

18

Скорости звука и плотности фононных состояний в однородно деформированном плоском листе графена

© Ю.А. Баимова¹, С.В. Дмитриев¹, А.В. Савин², Ю.С. Кившарь³

¹ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

² Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

³ Nonlinear Physics Centre, Australian National University, Canberra, Australia

E-mail: julia.a.baimova@gmail.com

(Поступила в Редакцию 22 августа 2011 г.)

В окончательной редакции 6 октября 2011 г.)

В последнее время ведутся интенсивные исследования влияния упругой деформации на механические и физические свойства графена. С помощью метода молекулярной динамики построена поверхность в трехмерном пространстве компонент тензора плоской деформации, ограничивающая область структурной устойчивости плоского листа графена, без учета тепловых колебаний и влияния граничных условий. Рассчитаны скорости звука и плотности фононных состояний в графене, подвергнутом упругой деформации в пределах области структурной устойчивости. Показано, что при приближении к границе устойчивости плоского листа графена одна из скоростей звука обращается в нуль. При двухосном растяжении графена щель в фононном спектре не образуется, но она появляется при одноосном растяжении вдоль направлений zigzag или armchair, а также при комбинированном деформировании растягивающими и сдвигающими усилиями.

Работа поддержана грантом РФФИ № 11-08-97057-р_поволжье_a.

1. Введение

Графен представляет собой двумерный кристаллический материал в виде моноатомного слоя углерода, где каждый атом связан валентной связью с тремя соседями, как показано на рис. 1, а. Уникальные механические [1], физические [2–4] и оптические [5,6] свойства графена находят различное применение [7], например в электронике [2,8], оптике [8], спинтронике [9], при хранении и транспортировке водорода [10], а также при изготовлении композитных материалов [11].

Наиболее просто и эффективно изменять и контролировать физические свойства графена и других наноразмерных углеродных структур можно с помощью их упругой деформации [12]. Например, было обнаружено, что теплопроводность графена и углеродных нанотрубок монотонно падает с увеличением растягивающих напряжений [13]. Существенно зависит от деформации и оптическая проводимость графена [14]. В работе [15] проводилось эмпирическое моделирование продольного растяжения и сжатия графеновых наночастиц и нанолент. Изменение электронного спектра при упругой плоской деформации графена рассматривалось в работе [16], где было показано, что образование энергетической щели в спектре электронов графена возникает для деформации ~ 0.15 и носит пороговый характер для различных направлений деформации. Моделирование из первых принципов также показывает, что одноосная деформация до 0.1 не приводит к возникновению щели в спектре фононных колебаний атомов графена [17]. Увеличение

с температурой модуля Юнга в графене в температурном интервале от 100 до 500 К было получено в молекулярно-динамическом исследовании [18]. В рамках модели Киттинга исследовались упругие постоянные графена [19]. Область устойчивости графена методом молекулярной динамики с использованием стандартного набора межатомных потенциалов исследована в [20]. Другой интересной областью исследования является изучение генерации и динамики дефектов под действием деформации [21] и без учета внешнего воздействия [22] в углеродных наноструктурах.

Целью настоящей работы является изучение зависимости скорости звука и плотности фононных состояний от упругой деформации бездефектного графена, без учета тепловых колебаний атомов и влияния граничных условий. Эта задача решается путем атомистического моделирования с использованием межатомного потенциала Бреннера [23] с модифицированным набором параметров (см., например, [24]). Отметим, что используемый набор межатомных потенциалов был апробирован при решении целого ряда задач, например при изучении динамики уединенных плоских волн в углеродных наноструктурах [25], поведения нанолент, подвергнутых осевому нагружению [26], модулей Юнга в графене [27]. Отметим, что существуют и другие межатомные потенциалы для графена, в частности стандартный набор межатомных потенциалов, учитывающий деформацию валентных и торсионных углов [28,29], который использовался в работе [20] для расчета предельной прочности графена, подвергнутого однородной

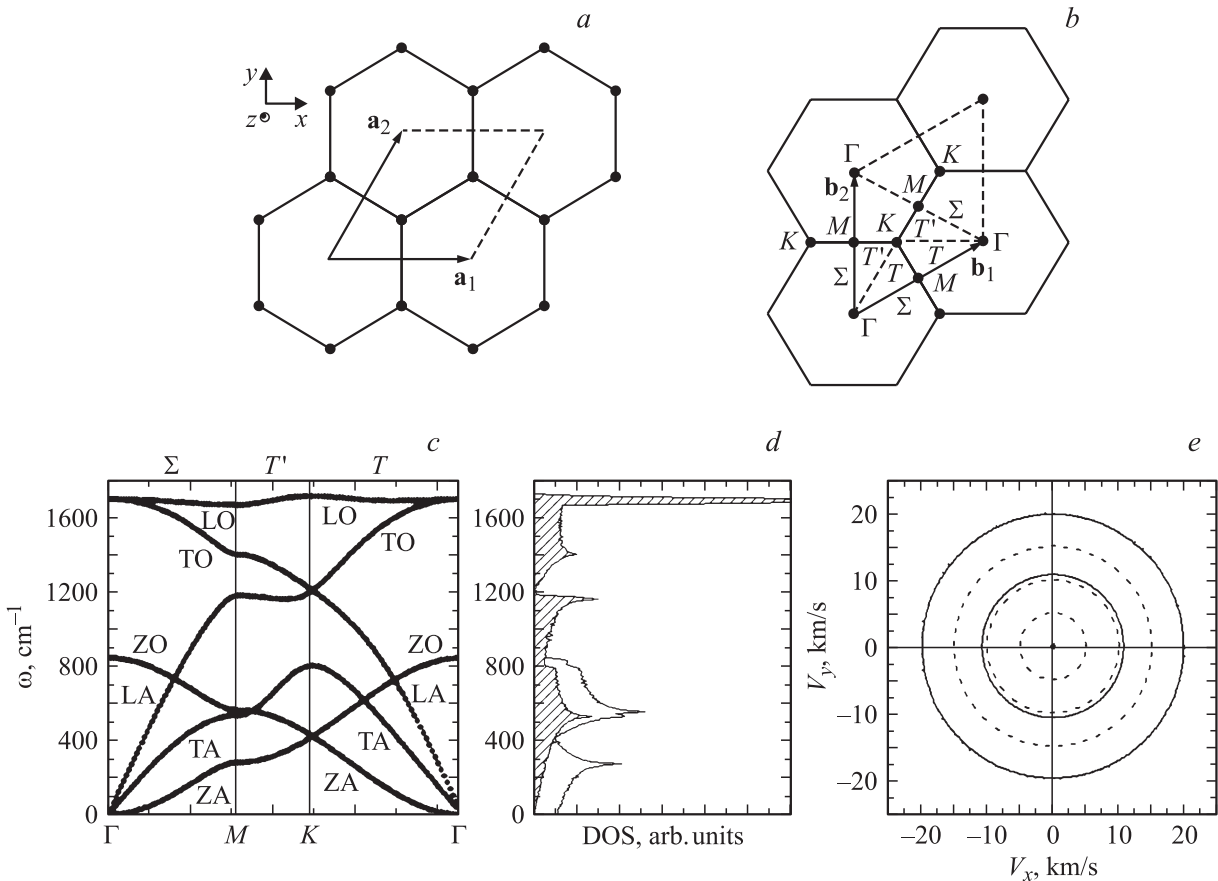


Рис. 1. *a)* Кристаллическая решетка графена и векторы трансляции примитивной ячейки $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$, содержащей два атома углерода. *b)* Обратное пространство решетки графена с первой зоной Бриллюэна, определенной векторами $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$. Заглавными буквами обозначены высокосимметричные точки и направления первой зоны Бриллюэна. *c)* Дисперсионные кривые недеформированного графена. Акустические (оптические) ветви LA (LO) и TA (TO) соответствуют продольной и поперечной волнам в плоскости листа графена. Акустическая (оптическая) ветвь ZA (ZO) соответствует поперечной волне по направлению нормали к плоскости графена. *d)* Плотности фоновых состояний (DOS) недеформированного графена. Заштрихованная область показывает DOS, не учитывающую фононы с колебаниями атомов перпендикулярно плоскости листа графена, т.е. ZA- и ZO-фононы. *e)* Скорости звука недеформированного графена, равные 19.7, 10.7 и 0 km/s для фоновых ветвей LA, TA, ZA соответственно. Заштрихованные линии — линии сетки.

плоской деформации. Кроме того, упомянем интересные работы по структурному моделированию межатомных взаимодействий графена [30].

2. Описание модели

Примитивная ячейка графена, определяемая векторами трансляции $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ (рис. 1, *a*), содержит два атома, каждый из которых имеет три степени свободы — компоненты вектора перемещения. Ось x совпадает с направлением zigzag, а ось y — с направлением armchair. Обратное пространство графена представлено на рис. 1, *b*, где заглавными буквами обозначены высокосимметричные точки и направления первой зоны Бриллюэна.

Для того чтобы задать энергию взаимодействия двух атомов углерода в графене с индексами i и j , нужно также знать положение других связанных с ними атомов.

Пусть r_{ij} — длина рассматриваемой связи, а $\theta_{i,1}, \theta_{i,2}$ и $\theta_{j,1}, \theta_{j,2}$ — углы, образованные валентными связями. Тогда энергия взаимодействия будет равна [23]

$$U_{ij} = V_R(r_{ij}) - \frac{1}{2}(B_{ij} + B_{ji})V_A(r_{ij}), \quad (1)$$

куда входят отталкивающая

$$V_R(r_{ij}) = \frac{D}{S-1} \exp[-\sqrt{2S}\beta(r-r_0)]$$

и притягивающая

$$V_A(r_{ij}) = \frac{DS}{S-1} \exp[-\sqrt{2/S}\beta(r-r_0)]$$

части потенциала, а модифицированные параметры для потенциала равны $r_0 = 1.39 \text{ \AA}$, $D = 6.0 \text{ eV}$, $\beta = -2.1 \text{ \AA}^{-1}$, $S = 1.22$ [24]. Коэффициенты

$$B_{ij} = [1 + G(\theta_{i,1}) + G(\theta_{i,2})]^{-\delta},$$

$$B_{ji} = [1 + G(\theta_{j,1}) + G(\theta_{j,2})]^{-\delta}$$

определены через функцию

$$G(\theta) = a_0 \left[1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos \theta)^2} \right]$$

и параметры $a_0 = 0.00020813$, $c_0 = 330$, $d_0 = 3.5$, $\delta = 0.5$.

Потенциал Бреннера дает значение равновесной длины валентной связи в недеформированном графене $\rho_0 = 1.4505 \text{ \AA}$, при этом равновесный параметр решетки равен $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}\rho_0$.

Для однородно деформированного в своей плоскости листа графена решалась задача линейной устойчивости равновесного положения атомов, т.е. определялся спектр малоамплитудных колебаний атомов, описываемых уравнениями движения, линеаризованными в окрестности их равновесных положений. Система считалась устойчивой, если спектр не содержал мнимых частот.

При анализе устойчивости относительно фононных колебательных мод первая зона Бриллюэна сканировалась по обеим координатам с шагом 0.01π и в каждой точке определялось шесть собственных частот колебаний. Кристалл считался неустойчивым при появлении хотя бы в одной точке зоны Бриллюэна мнимой собственной частоты. В данном расчете нами не учитывалась работа внешних сил, связанная с виртуальным изменением размеров и формы примитивной ячейки графена, что соответствует предположению об абсолютной жесткости нагружающего устройства.

Для того чтобы вычислить скорости звука, запишем координаты атомов через векторы трансляции деформированной решетки $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$:

$$x = p_{1,x}m + p_{2,x}n, \quad y = p_{1,y}m + p_{2,y}n; \quad (2)$$

отсюда найдем

$$m = (xp_{2,y} - yp_{2,x})/\Delta, \quad n = (-xp_{1,y} - yp_{1,x})/\Delta, \\ \Delta = p_{1,x}p_{2,y} - p_{1,y}p_{2,x}. \quad (3)$$

С помощью (3) запишем волну, распространяющуюся в плоскости листа графена, в виде

$$\mathbf{u}(x, y, t) = \mathbf{A}_j \exp \left[\frac{1}{\Delta} \left[(q_x p_{2,y} - q_y p_{1,y})x + (-q_x p_{2,x} + q_y p_{1,x})y \right] - \omega_j t \right], \quad (4)$$

где q_x, q_y — компоненты волнового вектора \mathbf{q} , а ω_j — частота колебаний. С помощью (4) найдем компоненты фазовой скорости волны

$$V_{x,j} = \frac{\omega_j \Delta}{q_x p_{2,y} - q_y p_{1,y}}, \quad V_{y,j} = \frac{\omega_j \Delta}{-q_x p_{2,x} + q_y p_{1,x}}. \quad (5)$$

Звуковыми волнами по определению являются длинные акустические волны, поэтому акустические частоты ω_j в (5) вычислялись для малых волновых векторов $|\mathbf{q}| \ll \pi$ (в расчетах принималось, что $|\mathbf{q}| = 10^{-3}\pi$). Направление вектора \mathbf{q} определяет направление распространения звуковой волны.

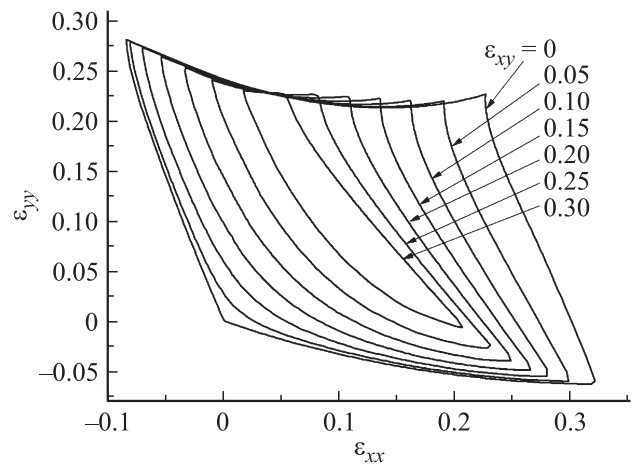


Рис. 2. Поверхность устойчивости графена в трехмерном пространстве деформаций, представленная сечениями плоскостями $\epsilon_{xy} = \text{const}$.

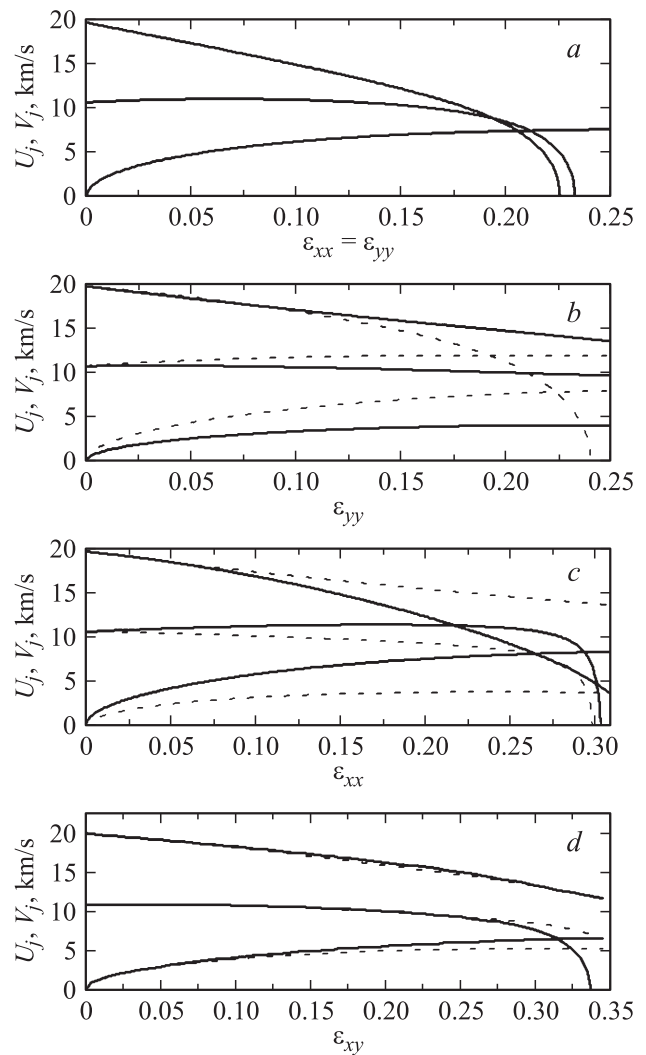


Рис. 3. Изменение скоростей звука, соответствующих трем фононным ветвям LA, TA и ZA, вдоль направления armchair $U_j = |(V_{x,j}, 0)|$ (сплошные линии) и вдоль направления zigzag $V_j = |(0, V_{y,j})|$ (штриховые линии) для деформации вида 1 (a), 2 (b), 3 (c) и 4 (d) (см. текст).

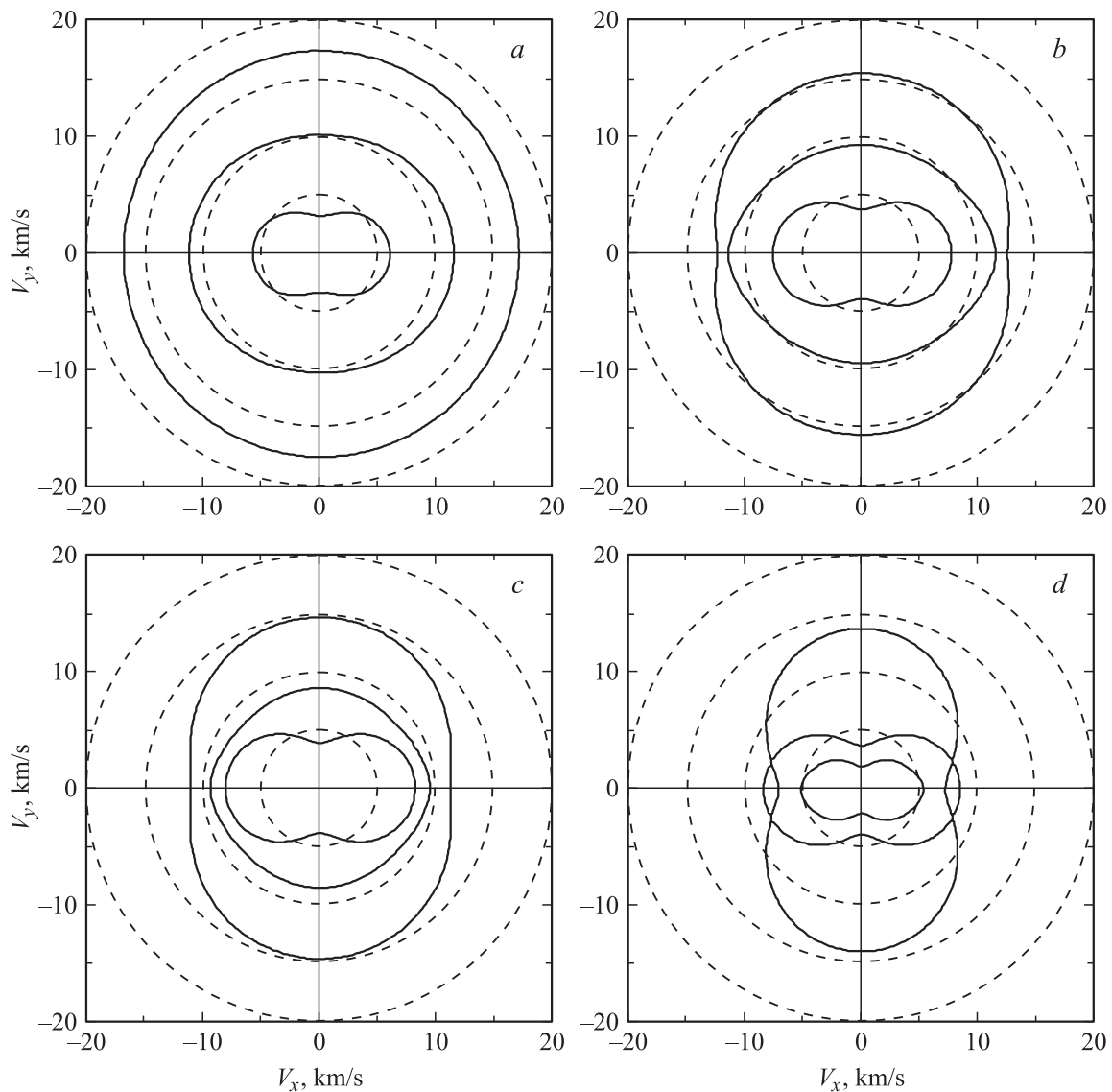


Рис. 4. Ориентационная зависимость скоростей звука в графене для деформации вида 3 (растяжение вдоль направления zigzag). Сплошные линии — для фоновых ветвей LA, TA, ZA. $\varepsilon_{xx} = 0.1$ (a), 0.2 (b), 0.25 (c) и 0.29 (d). Штриховые линии — линии сетки.

3. Результаты моделирования

3.1. Область устойчивости графена. На рис. 1, c приведены дисперсионные кривые недеформированного графена для точек зоны Бриллюэна, расположенных на отрезках Σ , T' и T , соединяющих последовательно точки $\Gamma \rightarrow M \rightarrow K \rightarrow \Gamma$ (см. рис. 1, b). Имеются три акустические и три оптические ветви. Наиболее высокочастотная LA и промежуточная по частоте TA акустические ветви соответствуют продольным и поперечным колебаниям атомов в плоскости листа графена, а самая низкочастотная ветвь ZA — поперечным колебаниям атомов по направлению нормали к плоскости графена. На рис. 1, d светлая область отображает плотность фоновых состояний недеформированного графена. Здесь же заштрихованная область соответствует плотности фоновых состояний без учета волн, где ато-

мы колеблются только по направлению нормали к плоскости графена. Из рисунка видно, что в недеформированном графене нет щели в фоновом спектре. На рис. 1, e показаны скорости звука недеформированного графена, которые не зависят от направления распространения и равны 19.7 km/s для фоновой ветви LA и 10.7 km/s для фоновой ветви TA. Волна ZA имеет нулевую скорость звука, поскольку изгибная жесткость недеформированного графена равна нулю. Отметим вполне удовлетворительное соответствие дисперсионных кривых, полученных с использованием потенциала Бреннера, с кривыми, измеренными экспериментально методами рентгеновского [31,32] и рамановского [33] рассеяния и рассчитанными с использованием эмпирических потенциалов [34].

Недеформированный графен изотропен, но после односторонней деформации изотропий, вообще говоря, те-

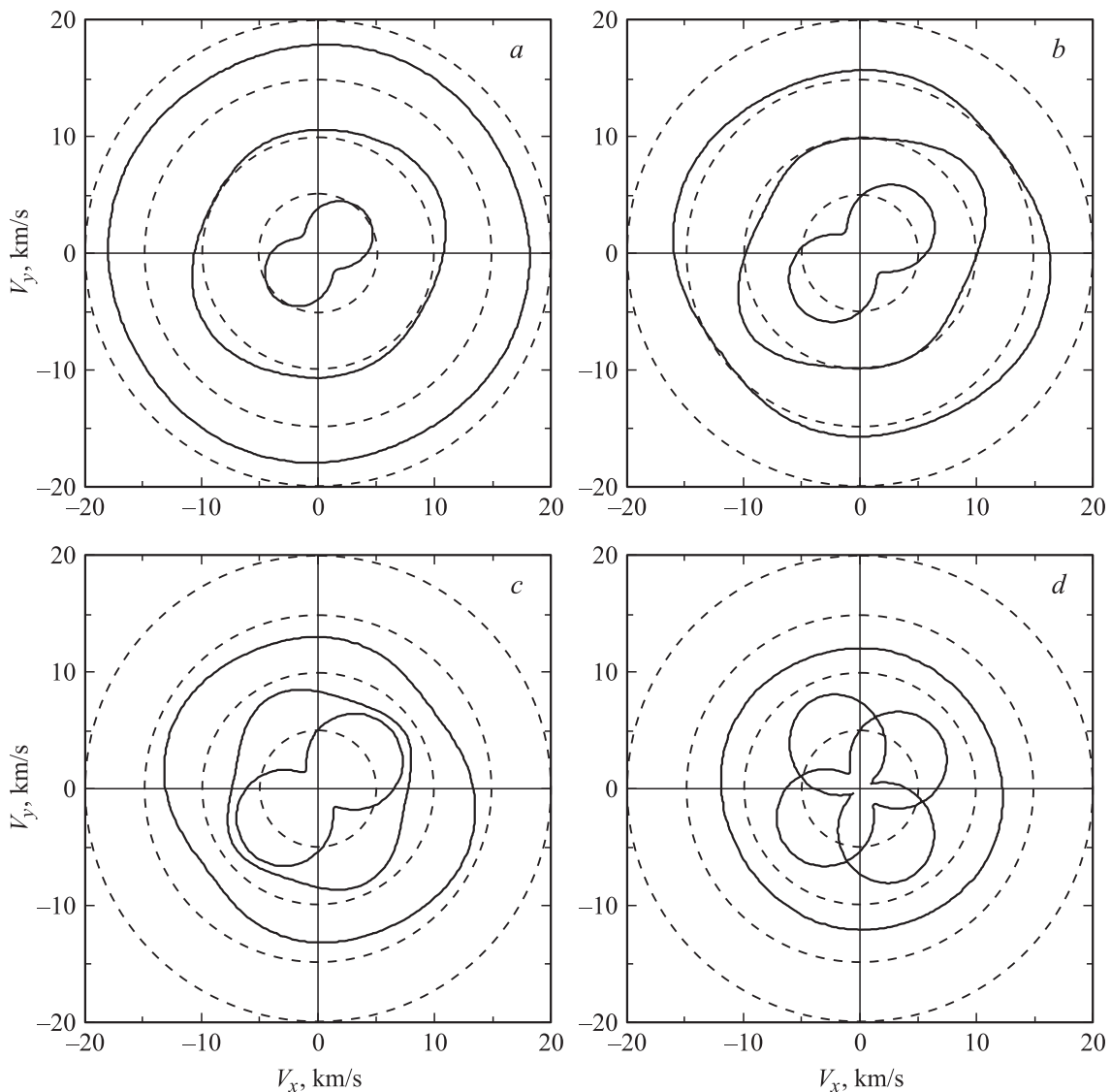


Рис. 5. То же, что на рис. 4, для деформации вида 4 (сложное деформирование). $\epsilon_{xy} = 0.1$ (a), 0.2 (b), 0.3 (c) и 0.33 (d).

ряется. Только при деформации однородного растяжения/сжатия, $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq 0$, $\epsilon_{xy} = 0$, графен остается изотропным. При нулевой же сдвиговой деформации ($\epsilon_{xy} = 0$) и при условии $\epsilon_{xx} \neq \epsilon_{yy}$ он ортотропен.

На рис. 2 поверхность, ограничивающая область устойчивости графена в трехмерном пространстве деформаций, представлена сечениями плоскостями $\epsilon_{xy} = \text{const}$. Для выбранной нами системы координат область устойчивости графена не зависит от знака деформации ϵ_{xy} . Как видно из рис. 2, графен, подвергнутый деформации сдвига, не может сохранять плоскую форму без приложения ненулевых деформаций ϵ_{xx} и ϵ_{yy} .

3.2. Скорости звука в деформированном графене. Скорости звука и плотности фононных состояний были рассчитаны для четырех видов деформации графена: 1) гидростатическое растяжение $(\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{xy}) = \xi(1, 1, 0)$; 2) растяжение вдоль направления armchair (ось y) $(\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{xy}) = \xi(0, 1, 0)$;

3) растяжение вдоль направления zigzag (ось x) $(\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{xy}) = \xi(1, 0, 0)$; 4) сложное деформирование $(\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{xy}) = \xi(1/3, 1/3, 1)$.

Во всех случаях $\xi \geq 0$. Отметим, что для деформации вида 4 $\epsilon_{xy} \neq 0$.

Рассмотрим подробнее зависимость скоростей звука от деформации для волн, распространяющихся вдоль направлений armchair и zigzag, и обозначим скорости звука через $U_j = |(V_{x,j}, 0)|$ и $V_j = |(0, V_{y,j})|$ соответственно. Здесь индекс $j = 1, 2, 3$ отвечает трем скоростям звука: продольной и поперечной в плоскости и перпендикулярной плоскости графена соответственно.

На рис. 3, a-d показано изменение U_j (сплошные линии) и V_j (штриховые линии) для видов упругой деформации 1-4 соответственно. На рис. 3, a $U_j = V_j$, так как деформация вида 1 соответствует гидростатическому растяжению, когда графен остается изотропным. При не слишком больших деформациях моды LA, TA

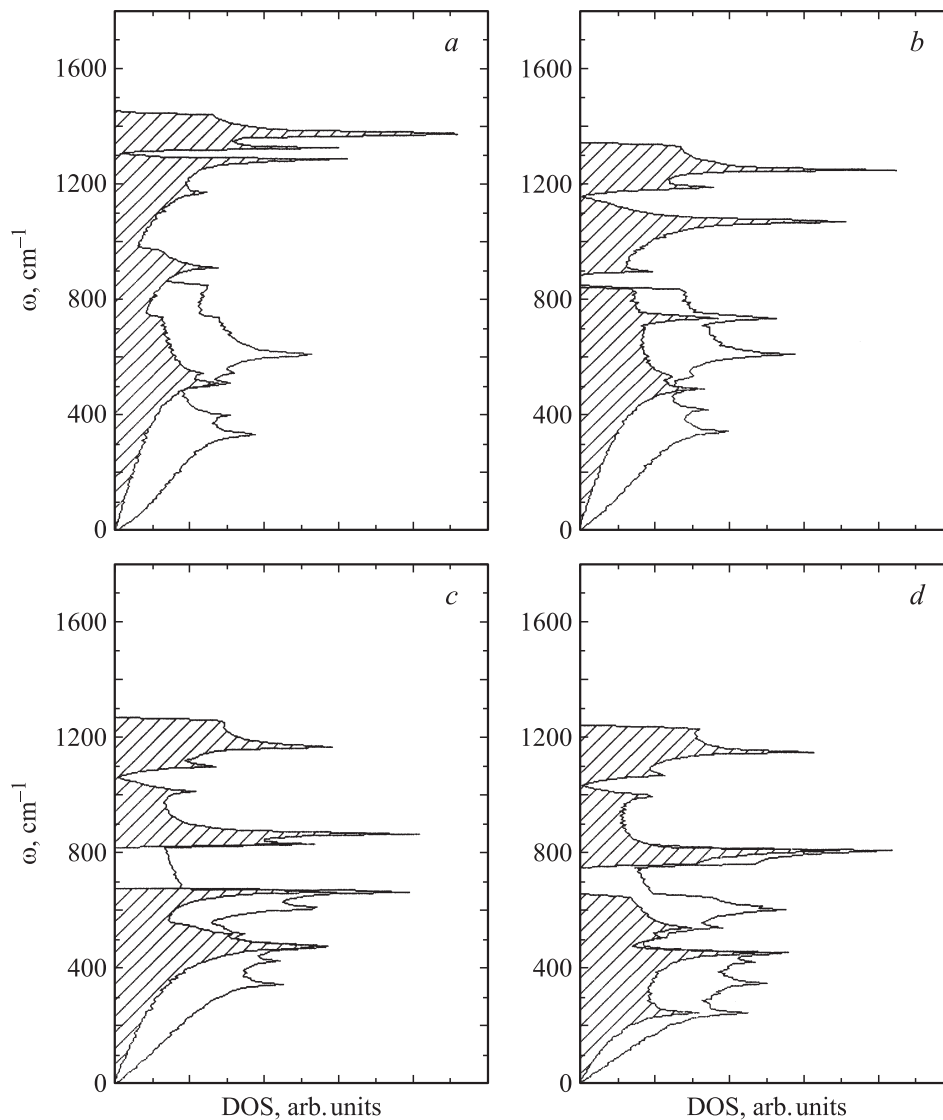


Рис. 6. Плотности фоновых состояний в графене при деформировании вида 3 (растяжение вдоль направления zigzag). $\varepsilon_{xx} = 0.1$ (a), 0.2 (b), 0.25 (c) и 0.29 (d). Штриховкой показаны DOS без учета фоновых мод, имеющих смещения атомов только перпендикулярно листу графена.

и ZA имеют наибольшую, среднюю и наименьшую скорости звука соответственно (как в недеформированном графене). При больших же деформациях этот порядок меняется. В момент, когда графен теряет устойчивость под действием нагрузки, одна из скоростей звука становится равной нулю. На рис. 4 (растяжение вдоль направления zigzag, вид деформации 3) и рис. 5 (сложное деформирование, вид деформации 4) показаны ориентационные зависимости скоростей звука в деформированном графене. Эти результаты отражают понижение симметрии в деформированном графене. Рис. 4, d и 5, d показывают скорости звука в графене, близком к пределу устойчивости; отсюда видно, что одна из скоростей звука становится близкой к нулю. Таким образом, обращение в нуль какой-либо скорости звука может рассматриваться как критерий структурной устойчивости графена.

3.3. Плотности фоновых состояний в деформированном графене. На рис. 6, 7 представлены плотности фоновых состояний листа графена для деформации вида 3, 4 соответственно. Как и на рис. 1, d, штриховкой показаны DOS, не учитывающие фононов, имеющих колебания атомов перпендикулярно плоскости листа графена. Из этих рисунков видно, что все рассмотренные виды деформации приводят к некоторому уменьшению максимальной частоты фоновых колебаний. Кроме того, при растяжении в направлении zigzag и при сложном деформировании в фоновом спектре появляется достаточно широкая щель (рис. 6 и 7). В отличие от этого растяжение в направлении armchair приводит к появлению лишь очень узкой щели, которая исчезает при больших значениях деформации. При всестороннем растяжении (деформация вида 1) даже узкой щели в фоновом спектре не образуется.

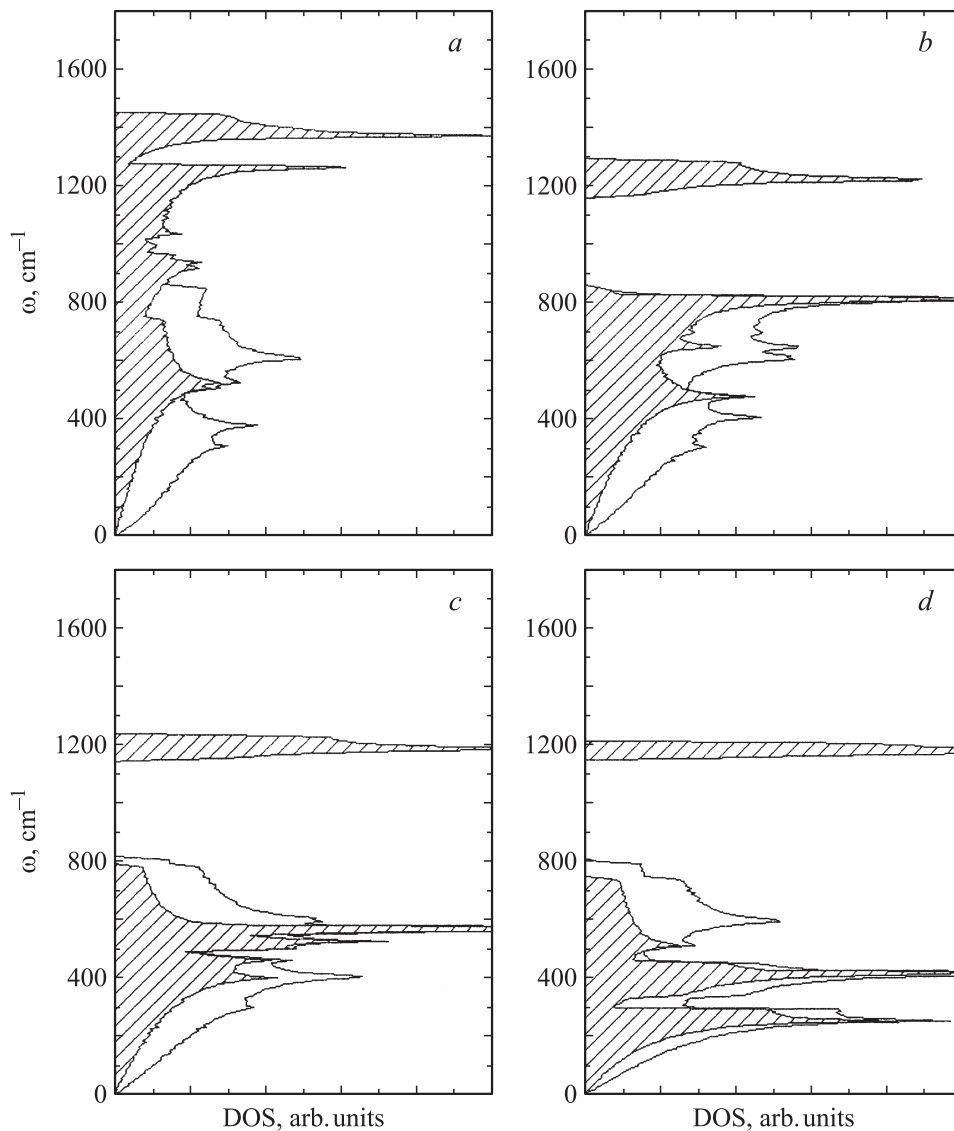


Рис. 7. То же, что на рис. 6, при деформировании вида 4 (сложное деформирование). $\epsilon_{xy} = 0.1$ (a), 0.2 (b), 0.3 (c) и 0.33 (d).

4. Заключение

В настоящей работе методами динамики решетки и молекулярной динамики с использованием потенциала Бреннера решены следующие задачи: 1) определены границы области устойчивости плоского листа графена в пространстве компонент плоской деформации ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{xy} (рис. 2); 2) рассчитаны скорости звука в графене, деформированном всесторонним растяжением, одноосным растяжением вдоль направлений armchair и zigzag, а также при сложном деформировании (рис. 4, 5); 3) для тех же четырех видов деформирования исследовано влияние деформации на плотность фоновых состояний графена (рис. 6, 7).

Первая задача была решена нами ранее в работе [20] для другого межатомного потенциала, и сравнение результатов выявило лишь количественные, но не качественные различия. В настоящей работе показано, что

при $\epsilon_{xy} = 0$ графен может выдерживать деформацию всестороннего растяжения вплоть до $\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy} = 0.225$ (рис. 2). При одноосной деформации вдоль направления zigzag (armchair) графен остается устойчивым до $\epsilon_{xx} = 0.3$ ($\epsilon_{yy} = 0.24$). Деформация сдвига может быть приложена к графену только при наличии растягивающих усилий, в отсутствие которых наблюдается „выпучивание“ по направлению нормали к плоскости графена с образованием „морщин“. Наши данные по критическим деформациям графена находятся в удовлетворительном согласии с ранее опубликованными экспериментальными и теоретическими результатами, полученными в случае только одноосного деформирования. Например, квантово-механические и квантовые молекулярно-динамические расчеты дают значения критических деформаций для нагружения вдоль направления zigzag (armchair) $\epsilon_{xx} = 0.38$ ($\epsilon_{yy} = 0.19$) [35]. В работе [17], основанной на методе функционала

электронной плотности, получены критические значения одноосной деформации в направлении zigzag (armchair) $\epsilon_{xx} = 0.266$ ($\epsilon_{yy} = 0.194$). В молекулярно-динамических расчетах критическое значение одноосной деформации составило $\epsilon_{yy} = 0.30$ [36]. В эксперименте по нанопрофилированию графена с помощью атомно-силового микроскопа была достигнута деформация около 0.3 [1].

Что касается рассчитанных в настоящей работе скоростей звука, то их значения для недеформированного графена (19.7 km/s для LA- и 10.7 km/s для TA-волн) также находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом. Например, в экспериментах по неупругому рассеянию рентгеновских лучей было установлено, что скорость звука в графене составляет 22 km/s для LA- и 14 km/s для TA-волн [37], а скорость звука для LA-волн, полученная в опытах по рамановскому рассеянию, составила 20 km/s [38]. Как следует из рис. 3, для всех рассмотренных видов деформирования с ростом деформации происходит монотонный рост скорости звука ZA-волн и монотонное уменьшение скорости звука LA-волн. Скорость звука TA-волн в некоторых случаях незначительно растет при не слишком больших деформациях, а затем начинает падать. Отмечено, что одна из скоростей звука обращается в нуль на границе области устойчивости графена, что дает основание считать обращение в нуль какой-либо из скоростей звука критерием неустойчивости графена. Рис. 4, 5 дают представление о степени анизотропии однородно деформированного графена для видов деформации 3, 4 соответственно.

Плотности фононных состояний, полученные в настоящей работе, можно сравнить с представленными в работе [17], где расчеты проводились на основании теории функционала плотности. Там же показано, что в недеформированном графене фононный спектр не имеет щелей, но щель появляется в графене, одноосно растянутом в направлении zigzag или armchair. Существование щелей в фононном спектре деформированного графена является необходимым условием существования щелевых дискретных бризеров, т.е. пространственно локализованных нелинейных колебательных мод, имеющих частоты, лежащие в щели фононного спектра, роль которых в физике твердого тела активно обсуждается в последние годы [39–43].

Результаты настоящей работы показывают, что механические и физические свойства графена можно изменять в широких пределах путем приложения упругой деформации. Основным отличием данной работы от предшествующих является рассмотрение не только растягивающих, но и сдвиговой компоненты деформации.

Список литературы

- [1] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone. *Science* **321**, 385 (2008).
- [2] A.K. Geim, K.S. Novoselov. *Nature Mater.* **6**, 183 (2007).
- [3] М.Б. Белоненко, Н.Г. Лебедев, Н.Н. Янюшкина, М.М. Шакирзянов. *ФТТ* **52**, 1819 (2010).
- [4] Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков. *ФТТ* **51**, 2033 (2009).
- [5] J.I. Inoue. *Phys. Rev. B* **83**, 205 404 (2011).
- [6] V.M. Apalkov, T. Chakraborty. *Phys. Rev. B* **84**, 033 408 (2011).
- [7] А.В. Елецкий, И.М. Искандарова, А.А. Книжник, Д.Н. Красиков. *УФН* **181**, 233 (2011).
- [8] C. Soldano, A. Mahmood, E. Dujardin. *Carbon* **48**, 2127 (2010).
- [9] N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H.T. Jonkman, B.J. van Wees. *Nature* **448**, 571 (2007).
- [10] G.E. Froudakis. *Mater. Today* **14**, 324 (2011).
- [11] S. Stankovich, D.A. Dikin, G.H.B. Dommett, K.M. Kohlhaas, E.J. Zimney, E.A. Stach, R.D. Piner, S.T. Nguyen, R.S. Ruoff. *Nature* **442**, 282 (2006).
- [12] T. Zhu, J. Li. *Progr. Mater. Sci.* **55**, 710 (2010).
- [13] X. Li, K. Maute, M.L. Dunn, R. Yang. *Phys. Rev. B* **81**, 245 318 (2010).
- [14] F.M.D. Pellegrino, G.G.N. Angilella, R. Pucci. *Phys. Rev. B* **81**, 035 411 (2010).
- [15] О.Е. Глухова, А.С. Колесникова. *ФТТ* **53**, 1855 (2011).
- [16] M.J. Majid, С.С. Савинский. *Письма в ЖТФ* **37**, 11, 58 (2011).
- [17] F. Liu, P. Ming, J. Li. *Phys. Rev. B* **76**, 064 120 (2007).
- [18] X. Wei, B. Fregneaud, C.A. Marianetti, J.W. Kysar. *Phys. Rev. B* **80**, 205 407 (2009).
- [19] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **53**, 617 (2011).
- [20] С.В. Дмитриев, Ю.А. Баимова, А.В. Савин, Ю.С. Кившарь. *Письма в ЖЭТФ* **37**, 13 (2011).
- [21] С.С. Моливер, Р.Р. Зимагулов, А.Л. Семенов. *Письма в ЖТФ* **37**, 14, 68 (2011).
- [22] O.V. Yazyev, S.G. Louie. *Phys. Rev. B* **81**, 195 420 (2010).
- [23] D.W. Brenner. *Phys. Rev. B* **42**, 9458 (1990).
- [24] S. Maruyama, Y. Igarashi, Y. Taniguchi, J. Shiomi. *J. Thermal. Sci. Technol.* **1**, 138 (2006).
- [25] А.В. Савин, О.И. Савина. *ФТТ* **46**, 372 (2004).
- [26] M. Neek-Amal, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B* **82**, 085 432 (2010).
- [27] J.-W. Jiang, J.-S. Wang, B. Li. *Phys. Rev. B* **80**, 113 405 (2009).
- [28] A.V. Savin, Yu.S. Kivshar, B. Hu. *Phys. Rev. B* **82**, 195 422 (2010).
- [29] A.V. Savin, Yu.S. Kivshar. *Eur. Phys. Lett.* **89**, 46 001 (2010).
- [30] А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов. *ФТТ* **44**, 2158 (2002).
- [31] J. Maultzsch, S. Reich, C. Thomsen, H. Requardt, P. Ordejon. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 075 501 (2004).
- [32] M. Mohr, J. Maultzsch, E. Dobardzic, S. Reich, I. Milosevic, M. Damnjanovic, A. Bosak, M. Krisch, C. Thomsen. *Phys. Rev. B* **76**, 035 439 (2007).
- [33] A. Gruneis, R. Saito, T. Kimura, L.G. Cancado, M.A. Pimenta, A. Jorio, A.G. Souza Filho, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Phys. Rev. B* **65**, 155 405 (2002).
- [34] L.J. Karssemeijer, A. Fasolino. *Surf. Sci.* **605**, 1611 (2011).
- [35] Y. Gao, P. Hao. *Physica E* **41**, 1561 (2009).
- [36] H. Bu, Y. Chen, M. Zou, H. Yi, K. Bi, Z. Ni. *Phys. Lett. A* **373**, 3359 (2009).
- [37] A. Bosak, M. Krisch, M. Mohr, J. Maultzsch, C. Thomsen. *Phys. Rev. B* **75**, 153 408 (2007).
- [38] R. Gillen, M. Mohr, J. Maultzsch. *Phys. Status Solidi B* **247**, 2941 (2010).
- [39] S. Flach, A.V. Gorbach. *Phys. Rep.* **467**, 1 (2008).
- [40] С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева. *ФТТ* **53**, 1353 (2011).
- [41] L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev. *Phys. Rev. B* **81**, 214 306 (2010).
- [42] С.В. Дмитриев, Ю.А. Баимова. *Письма в ЖТФ* **37**, 10, 13 (2011).
- [43] С.В. Дмитриев. *Письма о материалах* **1**, 78 (2011).