

Структура новых sp^2+sp^3 гибридных углеродных фаз, получаемых совмещением (n,n) однослойных углеродных нанотрубок

Е. А. Беленков[†], М. И. Тиньгаев

[†]belenkov@csu.ru

Челябинский государственный университет, ул. Братьев Кашириных 129, 454001, Челябинск, Россия

В работе методом теории функционала плотности (DFT) выполнены расчеты структуры новых sp^2+sp^3 углеродных фаз, которые могут быть получены в результате частичного совмещения жгутов креслообразных однослойных углеродных нанотрубок (УНТ). Установлена возможность существования пяти устойчивых фаз с эквивалентными позициями атомов. Эти фазы получаются при частичном совмещении нанотрубок (3,3), (4,4) или (6,6). Для этих фаз была рассчитана геометрически оптимизированная структура и найдены значения структурных параметров. Минимальное значение полной удельной энергии $-157,13$ эВ наблюдается для фазы $T_{(3,3)}b_{Z3}$, которая должна быть самой устойчивой из исследованных фаз. Экспериментальное получение sp^2+sp^3 углеродных гибридных фаз возможно при двухосном сжатии жгутов углеродных нанотрубок или всестороннем объемном сжатии фуллереновых конденсатов.

Ключевые слова: углерод, кристаллическая структура, углеродные нанотрубки, гибридные углеродные фазы

Structure of new sp^2+sp^3 hybrid carbon phases by means of aligning of armchair single-walled carbon nanotubes

E. A. Belenkov, M. I. Tingaev

Chelyabinsk State University, 129 Br. Khashirinyh St., 454001, Chelyabinsk, Russia

Theoretical investigations of new sp^2+sp^3 carbon phases that can be modeled as a result of partially aligning of armchair single-walled carbon nanotubes (SWNTs) using density functional theory (DFT) is performed. As a result of the simulation revealed that there are five stable structures with equivalent atom positions. These phases are obtained by the partial aligning of (3,3), (4,4) or (6,6) nanotubes. Geometrically optimized structure and structural parameters of such phases were found. The minimum value of the total energy is -157.13 eV/at for the observed phase $T_{(3,3)}b_{Z3}$, which should be the most stable of the studied phases. The experimentally obtained sp^2+sp^3 hybrid carbon phases are possible under biaxial compression of ropes of carbon nanotubes or volume compression of fullerene condensates.

Keywords: carbon, crystal structure, carbon nanotubes, hybrid carbon phases

1. Введение

Гибридные углеродные соединения состоят из атомов углерода, находящихся в состояниях с различной гибридизацией [1–3]. Всего возможно четыре класса таких соединений, состоящих из атомов в состояниях гибридизации $sp+sp^2$ [4–6], $sp+sp^3$ [7–9], sp^2+sp^3 [10–12] и $sp+sp^2+sp^3$ [13,14]. Особый интерес представляют исследования соединений, в которых атомы находятся в sp^2 и sp^3 гибридизованных состояниях. Эти соединения, по-видимому, должны быть наиболее устойчивыми по сравнению с соединениями других классов, так как составляющие их атомы находятся в состояниях,

подобных состояниям в структуре двух основных аллотропных разновидностей углерода — графита (sp^2) и алмаза (sp^3). Ряд sp^2+sp^3 гибридных наноструктур и фаз был экспериментально синтезирован [15–17]. Однако, какова возможная структура всех возможных фаз из атомов в состояниях sp^2 и sp^3 гибридизации до сих пор остается неясным.

Теоретически, структуры таких фаз могут быть получены в результате частичной сшивки или совмещения структур-предшественников, состоящих из sp^2 гибридизованных атомов. В качестве предшественников могут выступать фуллерены, углеродные нанотрубки (УНТ), графеновые слои и 3D-графиты [2,3]. В данной

работе было выполнено теоретическое исследование структуры sp^2+sp^3 гибридных фаз, состоящих из атомов в кристаллографически эквивалентных позициях, которые получаются при совмещении жгутов однослойных креслообразных УНТ.

2. Методика получения фаз и методы расчета структуры

Модельно получить углеродные sp^2+sp^3 гибридные фазы можно двумя способами. Первый механизм получения таких фаз заключается в совмещении структур предшественников так, что часть атомов совмещаемых структур замещают друг друга. Примеры образования гибридной структуры в результате совмещения УНТ приведен на рис.1. Второй механизм модельного получения углеродных фаз заключается в частичной сшивке структур предшественников. В данной работе ограничились рассмотрением только фаз, получаемых совмещением креслообразных УНТ, в которых все атомы sp^2 и sp^3 находятся в кристаллографически эквивалентных позициях.

Совмещение нанотрубок, для получения фаз, выполняли для различных жгутов, в которых УНТ находились в одинаковых координациях $i=3,4,6$, а также смешанных координациях 2-3, 2-4, 2-6. Другие координации нанотрубок в жгутах не могут привести к формированию структуры фаз в эквивалентных позициях, поэтому они

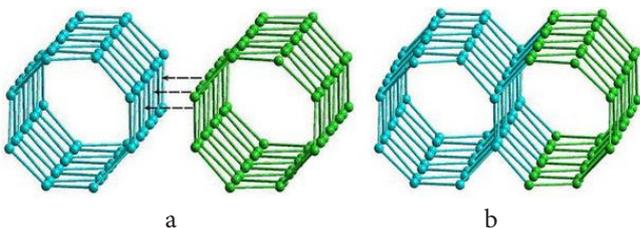


Рис. 1. Механизм получения структуры гибридных sp^2+sp^3 соединений при совмещении углеродных нанотрубок: совмещение нанотрубок (а); результирующая структура после замещения части атомов совмещенных УНТ (б).

Fig. 1. A mechanism for obtaining the structure of $sp^2 + sp^3$ hybrid compounds when combining carbon nanotubes: the combination of nanotubes (a); the resulting structure after the substitution of the atoms aligned CNTs (b).

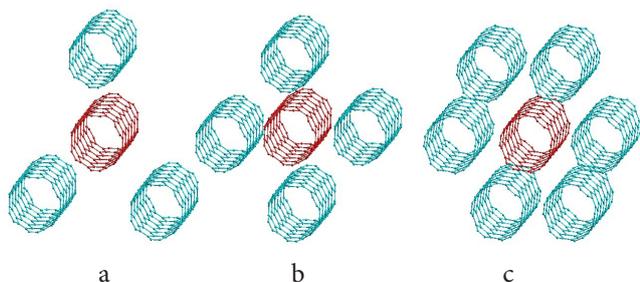


Рис. 2. УНТ в трехкоординированном (а), четырехкоординированном (б) и шестикоординированном (с) окружении в жгуте.

Fig. 2. Three (a), four (b) and six (c) coordinated CNTs formed in harnesses.

не рассматривались. Примеры трех-, четырех- и шестикоординированного расположения нанотрубок в совмещаемых жгутах представлены на рис.2.

Структуры гибридных фаз находили в два этапа. На первом этапе выполнялось совмещение жгутов, содержащих от 7 до 28 нанотрубок (n,n) (где $n=2,3,4,6$). В каждом из фрагментов нанотрубок содержалось от 52 до 132 атомов углерода. В результате получались кластеры, содержавшие от 912 до 1764 атомов. Структура полученных кластеров подвергалась геометрической оптимизации методом ММ+ [18]. В центральной части геометрически оптимизированных кластеров, где структура наименее искажена от краевых эффектов, находили элементарные ячейки. На втором этапе структура элементарных ячеек подвергалась дополнительной геометрической оптимизации в рамках теории функционала плотности с использованием обобщенного градиентного приближения DFT-GGA [19]. Использовался набор k-точек: $8 \times 8 \times 8$. Для ограничения размерности набора базисных функций значение Ecutoff было принято равным 950 эВ.

3. Результаты и обсуждение

В результате построения sp^2+sp^3 гибридных углеродных фаз, по схеме, описанной выше, была установлена возможность существования только пяти фаз, в которых sp^2 и sp^3 атомы находятся в кристаллографически эквивалентных позициях (табл.1).

Символы, использованные в обозначениях sp^2+sp^3 фаз, означают: $T_{(n,n)}$ — фаза получена из нанотрубок с индексами (n,n); **b** — **частичное совмещение исходных наноструктур предшественников**; индексы Zi или Gi указывают на то, что совмещение производилось вдоль зигзаг цепочек (Z) или по гексагонам (G) с координацией i.

Две фазы $T_{(3,3)}b_{Z3}$ и $T_{(3,3)}b_{G3}$ получаются в результате совмещения нанотрубок (3,3) в трехкоординированных состояниях, еще две фазы $T_{(4,4)}b_{Z4}$ и $T_{(4,4)}b_{G4}$ получены из нанотрубок (4,4) в четырехкоординированных состояниях, пятая фаза получается при совмещении трубок (6,6) в шестикоординированных состояниях. Еще одна sp^2+sp^3 фаза $T_{(2,2)}b_{G2-4}$ с эквивалентными позициями атомов, была получена при совмещении жгутов нанотрубок

Таблица 1. Результаты поиска эквивалентных структур

Table 1. Search results of equivalent structures

i	(2,2)	(3,3)	(4,4)	(5,5)	(6,6)
3	*	$T_{(3,3)}b_{Z3}$ $T_{(3,3)}b_{G3}$	*	*	*
4	*	*	$T_{(4,4)}b_{Z4}$ $T_{(4,4)}b_{G4}$	*	*
6	*	*	*	*	$T_{(6,6)}b_{G6}$
2-4	$T_{(2,2)}b_{G2-4}$ \Rightarrow	*	*	*	*
2-6	*	*	*	*	*
2-3	*	*	*	*	*

Таблица 2. Структурные параметры найденных фаз

Table 2. Search results of equivalent structures

Phase	$T_{(3,3)}b_{Z3}$	$T_{(3,3)}b_{G3}$	$T_{(4,4)}b_{G4}$	$T_{(4,4)}b_{Z4}$	$T_{(6,6)}b_{G4}$
Rng	6^58^1	6^6	4^16^5	6^58^1	6^33^1
E_{total} , eV	-157,13	-156,93	-156,96	-156,95	-156,96
$sp^2:sp^3$	2:1	1:1	1:1	2:1	1:2
a, nm	0,783	0,626	0,253	0,632	0,819
b, nm			1,053	0,246	
c, nm	0,241	0,253	0,527	0,632	0,253
Syngony	hex	hex	orth	tricl	hex

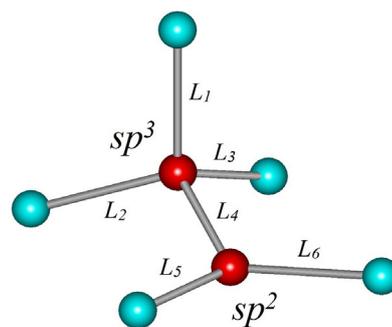


Рис. 3. Обозначение связей в структуре sp^2+sp^3 гибридных углеродных фаз.

Fig. 3. Designation of bonds in the structure of sp^2+sp^3 hybrid carbon phases.

(2,2) со смешанной координацией 2-4. Однако при последующей оптимизации этой фазы методом DFT-GGA ее структура трансформировалась в структуру алмазоподобной фазы A3 [20,21].

Для гибридных sp^2+sp^3 фаз после геометрической оптимизации их структуры методом DFT-GGA были определены координаты атомов в элементарных ячейках (табл.3), длины векторов элементарных трансляций (a,b,c), длины межатомных связей (L_i) (табл.4), углы между связями (φ_{ij}) (табл.5), полные удельные энергии (E_{total}), а также кольцевые параметры Rng и соотношения числа атомов $sp^2:sp^3$ (табл.2). Изображения геометрически оптимизированной структуры фаз представлены на рис.4. Кольцевые параметры Rng атомов sp^2 для всех изученных структур являются одинаковыми, поэтому в таблице 2 приведены значения параметров Rng только для sp^3 атомов. Минимальное значение полной удельной энергии -157,13 эВ наблюдается для фазы $T_{(3,3)}b_{Z3}$, которая, по-видимому, является самой устойчивой из изученных фаз.

Удельная энергия максимальна для фазы $T_{(3,3)}b_{G3}$, в которой углы между связями sp^3 гибридных атомов наиболее сильно отличаются от значений углов, харак-

терных для кубического алмаза (табл.5). Для двух фаз $T_{(3,3)}b_{G3}$ и $T_{(4,4)}b_{G4}$ соотношение атомов в трех и четырехкоординированных состояниях одинаково, фазы $T_{(3,3)}b_{Z3}$ и $T_{(4,4)}b_{Z4}$ содержат в два раза больше атомов в sp^2 состоянии, чем в sp^3 , а в фазе $T_{(6,6)}b_{G4}$ число атомов sp^2 наоборот больше в два раза, чем число sp^3 атомов. Кристаллические решетки трех фаз $T_{(3,3)}b_{Z3}$, $T_{(3,3)}b_{G3}$ и $T_{(6,6)}b_{G4}$ относятся к гексагональной сингонии (hex), у фазы $T_{(4,4)}b_{G4}$ сингония орторомбическая (orth), а для фазы $T_{(4,4)}b_{Z4}$ сингония триклинная (tricl).

В исследованных фазах все атомы находятся в двух различных позициях, соответствующих трех- и четырехкоординированным состояниям. Поэтому в структурах фаз возможно наличие только шести межатомных расстояний, отличающихся длиной (рис.3). Расчетные значения длины межатомных связей в фазах, получаемых совмещением кресло образных УНТ (расчет методом DFT-GGA), представлены в табл.4. Для каждой из фаз имеются некоторые связи, длины которых равны друг другу. Различных углов между шестью связями в структурах фаз может быть девять, рассчитанные значения которых приведены в табл.5.

Таблица 3. Координаты атомов в элементарных ячейках

Table 3. Atom coordinates of the unit cells

Phase	№	X	Y	Z	№	X	Y	Z	№	X	Y	Z
$T_{(3,3)}b_{Z3}$	1	0	0	0	7	5,609	3,238	0	13	5,609	-3,238	0
	2	0,867	1,262	0	8	6,268	1,857	0	14	4,083	-3,119	0
	3	1,210	1,857	1,236	9	6,612	1,262	1,236	15	3,396	-3,118	1,236
	4	1,870	3,238	1,236	10	7,478	0	1,236	16	1,870	-3,237	1,236
	5	3,396	3,119	1,236	11	6,612	-1,262	1,236	17	1,210	-1,856	1,236
	6	4,083	3,119	0	12	6,268	-1,857	0	18	0,867	-1,261	0
$T_{(3,3)}b_{G3}$	1	0	0	0	5	3,515	3,297	1,263	9	2,839	-2,125	1,263
	2	0,806	1,396	0	6	3,223	0	0	10	3,515	-3,297	1,263
	3	2,417	1,396	0	7	2,417	-1,395	0	11	4,066	0	1,263
	4	2,839	2,126	1,263	8	0,806	-1,395	0	12	5,418	0	1,263
$T_{(4,4)}b_{Z4}$	1	0	0	0	5	3,959	1,741	2,642	9	3,037	3,196	4,5
	2	1,125	1,043	0,001	6	5,128	1,505	1,68	10	4,206	2,96	3,538
	3	2,066	0,854	1,195	7	5,359	0,189	1,194	11	5,377	2,724	4,498
	4	2,788	1,977	1,682	8	2,315	2,072	4,987	12	6,1	3,848	4,985
$T_{(4,4)}b_{G4}$	1	0	0	0	7	1,264	3,312	1,144	13	1,264	5,267	4,456
	2	0	1,144	1,144	8	0	4,122	1,144	14	1,264	7,221	1,144
	3	0	0	2,288	9	0	5,267	0	15	1,264	8,579	1,144
	4	1,264	0	3,099	10	0	6,411	1,144	16	0	9,389	1,144
	5	1,264	0	4,456	11	0	5,267	2,288	-	-	-	-
	6	1,264	1,954	1,144	12	1,264	5,267	3,099	-	-	-	-
$T_{(6,6)}b_{G6}$	1	0	0	0	5	1,456	2,522	0	9	5,555	3,208	0
	2	3,31	-4,963	1,264	6	2,643	3,207	0	10	6,742	2,522	0
	3	4,099	-6,329	1,264	7	3,31	3,593	1,264	11	4,099	4,959	1,264
	4	4,888	-4,963	1,264	8	4,888	3,593	1,264	12	4,099	5,729	0

Таблица 4. Длины межатомных связей sp^2+sp^3 гибридных углеродных фаз

Table 4. The lengths of the interatomic bonds of sp^2+sp^3 hybrid carbon phases

Phase	Bond lengths, nm					
	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6
$T_{(3,3)}b_{Z3}$	0,152	0,154	0,152	0,154	0,140	0,140
$T_{(3,3)}b_{G3}$	0,161	0,161	0,152	0,152	0,152	0,135
$T_{(4,4)}b_{Z4}$	0,151	0,151	0,157	0,157	0,151	0,134
$T_{(4,4)}b_{G4}$	0,152	0,152	0,152	0,152	0,141	0,141
$T_{(6,6)}b_{G6}$	0,149	0,148	0,148	0,148	0,149	0,134

Анализ данных из таблиц 4 и 5 показывает, что фазой с наименьшими отличиями длин связей и углов между ними от значений для этих параметров в структурах кубического алмаза и графита ($L_{\text{diamond}}=0,154$ нм, $L_{\text{graphite}}=0,142$ нм, $\varphi_{\text{diamond}}=109,47^\circ$, $\varphi_{\text{graphite}}=120^\circ$) являются фаза $T_{(3,3)}b_{Z3}$.

4. Заключение

Таким образом, в работе был выполнен полный анализ возможной структуры всех гибридных sp^2+sp^3 фаз, которые могут быть получены из креслообразных УНТ путем их частичного совмещения, так, чтобы в этих фазах все атомы находились только в двух различных кристаллографически эквивалентных состояниях, соответствующих состояниям sp^2 и sp^3 гибридизации. В результате установлена возможность устойчивого существования пяти новых гибридных фаз, из которых наиболее стабильной должна быть фаза $T_{(3,3)}b_{Z3}$, получающаяся при частичном совмещении углеродных нанотрубок (3,3) вдоль зигзаг цепочек. Структура этой фазы внешне похожа на структуру фазы, описанную ранее в работе [22], однако $T_{(3,3)}b_{Z3}$ это новая структура, впервые описанная в данной работе. Изученные гибридные sp^2+sp^3 фазы должны быть устойчивыми, так как их структуры соответствуют локальным минимумам полной энергии связей и состояниям устойчивого равновесия. Процесс геометрической оптимизации исходно заданных структур не всегда заканчивается нахождением устойчивых фаз — расчеты структуры sp^2+sp^3

Таблица 5. Углы между связями гибридных УНТ фаз

Table 5. The bond angles of hybrid carbon phases

Angles	Phase				
	$T_{(3,3)}b_{Z3}$	$T_{(3,3)}b_{G3}$	$T_{(4,4)}b_{G4}$	$T_{(4,4)}b_{Z4}$	$T_{(6,6)}b_{G6}$
φ_{12}°	110,18	60,86	116,91	112,72	118,16
φ_{13}°	111,78	120,00	111,89	99,36	116,29
φ_{14}°	109,95	60,84	111,76	112,72	116,57
φ_{23}°	109,97	60,86	111,50	112,75	116,27
φ_{24}°	104,59	120,00	111,69	106,64	116,56
φ_{34}°	110,13	60,86	90,01	112,75	59,98
φ_{46}°	120,05	112,56	121,70	119,98	120,95
φ_{45}°	120,11	123,72	117,01	119,98	118,16
φ_{56}°	119,64	123,72	121,30	119,76	120,89

гибридных фаз, получаемых из графеновых слоев, показали невозможность их устойчивого существования [23]. Синтез гибридных sp^2+sp^3 фаз, вероятно, возможен при двухосном сжатии жгутов углеродных нанотрубок или всестороннем объемном сжатии фуллеритов или конденсатов из фрагментов нанотрубок, которые были описаны в работах [24,25].

Литература / References

1. E. A. Belenkov, V.V. Ivanovskaya, A.L. Ivanovskii. Nanodiamonds and related carbon nanomaterials. Ekaterinburg. UrO RAS, 2008. 169 p. (in Russian) [E. A. Беленков, В.В. Ивановская, А.Л. Ивановский. Наноалмазы и родственные углеродные наноматериалы. Екатеринбург. УрО РАН, 2008. 169 с.]
2. E. A. Belenkov, V.A. Greshnyakov. Physics of the Solid State. **55** (8), 1754—1764 (2013). [E. A. Беленков, В. А. Грешняков. Физика твердого тела. **55** (8), 1640—1650 (2013).] DOI: 10.1134/S1063783413080039
3. E. A. Belenkov, V. A. Greshnyakov. New Carbon Materials. **28** (4), 273—282 (2013). DOI: 10.1016/S1872-5805 (13) 60081-5
4. E. A. Belenkov, V.V. Mavrinsky. Proceedings of the Chelyabinsk Scientific Center of Ural Branch of the RAS. **32** (2), 13—18 (2006). (in Russian) [E. A. Беленков, В.В. Мавринский. Известия Челябинского научного центра УрО РАН. **32** (2), 13—18 (2006).]
5. E. A. Belenkov, V.V. Mavrinsky. T.E. Belenkova,

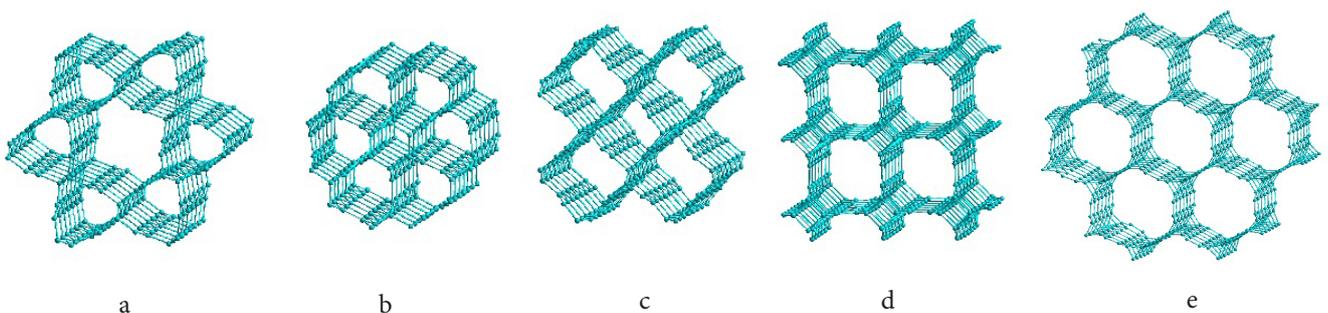


Рис. 6. Геометрически оптимизированная структура фаз: $T_{(3,3)}b_{Z3}$ (a), $T_{(3,3)}b_{G3}$ (b), $T_{(4,4)}b_{Z4}$ (c), $T_{(4,4)}b_{G4}$ (d), $T_{(6,6)}b_{G6}$ (e).

Fig. 6. The geometrically optimized of structure phases: $T_{(3,3)}b_{Z3}$ (a), $T_{(3,3)}b_{G3}$ (b), $T_{(4,4)}b_{Z4}$ (c), $T_{(4,4)}b_{G4}$ (d), $T_{(6,6)}b_{G6}$ (e).

- V.M. Chernov. Herald of Chelyabinsk State University. Physics. **316** (25), 31—39 (2013). (in Russian) [Е. А. Беленков, В. В. Мавринский, Т. Е. Беленкова, В. М. Чернов. Вестник ЧелГУ. Физика. **316** (25), 31—39 (2013).]
6. E. A. Belenkov, V. V. Mavrinsky, T. E. Belenkova, V. M. Chernov. Journal of Experimental and Theoretical Physics. **120** (6), (2015) (in press). [Е. А. Беленков, В. В. Мавринский, Т. Е. Беленкова, В. М. Чернов. ЖЭТФ. **147** (6), (2015).]
7. E. A. Belenkov, V. A. Greshnyakov, V. V. Mavrinsky. Herald of Chelyabinsk State University. Physics. **163** (25), 22—33 (2009). (in Russian) [Е. А. Беленков, В. А. Грешняков, В. В. Мавринский. Вестник Челябинского государственного университета. Физика. **163** (25), 22—33 (2009).]
8. E. A. Belenkov, I. V. Shakhova. Herald of Chelyabinsk State University. Physics. **193** (7), 33—40 (2010). (in Russian) [Е. А. Беленков, И. В. Шахова. Вестник Челябинского государственного университета. **193** (7), 33—40 (2010).]
9. E. A. Belenkov, I. V. Shakhova. Physics of the Solid State. **53** (11), 2385—2392 (2011). [Е. А. Беленков, И. В. Шахова. Физика твердого тела. **53** (11), 2265—2272 (2011).] DOI: 10.1134/S1063783411110059
10. M. J. Bucknum, R. Hoffmann. J. Am. Chem. Soc. **116**, 11456—11464 (1994). DOI: 10.1021/ja00104a027
11. N. Park, K. Park, M. H. Lee, J. Ihm. JKPS. **37** (2), 129—133 (2000).
12. N. Park, J. Ihm. Phys. Rev. **B. 62** (11), 7614—7618 (2000). DOI: 10.1103/PhysRevB.62.7614
13. L. A. Pesin. Journal of Materials Science. **37** (1), 1—28 (2002). DOI: 10.1023/A:1013100920130
14. L. A. Pesin, E. M. Baitinger. Carbon. **40**, 295—306 (2002). DOI: 10.1016/S0008-6223(01)00130-0
15. A. G. Lyapin, V. V. Brazhkin. Physics of the Solid State. **44** (3), 405—409 (2002). DOI: 10.1134/1.1462656
16. V. V. Brashkin. J. Phys.: Condens. Matter. **6**, 837—840 (1994). DOI: 10.1070/PU1996v039n08ABEH000163
17. M. Weiler, S. Sattel, T. Giessen, K. Jung, H. Erhardt, V. S. Veerasamy, J. Robertson. Phys. Rev. **B 53**, 1594—1608 (1996). DOI: 10.1103/PhysRevB.53.1594
18. J. K. Burdett, S. Lee. J. Am. Chem. Soc. **107** (11), 3063—3082 (1985).
19. W. Koch, M. C. Holthausen. Chemist's Guide to Density Functional Theory. Weinheim: Wiley-VCH. (2001) 313 p.
20. E. A. Belenkov, V. A. Greshnyakov. Journal of Experimental and Theoretical Physics. **113** (1), 86—95 (2011). [Е. А. Беленков, В. А. Грешняков. ЖЭТФ. **140** (1), 99—111 (2011).] DOI: 10.1134/S1063776111060173
21. E. A. Belenkov, V. A. Greshnyakov. Physics of the Solid State. **57** (1), 205-212 (2015). [Е. А. Беленков, В. А. Грешняков, Физика твердого тела. **57** (1), 192—199 (2015).] DOI: 10.1134/S1063783415010047
22. L. A. Chernozatonski, M. Menon, T. Yu. Astakhova, G. A. Vinogradov. JETP Letters. **74** (9), 523—527 (2001). DOI: 10.1134/1.1434288
23. E. A. Belenkov, M. I. Tingaev. Physicochemical aspects of investigations of clusters, nanostructures and nanomaterials. **6**, 42—47 (2014). (in Russian) [Е. А. Беленков, М. И. Тиньгаев. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. **6**, 42—47 (2014).]
24. J. A. Baimova, R. T. Murzaev, S. V. Dmitriev. Physics of the Solid State. **56** (10), 2010—2016 (2014). [Ю. А. Баимова, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев. Физика твердого тела. **56** (10), 1946—1952 (2014).] DOI: 10.1134/S1063783414100035
25. J. A. Baimova, B. Liu, S. V. Dmitriev, K. Zhou. Physica Status Solidi RRL. **8** (4), 336—340 (2014). DOI: 10.1002/pssr.201409063