

КРАТКО ОПИСАНИЕ НА НАУЧНИТЕ ПРИНОСИ

на проф. дфзн Валентин Николов Попов

за участие в конкурса за член-кореспондент на БАН 2018

Научноизследователската дейност на проф. дфзн Валентин Николов Попов е в бурно-развиващата се област на наноматериалите и нанотехнологиите, които имат огромен научен, технологичен и социален потенциал. Интересът към кристалните метални оксиди е свързан с специфичните им оптични свойства на слоести структури, високотемпературната свръхпроводимост, спин-Пайерлс преход, фероелектрични и магнитни свойства, колосално магнитосъпротивление и др. Изследванията по едномерни и двумерни въглеродни структури са мотивирани от уникалните им физични свойства, които ги правят подходящи за приложения в нанокмпозитни материали и в електрониката. В последния случай предизвикателство е прецизното характеризирание на образците от такива структури, като рамановата спектроскопия е подходящ метод за тази цел. Преглед на отделни аспекти от изследванията на кандидата в тази област може да се намери в глава от книга [1], раздел в енциклопедия [2] и обзор [3].

За настоящия конкурс са представени приноси в следните четири групи:

1. Компютърни симулации на фононната дисперсия и рамановия интензитет на кристални метални оксиди в рамките на модела на валентните обвивки.

За пръв път е предложен подход за пресмятане на фононната дисперсия на кристални метални оксиди в рамките на модела на валентните обвивки чрез систематично извеждане на моделните параметри. Компютърната програма за пресмятане чрез този модел е написана от кандидата. Параметрите на потенциалите на близкодействащото взаимодействие на йоните на алкалоземни и редкоземни елементи с тези на кислорода при различни координационни числа са изведени чрез напасване на модела към налични експериментални данни и чрез мащабни закони [4]. Преносимостта на получените параметри е обоснована с наличието на подобни блокове тези съединения и високата им симетрия.

Моделът на валентните обвивки е приложен с използване на така-изведените параметри за пресмятане на фононите на редица метални оксиди. Получените резултати са използвани в приписването на линиите в рамановите спектри на метални оксиди на определени раманово-активни фонони:

Nd(2-x)CexCuO4 [5], Ca(2-x)SrxCuO3 ($x = 0, 0.2, 0.4$) [6], YBaCuFeO5 [7], Pr(2-x)SrxCuO(4-d) [8], CuGeO3 [9,10], La4BaCu5O13 [11], SrLaAlO4 [12], SrCuO2 and Sr0.5Ca0.5CuO2 [13,14], hex-YMnO3 [15], R2Ba2Ti2Cu2O11 (R = Nd, Gd) и Gd2CaBa2Ti2Cu2O12 [16], ortho-YMnO3 и LaMnO3 [17,18], La8-xSrxCu8O20- δ ($x=1.6, 2.0$) [19], ortho-LaAlO3 и LaMnO3 [20], SrRuO3 [21], NaV2O5 [22,23], RuSr2GdCu2O8 [24 – 27], Gd3RuO7 [28], CaMnO3 [29], CaCu3Ti4O12 [30,31], AV2O5 (A = Na, Ca, Mg, Cs) [32], CaRuO3 [33], La(1-x)CaxMnO3 ($0 < x < 1$) [34], CaFe2O4 [35], hex-HoMnO3 [36], LaTiO3 [37], Sr2RuO4, Sr3Ru2O7 и Sr4Ru3O10 [38],

NaTiSi₂O₆ [39], Ca₃Ru₂O₇ [40], RMnO₃ (*R* = La, Pr, Eu, Dy, Ho, Y) [41], ortho-YBa₂Cu₃O_{6.5} [42] (и други оксиди в публикации, невключени в конкурса).

Резултатите от тези пресмятания съставят база-данни, която подпомага по-нататъшните теоретични и експериментални изследвания на метални оксиди. Използваният подход намира широк отклик сред работещите в областта поради много доброто предсказване на оптично-активните фонони на металните оксиди.

2. Компютърни симулации на фононната дисперсия и рамановия интензитет на въглеродни нанотръбички в рамките на модела на валентните силови полета и модела на поляризуемостта на връзките.

За пръв път е предложен симетриен феноменологичен модел за фононната дисперсия на въглеродни нанотръбички, в който експлицитно се отчита хеликалната симетрия на нанотръбичките и който позволява пресмятания за всички (около 300) реално наблюдаеми нанотръбички с използване на двуатомна елементарна клетка [43,44]. Така задачата за фононната дисперсия е сведена до задача за динамиката на решетката с динамична матрица от ранг шест. Симетриятният подход, използван в този модел, е възприет впоследствие от редица автори като единствен ефективен метод за получаване на фононната дисперсия на нанотръбичките.

Симетриен феноменологичен модел, използващ валентни силови полета [43], е приложен за пръв път за пресмятане на еластични свойства на изолирани нанотръбички [45] и снопове от нанотръбички [46], фононната дисперсия на изолирани нанотръбички [45], крайни и безкрайни снопове от нанотръбички [47,48], многостенни нанотръбички [49], топлинния капацитет на снопове от нанотръбички и многостенни нанотръбички [50,51], както и за пресмятане на фононната дисперсия на борово-нитридни нанотръбички [52]. Резултатите за еластичните и термичните свойства на системи от нанотръбички се използват широко при пресмятане на такива свойства на нанокomпозитни материали на основата на въглеродни нанотръбички.

Нерезонансният раманов интензитет на изолирани нанотръбички [43,45], образци от разориентирани нанотръбички [53], снопове от нанотръбички [47,48] и многостенни нанотръбички [49] е пресметнат с помощта на модела на поляризуемостта на валентните връзки. Като цяло получените резултати от симетриятния феноменологичен модел дават много добро описание на вибрационните свойства на нанотръбичките и са в много добро съответствие с експерименталните данни.

За пръв път е развит континуален модел за пресмятане на дишащите модове на двустенни нанотръбички с несъизмерими слоеве [52 – 60]. Предсказанията на модела са в много добро съответствие с експерименталните данни. Понастоящем резултати от пресмятанията с този модел се използват рутинно при приписване на раманови спектри на определени двустенни нанотръбички.

3. Компютърни симулации на оптичните свойства на въглеродни нанотръбички в рамките на модела на силната връзка.

За пръв път е предложен симетриен модел на силната връзка за електронната структура на изолирани еднослойни нанотръбички [61,62]. Този модел също отчита хеликалната симетрия на нанотръбичките и позволява използване на двуатомна

елементарна клетка, което, при отчитане на четири валентни електрона на въглероден атом, води до редуциране на електронната задача до матрична задача с ранг на матриците, равен на осем. Моделът на силната връзка използва матрични елементи на хамильтониана и на припокриването, изведени чрез пресмятания от първи принципи. Този модел няма свободни параметри и в някои отношения се доближава по точност до предсказанията от първи принципи. Първенството на кандидата за въвеждане на симетриятния модел е признато от водещи учени в областта (вж. например публикацията Applied Physics Letters 85, 5703, 2004, от водещи учени от САЩ, Бразилия, Япония и Русия; копие на публикацията е записано на електронния носител). Моделът вече се използва рутинно от редица автори за пресмятане на електронната структура на въглеродни нанотръбички. Компютърните програми за всички пресмятания в този раздел са дело на кандидата.

Симетриятният модел на силната връзка е приложен за пресмятане на електронната структура, оптичното поглъщане и енергиите на оптичните преходи на еднослойни нанотръбички [61 – 64]. Направени са пресмятания за всичките близо 300 нанотръбички с диаметри между 0.6 и 2.4 nm, които обичайно се наблюдават. Получените резултати за енергиите на оптичните преходи до 3 eV в тези нанотръбички отговарят много добре на наблюдаваните и понастоящем широко се използват при анализа на рамановите спектри на образци от нанотръбички [65 – 71].

За пръв път е предложен симетриен модел на динамиката на решетката на изолирани нанотръбички, получен чрез пертурбативен подход в рамките на модела на силната връзка. В него влиянието на електроните върху вибрационните модове на нанотръбичките е описано чрез експлицитно отчитане на електрон-фононното взаимодействие. Този модел е приложен при пресмятането на фононната дисперсия [72,73], резонансния раманов интензитет на дишания мод и G мода [74 – 78], на необходимите за тях матрични елементи на електрон-фотонното и електрон-фононното взаимодействия [79], и времето на живот на електронните нива [80] на нанотръбичките. Изучено е влиянието на точкови дефекти върху рамановия спектър на нанотръбички [81,82]. Изследвани са аномалиите на Кон на фононната дисперсия на метални нанотръбички [72] и е пресметната корекцията на надлъжните фононни клонки, дължаща се на силното електрон-фононно взаимодействие, и е изследван ефектът на легиране върху тях [83 – 85]. Такъв модел предсказва с голяма точност както честотите, така и собствените вектори на фононите в зоната на Брилуен, по което се доближава до предсказанията от първи принципи.

За пръв път в рамките на модела на силната връзка и с използване на теория на пертурбациите е моделиран G модът на двуслойни нанотръбички [88]. Предсказанията на модела отговарят на експерименталните данни в границите на експерименталната грешка [70,71] и понастоящем се използват за подпомагане на приписването на раманови спектри на определени двуслойни нанотръбички.

Текуща работа:

-пресмятане на двуфононните раманови спектри на еднослойни нанотръбички (два изпратени ръкописа);

-пресмятане на отместването на оптичните преходи в двуслойни нанотръбички, дължащо се на междуслойното взаимодействие.

4. Компютърни симулации на оптичните свойства на графен в рамките на модела на силната връзка.

Моделът на силната връзка е приложен за пресмятане на електронната структура и фононната дисперсия на идеален еднослоен графен [72], раманови спектри от първи ред на дефектни графени с различни точкови дефекти [87] и на легирани графени [88]. От практически интерес са предсказанията на рамановите спектри на α -, β - и γ -графайни [89] и силицен [90].

За пръв път, изцяло в рамките на единствен модел – модела на силната връзка, е решена важната задача за моделиране на двуфононните раманови спектри на еднослоен недеформиран графен за лазерно възбуждане във видимата област [91,92] и близката ултравиолетова област с отлично съответствие с експеримента [90,93], еднослоен деформиран графен [94,95], и двуслоен (Бернал) [92,96] графен – задача, стояла нерешена пред изчислителната физика близо две десетилетия. В случая на няколко слоен графен, допълнително са изведени матричните елементи на хамилтониана и на припокриването за междуслойното взаимодействие чрез пресмятания от първи принципи [97]. Пресметнатите двуфононни спектри успешно подпомагат идентифицирането на синтезирани графенови образци [98,99]. Компютърната програма за пресмятане на матричните елементи на модела на силната връзка може да се приложи и за други химични елементи.

За пръв път в рамките на модела на силната връзка успешно е моделиран рамановият G мод на разориентирани двуслойни графени. Предсказаните зависимости на положението и интензитета му [100] отговарят отлично на експерименталните данни и могат да се използват при приписването на експериментални раманови спектри на определен разориентиран двуслоен графен.

Текуща работа:

-пресмятане на двуфононните раманови спектри на разориентиран няколко слоен графен.

Наукометрични показатели:

Резултатите от изследванията на В. Н. Попов са публикувани в повече от 100 реферирани и индексирани издания - Mater. Science Eng. R – 1 публ. (IF = 29.3), Nano Letters – 2 (12.7), Nano Research – 1 (8.9), Phys. Rev. Lett. – 2 (8.5), 2D Materials – 1 (6.9), Carbon – 4 (6.3), Phys. Rev. B – 43 (3.8), New J. Phys. – 1 (3.8) и др. Той има над 4550 цитати, а H-индексът му е 32 (Web of Science, 28/05/2018).

БИБЛИОГРАФИЯ

1. Popov, V.N., Balkanski, M., Lattice dynamics of carbon nanotubes, (2005), Current Topics in Physics: In Honor of Sir Roger J. Elliott, pp. 113-150.
2. Lambin, Ph., and Popov, V. N., Carbon Nanotubes: Electronic Structure and Physical Properties, in: Encyclopedia of Materials: Science and Technology (2006 Elsevier Ltd.), ISBN: 0-08-043152-6, pp. 1–7; new edition 2016, DOI: 10.1016/B978-0-12-803581-8.02296-7.1.
3. Popov, V.N., Carbon nanotubes: Properties and application, (2004), Materials Science and Engineering R: Reports, 43 (3), pp. 61-102.
4. Popov, V.N., Shell model parameters for layered copper oxides (1995) Journal of Physics: Condensed Matter, 7 (8), art. no. 011, pp. 1625-1638.
5. Popov, V.N., Valchinov, V.L., Phonon spectra of the Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO₄ superconductor (1990), Physica C: Superconductivity and its applications, 172 (3-4), pp. 260-264.
6. Zlateva, G.A., Popov, V.N., Gyulmezov, M., Bozukov, L.N., Iliev, M.N., Phonons in Ca_{2-x}Sr_xCuO₃ (x=0, 0.2 and 0.4): Raman and infrared spectroscopy, and lattice dynamics calculation, (1992), Journal of Physics: Condensed Matter, 4 (44), art. no. 015, pp. 8543-8550.
7. Atanassova, Y.K., Popov, V.N., Bogachev, G.G., Iliev, M.N., Mitros, C., Psycharis, V., Pissas, M., Raman- and infrared-active phonons in YBaCuFeO₅: Experiment and lattice dynamics, (1993), Physical Review B, 47 (22), pp. 15201-15207.
8. Mateev, D.M., Popov, V.N., Hadjiev, V.G., Iliev, M.N., Γ -point optical phonons in T', T* and T phases of the Pr_{2-x}Sr_xCuO_{4- δ} system: experiment and theory, (1994), Physica C: Superconductivity and its applications, 235-240 (PART 2), pp. 1189-1190.
9. Dević, S.D., Popović, Z.V., Popov, V.N., Dhalenne, G., Revcolevschi, A., Temperature dependence of Raman active modes in CuGeO₃, (1997), Solid State Communications, 102 (8), pp. 599-604.
10. Popović, Z.V., Dević, S.D., Popov, V.N., Dhalenne, G., Revcolevschi, A., Phonons in CuGeO₃ studied using polarized far-infrared and Raman-scattering spectroscopies, (1995), Physical Review B, 52 (6), pp. 4185-4190.
11. Abrashev, M.V., Popov, V.N., Raman-active phonons in La₄BaCu₅O₁₃: Polarized Raman spectroscopy and lattice dynamical calculations, (1995), Journal of Physics: Condensed Matter, 7 (25), art. no. 019, pp. 4967-4973.
12. Hadjiev, V.G., Cardona, M., Ivanov, I., Popov, V., Gyulmezov, M., Iliev, M.N., Berkowski, M., Optical phonons probe of the SrLaAlO₄ crystal structure, (1997), Journal of Alloys and Compounds, 251 (1-2), pp. 7-10.
13. Abrashev, M., Litvinchuk, A., Thomsen, C., Popov, V., Optical phonons in the orthorhombic double-chain Sr_{1-x}Ca_xCuO₂ (x=0, 0.5), (1997), Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 55 (14), pp. 9136-9141.
14. Abrashev, M., Litvinchuk, A., Thomsen, C., Popov, V., Fröhlich-interaction-induced multiphonon Raman scattering in SrCuO₂ and Sr_{0.5}Ca_{0.5}CuO₂, (1997) Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 55 (14), pp. R8638-R8641.

15. Iliev, M., Lee, H., Popov, V., Raman- and infrared-active phonons in hexagonal YMnO₃: Experiment and lattice-dynamical calculations, (1997), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 56 (5), pp. 2488-2494.
16. Abrashev, M.V., Thomsen, C., Popov, V.N., Bozukov, L.N., Raman spectroscopy and lattice-dynamics calculations of mixed layered copper-titanium oxides, (1997), *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 274 (1-2), pp. 141-148.
17. Iliev, M.N., Abrashev, M.V., Lee, H.-G., Popov, V.N., Sun, Y.Y., Thomsen, C., Meng, R.L., Chu, C.W., Raman active phonons in orthorhombic YMnO₃ and LaMnO₃, (1998), *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 59 (10-12), pp. 1982-1984.
18. Iliev, M. N.; Abrashev, M. V.; Lee, H. G.; Popov, V.N., Sun, Y.Y., Thomsen, C., Meng, R.L., Chu, C.W., Raman spectroscopy of orthorhombic perovskitelike YMnO₃ and LaMnO₃, (1998), *Physical Review B* 57 (5), pp. 2872-2877 DOI: 10.1103/PhysRevB.57.2872.
19. Abrashev, M.V., Popov, V.N., Thomsen, C., Raman-active phonons in the quasi-one-dimensional conductor La_{8-x}Sr_xCu₈O_{20-δ} (x = 1.6, 2.0): Polarized Raman spectroscopy and lattice dynamical calculations, (1998), *Journal of Physics Condensed Matter*, 10 (7), pp. 1643-1654.
20. Abrashev, M.V., Litvinchuk, A.P., Iliev, M.N., Meng, R.L., Popov, V.N., Ivanov, V.G., Chakalov, R.A., Thomsen, C., Comparative study of optical phonons in the rhombohedrally distorted perovskites LaAlO₃ and LaMnO₃, (1999), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 59 (6), pp. 4146-4153.
21. Iliev, M.N., Litvinchuk, A.P., Lee, H.-G., Chen, C.L., Dezaneti, M.L., Chu, C.W., Ivanov, V.G., Abrashev, M.V., Popov, V.N., Raman spectroscopy of SrRuO₃ near the paramagnetic-to-ferromagnetic phase transition, (1999), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 59 (1), pp. 364-368.
22. Popović, Z.V., Konstantinović, M.J., Gajić, R., Popov, V., Raptis, Y.S., Vasil'ev, A.N., Isobe, M., Ueda, Y., Optical phonons in spin-Peierls compound NaV₂O₅, (1998), *Journal of Physics: Condensed Matter*, 10, pp. L513-L519.
23. Popović, Z.V., Konstantinović, M.J., Gajić, R., Popov, V., Raptis, Y.S., Vasil'ev, A.N., Isobe, M., Ueda, Y., Lattice vibrations in spin-Peierls compound NaV₂O₅, (1999), *Solid State Communications*, 110 (7), pp. 381-386.
24. Litvinchuk, A.P., Chen, S.Y., Iliev, M.N., Chen, C.L., Chu, C.W., Popov, V.N., Carrier dynamics and infrared-active phonons in c-axis oriented RuSr₂GdCu₂O₈ film, (2001), *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 361 (4), pp. 234-238.
25. Hadjiev, V.G., Bäckström, J., Popov, V.N., Iliev, M.N., Meng, R.L., Xue, Y.Y., Chu, C.W., Chu, C.W., Symmetry of phonon, magnetic, and spin-phonon excitations in GdSr₂RuCu₂O₈ single crystals, (2001), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 64 (13), art. no. 134304, pp. 1343041-1343046.
26. Iliev, M.N., Litvinchuk, A.P., Popov, V.N., Meng, R.L., Dezaneti, L.M., Chu, C.W., Raman phonons in RuSr₂GdCu₂O₈, (2000), *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 341-348, pp. 2209-2212.
27. Litvinchuk, A.P., Iliev, M.N., Xue, Y.-Y., Meng, R.L., Chu, C.W., Popov, V.N., Optical conductivity and infrared-active phonons in RuSr₂GdCu₂O₈, (2000), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 62 (14), pp. 9709-9712.
28. Bontchev, R.P., Jacobson, A.J., Gospodinov, M.M., Skumryev, V., Popov, V.N., Lorenz, B., Meng, R.L., Litvinchuk, A.P., Iliev, M.N., Crystal structure, electric and

- magnetic properties, and Raman spectroscopy of Gd₃RuO₇, (2000), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 62 (18), pp. 12235-12240.
29. Abrashev, M.V., Abrashev, M.V., Bäckström, J., Börjesson, L., Popov, V.N., Chakalov, R.A., Kolev, N., Meng, R.-L., Iliev, M.N., Raman spectroscopy of CaMnO₃: Mode assignment and relationship between Raman line intensities and structural distortions, (2002), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 65 (18), art. no. 184301, pp. 1843011-1843019.
 30. Litvinchuk, A.P., Chen, C.L., Kolev, N., Popov, V.N., Hadjiev, V.G., Iliev, M.N., Bontchev, R.P., Jacobson, A.J., Optical properties of high-dielectric-constant CaCu₃Ti₄O₁₂ films, (2003), *Physica Status Solidi (A) Applied Research*, 195 (2), pp. 453-458.
 31. Kolev, N., Bontchev, R.P., Jacobson, A.J., Popov, V.N., Hadjiev, V.G., Litvinchuk, A.P., Iliev, M.N., Raman spectroscopy of CaCu₃Ti₄O₁₂, (2002) *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 66 (13), art. no. 132102, pp. 1321021-1321024.
 32. Popović, Z.V., Konstantinović, M.J., Gajić, R., Popov, V.N., Isobe, M., Ueda, Y., Moshchalkov, V.V., Phonon dynamics in A V₂O₅ (A=Na, Ca, Mg, Cs) oxides, (2002), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 65 (18), art. no. 184303, pp. 843031-1843038.
 33. Kolev, N., Chen, C. L., Gospodinov, M., Bontchev, R. P., Popov, V. N., Litvinchuk, A. P., Litvinchuk, A. P., Abrashev, M. V., Hadjiev, V. G., Iliev, M. N., Iliev, M. N., Raman spectroscopy of CaRuO₃, (2002), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 66 (1), art. no. 014101, pp. 141011-141014.
 34. Iliev, M.N., Abrashev, M.V., Popov, V.N., Hadjiev, V.G., Role of Jahn-Teller disorder in Raman scattering of mixed-valence manganites, (2003), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 67 (21), 4 p.
 35. Kolev, N., Iliev, M.N., Popov, V.N., Gospodinov, M., Temperature-dependent polarized Raman spectra of CaFe₂O₄, (2003) *Solid State Communications*, 128 (4), pp. 153-155.
 36. Litvinchuk, A.P., Iliev, M.N., Popov, V.N., Gospodinov, M.M., Raman and infrared-active phonons in hexagonal HoMnO₃ single crystals: Magnetic ordering effects, (2004), *Journal of Physics Condensed Matter*, 16 (6), pp. 809-819.
 37. Iliev, M.N., Litvinchuk, A.P., Abrashev, M.V., Popov, V.N., Cmaidalka, J., Lorenz, B., Meng, R.L., Phonons and magnetic excitations in the Mott insulator LaTiO₃, (2004), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 69 (17), art. no. 172301, pp. 172301-1-172301-4.
 38. Iliev, M.N., Popov, V.N., Litvinchuk, A.P., Abrashev, M.V., Bäckström, J., Sun, Y.Y., Meng, R.L., Chu, C.W., Comparative Raman studies of Sr₂RuO₄, Sr₃Ru₂O₇ and Sr₄Ru₃O₁₀, (2005), *Physica B: Condensed Matter*, 358 (1-4), pp. 138-152.
 39. Popović, Z.V., Konstantinović, M.J., Popov, V.N., Cantarero, A., Dohčević-Mitrović, Z., Isobe, M., Ueda, Y., Optical phonons in the NaTiSi₂O₆ oxide with S=12 spin chains, (2005), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 71 (22), art. no. 224302.
 40. Iliev, M.N., Jandl, S., Popov, V.N., Litvinchuk, A.P., Cmaidalka, J., Meng, R.L., Meen, J., Raman spectroscopy of Ca₃Ru₂O₇: Phonon line assignment and electron scattering, (2005), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 71 (21), art. no. 214305.

41. Iliev, M.N., Hadjiev, V.G., Litvinchuk, A.P., Yen, F., Wang, Y.-Q., Sun, Y.Y., Jandl, S., Laverdière, J., Popov, V.N., Gospodinov, M.M., Multiple-order Raman scattering from rare-earth manganites: Oxygen isotope and rare-earth substitution effects, (2007), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 75 (6), art. no. 064303.
42. Iliev, M.N., Hadjiev, V.G., Jandl, S., Le Boeuf, D., Popov, V.N., Bonn, D., Liang, R., Hardy, W.N., Raman study of twin-free ortho-II YBa₂ Cu₃ O_{6.5} single crystals, (2008), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 77 (17), art. no. 174302.
43. Popov, V.N., Van Doren, V.E., Lattice dynamics of single-walled carbon nanotubes, (1999), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 59 (13), pp. 8355-8358.
44. Li, Z.M., Popov, V.N., Tang, Z.K., A symmetry-adapted force-constant lattice-dynamical model for single-walled carbon nanotubes, (2004), *Solid State Communications*, 130 (10), pp. 657-661.
45. Popov, V., Van Doren, V., Balkanski, M., Elastic properties of single-walled carbon nanotubes, (2000), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 61 (4), pp. 3078-3084.
46. Popov, V.N., Van Doren, V.E., Balkanski, M., Elastic properties of crystals of single-walled carbon nanotubes, (2000), *Solid State Communications*, 114 (7), pp. 395-399.
47. Henrard, L., Popov, V.N., Rubio, A., Influence of packing on the vibrational properties of infinite and finite bundles of carbon nanotubes, (2001), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 64 (20), art. no. 205403, pp. 2054031-20540310.
48. Popov, V.N., Henrard, L., Evidence for the existence of two breathinglike phonon modes in infinite bundles of single-walled carbon nanotubes, (2001), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 63 (23), 4 p.
49. Popov, V.N., Henrard, L., Breathinglike phonon modes of multiwalled carbon nanotubes, (2002), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 65 (23), art. no. 235415, pp. 2354151-2354156.
50. Popov, V.N., Low-temperature specific heat of nanotube systems, (2002), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 66 (15), art. no. 153408, pp. 1534081-1534084.
51. Popov, V.N., Theoretical evidence for T^{1/2} specific heat behavior in carbon nanotube systems, (2004), *Carbon*, 42 (5-6), pp. 991-995.
52. Popov, V.N., Lattice dynamics of single-walled boron nitride nanotubes, (2003), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 67 (8), 6 p.
53. Jungen, A., Popov, V.N., Stampfer, C., Durrer, L., Stoll, S., Hierold, C., Raman intensity mapping of single-walled carbon nanotubes, (2007), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 75 (4), art. no. 041405.
54. Pfeiffer, R., Kramberger, Ch., Simon, F., Kuzmany, H., Popov, V.N., Kataura, H., Interaction between concentric tubes in DWCNTs, (2004), *European Physical Journal B*, 42 (3), pp. 345-350.
55. Pfeiffer, R., Simon, F., Kuzmany, H., Popov, V.N., Fine structure of the radial breathing mode of double-wall carbon nanotubes, (2005), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 72 (16), art. no. 161404.

56. Rauf, H., Pichler, T., Pfeiffer, R., Simon, F., Kuzmany, H., Popov, V.N., Detailed analysis of the Raman response of n-doped double-wall carbon nanotubes, (2006), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 74 (23), art. no. 235419.
57. Débarre, A., Kobylko, M., Bonnot, A.M., Richard, A., Popov, V.N., Henrard, L., Kociak, M., Electronic and mechanical coupling of carbon nanotubes: A tunable resonant Raman study of systems with known structures, (2008), *Physical Review Letters*, 101 (19), art. no. 197403.
58. Levshov, D., Than, T.X., Arenal, R., Popov, V.N., Parret, R., Paillet, M., Jourdain, V., Zahab, A.A., Michel, T., Yuzyuk, Y.I., Sauvajol, J.-L., Experimental evidence of a mechanical coupling between layers in an individual double-walled carbon nanotube, (2011), *Nano Letters*, 11 (11), pp. 4800-4804.
59. Pfeiffer, R., Simon, F., Kuzmany, H., Popov, V.N., A Raman map of the DWCNT RBM region, (2005), *AIP Conference Proceedings*, 786, pp. 305-308.
60. Pfeiffer, R., Simon, F., Kuzmany, H., Popov, V.N., Zólyomi, V., Kürti, J., Tube-tube interaction in double-wall carbon nanotubes, (2006), *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 243 (13), pp. 3268-3272.
61. Popov, V.N., Henrard, L., Comparative study of the optical properties of single-walled carbon nanotubes within orthogonal and nonorthogonal tight-binding models, (2004), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 70 (11), pp. 115407-1-115407-12.
62. Popov, V.N., Curvature effects on the structural, electronic and optical properties of isolated single-walled carbon nanotubes within a symmetry-adapted non-orthogonal tight-binding model, (2004), *New Journal of Physics*, 6, 17 p.
63. Popov, V.N., Henrard, L., Optical properties of single-walled carbon nanotubes within a nonorthogonal tight-binding model, (2005), *Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 13 (SUPPL. 1), pp. 45-52.
64. Popov, V. N., Optical properties of small-radius SWNTS within a tight-binding model, (2004) *Frontiers of Multifunctional Integrated Nanosystems*, 152, pp. 1-10. DOI: 10.1007/1-4020-2173-9_1.
65. Parret, R., Levshov, D., Than, T.X., Nakabayashi, D., Michel, T., Paillet, M., Arenal, R., Popov, V.N., Jourdain, V., Yuzyuk, Y.I., Zahab, A.A., Sauvajol, J.-L., Raman spectroscopy on individual identified carbon nanotubes, (2012), *Materials Research Society Symposium Proceedings*, 1407, pp. 27-34.
66. Michel, T., Paille, M., Meyer, J.C., Popov, V.N., Henrard, L., Poncharal, P., Zahab, A., Sauvajol, J.-L., Raman spectroscopy of (n,m)-identified individual single-walled carbon nanotubes, (2007), *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 244 (11), pp. 3986-3991.
67. Paillet, M., Michel, T., Meyer, J.C., Popov, V.N., Henrard, L., Roth, S., Sauvajol, J.-L., Raman active phonons of identified semiconducting single-walled carbon nanotubes, (2006), *Physical Review Letters*, 96 (25), art. no. 257401.
68. Michel, T., Paillet, M., Meyer, J.C., Popov, V.N., Henrard, L., Sauvajol, J.-L., E33 and E44 optical transitions in semiconducting single-walled carbon nanotubes: Electron diffraction and Raman experiments, (2007), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 75 (15), art. no. 155432.
69. Tran, H.N., Blancon, J.-C., Huntzinger, J.-R., Arenal, R., Popov, V.N., Zahab, A.A., Ayari, A., San-Miguel, A., Vallée, F., Del Fatti, N., Sauvajol, J.-L., Paillet, M.,

- Excitonic optical transitions characterized by Raman excitation profiles in single-walled carbon nanotubes, (2016), *Physical Review B*, 94 (7), art. no. 075430.
70. Levshov, D.I., Tran, H.-N., Michel, T., Cao, T.T., Nguyen, V.C., Arenal, R., Popov, V.N., Sauvajol, J.-L., Zahab, A.-A., Paillet, M., Interlayer Interaction Effects on the G Modes in Double-Walled Carbon Nanotubes With Different Electronic Configurations, (2017), *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 254 (11), art. no. 1700251.
 71. Levshov, D.I., Parret, R., Tran, H.-N., Michel, T., Cao, T.T., Nguyen, V.C., Arenal, R., Popov, V.N., Rochal, S.B., Sauvajol, J.-L., Zahab, A.-A., Paillet, M., Photoluminescence from an individual double-walled carbon nanotube, (2017), *Physical Review B*, 96 (19), art. no. 195410.
 72. Popov, V.N., Lambin, P., Radius and chirality dependence of the radial breathing mode and the G-band phonon modes of single-walled carbon nanotubes, (2006), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 73 (8), art. no. 085407.
 73. Popov, V.N., Lambin, P., Symmetry-adapted tight-binding calculations of the phonon dispersion and the resonant Raman intensity of the totally symmetric phonons of single-walled carbon nanotubes, (2006), *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 243 (13), pp. 3480-3484.
 74. Popov, V.N., Lambin, P., Resonant Raman intensity of the totally symmetric phonons of single-walled carbon nanotubes, (2006), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 73 (16), art. no. 165425.
 75. Popov, V.N., Lambin, P., Theoretical Raman intensity of the radial breathing mode of single-walled carbon nanotubes, (2007), *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 244 (11), pp. 4269-4274.
 76. Popov, V.N., Henrard, L., Lambin, P., Resonant Raman intensity of the radial-breathing mode of single-walled carbon nanotubes, (2005), *AIP Conference Proceedings*, 786, pp. 465-468.
 77. Popov, V.N., Henrard, L., Lambin, P., Resonant Raman intensity of the radial breathing mode of single-walled carbon nanotubes within a nonorthogonal tight-binding model, (2004), *Nano Letters*, 4 (9), pp. 1795-1799.
 78. Popov, V.N., Lambin, P., Symmetry-adapted tight-binding calculations of the totally symmetric A₁ phonons of single-walled carbon nanotubes and their resonant Raman intensity, (2007), *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 37 (1-2), pp. 97-104.
 79. Popov, V.N., Henrard, L., Lambin, P., Electron-phonon and electron-photon interactions and resonant Raman scattering from the radial-breathing mode of single-walled carbon nanotubes, (2005), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 72 (3), art. no. 035436.
 80. Popov, V.N., Lambin, P., Intraband electron-phonon scattering in single-walled carbon nanotubes, (2006), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 74 (7), art. no. 075415.
 81. Popov, V.N., Lambin, P., Theoretical resonant Raman spectra of nanotube (7,0) with point defects, (2009), *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 246 (11-12), pp. 2602-2605.

82. Popov, V.N., Lambin, P., Intermediate frequency Raman spectra of defective single-walled carbon nanotubes, (2010), *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 247 (4), pp. 892-895.
83. Popov, V.N., Lambin, P., Non-adiabatic phonon dispersion of metallic single-walled carbon nanotubes, (2010), *Nano Research*, 3 (11), pp. 822-829.
84. Popov, V.N., Lambin, P., Theoretical phonon dispersion of armchair and metallic zigzag carbon nanotubes beyond the adiabatic approximation, (2010), *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 247 (11-12), pp. 2784-2788.
85. Popov, V.N., Theoretical study of the doping effect on the phonon dispersion of metallic carbon nanotubes, (2012), *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 44 (6), pp. 1032-1035.
86. Popov, V.N., Levshov, D.I., Sauvajol, J.-L., Paillet, M., Computational study of the shift of the G band of double-walled carbon nanotubes due to interlayer interactions, (2018), *Physical Review B*, 97 (16), art. no. 165417.
87. Popov, V.N., Henrard, L., Lambin, P., Resonant Raman spectra of graphene with point defects, (2009), *Carbon*, 47 (10), pp. 2448-2455.
88. Popov, V.N., Lambin, P., Dynamic and charge doping effects on the phonon dispersion of graphene, (2010), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 82 (4), art. no. 045406.
89. Popov, V.N., Lambin, P., Theoretical Raman fingerprints of α -, β -, and γ -graphyne, (2013), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 88 (7), art. no. 075427.
90. Popov, V.N., Lambin, P., Comparative study of the two-phonon Raman bands of silicene and graphene, (2016), *2D Materials*, 3 (2), art. no. 025014.
91. Popov, V. N., Lambin, P., Theoretical polarization dependence of the two-phonon double-resonant Raman spectra of graphene, (2012), *European Physical Journal B*, 85(12), 418.
92. Popov, V.N., 2D Raman band of single-layer and bilayer graphene, (2016), *Journal of Physics: Conf. Series*, 682 (1), art. no. 012013.
93. Popov, V.N., Two-phonon Raman scattering in graphene for laser excitation beyond the π -plasmon energy, (2016,) *Journal of Physics: Conf. Series*, 764 (1), art. no. 012008.
94. Popov, V.N., Lambin, P., Theoretical 2D Raman band of strained graphene, (2013), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 87 (15), art. no. 155425.
95. Popov, V.N., Lambin, P., Theoretical Raman intensity of the G and 2D bands of strained graphene, (2013), *Carbon*, 54, pp. 86-93.
96. Popov, V.N., Two-phonon Raman bands of bilayer graphene: Revisited, (2015), *Carbon*, 91, pp. 436-444.
97. Popov, V.N., Van Alsenoy, C., Low-frequency phonons of few-layer graphene within a tight-binding model, (2014), *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 90 (24), art. no. 245429.
98. Milenov, T.I., Avramova, I., Valcheva, E., Avdeev, G.V., Rusev, S., Kolev, S., Balchev, I., Petrov, I., Pishinkov, D., Popov, V.N., Deposition of defected graphene on (001) Si substrates by thermal decomposition of acetone, (2017), *Superlattices and Microstructures*, 111, pp. 45-56.

99. Milenov, T.I., Valcheva, E., Popov, V.N., Raman Spectroscopic Study of As-Deposited and Exfoliated Defected Graphene Grown on (001) Si Substrates by CVD, (2017) *Journal of Spectroscopy*, (2017), art. no. 3495432.
100. Popov, V.N., Raman bands of twisted bilayer graphene, (2018), *Journal of Raman Spectroscopy*, 49 (1), pp. 31-35.