija u odnosu na udaljenost atoma od trakice.

Da bi se izračunala energija adsorpcije, potrebno je koristiti se sljedećim izrazom:

$$E_{ads} = E_{t+a} - E_t - E_a \quad [21], \quad (8.1)$$

gdje E_{ads} predstavlja energiju adsorpcije, E_{t+a} energiju trakice i atoma koju smo dobili nakon proračuna, E_t energiju same trakice koju smo već imali izračunatu, a E_a energiju samog atoma (u našem slučaju europija). Do adsorpcije dolazi ako vrijedi $E_{ads} < 0$ [21].

Postavili smo atom europija na 10 različitih položaja iznad trakice koja ima spoj u smjeru naslonjač i nakon proračuna dobili energije trakice i atoma europija zajedno (E_{t+a}), koje smo koristili za izračunavanje energije adsorpcije uz pomoć izraza (8.1). Prikaz različitih položaja atoma europija možemo vidjeti na Slici 8 (oznake 1 – 10).



Slika 8: Naslonjač smjer - prikaz položaja na koje smo postavljali atom europija.

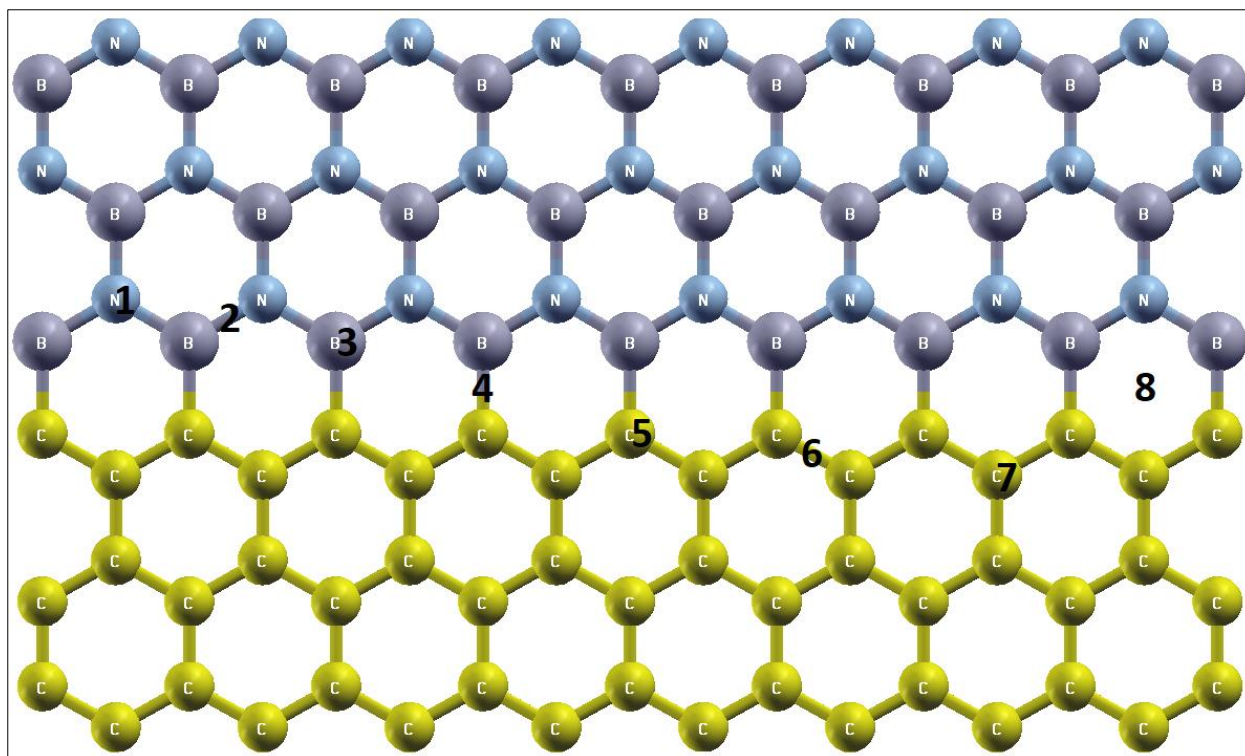
Energije trakice i atoma za svaki položaj, energiju same trakice, energiju samog atoma, energiju adsorpcije te optimiziranu udaljenost atoma od trakice za dani položaj prikazat ćemo u Tablici 1.

Tablica 1: Pozicije (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac), energije adsorpcije (peti stupac) te optimizirane udaljenosti atoma od trakice d (šesti stupac). Sve energije izražene su u Ry.

Pozicija	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)	d (Å)
1	-323,8860787	-200,09149458	-123,57657900	-0,21800512	2,43194288
2	-323,9140929	-200,09149458	-123,57657900	-0,24601932	2,43353528
3	-323,9271938	-200,09149458	-123,57657900	-0,25912022	2,21772468
4	-323,9592469	-200,09149458	-123,57657900	-0,29117332	2,17872478
5	-323,9473941	-200,09149458	-123,57657900	-0,27932052	2,32202224
6	-323,9349626	-200,09149458	-123,57657900	-0,26688902	2,32142256
7	-323,9565806	-200,09149458	-123,57657900	-0,28850702	2,30716034
8	-323,9454233	-200,09149458	-123,57657900	-0,27734972	2,31259856
9	-323,9060256	-200,09149458	-123,57657900	-0,23795202	2,38026656
10	-323,8789026	-200,09149458	-123,57657900	-0,21082902	2,45744450

Iz Tablice 1 vidimo da je za položaj broj 4 (tj. iznad šesterokuta okruženog s četiri ugljikova atoma, jednim atomom bora i jednim atomom dušika) energija adsorpcije najmanja, što znači da je na tom položaju mogućnost adsorpcije atoma europija na nanotrakici grafena i hBN najvjerojatnija.

Slične račune ponovili smo i za nanotrakice čiji je spoj u smjeru cik-cak, i to za dva različita slučaja; kada je u spoju istaknut atom bora, odnosno atom dušika. Slike proučavanih položaja atoma europija te pripadne energije adsorpcije dane su na Slikama 9 i 10 te u Tablicama 2 i 3.

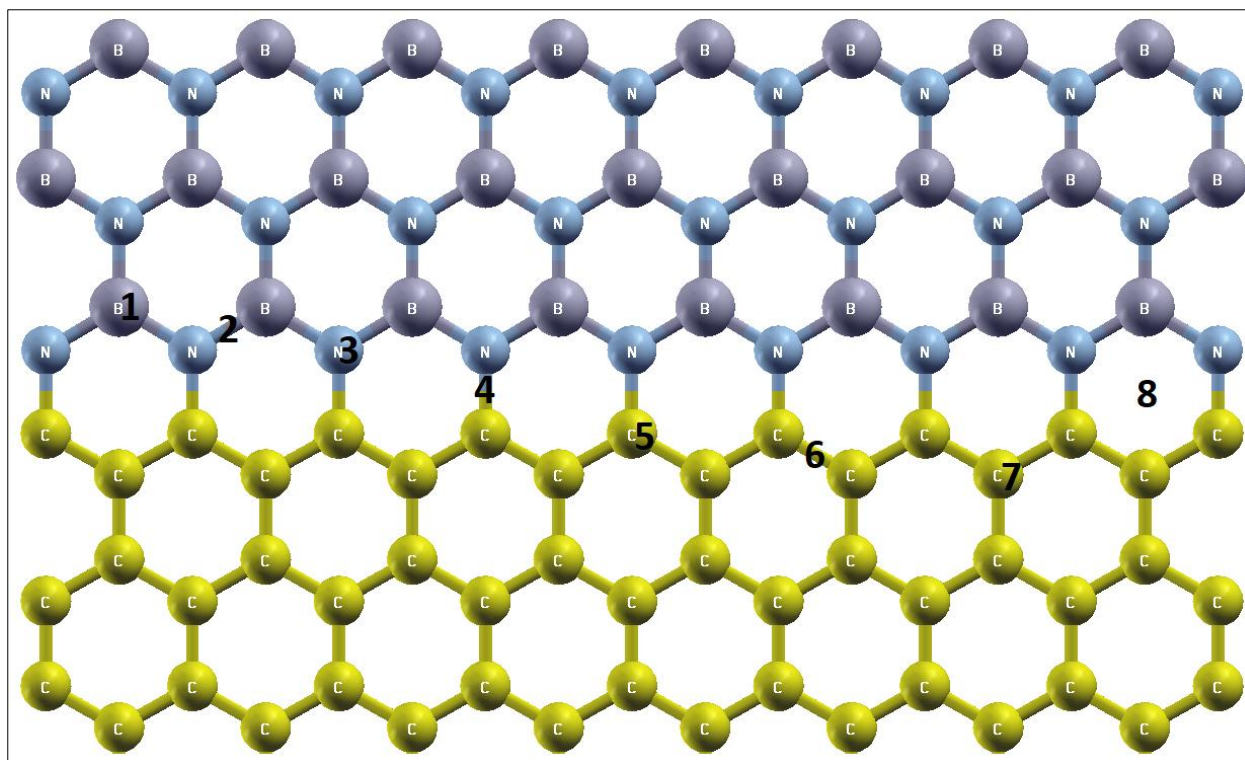


Slika 9: Cik-cak smjer, istaknuti bor – prikaz položaja na koje smo postavljali atom europija.

Tablica 2: Cik-cak smjer, istaknuti bor – pozicije (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac), energije adsorpcije (peti stupac) te optimizirane udaljenosti atoma od trakice d (šesti stupac). Sve energije izražene su u Ry.

Pozicija	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)	d (Å)
1	-324,0631248298	-200,271620199	-123,57657900	-0,2149256308	2,58368476
2	-324,0596071525	-200,271620199	-123,57657900	-0,2114079535	2,65619140
3	-324,0535893131	-200,271620199	-123,57657900	-0,2053901141	2,73979860
4	-324,0677541482	-200,271620199	-123,57657900	-0,2195549492	2,63965002
5	-324,0751648885	-200,271620199	-123,57657900	-0,2269656895	2,55487466
6	-324,0736603748	-200,271620199	-123,57657900	-0,2254611758	2,56654790
7	-324,0689364904	-200,271620199	-123,57657900	-0,2207372914	2,51588916
8	-324,0795574095	-200,271620199	-123,57657900	-0,2313582105	2,22317234

Iz Tablice 2 vidimo da je za položaj broj 8 (tj. iznad šesterokuta okruženog s tri ugljikova atoma, dva atoma bora i jednim atomom dušika) energija adsorpcije najmanja što znači da je na tom položaju mogućnost adsorpcije atoma europija na nanotrakici grafena i hBN najvjerojatnija.



Slika 10: Cik-cak smjer, istaknuti dušik – prikaz položaja na koje smo postavljali atom europija.

Tablica 3: Cik-cak smjer, istaknuti dušik – pozicije (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac), energije adsorpcije (peti stupac) te optimizirane udaljenosti atoma od trakice d (šesti stupac). Sve energije izražene su u Ry.

Pozicija	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)	d (Å)
1	-323,9809200952	-200,27065861	-123,57657900	-0,1336824852	2,96260966
2	-323,9951826573	-200,27065861	-123,57657900	-0,1479450473	2,68094882
3	-324,0167227066	-200,27065861	-123,57657900	-0,1694850966	2,48813484
4	-324,0275883623	-200,27065861	-123,57657900	-0,1803507523	2,48717654
5	-324,0233124895	-200,27065861	-123,57657900	-0,1760748795	2,51390258
6	-324,0190649322	-200,27065861	-123,57657900	-0,1718273222	2,58429892
7	-324,0211625167	-200,27065861	-123,57657900	-0,1739249067	2,51857430
8	-323,9953886766	-200,27065861	-123,57657900	-0,1481510666	2,84890696

Iz Tablice 3 vidimo da je za položaj broj 4 (tj. na vezi između jednog atoma ugljika i jednog atoma dušika) energija adsorpcije najmanja što znači da je na tom položaju mogućnost adsorpcije atoma europija na nanotrakici grafena i hBN najvjerojatnija.

8.3. Energija adsorpcije u ovisnosti o širini trakice i koncentraciji adsorbiranih atoma europija

U sljedećem dijelu istraživanja ispitivali smo ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti atoma europija od trakice za različite vrste spojeva između grafena i borovog nitrida, za širine trakica i različite koncentracije adsorbiranih atoma europija.

Za sva tri navedena spoja (naslonjač, cik-cak s istaknutim borom te cik-cak s istaknutim dušikom) između grafenske nanotrakice i nanotrakice borovog nitrida, proučavali smo tri različite širine trakica: spoj četiri lanca grafena i četiri lanca hBN, spoj osam lanaca grafena i osam lanaca hBN te spoj deset lanaca grafena i deset lanaca hBN.

Za svaki od navedenih slučajeva, računali smo energije adsorpcije za deset različitih udaljenosti atoma europija od trakice, i to tako da smo atom europija smjestili na početku na udaljenost od trakice za 3 Å i približavali ga trakici u svakom koraku za 0,3 Å. U svim navedenim slučajevima, položaj atoma iznad trakice bio je upravo iznad sredine šesterokuta kojega čine atomi ugljika, bora i dušika.

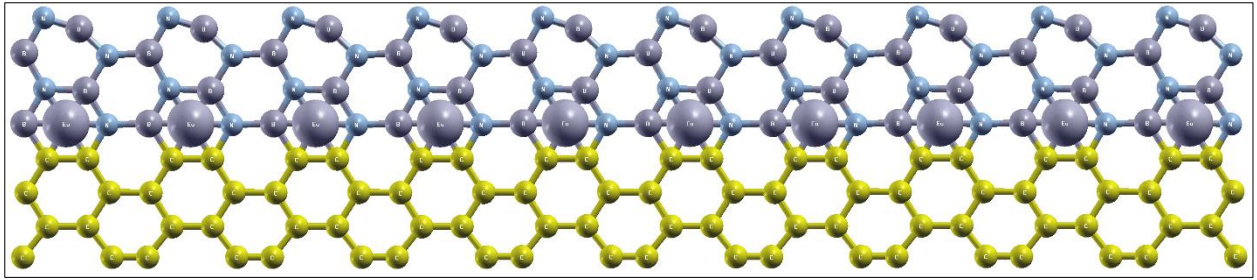
Nadalje, ispitivali smo utjecaj koncentracije atoma europija na energije adsorpcije, i to tako da smo razmatrali spoj četiri lanca grafena i četiri lanca hBN, ali su koncentracije atomu europija bile dva (oznaka C2), odnosno tri (oznaka C3) puta manje od početne (C1).

Naslonjač vrsta ruba

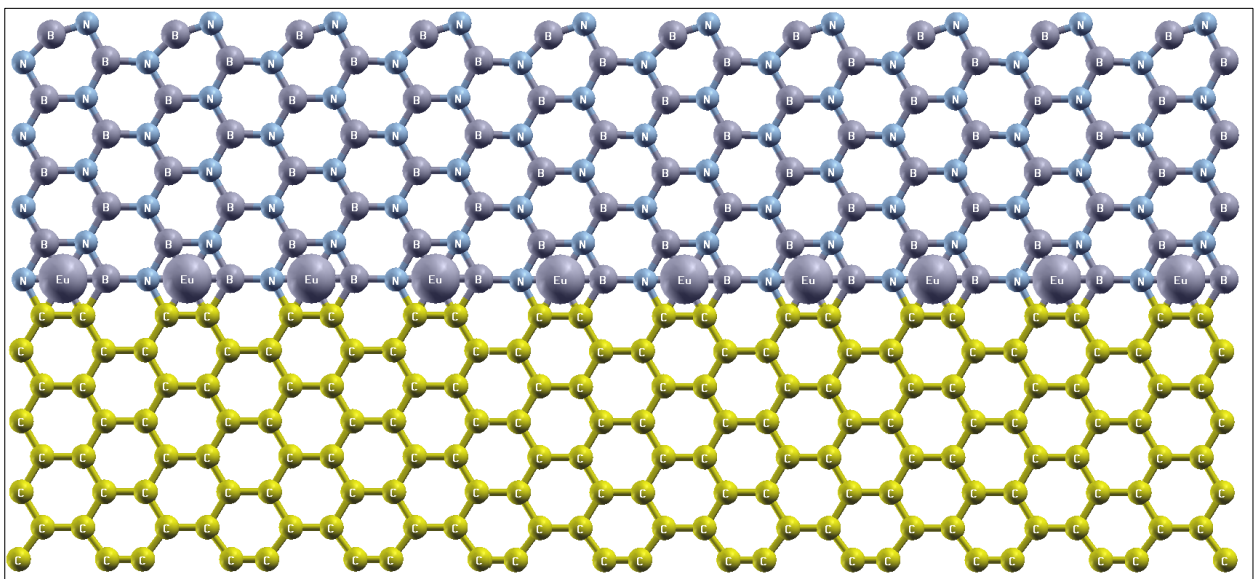
Za naslonjač vrstu ruba, spoj četiri lanca grafena i četiri lanca hBN prikazan je na Slici 11, spoj osam lanaca grafena i osam lanaca hBN prikazan je na Slici 12, a spoj deset lanaca grafena i deset lanaca hBN prikazan je na slici 13.

Slike struktura s dvostruko manjom koncentracijom (C2), odnosno tri puta manjom koncentracijom (C3) prikazane su na Slikama 14 i 15. U svim navedenim slučajevima, atom europija postavljen je iznad šesterokuta koji je okružen s po dva atoma ugljika, bora i dušika.

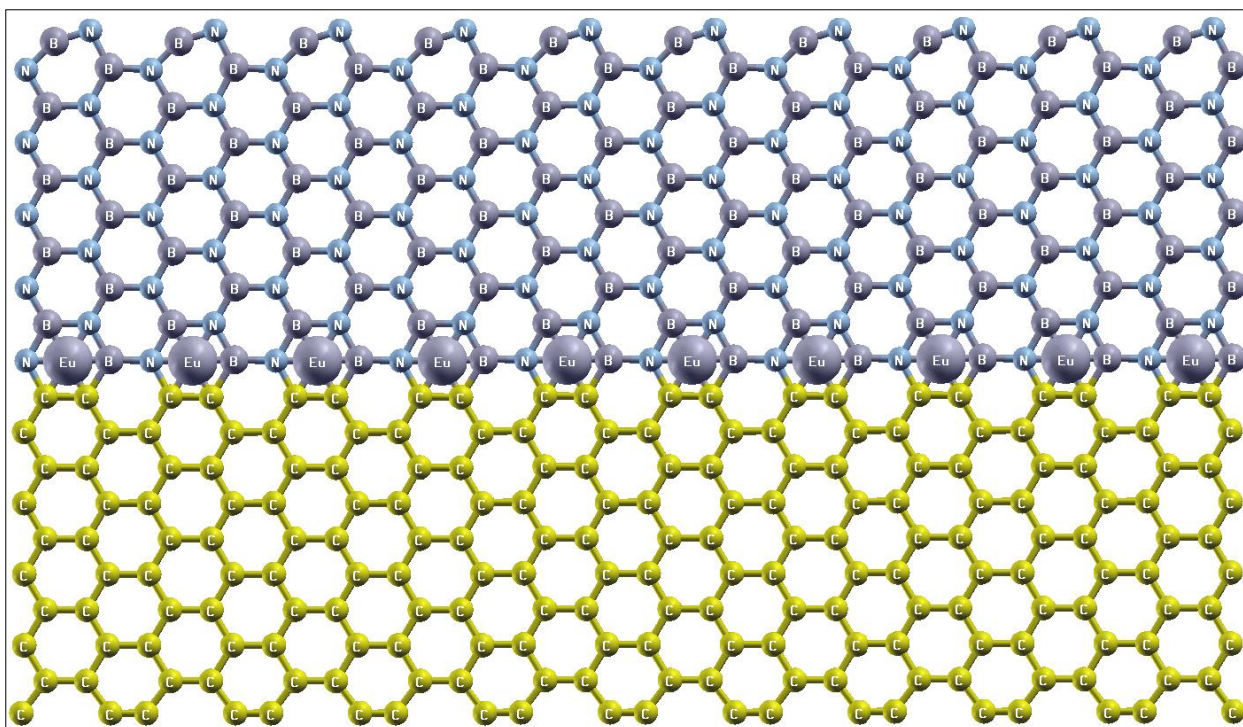
Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti za navedene nanotrakice prikazane su na Slikama 16 i 17 te u Tablicama 4 – 8, koje se nalaze u Dodatku B.



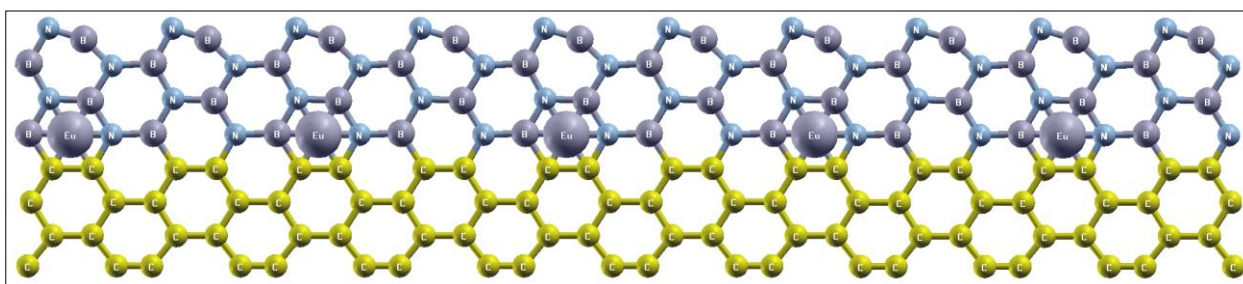
Slika 11: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (naslonjač smjer, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN).



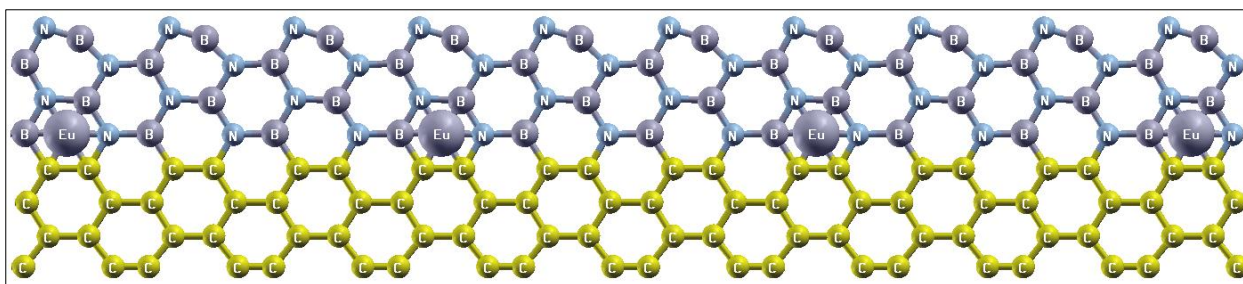
Slika 12: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (naslonjač smjer, osam lanaca grafena + osam lanaca hBN).



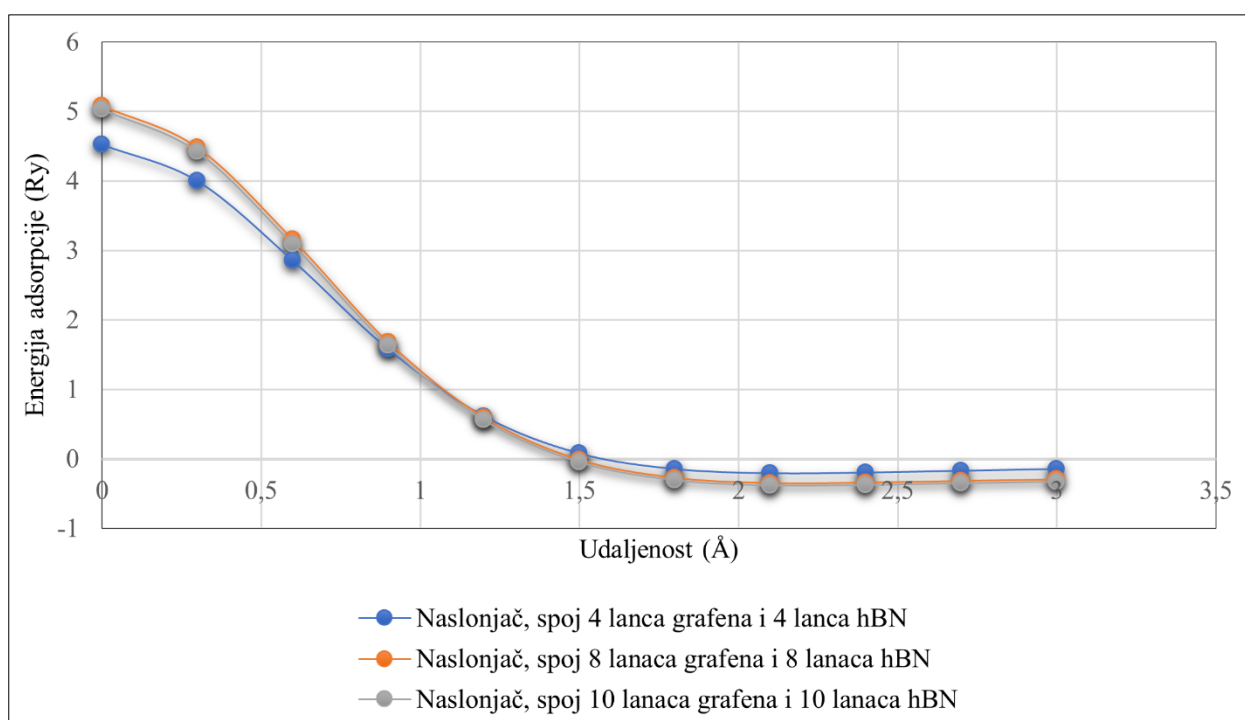
Slika 13: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (naslonjač smjer, deset lanaca grafena + deset lanaca hBN).



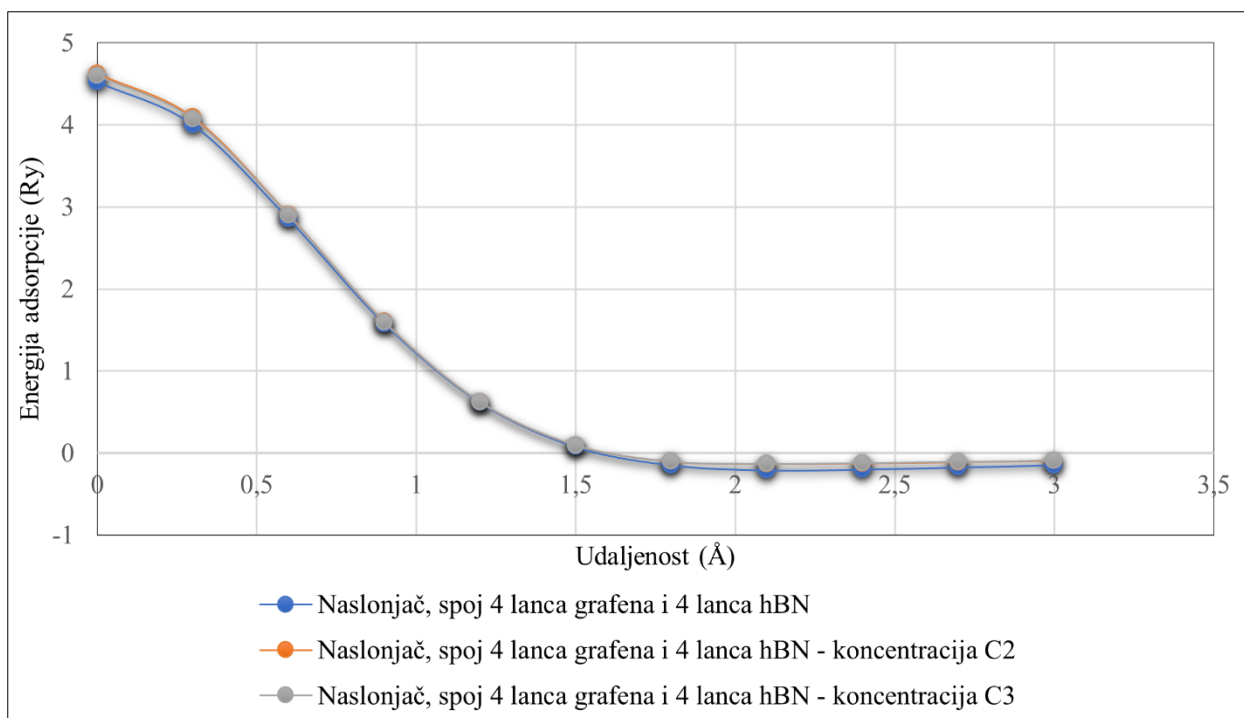
Slika 14: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (naslonjač, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN – koncentracija C2).



Slika 15: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (naslonjač, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN – koncentracija C3).



Slika 16: Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti atoma europija od trakice grafena i borovog nitrida za trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN (plavi krugovi), trakicu koja se sastoji od 8 lanaca grafena i 8 lanaca hBN (narančasti krugovi) te trakicu koja se sastoji od 10 lanaca grafena i 10 lanaca hBN (sivi krugovi). Linije su ucrtane samo zbog jednostavnijeg pregleda.



Slika 17: Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti atoma europija od trakice grafena i borovog nitrida za trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN (plavi krugovi), trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN – koncentracija 2 (narančasti krugovi) te trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN – koncentracija 3 (sivi krugovi). Linije su ucrtane samo zbog jednostavnijeg pregleda.

Na temelju rezultata iz grafova (Slike 16 i 17) i Tablica 4 – 8 koje se nalaze u Dodatku B, možemo zaključiti da je energija adsorpcije u svim primjerima najmanja na udaljenosti atoma od trakice za 2,1 Å, dok za udaljenosti manje od 1,5 Å ne dolazi do adsorpcije (što zaključujemo iz pozitivnih energija adsorpcije).

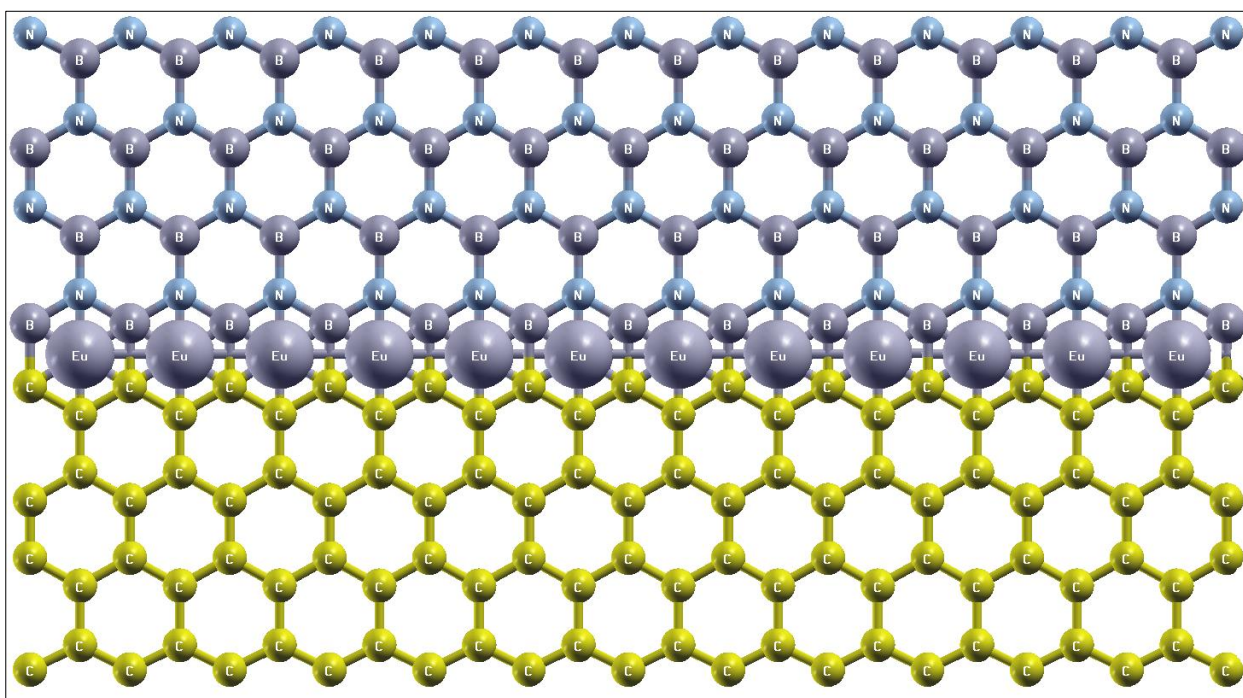
Cik-cak vrsta ruba

Istaknuti atom bora

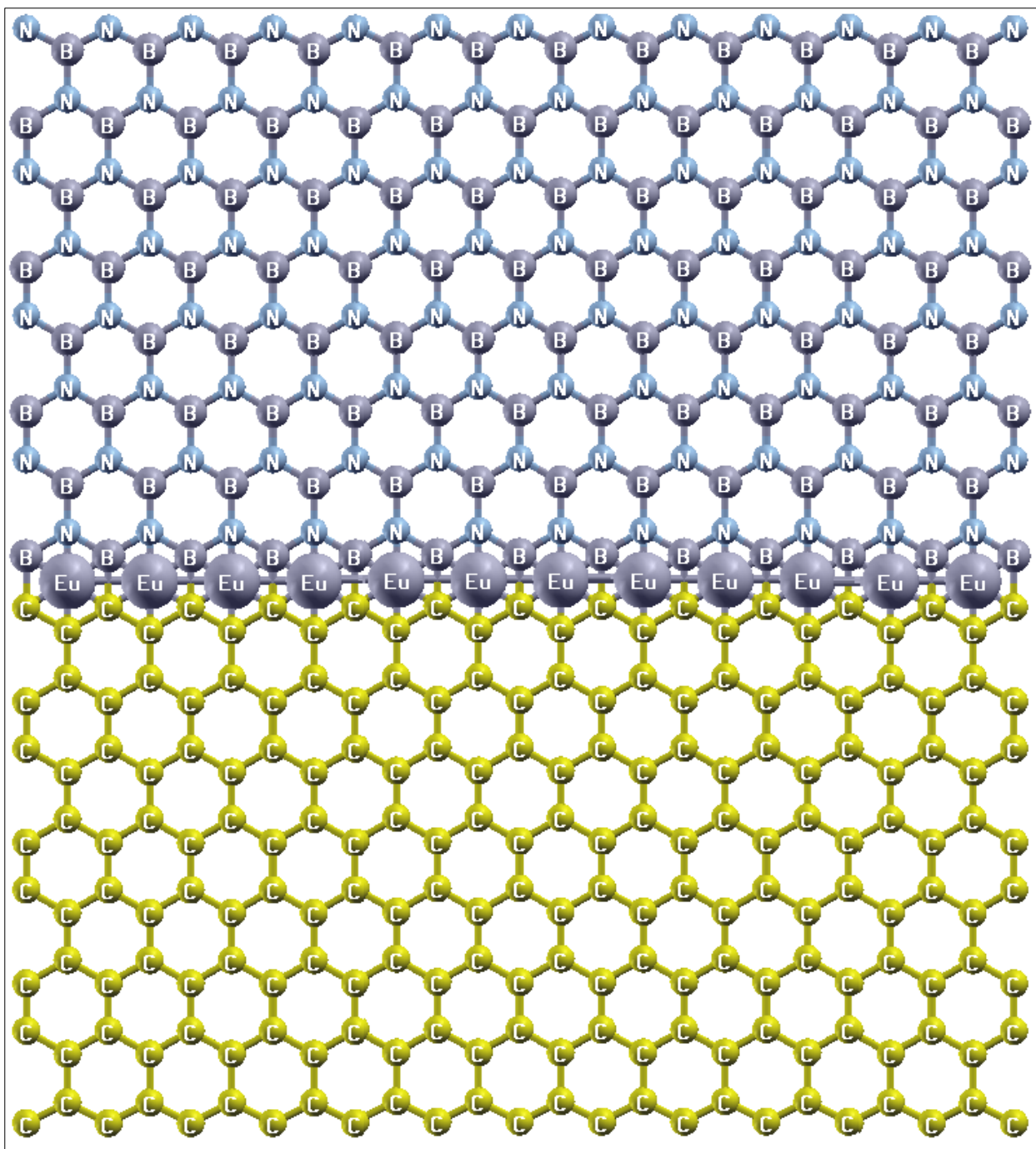
Za cik-cak vrstu ruba s istaknutim atomom bora, spoj četiri lanca grafena i četiri lanca hBN prikazan je na Slici 18, spoj osam lanaca grafena i osam lanaca hBN prikazan je na Slici 19, a spoj deset lanaca grafena i deset lanaca hBN prikazan je na slici 20.

Slike struktura s dvostruko manjom koncentracijom (C2), odnosno tri puta manjom koncentracijom (C3) prikazane su na Slikama 21 i 22. Za sve navedene strukture trakica, atom europija postavljen je iznad šesterokuta okruženog s tri atoma ugljika, dva atoma bora te jednim atomom dušika.

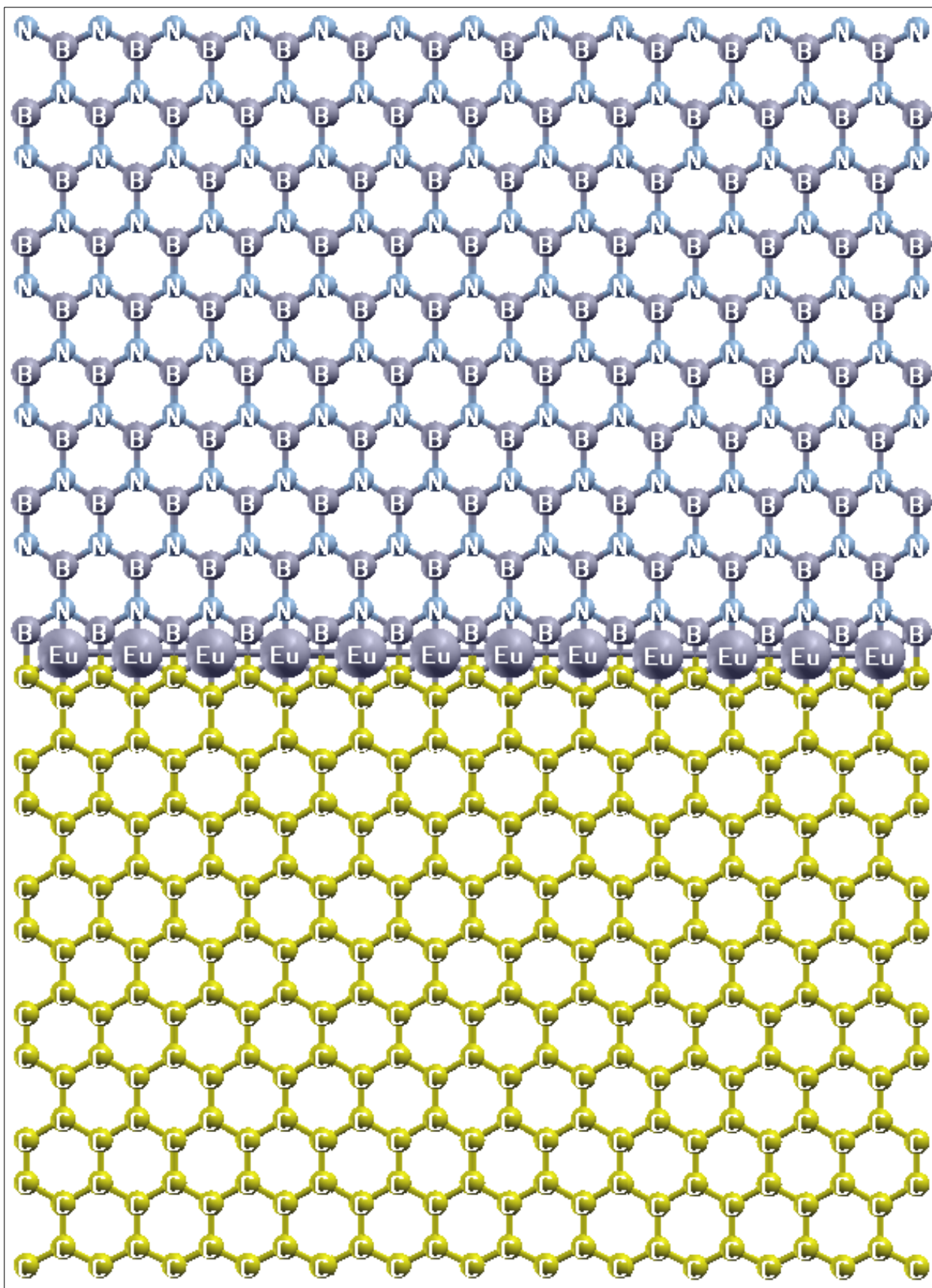
Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti prikazane su na Slikama 23 i 24 te u Tablicama 9 – 13, koje se nalaze u Dodatku B.



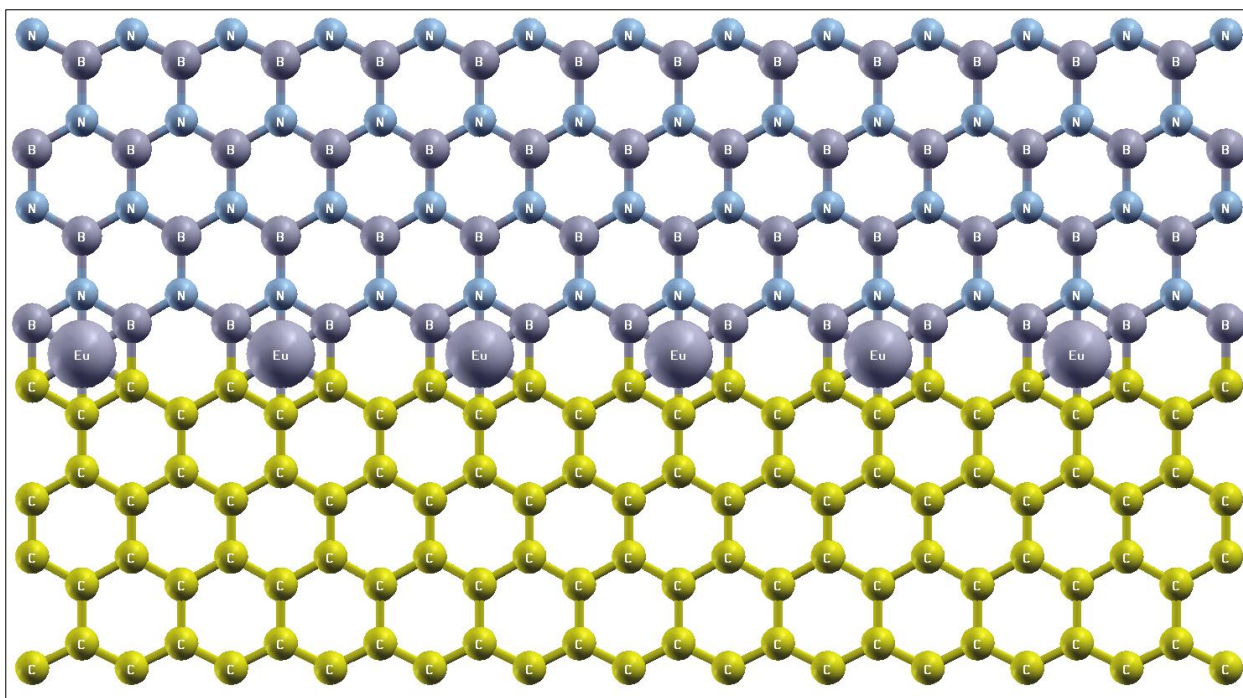
Slika 18: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN).



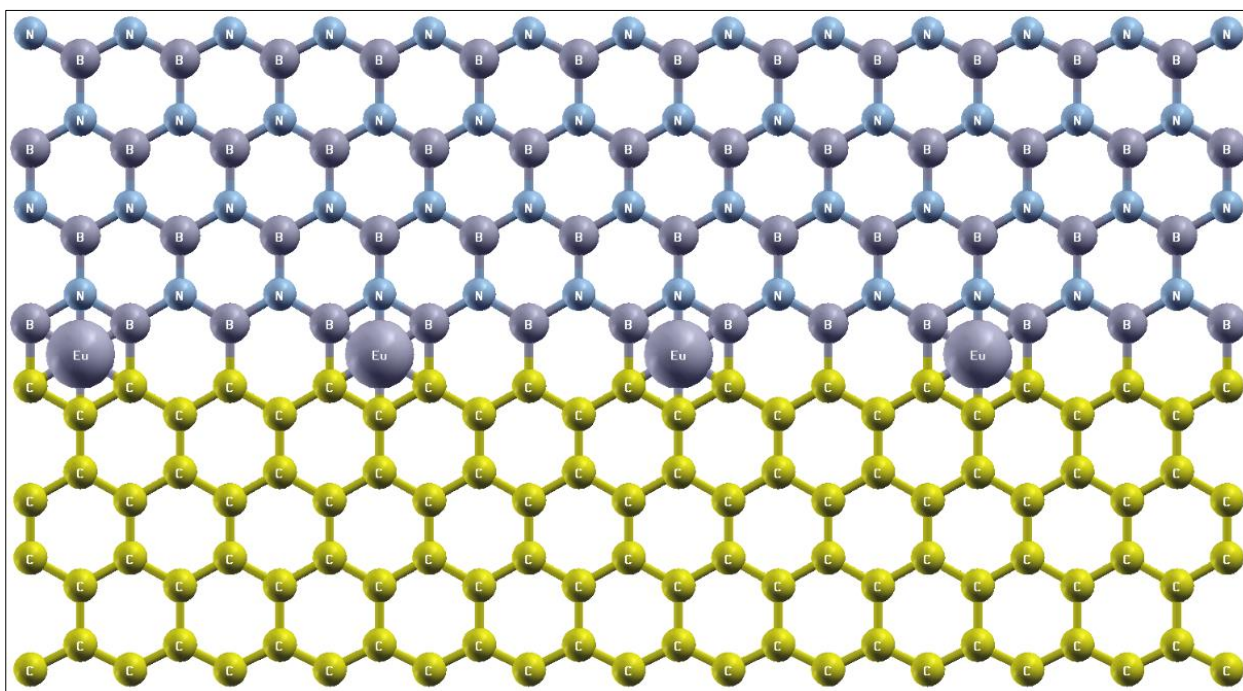
Slika 19: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, osam lanaca grafena + osam lanaca hBN).



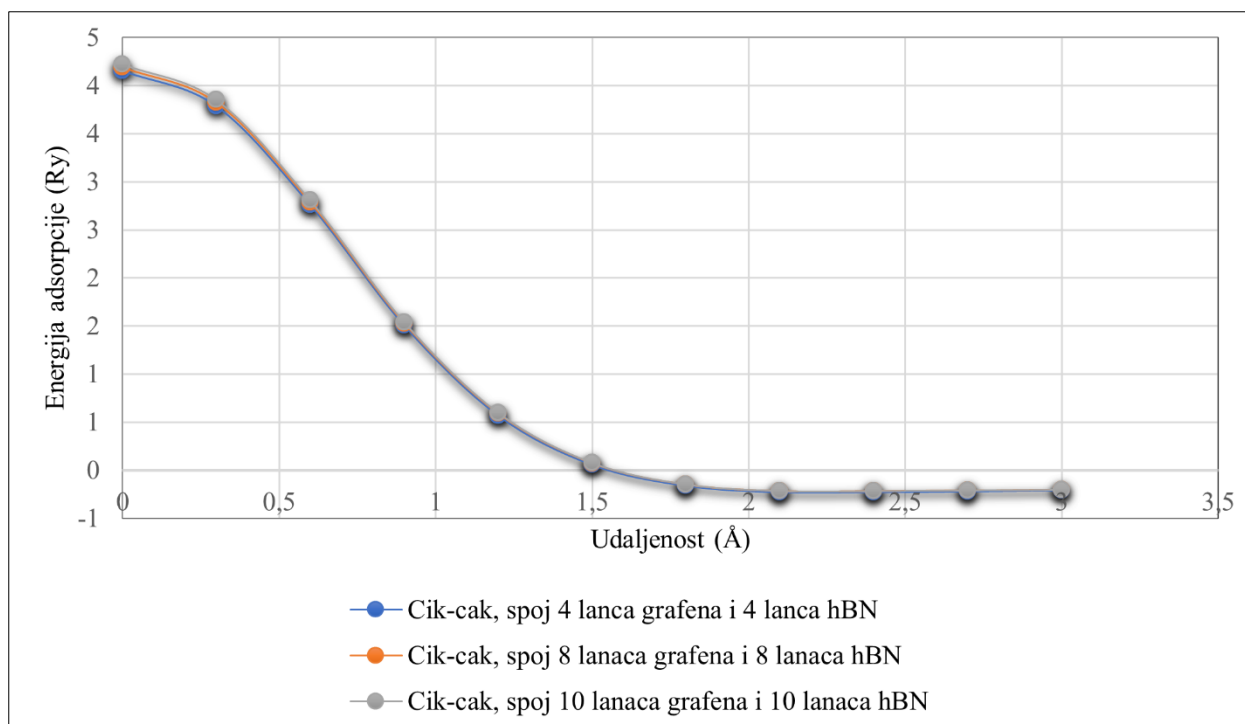
Slika 20: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, deset lanaca grafena + deset lanaca hBN).



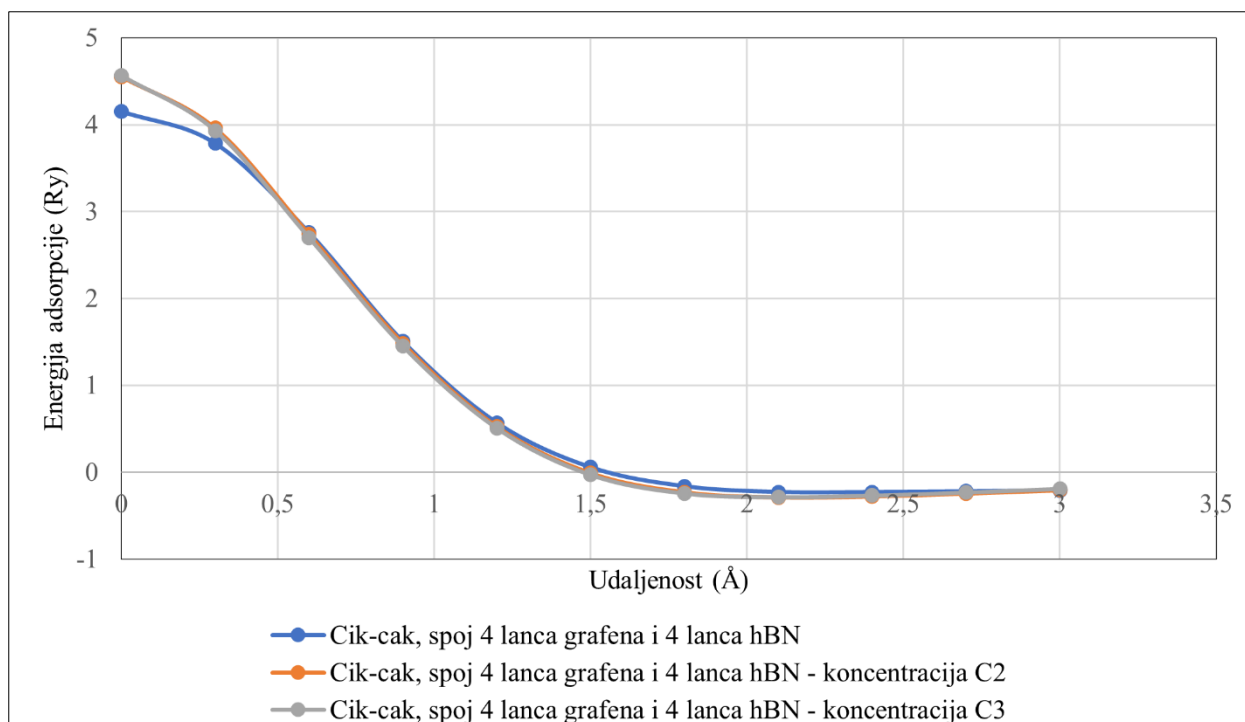
Slika 21: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN – koncentracija C2).



Slika 22: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN – koncentracija C3).



Slika 23: Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti atoma europija od trakice grafena i borovog nitrida za trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN (plavi krugovi), trakicu koja se sastoji od 8 lanaca grafena i 8 lanaca hBN (narančasti krugovi) te trakicu koja se sastoji od 10 lanaca grafena i 10 lanaca hBN (sivi krugovi). Linije su ucrtane samo zbog jednostavnijeg pregleda.



Slika 24: Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti atoma europija od trakice grafena i borovog nitrida za trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN (plavi krugovi), trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN – koncentracija C2 (narančasti krugovi) te trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN – koncentracija C3 (sivi krugovi). Linije su ucrtane samo zbog jednostavnijeg pregleda.

Na temelju rezultata iz grafova (Slike 23 i 24) i Tablica 9 – 13 koje se nalaze u Dodatku B, možemo zaključiti da je energija adsorpcije u primjerima za trakice koje se sastoje od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN (koncentracije C1, C2 i C3) najmanja na udaljenosti atoma od trakice za 2,1 Å, dok je energija adsorpcije za trakice koje se sastoje od 8 lanaca grafena i 8 lanaca hBN, odnosno 10 lanaca grafena i 10 lanaca hBN najmanja na udaljenosti atoma od trakice za 2,4 Å.

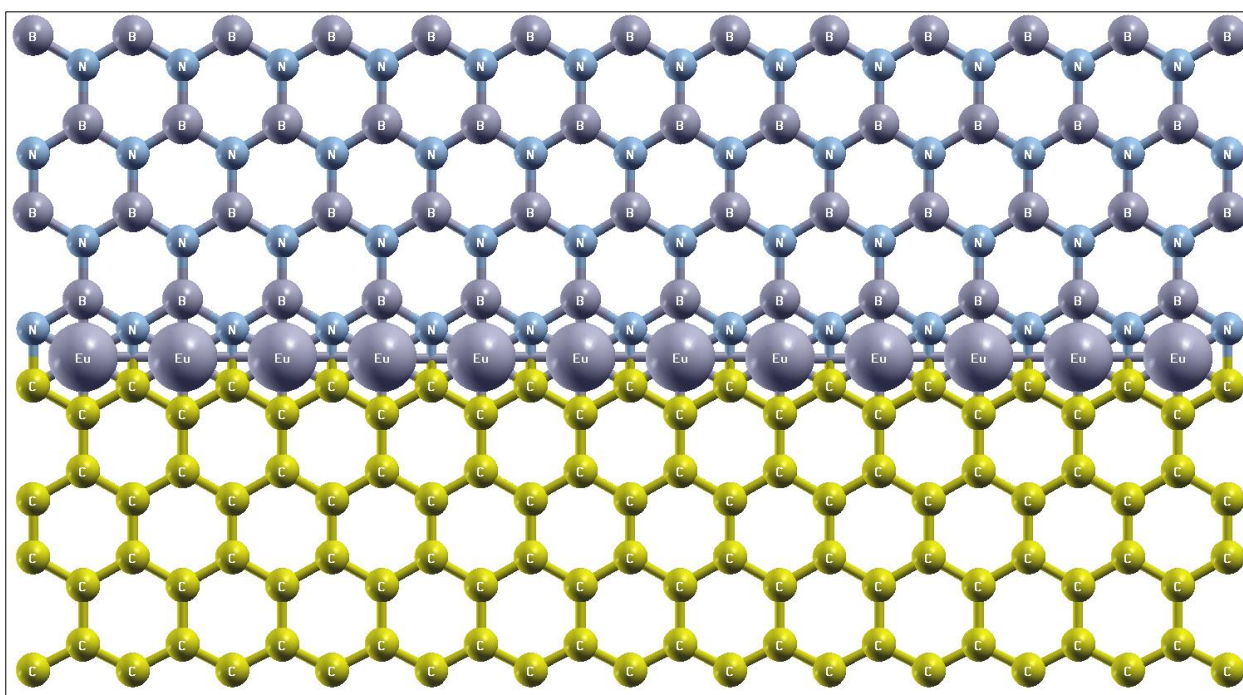
Za udaljenosti manje od 1,8 Å (spoj 4 lanca grafena i 4 lanca hBN, spoj 8 lanaca grafena i 8 lanaca hBN te spoj 10 lanaca grafena i 10 lanaca hBN), tj. manje od 1,5 Å (spoj 4 lanca grafena i 4 lanca hBN – koncentracije C2 i C3) ne dolazi do adsorpcije (što zaključujemo iz pozitivnih energija adsorpcije).

Istaknuti atom dušika

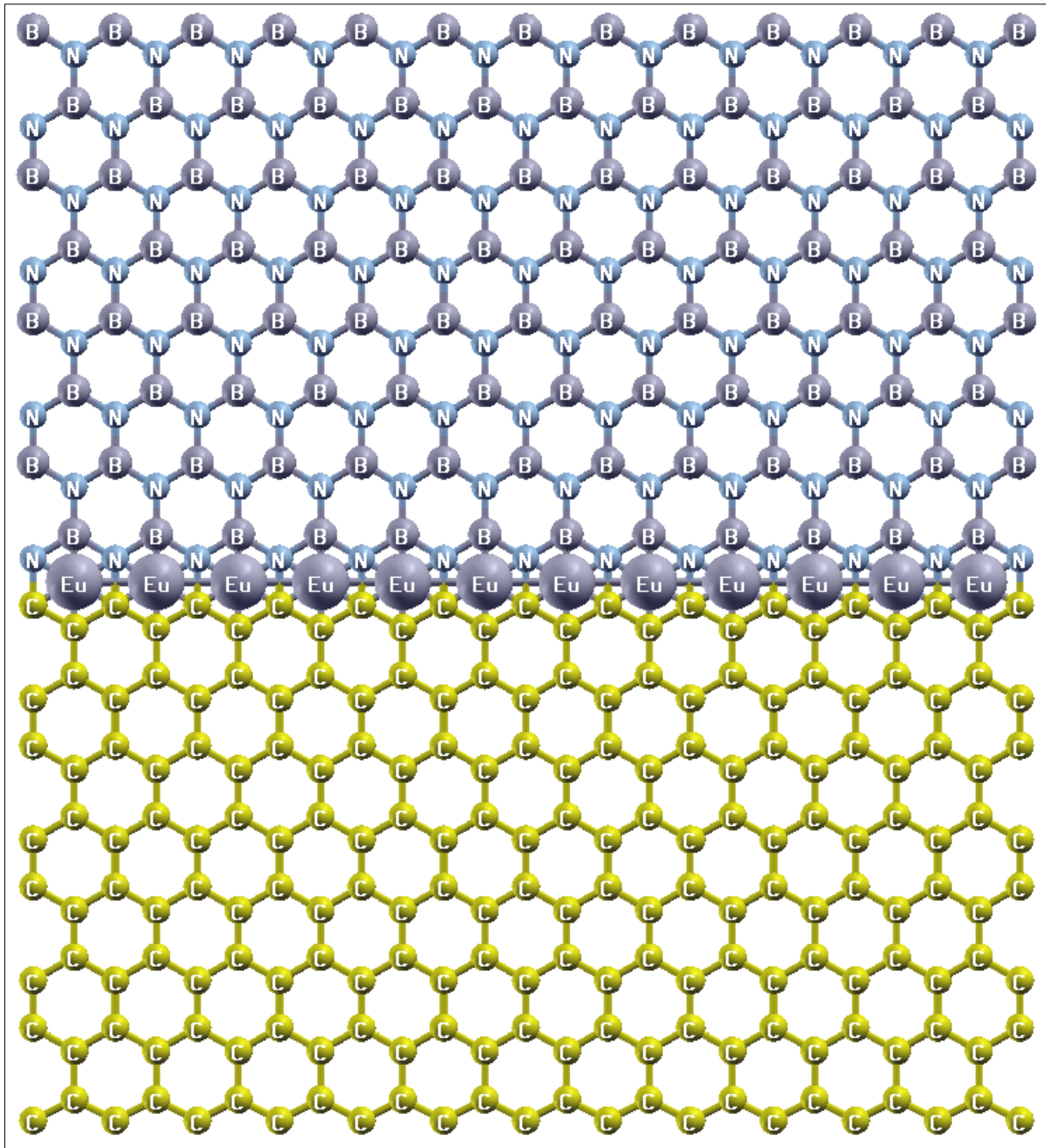
Za cik-cak vrstu ruba s istaknutim atomom dušika, spoj četiri lanca grafena i četiri lanca hBN prikazan je na Slici 25, spoj osam lanaca grafena i osam lanaca hBN prikazan je na Slici 26, a spoj deset lanaca grafena i deset lanaca hBN prikazan je na slici 27.

Slike struktura s dvostruko manjom koncentracijom (C2), odnosno tri puta manjom koncentracijom (C3) prikazane su na Slikama 28 i 29. Za sve promatrane strukture nanotrakica, atom europija smješten je iznad šesterokuta okruženog s tri atoma ugljika, dva atoma dušika i jednim atomom bora.

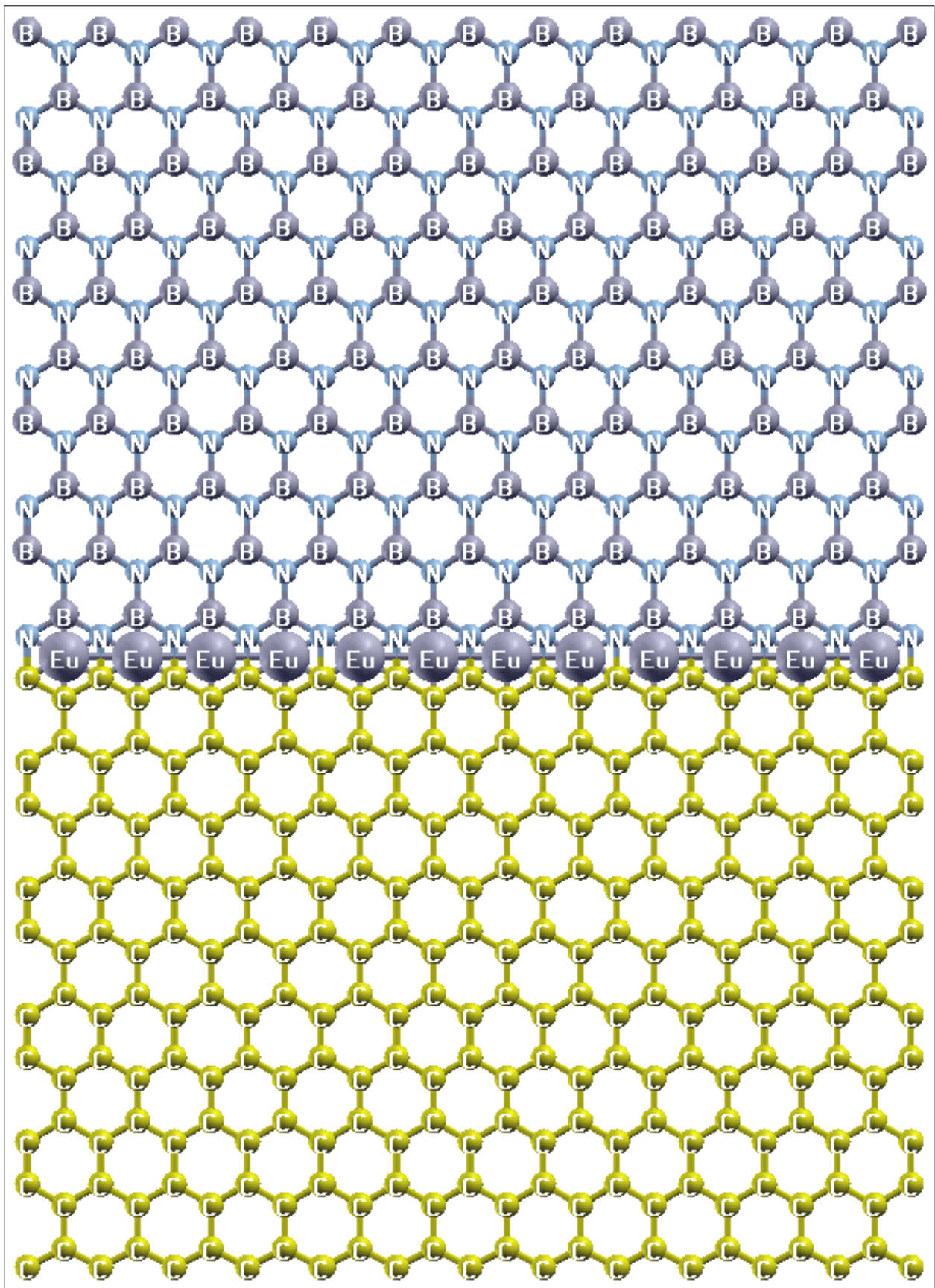
Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti prikazane su na Slikama 30 i 31 te u Tablicama 14 – 18, koje se nalaze u Dodatku B.



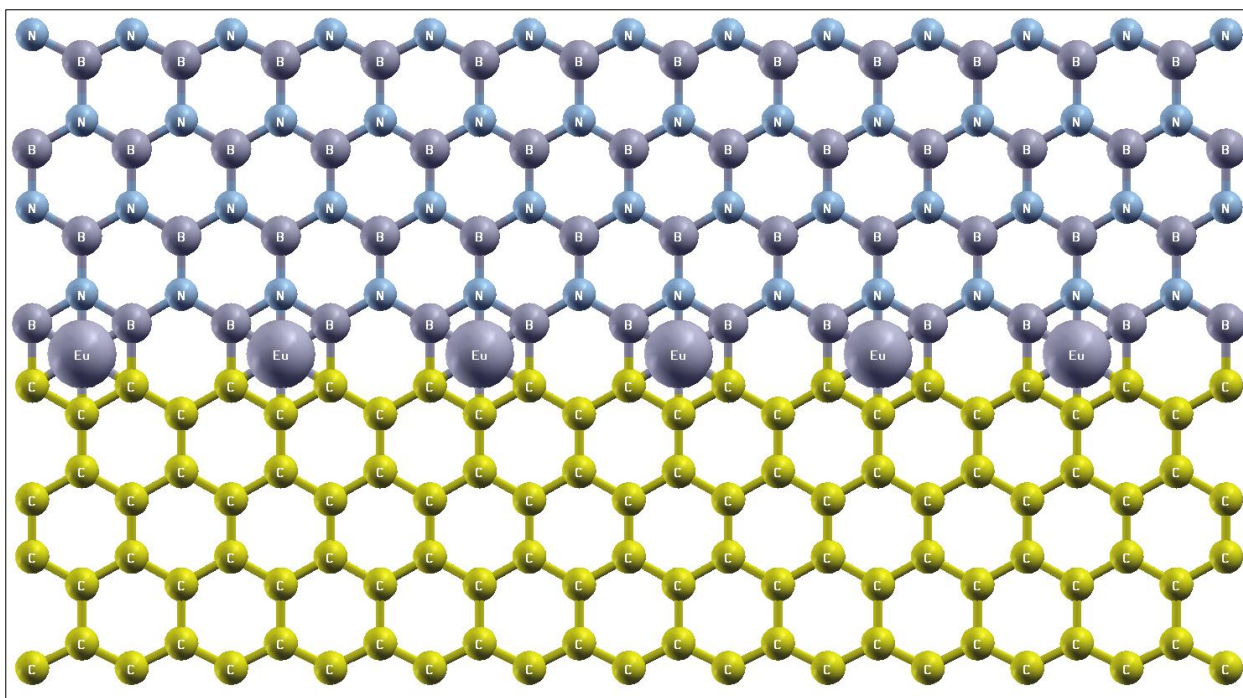
Slika 25: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN).



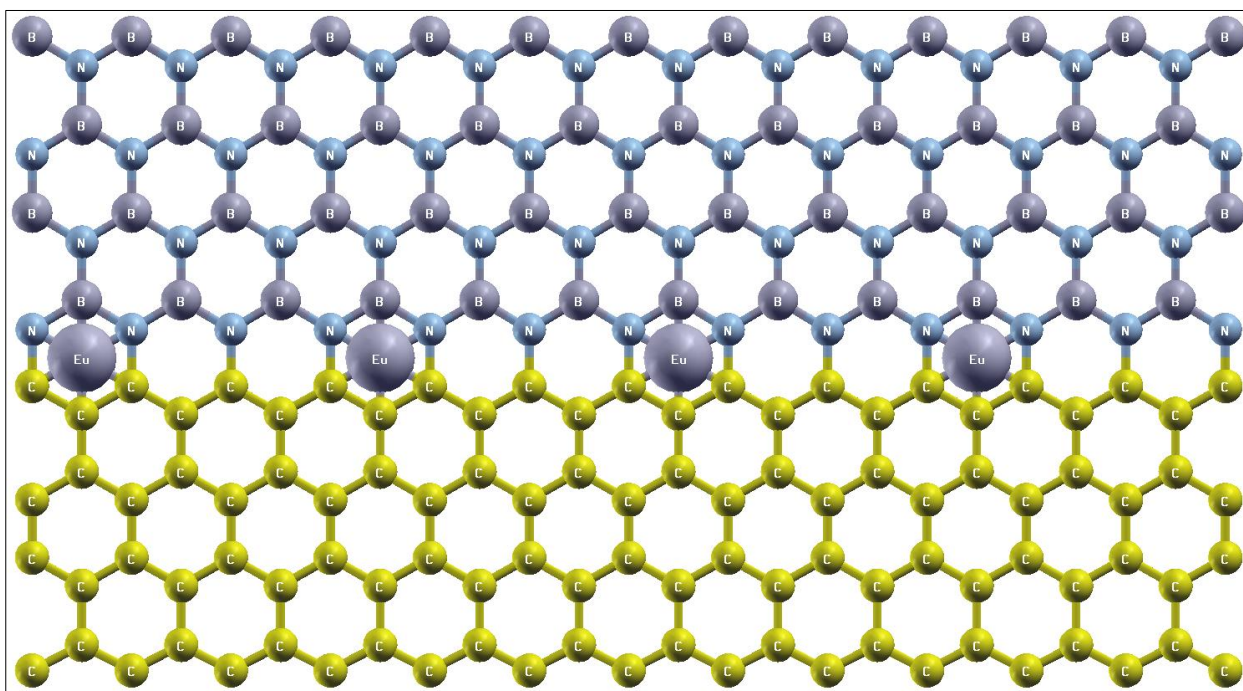
Slika 26: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, osam lanaca grafena + osam lanaca hBN).



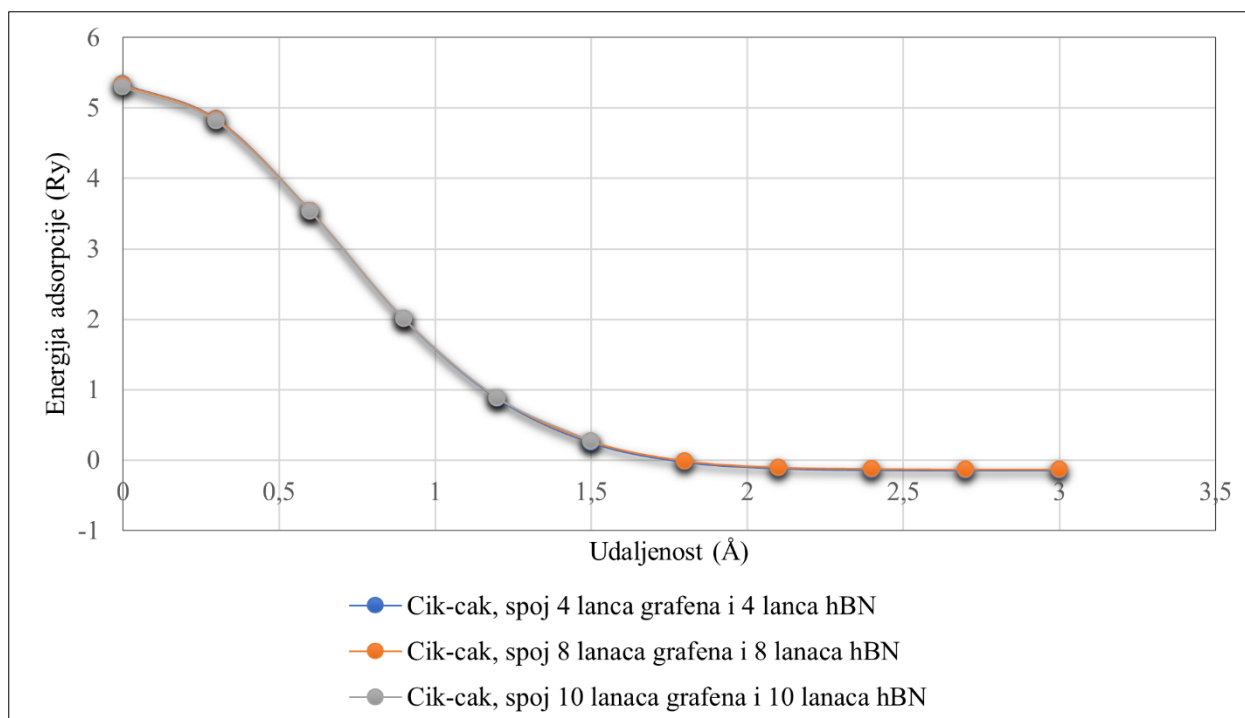
Slika 27: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, deset lanaca grafena + deset lanaca hBN).



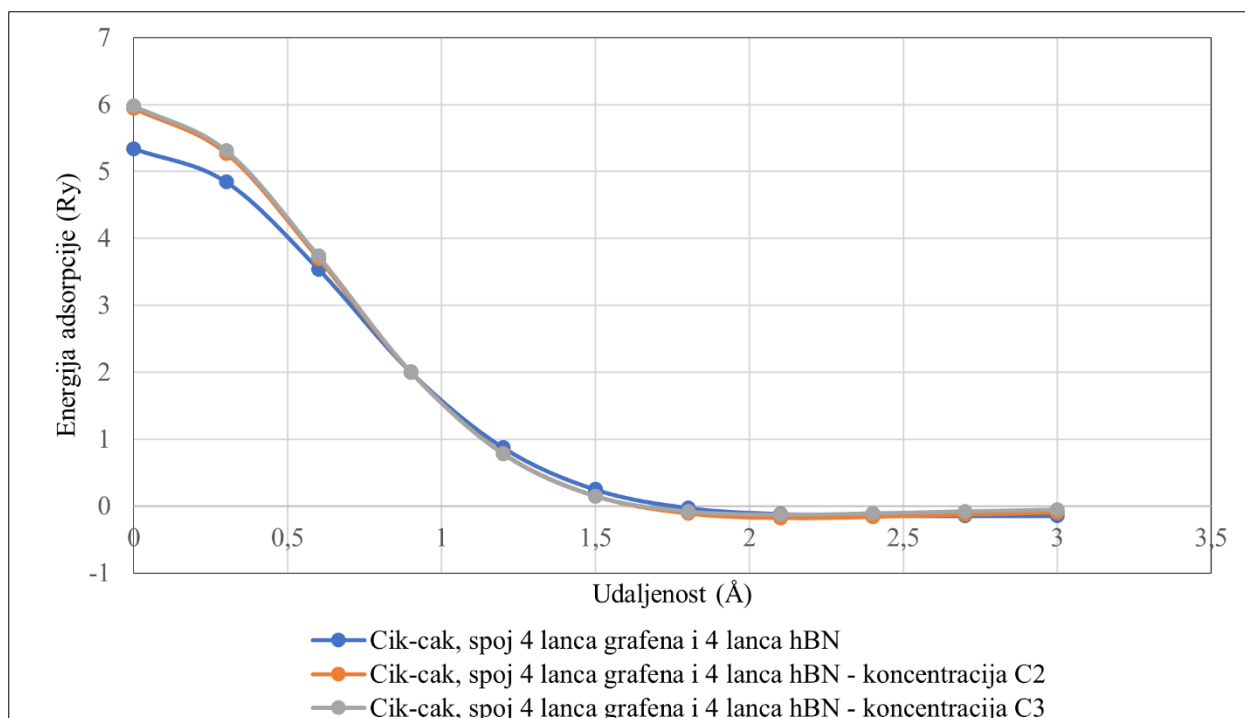
Slika 28: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN – koncentracija C2).



Slika 29: Heterostruktura grafena i heksagonalnog borovog nitrida (cik-cak, četiri lanca grafena + četiri lanca hBN – koncentracija C3).



Slika 30: Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti atoma europija od trakice grafena i borovog nitrida za trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN (plavi krugovi), trakicu koja se sastoji od 8 lanaca grafena i 8 lanaca hBN (narančasti krugovi) te trakicu koja se sastoji od 10 lanaca grafena i 10 lanaca hBN (sivi krugovi). Linije su ucrtane samo zbog jednostavnijeg pregleda.



Slika 31: Ovisnost energije adsorpcije o udaljenosti atoma europija od trakice grafena i borovog nitrida za trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN (plavi krugovi), trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN – koncentracija C2 (narančasti krugovi) te trakicu koja se sastoji od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN – koncentracija C3 (sivi krugovi). Linije su ucrtane samo zbog jednostavnijeg pregleda.

Na temelju rezultata iz grafova (Slike 30 i 31) i Tablica 14 – 18 koje se nalaze u Dodatku B, možemo zaključiti da je energija adsorpcije u primjerima za trakice koje se sastoje od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN, od 8 lanaca grafena i od 8 lanaca hBN te od 10 lanaca grafena i 10 lanaca hBN najmanja na udaljenosti atoma od trakice za 2,7 Å, dok je energija adsorpcije za trakice koje se sastoje od 4 lanca grafena i 4 lanca hBN – koncentracije C2 i C3 najmanja na udaljenosti atoma od trakice za 2,1 Å.

Za udaljenosti manje od 1,5 Å ne dolazi do adsorpcije (što zaključujemo iz pozitivnih energija adsorpcije).

9. Zaključak

Istraživanje koje smo proveli temelji se na teoriji funkcionala gustoće, a područje istraživanja jesu 2D materijali. Grafen i heksagonalni borov nitrid čine dio istraživanja ovog rada. Zajedno ta dva materijala čine heterostrukturu za koju smo promatrali energije adsorpcije atoma europija.

Uspoređivanjem rezultata druge cjeline u ovom istraživanju (ovisnost energije adsorpcije o položaju atoma europija iznad trakice), možemo zaključiti da je veća mogućnost adsorpcije atoma europija na heterostrukturu grafena i heksagonalnog borovog nitrida ukoliko su ta dva materijala povezani u naslonjač smjeru jer je energija adsorpcije manja nego kada su povezani u cik-cak smjeru. Također iz rezultata vidimo da su u dva slučaja energije adsorpcije najmanje za položaj atoma europija iznad šesterokuta, a u jednom slučaju iznad veze B-N. Slučaji u kojima je atom europija iznad šesterokuta su očekivani, ali kada je iznad veze B-N, taj slučaj nije očekivan. No kako nismo ispitivali uzroke ovim energijama, to bi mogao biti sljedeći korak istraživanja.

Energija adsorpcije atoma litija iznosi otprilike $-0,03$ Ry [22] što je u usporedbi s našim rezultatima otprilike deset puta manje. Energija adsorpcije atoma natrija iznosi otprilike $-0,11$ Ry [21] što je otprilike tri puta manje od naših rezultata. To je za očekivati zato jer je atom europija jako velikih dimenzija zbog čega jako teško prolazi kroz trakicu. Također atom europija možemo usporediti s primjerom velikog atoma, primjerice cezijem. Energija adsorpcije atoma cezija iznosi otprilike $-0,25$ Ry [23] što je približno našim rezultatima, ali je i dalje manje. Energijska barijera za atom cezija (na nanotrakicu hBN) iznosi otprilike $0,4$ Ry [23] što je u usporedbi s našim rezultatima puno manje jer ona iznosi otprilike 5 Ry.

Ako promotrimo grafove koje smo dobili u trećoj cjelini ovoga istraživanja (ovisnost energije adsorpcije o širini trakice i koncentraciji adsorbiranih atoma europija), primijetit ćemo da su vrijednosti jako slične i da do adsorpcije dolazi na približno jednakim udaljenostima. S obzirom da se krivulje na svim grafovima poklapaju, to znači da do konvergencije dolazi već za najmanji broj atoma europija, tj. za najveću promatranu koncentraciju europija na trakici. To nam govori da bismo u daljnjem istraživanju mogli ispitati ovisnost energije adsorpcije o većoj koncentraciji atoma europija.

Sljedeći korak nakon ovog istraživanja, kao što smo već ranije spomenuli, bilo bi ispitivanje uzroka navedenih energija. Također bi se u nastavku mogla ispitati elektronska svojstva trakica te bi se mogli istražiti utjecaji atoma europija na svojstva trakica.

Dodatak A – scf ulazna datoteka

```
&control
  calculation = 'scf',
  restart_mode = 'from_scratch',
  prefix = 'Eu_hBN',
  pseudo_dir = '/home/vdusic/pseudopotencijali/',
  outdir = './',
  tstress = .true.
  tprnfor = .true.
  nstep = 300
&system
  ibrav = 8,
  nat = 17,
  ntyp = 4,
  a = 4.26,
  b = 28.7885,
  c = 20.0,
  occupations = 'smearing',
  smearing = 'm-p',
  degauss = 0.03,
  ecutwfc = 110,
  ecutrho = 1100,
  vdw_corr = 'Grimme-D2'
&ELECTRONS
  mixing_mode = 'local-TF',
  mixing_beta = 0.2,
  ! conv_thr = 1.0D-13,
  electron_maxstep = 500,
/
&IONS
  ion_dynamics = 'bfgs',
  ! ion_damping = 0.2,
  ion_positions = 'from_input',
  upscale = 100,

&CELL
  cell_dynamics = "bfgs",
  press_conv_thr = 0.5D-4,
  cell_dofree = 'x',
  cell_factor = 3
/
ATOMIC_SPECIES
C 12.011 C.pbe-n-rrkjus_psl.0.1.UPF
B 10.811 B.pbe-n-van_ak.UPF
N 14.009 N.pbe-van_ak.UPF
Eu 151.964 Eu.pbe-spdn-rrkjus_psl.1.0.0.UPF

ATOMIC_POSITIONS (crystal)
C 0.00000000 0.00000000 0.00000000
C 0.16666666 0.043611164 0.00000000
C 0.50000000 0.043611164 0.00000000
C 0.66666666 0.00000000 0.00000000
C 0.00000000 0.087222328 0.00000000
C 0.66666666 0.087222328 0.00000000
C 0.16666666 0.130833493 0.00000000
C 0.50000000 0.130833493 0.00000000
B 0.00000000 0.174444657 0.00000000
N 0.66666666 0.174444657 0.00000000
N 0.16666666 0.218055821 0.00000000
B 0.50000000 0.218055821 0.00000000
B 0.00000000 0.261666985 0.00000000
N 0.66666666 0.261666985 0.00000000
N 0.16666666 0.305278149 0.00000000
B 0.50000000 0.305278149 0.00000000
Eu 0.33333333 0.17777777 0.10000000

K_POINTS {automatic}
14 1 1 0 0
```

Dodatak B – Tablice rezultata

Naslonjač vrsta ruba

Tablica 4: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-323,815435817	-200,091494579	-123,57657900	-0,147362238
2,7	-323,841535316	-200,091494579	-123,57657900	-0,173461737
2,4	-323,867753412	-200,091494579	-123,57657900	-0,199679833
2,1	-323,877544545	-200,091494579	-123,57657900	-0,209470966
1,8	-323,815625598	-200,091494579	-123,57657900	-0,147552019
1,5	-323,591231062	-200,091494579	-123,57657900	0,076842517
1,2	-323,052861523	-200,091494579	-123,57657900	0,615212056
0,9	-322,090640449	-200,091494579	-123,57657900	1,577433130
0,6	-320,814369190	-200,091494579	-123,57657900	2,853704389
0,3	-319,667976236	-200,091494579	-123,57657900	4,000097343
0,0	-319,142384835	-200,091494579	-123,57657900	4,525688744

Tablica 5: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od osam lanaca grafena te osam lanaca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-524,696731886	-400,827450241	-123,57657900	-0,292702645
2,7	-524,719496973	-400,827450241	-123,57657900	-0,315467732
2,4	-524,743392741	-400,827450241	-123,57657900	-0,339363500
2,1	-524,749799762	-400,827450241	-123,57657900	-0,345770521
1,8	-524,673666388	-400,827450241	-123,57657900	-0,269637147
1,5	-524,414650777	-400,827450241	-123,57657900	-0,010621536
1,2	-523,805345458	-400,827450241	-123,57657900	0,598683783
0,9	-522,724938548	-400,827450241	-123,57657900	1,679090693
0,6	-521,249305368	-400,827450241	-123,57657900	3,154723873
0,3	-519,924950696	-400,827450241	-123,57657900	4,479078545
0,0	-519,324786658	-400,827450241	-123,57657900	5,079242583

Tablica 6: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od deset lanaca grafena te deset lanaca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-625,098718494	-501,193170712	-123,57657900	-0,328968782
2,7	-625,121615099	-501,193170712	-123,57657900	-0,351865387
2,4	-625,145577706	-501,193170712	-123,57657900	-0,375827994
2,1	-625,151400833	-501,193170712	-123,57657900	-0,381651121
1,8	-625,074235920	-501,193170712	-123,57657900	-0,304486208
1,5	-624,816164928	-501,193170712	-123,57657900	-0,046415216
1,2	-624,210882710	-501,193170712	-123,57657900	0,558867002
0,9	-623,141839782	-501,193170712	-123,57657900	1,627909930
0,6	-621,680796144	-501,193170712	-123,57657900	3,088953568
0,3	-620,350884962	-501,193170712	-123,57657900	4,418864750
0,0	-619,739400115	-501,193170712	-123,57657900	5,030349597

Tablica 7: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN – koncentracija C2, koja je dvostruko šira. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-523,868631134	-400,202361998	-123,57657900	-0,089690136
2,7	-523,888761023	-400,202361998	-123,57657900	-0,109820025
2,4	-523,903119067	-400,202361998	-123,57657900	-0,124178069
2,1	-523,910155552	-400,202361998	-123,57657900	-0,131214554
1,8	-523,880596187	-400,202361998	-123,57657900	-0,101655189
1,5	-523,682334158	-400,202361998	-123,57657900	0,096606840
1,2	-523,154336590	-400,202361998	-123,57657900	0,624604408
0,9	-522,177504895	-400,202361998	-123,57657900	1,601436103
0,6	-520,873969610	-400,202361998	-123,57657900	2,904971388
0,3	-519,687412947	-400,202361998	-123,57657900	4,091528051
0,0	-519,155814012	-400,202361998	-123,57657900	4,623126986

Tablica 8: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN – koncentracija C3, koja je trostruko šira. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-723,967986376	-600,303543033	-123,57657900	-0,087864343
2,7	-723,986619466	-600,303543033	-123,57657900	-0,106497433
2,4	-723,999929639	-600,303543033	-123,57657900	-0,119807606
2,1	-724,009238658	-600,303543033	-123,57657900	-0,129116625
1,8	-723,982011507	-600,303543033	-123,57657900	-0,101889474
1,5	-723,782036718	-600,303543033	-123,57657900	0,098085315
1,2	-723,254008213	-600,303543033	-123,57657900	0,626113820
0,9	-722,280722901	-600,303543033	-123,57657900	1,599399132
0,6	-720,978023942	-600,303543033	-123,57657900	2,902098091
0,3	-719,806812577	-600,303543033	-123,57657900	4,073309456
0,0	-719,275094891	-600,303543033	-123,57657900	4,605027142

Cik-cak vrsta ruba

Istaknuti atom bora

Tablica 9: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-324,056972354	-200,271620199	-123,57657900	-0,208773155
2,7	-324,067484421	-200,271620199	-123,57657900	-0,219285222
2,4	-324,075580440	-200,271620199	-123,57657900	-0,227381241
2,1	-324,075601270	-200,271620199	-123,57657900	-0,227402071
1,8	-324,009219854	-200,271620199	-123,57657900	-0,161020655
1,5	-323,790503042	-200,271620199	-123,57657900	0,057696157
1,2	-323,278493312	-200,271620199	-123,57657900	0,569705887
0,9	-322,341888778	-200,271620199	-123,57657900	1,506310421
0,6	-321,088947428	-200,271620199	-123,57657900	2,759251771
0,3	-320,060224717	-200,271620199	-123,57657900	3,787974482
0,0	-319,692473178	-200,271620199	-123,57657900	4,155726021

Tablica 10: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od osam lanaca grafena te osam lanaca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-524,853197860	-401,075032172	-123,57657900	-0,20158669
2,7	-524,862081226	-401,075032172	-123,57657900	-0,21047005
2,4	-524,868643631	-401,075032172	-123,57657900	-0,21703246
2,1	-524,868039649	-401,075032172	-123,57657900	-0,21642848
1,8	-524,800571240	-401,075032172	-123,57657900	-0,14896007
1,5	-524,578146974	-401,075032172	-123,57657900	0,073464198
1,2	-524,061045304	-401,075032172	-123,57657900	0,590565868
0,9	-523,123001446	-401,075032172	-123,57657900	1,528609726
0,6	-521,864886470	-401,075032172	-123,57657900	2,786724702
0,3	-520,826462419	-401,075032172	-123,57657900	3,825148753
0,0	-520,458107949	-401,075032172	-123,57657900	4,193503223

Tablica 11: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od deset lanaca grafena te deset lanaca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-625,255006549	-501,477401921	-123,57657900	-0,201025628
2,7	-625,263621918	-501,477401921	-123,57657900	-0,209640997
2,4	-625,269965120	-501,477401921	-123,57657900	-0,215984199
2,1	-625,269219440	-501,477401921	-123,57657900	-0,215238519
1,8	-625,201196933	-501,477401921	-123,57657900	-0,147216012
1,5	-624,976844107	-501,477401921	-123,57657900	0,077136814
1,2	-624,456250664	-501,477401921	-123,57657900	0,597730257
0,9	-623,512900905	-501,477401921	-123,57657900	1,541080016
0,6	-622,247118038	-501,477401921	-123,57657900	2,806862883
0,3	-621,201176556	-501,477401921	-123,57657900	3,852804365
0,0	-620,829718306	-501,477401921	-123,57657900	4,224262615

Tablica 12: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN – koncentracija C2, koja je dvostruko šira. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-524,329037926	-400,546376328	-123,57657900	-0,206082598
2,7	-524,367192933	-400,546376328	-123,57657900	-0,244237605
2,4	-524,400319223	-400,546376328	-123,57657900	-0,277363895
2,1	-524,411788064	-400,546376328	-123,57657900	-0,288832736
1,8	-524,352134572	-400,546376328	-123,57657900	-0,229179244
1,5	-524,132112212	-400,546376328	-123,57657900	-0,009156884
1,2	-523,596621026	-400,546376328	-123,57657900	0,526334302
0,9	-522,639411742	-400,546376328	-123,57657900	1,483543586
0,6	-521,383827007	-400,546376328	-123,57657900	2,739128321
0,3	-520,162539807	-400,546376328	-123,57657900	3,960415521
0,0	-519,568620247	-400,546376328	-123,57657900	4,554335081

Tablica 13: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN – koncentracija C3, koja je trostruko šira. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-724,584847794	-600,819560769	-123,57657900	-0,188708025
2,7	-724,626810168	-600,819560769	-123,57657900	-0,230670399
2,4	-724,662984924	-600,819560769	-123,57657900	-0,266845155
2,1	-724,680543346	-600,819560769	-123,57657900	-0,284403577
1,8	-724,637911554	-600,819560769	-123,57657900	-0,241771785
1,5	-724,423953983	-600,819560769	-123,57657900	-0,027814214
1,2	-723,887222750	-600,819560769	-123,57657900	0,508917019
0,9	-722,945011800	-600,819560769	-123,57657900	1,451127969
0,6	-721,694987581	-600,819560769	-123,57657900	2,701152188
0,3	-720,464158261	-600,819560769	-123,57657900	3,931981508
0,0	-719,830904983	-600,819560769	-123,57657900	4,565234786

Istaknuti atom dušika

Tablica 14: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-323,993617803	-200,27065861	-123,57657900	-0,146380193
2,7	-323,994039699	-200,27065861	-123,57657900	-0,146802089
2,4	-323,987924453	-200,27065861	-123,57657900	-0,140686843
2,1	-323,964262756	-200,27065861	-123,57657900	-0,117025146
1,8	-323,873854076	-200,27065861	-123,57657900	-0,026616466
1,5	-323,599266328	-200,27065861	-123,57657900	0,247971282
1,2	-322,972911358	-200,27065861	-123,57657900	0,874326252
0,9	-321,844448237	-200,27065861	-123,57657900	2,002789373
0,6	-320,305838039	-200,27065861	-123,57657900	3,541399571
0,3	-319,003981816	-200,27065861	-123,57657900	4,843255794
0,0	-318,509372214	-200,27065861	-123,57657900	5,337865396

Tablica 15: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od osam lanaca grafena te osam lanaca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-524,793074829	-401,082288558	-123,57657900	-0,134207271
2,7	-524,793924069	-401,082288558	-123,57657900	-0,135056511
2,4	-524,787301256	-401,082288558	-123,57657900	-0,128433698
2,1	-524,765762295	-401,082288558	-123,57657900	-0,106894737
1,8	-524,672728127	-401,082288558	-123,57657900	-0,013860569
1,5	-524,395178516	-401,082288558	-123,57657900	0,263689042
1,2	-523,773197883	-401,082288558	-123,57657900	0,885669675
0,9	-522,649366821	-401,082288558	-123,57657900	2,009500737
0,6	-521,116926361	-401,082288558	-123,57657900	3,541941197
0,3	-519,819526131	-401,082288558	-123,57657900	4,839341427
0,0	-519,325957219	-401,082288558	-123,57657900	5,332910339

Tablica 16: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od deset lanaca grafena te deset lanaca hBN. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-625,214103574	-501,488778617	-123,57657900	-0,148745957
2,7	-625,231028372	-501,488778617	-123,57657900	-0,165670755
2,4	-625,230039472	-501,488778617	-123,57657900	-0,164681855
2,1	-625,227524857	-501,488778617	-123,57657900	-0,162167240
1,8	-625,180916293	-501,488778617	-123,57657900	-0,115558676
1,5	-624,800428345	-501,488778617	-123,57657900	0,264929272
1,2	-624,182193767	-501,488778617	-123,57657900	0,883163850
0,9	-623,061385755	-501,488778617	-123,57657900	2,003971862
0,6	-621,536116100	-501,488778617	-123,57657900	3,529241517
0,3	-620,254882655	-501,488778617	-123,57657900	4,810474962
0,0	-619,768426755	-501,488778617	-123,57657900	5,296930862

Tablica 17: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN – koncentracija C2, koja je dvostruko šira. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-524,213285908	-400,540895521	-123,57657900	-0,095811387
2,7	-524,243557203	-400,540895521	-123,57657900	-0,126082682
2,4	-524,278119546	-400,540895521	-123,57657900	-0,160645025
2,1	-524,295173460	-400,540895521	-123,57657900	-0,177698939
1,8	-524,227145602	-400,540895521	-123,57657900	-0,109671081
1,5	-523,967119326	-400,540895521	-123,57657900	0,150355195
1,2	-523,332884944	-400,540895521	-123,57657900	0,784589577
0,9	-522,117238013	-400,540895521	-123,57657900	2,000236508
0,6	-520,418272426	-400,540895521	-123,57657900	3,699202095
0,3	-518,845713510	-400,540895521	-123,57657900	5,271761011
0,0	-518,175493816	-400,540895521	-123,57657900	5,941980705

Tablica 18: Udaljenost atoma europija od trakice (prvi stupac), energije sustava trakice + atoma (drugi stupac), energija trakice (treći stupac), energija izoliranog atoma europija (četvrti stupac) te energije adsorpcije (peti stupac) za trakicu koja se sastoji od četiri lanca grafena te četiri lanca hBN – koncentracija C3, koja je trostruko šira. Sve energije izražene su u Ry.

Udaljenost (Å)	E_{t+a} (Ry)	E_t (Ry)	E_a (Ry)	E_{ads} (Ry)
3,0	-724,442256955	-600,811343359	-123,57657900	-0,054334596
2,7	-724,468445776	-600,811343359	-123,57657900	-0,080523417
2,4	-724,498721481	-600,811343359	-123,57657900	-0,110799122
2,1	-724,517490742	-600,811343359	-123,57657900	-0,129568383
1,8	-724,468974114	-600,811343359	-123,57657900	-0,081051755
1,5	-724,241204132	-600,811343359	-123,57657900	0,146718227
1,2	-723,609418621	-600,811343359	-123,57657900	0,778503738
0,9	-722,381585487	-600,811343359	-123,57657900	2,006336872
0,6	-720,651980032	-600,811343359	-123,57657900	3,735942327
0,3	-719,076571427	-600,811343359	-123,57657900	5,311350932
0,0	-718,407467405	-600,811343359	-123,57657900	5,980454954

Literatura

- [1] Mas-Ballesté, R., Gómez-Navarro, C., Gómez Herrero, J., Zamora, F. (2010). 2D Materials: to graphene and beyond. *Nanoscale*, 2011, 3, 20. – 30. str.
- [2] Gusev, A. I., *Nanostructured material*. Glossary of nanotechnology and related terms. Preuzeto 3. listopada 2020. sa sljedećeg URL: <https://eng.thesaurus.rusnano.com/wiki/article1371>
- [3] Horvat, G. (2018). *Elastičnost dvodimenzionalnog indija*. Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za fiziku. Osijek
- [4] Lin, Z. et al. (2016). 2D materials advances: from large scale synthesis and controlled heterostructures to improved characterization techniques, defects and applications. *2D materials*. 2016, 3
- [5] Novoselov, K. S., Castro Neto, A. H. (2012). Two-dimensional crystals-based heterostructures: materials with tailored properties. *Physica Scripta*, 2012, 014006
- [6] *Nanoparticles and their applications*. Understanding Nano. Preuzeto 4. listopada sa sljedećeg URL: <https://www.understandingnano.com/nanoparticles.html>
- [7] Rushton, P. P. (2002). *Towards a non-local density functional description of exchange and correlation*. Durham theses, Durham University
- [8] Kohn, W. (1999). Electronic structure of matter – wave functions and density functionals. *Rev. Mod. Phys.*, 1999, 71, str. 1253-1265
- [9] Cuevas, J. C. (2010). *Introduction to density functional theory*. Universität Karlsruhe, Institut für Theoretische Festkörperphysik. Karlsruhe
- [10] Lukačević, I. (2009). *Visokotlačni fazni prijelazi u binarnim poluvodičima*. Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet. Zagreb
- [11] Batistić, I. (2010). *Teorija funkcionala gustoće čestica*. Preuzeto 5. listopada sa sljedećeg URL: http://grdelin.phy.hr/~ivo/Nastava/Napredna_kvantna/11-pred.pdf
- [12] Bošnjaković, D. (2011). *Visokotlačni fazni prijelazi kristala silicija*. Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za fiziku. Osijek

[13] Hasnip, P. J. (2009). *Electronic structure, plane waves and pseudopotentials*. University of Cambridge.

Preuzeto 5. listopada sa sljedećeg URL: <http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/castep/oxford/hasnip1.pdf>

[14] Quantum ESPRESSO. URL: <https://www.quantum-espresso.org/>

[15] XCrySDen. URL: <http://www.xcrysden.org/>

[16] Računalni klaster Isabella.

URL: <https://wiki.srce.hr/pages/viewpage.action?pageId=8487673>

[17] Wang, J., Fengcai, M., Megntao, S. (2017). Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications. *RSC Adv.*, 2017, 7, 16801-16822

[18] Cai, J., Jolie, W., Silva, C. C., Petrović, M., Schlueter, C., Michely, T., Kralj, M., Lee, T. L., Busse, C. (2018). Modifying the geometric and electronic structure of hexagonal boron nitride or Ir(111) by Cs adsorption and intercalation. *Physical Review*, B 98, 195443

[19] Petrović, M., Horn-von Hoegen, M., Meyer zu Heringdorf, F. J. (2018). Lateral heterostructures of hexagonal boron nitride and graphene: BCN alloy formation and microstructuring mechanism. Faculty of Physics and CENIDE, University of Duisburg-Essen, Germany, Center of Excellence for Advanced Materials and Sensing Devices, Institute of Physics, Zagreb, Croatia

[20] Liu, Z., Ma, L., Shi, G., Zhou, W., Gong, Y., Lei, S., Yang, X., Zhang, J., Yu, J., Hackenberg, K. P., Babakhani, A., Idrobo, J. C., Vajtai, R., Lou, J., Ajayan, P. (2013). In-plane heterostructures of graphene and hexagonal boron nitride with controlled domain sizes. *Nature Nanotechnology*, 10.1038/NNANO.2012.256

[21] Sengupta, A., Frauenheim, T. (2017). Lithium and sodium adsorption properties of monolayer antimonene. *Materials Today Energy*, 5 (2017) 347-354

[22] Lee, E., Persson, K. (2012). Li Adsorption and intercalation in Single Layer Graphene and Few Layer Graphene by First Principles. *Nanno Letters*, 2012, 12, 4624-4628

[23] Cai, J., Jolie, W., Silva, C. C., Petrović, M., Schlueter, C., Michely, T., Kralj, M., Lee, T.-L., Busse, C. (2018). Modifying the geometric and electronic structure of hexagonal boron nitride on Ir(111) by Cs adsorption and intercalation. *Physical Review*, B 98, 195443 (2018)

Životopis

Vanja Dušić rođen je 30. srpnja 1994. godine. Nakon završene Osnovne škole Vijenac u Osijeku, pohađao je III. gimnaziju u Osijeku koju je s izvrsnim uspjehom završio 2013. godine. Nakon toga, iste je godine upisao Sveučilišni preddiplomski studij Fizike na Odjelu za fiziku na Sveučilištu Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku koji uspješno završava u veljači 2018. godine. Nekoliko mjeseci nakon, u listopadu 2018. godine upisuje Sveučilišni diplomski studij Fizike i informatike također na Odjelu za fiziku na osječkom Sveučilištu te ga uspješno završava u listopadu 2020. godine. Dvije akademske godine (2015./2016. i 2016./2017.) bio je član i predsjednik Studentskog zbora Odjela za fiziku te predstavnik Studentskog zbora Odjela za fiziku u Sveučilišnom zboru Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku.

Vanja se bavi plesom još od 2008. godine od kada je aktivni član Športsko-plesne udruge Feniks s kojom sudjeluje na brojim manifestacijama, kongresima i festivalima unutar i van granica Hrvatske. Tijekom 2016. i 2017. godine pohađa te uspješno završava program za Voditelja plesnih tehnika na Pučkom otvorenom učilištu u Zagrebu. Volontira u Športsko-plesnoj udruzi Feniks u Osijeku te postaje dopredsjednikom udruge u prosincu 2019. godine. Također je član baletnog ansambla Hrvatskog narodnog kazališta u Osijeku s kojim je sudjelovao u više od 350 kazališnih predstava.

Neki od hobija su mu plesanje, putovanje, čitanje, pisanje, slušanje glazbe, vožnja biciklom, trčanje.