

**FORCE CONSTANT MATRICES FROM KEATING INTERATOMIC POTENTIAL:  
APPLICATION TO GRAPHENE***Alexandr COCEMASOV**Moldova State University*

Based on the Keating interatomic potential an analytical derivation of force constant matrices of two- and three-body interactions in crystals is performed. Using the derived force constant matrices the in-plane phonon energy spectra of graphene was calculated in the framework of a lattice dynamics theory. A reasonable agreement with experimental data was obtained. The results can extend the applicability of the current force constant models for investigation of crystal dynamics.

**Keywords:** *force constant matrices, Keating potential, graphene, phonons, crystal dynamics.*

**MATRICELE CONSTANTELOR DE FORȚĂ DIN POTENȚIALUL INTERATOMAR AL LUI KEATING:  
APLICAREA CĂTRE GRAFEN**

În baza potențialului interatomar al lui Keating au fost deduse analitic matricele constantelor de forță ale interacțiunilor a două și trei particule în cristale. Utilizând aceste matrice, în cadrul teoriei dinamicii rețelei cristaline a fost calculat spectrul fononic al grafenului în planul stratului. A fost obținut un acord rezonabil cu datele experimentale. Aceste rezultate pot extinde aplicabilitatea modelelor constantelor de forță curente la studierea dinamicii cristalelor.

**Cuvinte-cheie:** *matricele constantelor de forță, potențialul lui Keating, grafen, fononi, dinamica cristalelor.*

*Prezentat la 08.04.2014*

*Publicat: august 2014*