

## ДИСПЕРСИЯ ИЗГИБНЫХ МОД В ГРАФЕНЕ

А. Н. Ипатов<sup>a,b\*</sup>, Д. А. Паршин<sup>b\*\*</sup>, Д. А. Конюх<sup>c\*\*\*</sup><sup>a</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
195251, Санкт-Петербург, Россия<sup>b</sup> Академический университет им. Ж. И. Алфёрова  
194021, Санкт-Петербург, Россия<sup>c</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, РоссияПоступила в редакцию 15 мая 2021 г.,  
после переработки 25 июня 2021 г.  
Принята к публикации 25 июня 2021 г.

В рамках модели Борна–фон Кармана построена простая аналитическая теория дисперсии изгибных колебаний в графене, позволяющая учесть, в принципе, любое количество конфигурационных сфер. В рамках этой теории была проанализирована квадратичная дисперсия изгибных акустических фононов в графене. Показано, что причиной возникновения такой дисперсии изгибных колебаний в графене является взаимодействие каждого атома не только с ближайшими соседями, но и с более дальними атомами. При этом знаки эффективных силовых констант, соответствующих разным координационным сферам, должны различаться, сохраняя устойчивость системы. Получены аналитические соотношения между упругими константами, при которых оказывается возможным распространение изгибных колебаний в плоскости графена. При выведенном в данной работе «критическом» соотношении отрицательные упругие константы второй и третьей координационных сфер практически полностью компенсируют положительный вклад от первой координационной сферы. В результате в узком интервале значений волнового вектора вблизи  $k = 0$  распространение низкочастотных изгибных акустических волн с обычной линейной дисперсией оказывается невозможным. Определены условия, при которых закон дисперсии изгибных мод в графене приобретает квадратичный характер, характерный для изгибных колебаний в тонких макроскопических мембранах.

DOI: 10.31857/S0044451021100102

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Двумерные кристаллические структуры являются объектом интенсивных исследований в последние десятилетия, что объясняется активным развитием нанотехнологий [1]. До недавнего времени основное внимание было обращено на их электронные свойства, чему дали толчок первые экспериментальные работы, посвященные изучению графена [2, 3]. Позднее начались исследования спектров фононных мод как в двумерных решетках на основе углерода [4–6], так и в других кристаллических структурах [7]. Как известно, в элементарной ячейке графе-

на находятся два атома углерода, поэтому в его фоннном спектре имеются шесть колебательных мод, три акустические и три оптические. Четыре из них, LA-, LO-, TA-, TO-моды, соответствуют смещениям атомов, лежащих в плоскости листа графена. Две оставшихся моды, ZO и ZA, соответствуют смещениям атомов перпендикулярно плоскости, поэтому их называют изгибными модами. Они в силу симметрии никак не взаимодействуют с оставшимися четырьмя модами. Неожиданным оказалось то, что изгибные ZA-фононы в графене имели аномальный закон дисперсии при малых значениях волнового вектора,  $\omega \propto k^2$  [5]. Эта зависимость наблюдалась экспериментально при рассеянии рентгеновских лучей в графите [8] и при расчетах *ab initio* в графите [9] и графене [6], однако причины возникновения этого закона оставались неясными. Специалисты по теории упругости утверждали, что такой

\* E-mail: andrei\_ipatov@mail.ru

\*\* E-mail: dmitry.a.parshin@gmail.com

\*\*\* E-mail: conyuh.dmitrij@yandex.ru

закон дисперсии вполне ожидаем, поскольку наблюдается в тонких мембранах [10]. Но графен не является макроскопической мембраной, и, как указано в работе [11], атомы графена «не знают», что должны подчиняться макроскопическим уравнениям теории упругости. При этом теоретические расчеты, проведенные с учетом взаимодействия только с атомами первой координационной сферы, дают обычную линейную дисперсию  $\omega \propto k$ , как и положено для звуковой волны [12]. Ситуация немного прояснилась с появлением работ Фальковского [11, 13, 14], который, учтя взаимодействия с двумя, а затем с тремя конфигурационными сферами, получил, наконец, «аномальный» квадратичный закон дисперсии. В этих работах было продемонстрировано, что имеется возможность получить дисперсионные зависимости для фононных мод в графене, в широком диапазоне значений волновых векторов, согласующиеся с экспериментальными данными. При этом по-прежнему оставалось непонятным, что является причиной аномальной дисперсии изгибных волн.

Из уже имеющихся результатов исследований особенностей дисперсии колебательных мод в сильноанизотропных слоистых кристаллических материалах, состоящих из слабосвязанных между собой многоатомных слоев, в частности графита, известно, что в законе дисперсии упругой волны, поляризованной в направлении, перпендикулярном слоям кристалла, в общем случае присутствуют как линейный, так и квадратичный члены [15]. В последней работе, в частности, были сделаны выводы, что для адекватного анализа колебательных характеристик квазидвумерных систем типа графита или графена необходимо учитывать взаимодействие не менее трех координационных сфер. Там же авторами на основе анализа симметрии тензора модулей упругости были получены соотношения для упругих констант, при которых в длинноволновом пределе дисперсия акустической ветви изгибных мод становится чисто квадратичной. При этом значения частот в особых точках зоны Бриллюэна, полученные с использованием этих соотношений, совпадают с результатами, приведенными в статьях [13, 14]. Целью нашего исследования было не только проанализировать закон дисперсии решетки графена, но и определить роль каждой из координационных сфер по отдельности в формировании дисперсионной зависимости. В частности, стояла задача не только продемонстрировать, что для изменения характера закона дисперсии с линейного на квадратичный необходимо наличие в системе отрицательных упругих констант, но и на основании простых аналитических

выкладок наглядно показать, взаимодействие с какими из соседей в решетке приводит к этому изменению.

В нашей работе в рамках теории Борна–фон Кармана в результате решения уравнений движения для атомов двумерной кристаллической решетки графена были получены достаточно простые аналитические выражения для фононных частот ZO- и ZA-мод и проанализированы их зависимости от выбора силовых констант. Важно отметить, что наша модель не требует экспериментальных данных для определения параметров межатомного взаимодействия, как это было сделано, например, в работах [9, 16, 17], в которых для описания межатомного взаимодействия были использованы эффективные потенциалы, включающие в себя ряд эмпирических параметров. В рамках простой модели, не требующей сложных численных расчетов, мы показали, что меняя число учитываемых координационных сфер и значения силовых констант, оказывается возможным улучшать согласие результатов расчета с экспериментом. Важно отметить, что эффективные упругие константы взаимодействия с более далекими соседями могут существенно отличаться от констант взаимодействия с ближайшими атомами и даже иметь разные знаки [18, 19], что и является причиной изменения характера дисперсии. В настоящей работе наша задача показать, что именно наличие упругих констант разного знака приводит к возможности появления в системе изгибных колебательных мод с квадратичной дисперсией с сохранением при этом ее устойчивости. Основной целью работы было вывести простые аналитические соотношения между упругими константами, соответствующими взаимодействию с атомами разных координационных сфер, при которых линейный закон дисперсии сменяется на квадратичный. При этом важно отметить, что наша модель позволяет получить эти соотношения для любого числа учитываемых координационных сфер.

## 2. ИЗГИБНЫЕ МОДЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Вначале обсудим, каким образом появление отрицательных упругих констант влияет на характер колебательных мод в системе на примере колебаний линейной цепочки атомов [20, 21]. Проблема дисперсии изгибных мод в такой системе была достаточно детально проанализирована в книге [21], где было продемонстрировано, что в общем случае дисперси-

онная зависимость  $\omega(k)$  атомной цепочки в длинно-волновом пределе  $ka \ll 1$  содержит как линейное, так и квадратичное слагаемое. Наша задача состоит в том, чтобы в рамках простой модели определить, при каких условиях закон дисперсии становится чисто квадратичным, что в дальнейшем будет использовано для анализа свойств изгибных мод в двумерной решетке графена.

### 2.1. Колебания линейной цепочки атомов

Пусть имеется линейная цепочка из одинаковых атомов массой  $m$ , в положении равновесия расположенных в узлах одномерной решетки с постоянной решетки  $a$ . Сперва рассмотрим хорошо известную задачу нахождения спектра нормальных колебательных мод, когда учитывается только короткодействующее взаимодействие между ближайшими соседями, описываемое упругой силой с константой взаимодействия  $\kappa_1 > 0$ . Обозначив смещение  $n$ -го атома относительно положения равновесия как  $u_n$ , запишем для него уравнение движения

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \kappa_1 (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n). \quad (1)$$

Будем искать решение в виде бегущей волны

$$u_n = u_0 \exp(i(\omega t - kna)), \quad (2)$$

где  $k$  — волновой вектор. После подстановки (2) в уравнение (1) получаем

$$-\omega^2 m u_n = \kappa_1 u_n (\exp(ika) + \exp(-ika) - 2), \quad (3)$$

откуда следует хорошо известный закон дисперсии [20]

$$\omega^2(k) = \frac{2\kappa_1}{m} (1 - \cos(ka)) = 4\Omega_1^2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right), \quad (4)$$

где  $\Omega_1 = \sqrt{\kappa_1/m}$ . При малых значениях  $k$ , т. е. при длинах волн, значительно превышающих межатомные расстояния в цепочке, частота колебаний  $\omega$  зависит от  $k$  линейно, как для звуковой волны, распространяющейся вдоль непрерывной упругой струны [20],

$$\omega \approx a \sqrt{\frac{\kappa_1}{m}} k = v_s k, \quad (5)$$

где  $v_s$  — скорость распространения акустических волн, не зависящая от длины волны.

В случае, если в цепочке могут взаимодействовать не только ближайшие соседи, но и атомы, от-

стоящие друг от друга на два периода решетки, уравнение движения  $n$ -го атома записывается в виде

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \kappa_1 (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \kappa_2 (u_{n+2} + u_{n-2} - 2u_n), \quad (6)$$

где  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  — соответствующие упругие константы, знаки которых в общем случае могут различаться.

Формула (3) теперь приобретает вид

$$-\omega^2 m u_n = \kappa_1 u_n (\exp(ika) + \exp(-ika) - 2) + \kappa_2 u_n (\exp(i2ka) + \exp(-i2ka) - 2), \quad (7)$$

что приводит к изменению в законе дисперсии

$$\omega^2 = \frac{4}{m} \left( \kappa_1 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \kappa_2 \sin^2(ka) \right). \quad (8)$$

Таким образом, необходимым условием устойчивости для распространения вдоль цепочки атомов упругой волны с фазовой скоростью  $v_s = \omega/k$  при малых  $k$  является требование

$$\kappa_1 \frac{k^2 a^2}{4} + \kappa_2 k^2 a^2 > 0. \quad (9)$$

Отсюда следует предельное отрицательное значение для константы  $\kappa_2$ ,

$$\kappa_2 = -\frac{\kappa_1}{4}, \quad (10)$$

ниже которого система теряет устойчивость. Легко убедиться, что в случае «критического» соотношения упругих констант (10), при котором скорость звука в пределе малых  $k$  стремится к нулю, закон дисперсии колебаний цепочки (8) с точностью до численного множителя воспроизводит квадрат дисперсионного соотношения из формулы (4), учитывающей взаимодействие только с ближайшими соседями:

$$\begin{aligned} \omega^2(k) &= 4\Omega_1^2 \left( \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) - \frac{\sin^2(ka)}{4} \right) = \\ &= 4\Omega_1^2 \sin^4\left(\frac{ka}{2}\right). \end{aligned} \quad (11)$$

В результате мы получаем квадратичный закон дисперсии колебаний. Другими словами, включение взаимодействия с атомами, отстоящими на два периода решетки, при отрицательном «критическом» значении упругой константы  $\kappa_2$  приводит к смене линейного закона дисперсии на квадратичный,  $\omega \sim k^2$ , характерный для изгибных колебательных мод [10, 21].

В самом общем случае, когда во взаимодействии участвуют соседи, отстоящие от рассматриваемого  $n$ -го атома на  $N$  периодов цепочки, уравнение движения приобретает вид

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \kappa_1(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \kappa_2(u_{n+2} + u_{n-2} - 2u_n) + \kappa_3(u_{n+3} + u_{n-3} - 2u_n) + \dots + \kappa_N(u_{n+N} + u_{n-N} - 2u_n) \quad (12)$$

и при  $Nka \ll 1$  в первом порядке разложения его правой части в ряд преобразуется как

$$m\omega^2(k) \approx (ka)^2 \sum_{j=1}^N j^2 \kappa_j. \quad (13)$$

Таким образом, множество всех возможных «критических» сочетаний упругих констант, для которых в дисперсионной зависимости  $\omega(k)$  при малых  $k$  исчезают линейные по  $k$  члены и скорость звука  $v_s$  стремится к нулю, определяется из условия

$$\sum_{j=1}^N j^2 \kappa_j = 0, \quad (14)$$

что в рассматриваемом одномерном случае воспроизводит доказанное в [21] свойство симметрии элементов силовой матрицы.

Условие (14) по своему физическому смыслу является не чем иным, как условием полной компенсации положительных упругих констант отрицательными. Модуль Юнга такой предельно мягкой среды равен нулю, поэтому равна нулю и скорость звука. Обычные упругие волны в такой среде распространяться не могут, в отличие от изгибных волн с квадратичной дисперсией [19].

Таким образом, на простом примере линейной цепочки атомов нами продемонстрировано, что для появления изгибных колебательных мод с квадратичным законом дисперсии необходимо, чтобы в системе присутствовали межатомные связи с отрицательными силовыми константами. При этом по мере увеличения числа соседних атомов, взаимодействие с которыми принимается в расчет, растет и число всевозможных «критических» сочетаний констант взаимодействия.

## 2.2. Графен: взаимодействие с атомами из первой координационной сферы

Кристаллическая решетка графена, фрагмент которой представлен на рис. 1, состоит из правиль-

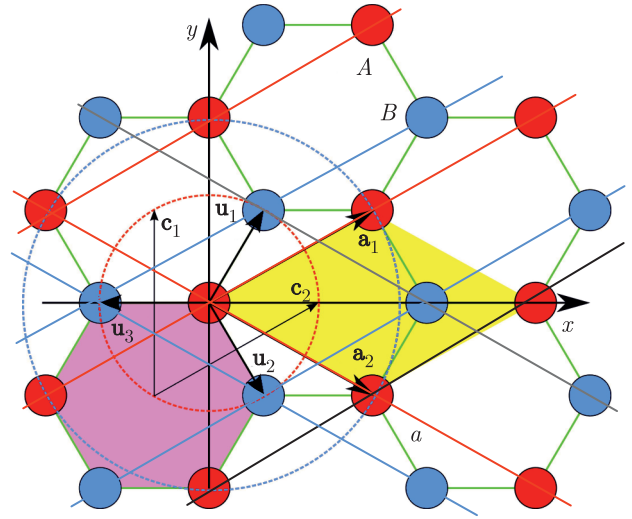


Рис. 1. Фрагмент кристаллической решетки графена [4]

ных шестиугольников. В ее элементарной ячейке находятся два атома углерода, которые на рисунке условно изображены красным и синим цветом и обозначены соответственно как А и В. Векторы  $\mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{u}_2$  и  $\mathbf{u}_3$  показывают положения трех ближайших «синих» соседей по отношению к одному из «красных» атомов. Если принять за начало отсчета один из узлов решетки, из которого проведена пара векторов элементарных трансляций  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ , и ввести декартову систему координат, как показано на рисунке, их координаты запишутся как [4, 5]

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2} (3\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y), \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2} (3\mathbf{e}_x - \sqrt{3}\mathbf{e}_y), \end{aligned} \quad (15)$$

где  $a$  — постоянная кристаллической решетки. Им соответствуют элементарные векторы обратной решетки, показанные на рис. 2, на котором изображена первая зона Бриллюэна графена и ее точки особой симметрии:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{3}\mathbf{e}_x - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_y \right), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{3}\mathbf{e}_x + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_y \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Рассмотрим колебания атомов двумерной решетки графена в приближении ближайших соседей [22]. При этом будем рассматривать отдельно движение «красных» и «синих» атомов, обозначив их нормальные к плоскости графена смещения относительно положения равновесия соответственно как  $V_{n,m}$  и  $U_{n,m}$ . Здесь индексы  $n$  и  $m$  определяют положение атома на осях, направленных соответственно

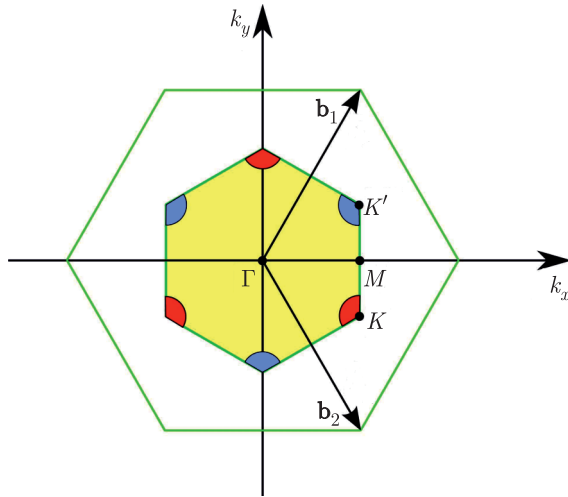


Рис. 2. Первая зона Бриллюэна с векторами обратной решетки  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  [4]

вдоль векторов  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ . Пусть  $\kappa_1$  — упругая константы взаимодействия атома  $(n, m)$  со своими соседями из первой координационной сферы, насчитывающей, как видно на рис. 1, три атома. Считая массы атомов одинаковыми, запишем их уравнения движения [12]:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 U_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 (V_{n,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m-1} - 3U_{n,m}), \\ m \frac{d^2 V_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 (U_{n,m} + U_{n+1,m} + U_{n,m+1} - 3V_{n,m}). \end{aligned} \quad (17)$$

Будем искать решения в виде плоских бегущих волн возмущения,

$$\begin{aligned} U_{n,m} &= u_0 \exp(i(\omega t - \mathbf{k}(n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2))), \\ V_{n,m} &= v_0 \exp(i(\omega t - \mathbf{k}(n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2))), \end{aligned} \quad (18)$$

где  $\omega(\mathbf{k})$  — фононная частота,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор.

После подстановки (18) и введения обозначения  $\Omega_1^2 = \kappa_1/m$  уравнения (17) преобразуются к виду

$$\begin{aligned} U_{n,m} (\omega^2 - 3\Omega_1^2) + \\ + V_{n,m} \Omega_1^2 (1 + e^{i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}) &= 0, \\ V_{n,m} (\omega^2 - 3\Omega_1^2) + \\ + U_{n,m} \Omega_1^2 (1 + e^{-i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}) &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Система (19) имеет нетривиальное решение при условии равенства нулю определителя

$$(\omega^2 - 3\Omega_1^2)^2 - \Omega_1^4 A(\mathbf{k}) A^*(\mathbf{k}) = 0, \quad (20)$$

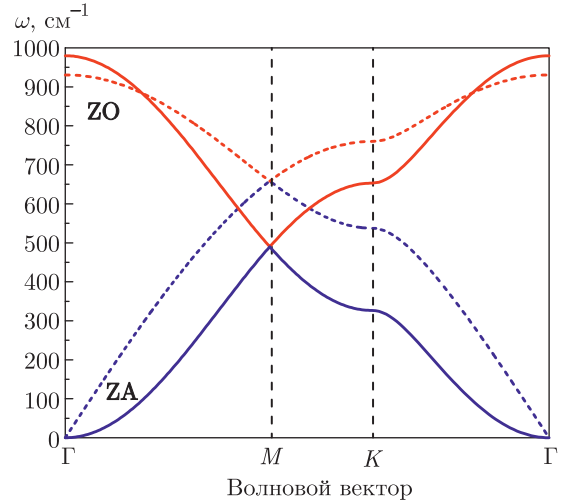


Рис. 3. Фононная дисперсия  $\omega(\mathbf{k})$  в графене при взаимодействии только с атомами из первой координационной сферы (штриховые линии) и с атомами из первых двух координационных сфер при  $\kappa_2 = -\kappa_1/6$  (сплошные линии)

где

$$A(\mathbf{k}) = 1 + e^{i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}. \quad (21)$$

В результате выражение, определяющее зависимость  $\omega(\mathbf{k})$ , может быть записано как

$$(\omega^2 - 3\Omega_1^2)^2 - \Omega_1^4 (3 + 2f(\mathbf{k})) = 0, \quad (22)$$

где использована функция

$$f(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}) + \cos(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}) + \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k}). \quad (23)$$

Таким образом, в случае учета взаимодействия только с соседями из первой координационной сферы закон дисперсии фононных мод в графене принимает вид

$$\omega^2 = \Omega_1^2 \left( 3 \pm \sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} \right), \quad (24)$$

где знаки «+» и «-» соответствуют оптической (ZO) и акустической (ZA) ветвям спектра.

Функция (23) при малых значениях волнового вектора может быть представлена в виде ряда по степеням  $k^2$ ,

$$f(\mathbf{k}) \approx 3 - \frac{9}{4} k^2 a^2 + \frac{27}{64} k^4 a^4 + \dots, \quad (25)$$

и, таким образом, в результате подстановки (25) в (24) получаем, что, как видно на рис. 3, для акустической ветви в длинноволновом пределе в дисперсионном соотношении наблюдается линейная зависимость  $\omega \sim k$ , как это было и в случае одномерной цепочки при учете взаимодействия с ближайшими соседями (5):



$$\omega \approx \frac{\sqrt{3}}{2} a\Omega_1 k = v_s k. \quad (26)$$

Таким образом, в случае, когда атом решетки графена взаимодействует только с ближайшими соседями из первой координационной сферы, изгибные моды с квадратичным законом дисперсии в системе отсутствуют. Как было продемонстрировано выше на примере линейной цепочки, для их появления необходимо учесть взаимодействие с более дальними соседями, что должно коренным образом изменить дисперсионные соотношения.

### 2.3. Графен: взаимодействие с атомами из двух ближайших координационных сфер

Запишем уравнения движения с учетом взаимодействия с атомами первой и второй координационных сфер:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 U_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 (V_{n,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m-1} - 3U_{n,m}) + \\ &+ \kappa_2 (U_{n+1,m} + U_{n-1,m} + U_{n,m+1} + \\ &+ U_{n,m-1} + U_{n-1,m+1} + U_{n+1,m-1} - 6U_{n,m}), \\ m \frac{d^2 V_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 (U_{n,m} + U_{n+1,m} + U_{n,m+1} - 3V_{n,m}) + \\ &+ \kappa_2 (V_{n+1,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m+1} + \\ &+ V_{n,m-1} + V_{n-1,m+1} + V_{n+1,m-1} - 6V_{n,m}), \end{aligned} \quad (27)$$

где  $\kappa_2$  — упругая константа взаимодействия с соседями из второй координационной сферы, в которой, как видно на рис. 1, содержится шесть атомов, и вновь будем искать решения в виде бегущих волн вида (18).

В результате уравнения (27) преобразуются к виду

$$\begin{aligned} U_{n,m} (\omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) + \\ + V_{n,m} \Omega_1^2 A(\mathbf{k}) = 0, \\ V_{n,m} (\omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) + \\ + U_{n,m} \Omega_1^2 A^*(\mathbf{k}) = 0, \end{aligned} \quad (28)$$

где  $\Omega_1^2 = \kappa_1/m$  и  $\Omega_2^2 = \kappa_2/m$ .

Из условия равенства нулю определителя системы (28) следует соотношение для закона дисперсии

$$(\omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})))^2 - \Omega_1^4(3 + 2f(\mathbf{k})) = 0 \quad (29)$$

и может быть получена искомая зависимость  $\omega^2(\mathbf{k})$ :

$$\omega^2 = \Omega_1^2 (3 \pm \sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})}) + 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})). \quad (30)$$

При этом в случае учета взаимодействия только с соседями из первой координационной сферы, что эквивалентно условию  $\kappa_2 = 0$ , дисперсионное соотношение воспроизводит формулу (24).

Согласно заявленной цели работы, необходимо вновь проанализировать полученный закон дисперсии (30) в пределе малых  $k$ , чтобы определить «критическое» соотношение параметров  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$ , при котором для акустической ветви будет наблюдаться квадратичная зависимость  $\omega \sim k^2$ , характерная для изгибных мод. Это соотношение значений упругих констант может быть получено из условия стремления частоты (30) к пределу (35) для акустической ветви,

$$\omega(k) \sim k^2, \quad (31)$$

в то время как частоты оптической ветви всегда отличны от нуля, поэтому для них это условие роли не играет. Действительно, используя разложение функции (23) в ряд (25), дисперсионное соотношение в длинноволновом пределе  $ka \ll 1$  можно записать как

$$\begin{aligned} \omega^2 \approx \Omega_1^2 \left( 3 \pm 3 \left( 1 - \frac{k^2 a^2}{4} + \frac{k^4 a^4}{64} \right) \right) + \\ + 9\Omega_2^2 \left( \frac{k^2 a^2}{2} - \frac{3}{32} k^4 a^4 \right). \end{aligned} \quad (32)$$

Легко видеть, что линейный по  $k^2$  член разложения (32) для акустической ветви,

$$\omega^2 \approx \frac{3}{4} k^2 a^2 (\Omega_1^2 + 6\Omega_2^2), \quad (33)$$

при «критическом» соотношении упругих констант  $\kappa_2 = -\kappa_1/6$  обращается в нуль, что соответствует стремлению к нулю скорости звука в пределе длинных волн:

$$v_s^2 = (3/4)a^2 (\Omega_1^2 + 6\Omega_2^2) \rightarrow 0. \quad (34)$$

При этом дисперсионное соотношение приобретает вид, соответствующий закону дисперсии, характерному для изгибных мод,  $\omega(k) \sim k^2$ ,

$$\omega^2 \approx \frac{3}{32} \Omega_1^2 k^4 a^4. \quad (35)$$

Таким образом, как и в случае линейной цепочки атомов, необходимым условием появления квадратичных изгибных мод в графене является наличие

в системе отрицательных упругих констант при сохранении ее устойчивости.

Следует также отметить, что при «критическом» соотношении констант выражение (30) в общем случае с точностью до численного множителя воспроизводит квадрат частоты (24). Действительно, возводя (24) в квадрат, получаем

$$\begin{aligned} \omega^4 &= \Omega_1^4 \left( 12 \pm 6\sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} + 2f(\mathbf{k}) \right) = \\ &= 6\Omega_1^4 \left( 2 \pm \sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} + \frac{f(\mathbf{k})}{3} \right). \end{aligned} \quad (36)$$

В свою очередь, при  $\kappa_2 = -\kappa_1/6$ , формула (30) естественным образом преобразуется к виду

$$\omega^2 = \Omega_1^2 \left( 2 \pm \sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} + f(\mathbf{k})/3 \right), \quad (37)$$

что отличается от (36) лишь численным коэффициентом, сохраняя функциональную зависимость закона дисперсии. Этот результат означает, что в «критическом» случае для получения закона дисперсии при учете двух координационных сфер достаточно просто возвести в квадрат выражение для закона дисперсии, соответствующего только первой координационной сфере. Другими словами, добавка к лапласиану взаимодействия с атомами первой координационной сферы лапласиана, соответствующего второй сфере, оказывается эквивалентной возведению первого лапласиана в квадрат. Немаловажно, что это выполняется во всем диапазоне волновых векторов.

Таким образом, можно сделать вывод, что, как видно на рис. 3, общий характер дисперсионной зависимости в широком диапазоне значений волнового вектора определяется взаимодействием с атомами из первой координационной сферы. Включение взаимодействия с соседями из второй сферы принципиально меняет низкочастотный закон дисперсии колебательных мод в графене. В случае «критического» соотношения упругих констант происходит смена линейной зависимости  $\omega(k)$ , определяемой взаимодействием с атомами первой координационной сферы, на квадратичную, соответствующую изгибным фононным модам, как это наблюдалось на примере линейной атомной цепочки. Как мы покажем ниже, для численных оценок дисперсии изгибных волн в графене учета двух координационных сфер практически вполне достаточно. Учет третьей сферы приводит лишь к незначительным поправкам, не превышающим 15%. Это означает, что дисперсия изгибных мод в графене с достаточной точностью аналитически описывается простой формулой (37),

которая не имеет подгоночных параметров, кроме выбора масштаба по горизонтальной и вертикальной осям.

#### 2.4. Графен: учет взаимодействия с атомами из третьей координационной сферы

Учет взаимодействия с тремя атомами из третьей координационной сферы с упругой константой  $\kappa_3$  приводит к появлению дополнительных слагаемых в уравнениях, описывающих движение атомов в решетке графена:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 U_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 \left( V_{n,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m-1} - 3U_{n,m} \right) + \\ &+ \kappa_2 \left( U_{n+1,m} + U_{n-1,m} + U_{n,m+1} + \right. \\ &+ \left. U_{n,m-1} + U_{n-1,m+1} + U_{n+1,m-1} - 6U_{n,m} \right) + \\ &+ \kappa_3 \left( V_{n-1,m-1} + V_{n-1,m+1} + \right. \\ &\quad \left. + V_{n+1,m-1} - 3U_{n,m} \right), \quad (38) \\ m \frac{d^2 V_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 \left( U_{n,m} + U_{n+1,m} + U_{n,m+1} - 3V_{n,m} \right) + \\ &+ \kappa_2 \left( V_{n+1,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m+1} + \right. \\ &+ \left. V_{n,m-1} + V_{n-1,m+1} + V_{n+1,m-1} - 6V_{n,m} \right) + \\ &+ \kappa_3 \left( U_{n+1,m+1} + U_{n-1,m+1} + \right. \\ &\quad \left. + U_{n+1,m-1} - 3V_{n,m} \right). \end{aligned}$$

После подстановки (18) и введения обозначения  $\Omega_3^2 = \kappa_3/m$  уравнения (38) преобразуются в систему алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} U_{n,m} \left( \omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) - 3\Omega_3^2 \right) + \\ + V_{n,m} \left( \Omega_1^2(1 + e^{i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}) + \right. \\ + \left. \Omega_3^2(e^{i(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k}} + 2 \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k})) \right) = 0, \quad (39) \\ V_{n,m} \left( \omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) - 3\Omega_3^2 \right) + \\ + U_{n,m} \left( \Omega_1^2(1 + e^{-i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}) + \right. \\ + \left. \Omega_3^2(e^{-i(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k}} + 2 \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k})) \right) = 0. \end{aligned}$$

Из требования равенства нулю ее определителя закон дисперсии приобретает вид

$$\begin{aligned} \omega^2 = & 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) + 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) \pm \left[ \Omega_1^4(3 + 2f(\mathbf{k})) + \right. \\ & + \Omega_3^4(1 + 4 \cos^2((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)k) + 4 \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)k) \times \\ & \times \cos((\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)k) + \Omega_1^2\Omega_3^2 \left( 2 \cos((\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)k) + \right. \\ & \left. + 2 \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)k) + 4 \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)k) \times \right. \\ & \left. \left. \times (\cos(\mathbf{a}_1 k) + \cos(\mathbf{a}_2 k)) + 2f(\mathbf{k}) \right) \right]^{1/2}. \quad (40) \end{aligned}$$

С использованием явного вида функции  $f(\mathbf{k})$  и трансляционных векторов  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$  (15) зависимость (40) от проекций волнового вектора  $k_x$  и  $k_y$  может быть приведена к виду

$$\begin{aligned} \omega^2 = & 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) + 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) \pm \\ & \pm \left[ \Omega_1^4(3 + 2f(\mathbf{k})) + \Omega_3^4 \left( 1 + 4 \cos^2(\sqrt{3}k_y a) + \right. \right. \\ & \left. \left. + 4 \cos(\sqrt{3}k_y a) \cos(3k_x a) \right) + \right. \\ & \left. + \Omega_1^2\Omega_3^2 \left( 2 \cos(3k_x a) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + \right. \right. \\ & \left. \left. + 8 \cos(\sqrt{3}k_y a) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) \times \right. \right. \\ & \left. \left. \times \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) + 2f(\mathbf{k}) \right) \right]^{1/2}. \quad (41) \end{aligned}$$

Важно отметить, что формула (41) в общем случае воспроизводит дисперсионную зависимость для изгибных колебаний, полученную в работе [11] с помощью векторной модели Борна – фон Кармана.

С учетом (25) в пределе малых  $k$  выражение (41) можно разложить в ряд, ограничившись членами первого порядка:

$$\begin{aligned} \omega^2 \approx & 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) + \frac{9}{2}\Omega_2^2 k^2 a^2 \pm \\ & \pm 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) \left( 1 - \frac{1}{4}k^2 a^2 \frac{\Omega_1^4 + 4\Omega_3^4 + 5\Omega_1^2\Omega_3^2}{(\Omega_1^2 + \Omega_3^2)^2} \right). \quad (42) \end{aligned}$$

Для акустической ветви формула (42) преобразуется как

$$\omega^2 \approx \frac{3}{4}k^2 a^2 (\Omega_1^2 + 6\Omega_2^2 + 4\Omega_3^2), \quad (43)$$

и при  $\kappa_3 \neq 0$  «критическое» соотношение упругих констант, обеспечивающее возможность распространения изгибных мод в решетке графена, уже не сводится к единственно возможному сочетанию  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$  и  $\kappa_3$ . При этом в случае фиксированной  $\kappa_1$  возможные «критические» значения двух оставшихся параметров  $\kappa_2$  и  $\kappa_3$  определяются по формуле (45), а их

связь также может быть представлена в виде функционального соотношения

$$\kappa_1 + 6\kappa_2 + 4\kappa_3 = 0, \quad (44)$$

которое в точности совпадает с результатом, полученным в работе [15] на основе анализа симметрии тензора модулей упругости.

При фиксированном  $\kappa_1$  также может быть использовано соотношение для приведенных безразмерных параметров  $\tilde{\Omega}_2 = \Omega_2/\Omega_1$  и  $\tilde{\Omega}_3 = \Omega_3/\Omega_1$ , при котором исчезает квадратичный член в законе дисперсии (43),

$$\tilde{\Omega}_3^2 = -\frac{3}{2}\tilde{\Omega}_2^2 - \frac{1}{4}, \quad (45)$$

что эквивалентно функциональной зависимости между упругими константами (44).

Легко убедиться, что, как и в случае линейной цепочки (14), соотношение (44) соответствует условию

$$\sum_{j=1}^3 N_j \kappa_j r_j^2 = 0, \quad (46)$$

где  $N_j$  – число атомов в  $j$ -й координационной сфере, а  $r_j$  – ее радиус. Для графена  $N_1 = 3$ ,  $N_2 = 6$ ,  $N_3 = 3$ , а  $r_1^2 = a^2$ ,  $r_2^2 = 3a^2$ ,  $r_3^2 = 4a^2$ . Равенство нулю суммы (46) также обеспечивает необходимое при описании изгибных колебаний сокращение вкладов в закон дисперсии от положительных и отрицательных упругих констант. Следует отметить, что как и в ситуации с линейной цепочкой атомов, полученное соотношение легко обобщить на случай учета взаимодействия с атомами из произвольного числа координационных сфер, узлы которых соответствуют вершинам правильных вписанных  $N_j$ -угольников.

Таким образом, упругие константы взаимодействия координационных сфер оказываются между собой непосредственно взаимосвязаны, и включение взаимодействия с атомами третьей координационной сферы для удовлетворения «критическим» условиям требует изменения констант  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$ . Можно сделать вывод, что при учете взаимодействия с минимально необходимым числом соседних атомов путем подбора соотношения упругих констант всегда есть возможность обеспечить отсутствие линейного члена в дисперсионном соотношении  $\omega(\mathbf{k})$ , что является характерным признаком изгибных мод с квадратичной дисперсией в рассматриваемой кристаллической решетке.



**2.4.1. Точки симметрии в первой зоне Бриллюэна**

Отдельный интерес представляет анализ формулы (41) в точках симметрии первой зоны Бриллюэна, отмеченных на рис. 2.

Для Г-точки, для которой  $\mathbf{k} = 0$  и  $f(\mathbf{k}) = 3$ , отлична от нуля только частота оптической ветви,

$$\omega_{\Gamma O}^2 = 6(\Omega_1^2 + \Omega_3^2), \quad (47)$$

значение которой не зависит от влияния атомов второй координационной сферы.

В седловой точке  $M$ , которой соответствует волновой вектор

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2}{2} = \left( \frac{2\pi}{3a}, 0 \right), \quad (48)$$

$f(\mathbf{k}) = -1$  и частоты нормальных мод удовлетворяют соотношению

$$\omega^2 = 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) + 8\Omega_2^2 \pm (\Omega_1^2 - 3\Omega_3^2). \quad (49)$$

При этом интересно, что частота оптической ветви

$$\omega_{MO}^2 = 2(2\Omega_1^2 + 4\Omega_2^2), \quad (50)$$

в этом случае не зависит от влияния атомов третьей координационной сферы, а частота акустической ветви равна

$$\omega_{MA}^2 = 2(\Omega_1^2 + 4\Omega_2^2 + 3\Omega_3^2). \quad (51)$$

Несколько иной вид приобретает закон дисперсии для точек Дирака  $K$  и  $K'$ , т. е. для точек

$$\mathbf{k} = \left( \pm \frac{2\pi}{3a}, \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad (52)$$

а также для точек

$$\mathbf{k} = \left( 0, \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad (53)$$

для которых  $f(\mathbf{k}) = -3/2$ ,

$$\omega_{KO,A}^2 = 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2 + 3\Omega_2^2), \quad (54)$$

т. е. частоты оптической и акустической ветвей, как и следовало ожидать, совпадают.

Важно отметить, что выражения (47), (50), (51), (54) в точности совпадают с формулами для частот в симметричных точках зоны Бриллюэна, полученными в работах [11, 14], где для упругих констант  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$  и  $\kappa_3$  были использованы соответственно обозначения  $-\alpha_z$ ,  $-\gamma_z$  и  $-\alpha'_z$ .

**2.5. Обсуждение результатов**

Итак, при «критическом» соотношении упругих констант низкочастотные изгибные фононы с линейным законом дисперсии не могут распространяться в графене, поскольку их модуль упругости и скорость звука стремятся к нулю. Им на смену приходят изгибные моды с более сложным законом дисперсии [15], который вблизи «критического» состояния может быть представлен в виде (32)

$$\omega^2(k) = \alpha k^2 + \beta k^4, \quad (55)$$

где  $\alpha \sim (\kappa_1 + \kappa_2/6)$ , а  $\beta \sim 1$ . В точке перехода в режим изгибных мод  $\alpha = 0$  и скорость звука  $v_s$  при  $k \rightarrow 0$  обращается в нуль (34).

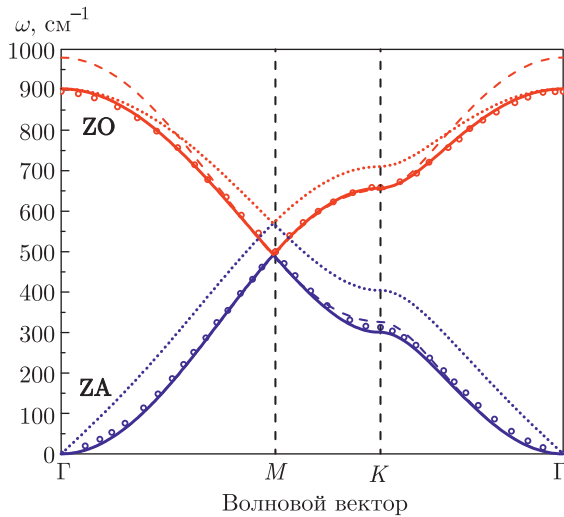
Чтобы обеспечить возможность анализа результатов в абсолютных значениях, перепишем формулу (41) для дисперсионной зависимости в более удобном виде:

$$\begin{aligned} \omega^2 = \Omega_1^2 \left\{ 3 \left( 1 + \tilde{\Omega}_3^2 \right) + 2\tilde{\Omega}_2^2(3 - f(\mathbf{k})) \pm \right. \\ \left. \pm \left[ (3 + 2f(\mathbf{k})) + \tilde{\Omega}_3^4 \left( 1 + 4 \cos^2(\sqrt{3}k_y) + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + 4 \cos(\sqrt{3}k_y) \cos(3k_x) \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \tilde{\Omega}_3^2 \left( 2 \cos(3k_x) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y) + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + 8 \cos(\sqrt{3}k_y) \cos\left(\frac{3}{2}k_x\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + 2f(\mathbf{k}) \right) \right]^{1/2} \right\}. \quad (56) \end{aligned}$$

Такая форма записи позволяет использовать частоту  $\Omega_1$  как свободный параметр, а для безразмерных приведенных частот  $\tilde{\Omega}_2$  и  $\tilde{\Omega}_3$  в случае их «критического» соотношения по-прежнему выполняются условия их взаимосвязи (45).

Нами была поставлена задача выяснить, позволяет ли используемый подход воспроизвести результаты численных расчетов других авторов, основанных на более сложных моделях, а также определить, взаимодействие с каким минимальным количеством атомов для этого необходимо учесть.

На рис. 4 для сравнения приведены результаты, полученные в работе Фальковского [11] для изгибных фононных мод с учетом взаимодействия с атомами трех ближайших координационных сфер в рамках векторной модели Борна-фон Кармана,



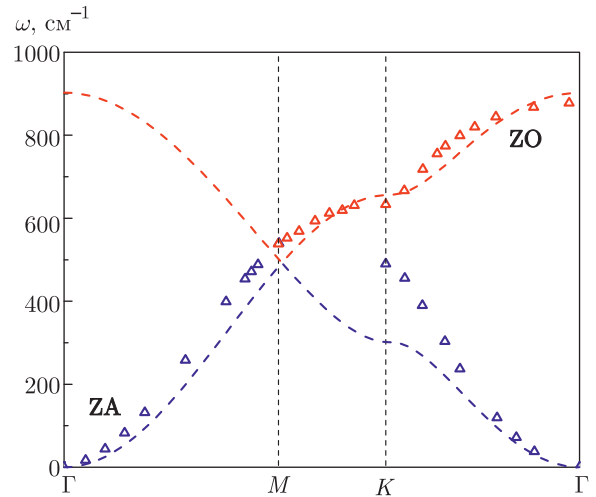
**Рис. 4.** Фононная дисперсия в графене для изгибных мод с учетом взаимодействия с атомами двух (штриховые линии) и трех (сплошные линии) ближайших координационных сфер при «критическом» соотношении упругих констант. Пунктирными линиями представлены дисперсионные кривые при соотношении констант взаимодействия отличном от «критического». Кружками приведены результаты расчета из работы [11]

где при проведении расчетов был использован набор упругих констант, обеспечивающий воспроизведение отличной от нуля скорости акустических изгибных волн в графене в длинноволновом пределе,

$$v_s = a(-0.75\alpha_z - 3\alpha'_z - 4.5\gamma_z)^{1/2}.$$

Частоты закона дисперсии, полученные в [11], показаны кружками красного и синего цвета соответственно для оптической (ZO) и акустической (ZA) мод. Тонкими штриховыми линиями показаны результаты расчета по формуле (56), соответствующие учету взаимодействия только с двумя ближайшими координационными сферами, т. е. при  $\tilde{\Omega}_2^2 = -1/6$  и  $\tilde{\Omega}_3^2 = 0$ ,  $\Omega_1 = 400 \text{ см}^{-1}$ . На графике видно, что, несмотря на хорошее согласие с результатами [11] для волновых векторов в окрестностях точек  $K$  и  $M$ , наблюдается заметное расхождение для частот оптической ветви при малых  $k$ . На этом же графике сплошными линиями соответствующего цвета также показаны дисперсионные кривые, полученные с учетом взаимодействия с тремя ближайшими координационными сферами при соотношении упругих констант,

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_2^2 &= -\frac{1}{6} + 0.04 = -0.12667, \\ \tilde{\Omega}_3^2 &= -\frac{3}{2}\tilde{\Omega}_2^2 - \frac{1}{4} = -0.06, \quad \Omega_1 = 380 \text{ см}^{-1}. \end{aligned}$$



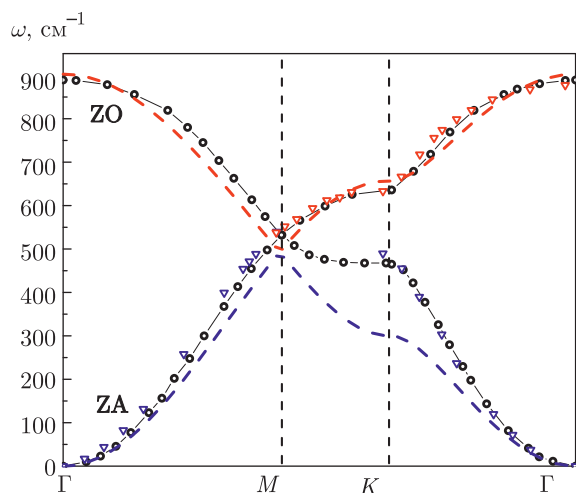
**Рис. 5.** Сравнение экспериментальных данных фононной дисперсии в графите [8] с результатами расчета по формуле (56)

Значения констант были подобраны таким образом, чтобы одновременно удовлетворить «критическим» соотношениям и при этом добиться возможно лучшего согласия с результатами [11] во всем диапазоне волновых векторов.

Из полученных графиков следует, что дополнительный учет взаимодействия с атомами из третьей координационной сферы приводит к лучшему согласию для оптической ветви в области малых значений волнового вектора, практически не изменяя дисперсионную зависимость на краях зоны Бриллюэна. При этом влияние второй координационной сферы является существенно более заметным. На рис. 4 пунктирными линиями представлены дисперсионные кривые, учитывающие взаимодействие с атомами из трех координационных сфер, при  $\tilde{\Omega}_2^2 = -0.0633$ , т. е. вдвое меньшем по абсолютной величине по сравнению с «критическим» значением. Из графика следует, что в области малых  $k$  дисперсионная зависимость приобретает не квадратичный, а линейный характер, а также заметно возрастают частоты обеих фононных ветвей в окрестности точек  $K$  и  $M$ .

Представляет интерес сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. К сожалению, достоверные экспериментальные результаты непосредственно по графену отсутствуют, но остается возможность использовать, например, данные, полученные из эксперимента по упругому рассеянию рентгеновских лучей в графите [8].

На рис. 5 сравниваются результаты эксперимента [8] и нашего численного расчета по форму-



**Рис. 6.** Сравнение экспериментальных данных фоновой дисперсии в графите [8] (треугольники), численных расчетов в приближении DFT-LDA [9, 16] (черные кружки) и результатов, полученных на основе формулы (56) (штриховые линии)

ле (56) с учетом взаимодействия с тремя ближайшими координационными сферами. При вычислениях использовались те же значения упругих констант  $\tilde{\Omega}_2^2 = -0.12667$ ,  $\tilde{\Omega}_3^2 = -0.06$  и  $\Omega_1 = 380 \text{ см}^{-1}$ , которые обеспечили наилучшее согласие с данными из работы [11], соответствующие кривые изображены штриховыми линиями на рис. 4. Из графика следует, что наблюдается достаточно хорошее согласие результатов для ZA-моды на участке  $\Gamma$ -K, а также для ZO-моды на участках  $\Gamma$ -M-K. В то же время, присутствует заметное расхождение для акустической фоновой ветви на участке M- $\Gamma$ , которое может быть объяснено влиянием взаимодействия между соседними слоями графита. Величина этого взаимодействия согласно оценке, сделанной в работе [11], составляет около  $130 \text{ см}^{-1}$ , что по порядку величины согласуется с расхождением между вычисленным значением частоты акустической ветви в точке M,  $\omega_{MA}$ , и соответствующей частотой в графите.

Теоретические расчеты дисперсии фононов также проводились в ряде работ с использованием методов функционала плотности [9, 16] и с использованием эффективных потенциалов межатомного взаимодействия [17]. На рис. 6 для сравнения представлены результаты расчетов нескольких авторов [9, 16], а также экспериментальные данные [8] и наши кривые, полученные при «критических» параметрах, обеспечивших согласие с результатами из статьи [11].

Из сравнения графиков видно, что как наши расчеты, так и результаты [11] демонстрируют качественное согласие с экспериментальными результатами и расчетами, использующими приближение локальной плотности для учета электрон-фононного взаимодействия в графите. В то же время, по-прежнему наблюдается численное расхождение для части спектра акустической ветви. Можно предположить, что хорошее согласие между экспериментом и расчетными данными [9, 16] обеспечивалось в первую очередь тем, что значения силовых констант в этих работах специально подбирались таким образом, чтобы добиться наилучшего воспроизведения экспериментальных дисперсионных зависимостей в графите, в то время как в нашей работе выбор параметров определялся исходя из требования квадратичного закона дисперсии для акустической ветви в длинноволновом пределе. Кроме того, по сравнению с упомянутыми работами, мы не учитывали влияния соседей из четвертой координационной сферы, а также роль электрон-фононного взаимодействия. Таким образом, в целом наша модель дает хорошее качественное описание дисперсионной зависимости для изгибных фоновых мод в графене и наглядно демонстрирует, что дополнительный учет взаимодействия с более дальними соседями в его кристаллической решетке может кардинально менять характер фоновой спектра.

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, на основе проведенного анализа в рамках простой мы показали, что физической причиной аномальной квадратичной дисперсии изгибных акустических волн в графене является близость упругих констант второй и третьей конфигурационных сфер к «критическому» соотношению (44), что возможно только при отрицательных значениях этих констант и достаточной их абсолютной величине. Определяющую роль в изменении закона дисперсии играет взаимодействие с атомами второй координационной сферы, в то время как более дальние соседи вносят только сравнительно незначительные количественные поправки. При этом дополнительный учет взаимодействия с соседними атомами даже только из второй конфигурационной сферы качественно меняет характер спектра колебательных мод в решетке графена по сравнению с результатами при взаимодействии только с самыми ближайшими соседями. Мы пока не можем сделать окончательный

вывод о дисперсионной зависимости изгибных мод в графене, характер которой зависит от реального соотношения упругих констант, которые могут быть определены или непосредственно из экспериментальных данных или на основе теоретических расчетов *ab initio*. Однако сравнение с результатами экспериментальных измерений дает основание считать, что в низкочастотной области дисперсионная зависимость близка к параболической, и, таким образом, мы находимся либо в «критической» ситуации, либо очень близко к ней.

**Благодарности.** Авторы выражают искреннюю благодарность Ю. М. Гальперину за продуктивное обсуждение результатов работы и полезные замечания.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. И. Балабанов, *Нанотехнологии. Наука будущего*, Эксмо, Москва (2009).
2. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science* **306**, 666 (2004).
3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Nature* **438**, 197 (2005).
4. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, NY (2012).
5. M. I. Katsnelson, *The Physics of Graphene*, Cambridge University Press, NY (2020).
6. L. J. Karssemeijer and A. Fasolino, *Surf. Sci* **605**, 1611 (2011).
7. Hanyu Zhu, Jun Yi, Ming-Yang Li et al., *Science* **359**, 579 (2018).
8. M. Mohr, J. Maultzsch et al., *Phys. Rev. B* **76**, 035439 (2007).
9. L. Wirtz and A. Rubio, *Solid State Comm.* **131**, 141 (2004).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).
11. Л. А. Фальковский, *ЖЭТФ* **142**, 560 (2012).
12. И. О. Райков, Д. А. Конюх, А. Н. Ипатов, Д. А. Паршин, *ФТТ* **11**, 1866 (2020).
13. L. A. Falkovsky, *ЖЭТФ* **132**, 446 (2007).
14. L. A. Falkovsky, *Phys. Lett. A* **372**, 5189 (2008).
15. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, К. В. Кравченко и др., *ФНТ* **35**, 208 (2009).
16. O. Dubay and G. Kresse, *Phys. Rev. B* **67**, 035401 (2003).
17. V. K. Tewary and B. Yang, *Phys. Rev. B* **79**, 075442 (2009).
18. R. Saito, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, *Physical and Chemical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, UK (2003).
19. Г. Л. Беленький, Э. Ю. Салаев, Р. А. Сулейманов, *УФН* **155**, 89 (1988).
20. П. В. Павлов, А. В. Хохлов, *Физика твердого тела*, Высшая школа, Москва (2000).
21. А. М. Косевич, *Основы механики кристаллической решетки*, Наука, Москва (1972).
22. Д. А. Конюх, Я. М. Бельтюков, Д. А. Паршин, *ФТТ* **60**, 369 (2018).