

Энергетический спектр фуллерена C₆₀

© Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев

Марийский государственный университет,
Йошкар-Ола, Россия

E-mail: nanotubes59@mail.ru

(Поступила в Редакцию 6 декабря 2010 г.
В окончательной редакции 15 марта 2011 г.)

В рамках модели Шубина–Вонсовского–Хаббарда в приближении статических флуктуаций получен энергетический спектр фуллерена C₆₀. На основе этого спектра удается объяснить полосы оптического поглощения при 4.84, 5.88 и 6.3 eV, наблюдаемые экспериментально. Сделан вывод о приемлемости использованной модели для расчета энергетического спектра и энергетических свойств других наносистем, таких как фуллерены высших порядков, углеродные нанотрубки и графеновые плоскости.

Одной из важнейших характеристик системы является ее энергетический спектр. Энергетический спектр фуллерена C₆₀ был получен почти сразу после его синтеза с помощью хюккелевского расчета [1,2].¹ При таком расчете учитываются только π -электроны; несмотря на это, удается правильно установить относительное расположение энергетических уровней и степень их вырождения. Параметры, вводимые при этом, подбираются так, чтобы достигалось согласие с экспериментальными данными. Имеется ряд работ, где энергетический спектр C₆₀ получен неэмпирическими методами [4–7]. Для более полного понимания процессов, происходящих внутри фуллерена, описания основных физических свойств возникает необходимость применения к C₆₀ аналитических методов квантовой теории поля. Поэтому представление C₆₀ в рамках определенной модели, решение модельной задачи, сравнение полученных в аналитическом виде результатов с известными экспериментальными данными и теоретическими хюккелевскими результатами актуальны при исследовании наносистем.

Фуллерен C₆₀ представляет собой сферическую молекулу углерода, состоящую из пяти- и шестичленных циклов и содержащую 60 атомов углерода (рис. 1). Все узлы в молекуле эквивалентны. Химические связи, соединяющие узлы в C₆₀, разделяются на два типа: связи, образующие общую сторону двух гексагонов, и связи, образующие общую сторону гексагона и пентагона. Расстояния между двумя атомами углерода, соединенными связями первого типа, меньше, чем между атомами, соединенными связями второго типа. Эти расстояния равны соответственно 1.39 и 1.43 Å [8].

Особенностью рассматриваемой системы является то, что здесь углерод находится в sp^2 -гибридизованном состоянии. Три гибридные орбитали формируют остов структуры, и их состояния образуют полностью заполненные глубоколежащие зоны. Негибридная p -орбиталь,

перпендикулярная плоскости остова, представляет собой делокализованное электронное состояние с одним электроном. Состояния, сформированные этими орбиталями, частично заполнены и образуют так называемые блуждающие π -связи. Такая дополнительная связь может стабилизировать структуру, уменьшая энергию системы; это происходит, в частности, в бензоле. Очевидно, что эти электронные состояния должны играть такую же важную роль и в изучаемой нами системе. Более того, эти состояния, на наш взгляд, в основном и определяют электронные и электрохимические свойства фуллерена C₆₀.

Электроны этих состояний характеризуются тем, что они имеют возможность перескакивать с узла на узел; если на одном узле находятся два электрона, то между ними возникает сильное кулоновское взаимодействие. Поэтому π -электроны можно описать в рамках гамильтониана Хаббарда [9]. Следует отметить, что впервые эта модель была предложена Шубиным и Вонсовским в [10], поэтому мы, следуя исторической правде, будем назы-

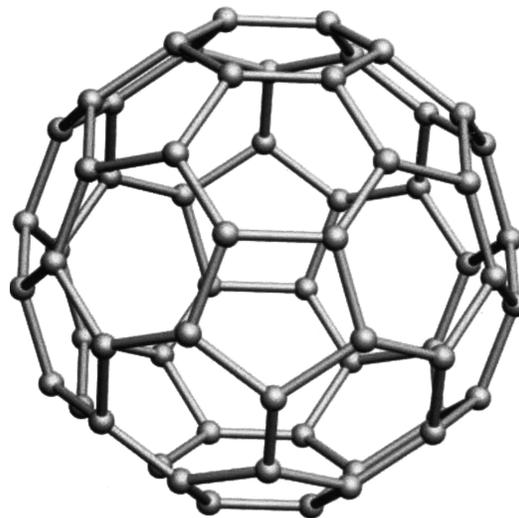


Рис. 1. Фуллерен C₆₀.

¹ Необходимо отметить, что еще до открытия фуллерена его энергетический спектр был рассчитан Бовчаром и Гальперн [3]. Последующие более точные расчеты [1,2] только подтвердили правильность расположения электронных уровней и порядок их заполнения, полученные в [3].

вать ее моделью Шубина–Вонсовского–Хаббарда. Одной из первых работ, где эта модель была использована для описания углеродных систем, а именно их электронной подсистемы, представленной π -электронами, явилась работа [11], авторы которой изучали полиеновые углеводородные цепочки с ненасыщенными связями. Ими было показано, что учет кулоновского отталкивания на одном узле позволяет объяснить, почему такая молекулярная цепочка не переходит в металлическое состояние при $N_a \rightarrow \infty$ (здесь N_a — число атомов в цепочке). В приложении к углеродным наносистемам подобный подход был использован в работе [12], в которой в рамках метода вторичного квантования описывается π -электронная подсистема графена и нанотрубок. Однако в [12] не учитывается кулоновское отталкивание электронов на одном узле, которое последовательно может быть учтено в модели Шубина–Вонсовского–Хаббарда.

Углеродные наносистемы в рамках модели Хаббарда изучались нами в приближении статических флуктуаций (СФ) [13–16]. Настоящая работа посвящена изучению энергетического спектра S_{60} в рамках этого подхода.

Для расчетов была взята стандартная модель Шубина–Вонсовского–Хаббарда

$$H = \varepsilon \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + B \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где ε — собственная энергия электрона; U — энергия кулоновского взаимодействия на одном узле; B — интервал перескока между соседними узлами; $\hat{n}_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ — оператор числа частиц в узле i с проекцией спина σ ; $a_{i\sigma}^+$ и $a_{i\sigma}$ — соответственно операторы рождения и уничтожения электронов в узле i с проекцией спина σ . Суммирование по i производится по всем атомам системы, а по j (во втором слагаемом) по соседним к i узлам.

Как уже отмечалось, в работах [13–16] для изучения углеродных наносистем, описываемых моделью Шубина–Вонсовского–Хаббарда, был предложен метод получения функций Грина в приближении СФ. Суть метода заключается в написании уравнений движения не для функций Грина, а для операторов. В рамках этого метода благодаря точному операторному равенству

$$\hat{n}_{i\sigma}^2 = \hat{n}_{i\sigma} \quad (2)$$

удаётся получить замкнутую систему уравнений для операторов $a_{i\sigma}^+$ и $a_{i\sigma}$, решив которую можно вычислить антикоммутирующие функции Грина, содержащие всю информацию о физических свойствах исследуемой системы.

Возьмем гамильтониан (1) в представлении Гейзенберга с мнимым временем τ и запишем уравнения движения для операторов $a_{i\sigma}^+(\tau)$ ($i = 1, \dots, 60$)

$$\begin{aligned} \frac{da_{i\sigma}^+(\tau)}{d\tau} &= [H, a_{i\sigma}^+(\tau)] \\ &= \varepsilon a_{i\sigma}^+(\tau) + B \sum_{j \neq i} a_{j\sigma}^+(\tau) + U \hat{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) a_{i\sigma}^+(\tau), \quad (3) \end{aligned}$$

где $\bar{\sigma}$ обозначает проекцию спина, противоположную по знаку σ . Оператор $\hat{n}_{i\sigma}$ представим как $\hat{n}_{i\sigma} = \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle + \Delta \hat{n}_{i\sigma}$. Тогда (3) переписывается в виде

$$\frac{da_{i\sigma}^+(\tau)}{d\tau} = \varepsilon_i a_{i\sigma}^+(\tau) + B \sum_{j \neq i} a_{j\sigma}^+(\tau) + U \Delta n_{i\bar{\sigma}}(\tau) a_{i\sigma}^+(\tau). \quad (4)$$

Здесь, как и в (3), суммирование по j идет по узлам, соседним с i ,

$$\varepsilon_i = \varepsilon + U \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle. \quad (5)$$

Следуя [13,16], запишем

$$a_{i\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0 \tau) \exp(-H_0 \tau) a_{i\sigma}^+(\tau) \exp(H_0 \tau) \exp(-H_0 \tau) \quad (6)$$

и введем обозначение

$$\tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau) = \exp(-H_0 \tau) a_{i\sigma}^+(\tau) \exp(H_0 \tau),$$

где

$$H_0 = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i \hat{n}_{i,\sigma} + B \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}). \quad (7)$$

Легко показать, что операторы $\tilde{a}_{i\sigma}^+$ и $\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}}$ в рамках приближения СФ удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau)}{d\tau} = -U (\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau)), \\ \frac{d(\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau))}{d\tau} = -U (1 - 2 \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) (\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau)) - U \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle (1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) \tilde{a}_{i\sigma}^+(\tau), \end{cases} \quad (8)$$

где

$$\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}} = \exp(-H_0 \tau) \Delta n_{i\bar{\sigma}}(\tau) \exp(H_0 \tau).$$

Решив (8) с использованием (2), получим

$$\begin{aligned} a_{i\sigma}^+(\tau) &= \bar{a}_{i\sigma}^+(\tau) \left\{ (1 - \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle) \exp(-\langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle U \tau) \right. \\ &\quad \left. + \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle \exp((1 - \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle) U \tau) \right\} + \Delta n_{i\bar{\sigma}}(0) \\ &\quad \times \left\{ \exp((1 - \langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle) U \tau) - \exp(-\langle \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \rangle U \tau) \right\} \bar{a}_{i\sigma}^+(\tau). \quad (9) \end{aligned}$$

Здесь $\bar{a}_{i\sigma}^+ = \exp(H_0 \tau) a_{i\sigma}^+(0) \exp(-H_0 \tau)$, $\bar{a}_{i\sigma}^+(\tau)$ находится из решения следующей системы уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d}{d\tau} \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1 \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{5\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{7\sigma}^+(\tau), \\ \frac{d}{d\tau} \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2 \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{3\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{8\sigma}^+(\tau), \\ \dots \dots \dots \\ \frac{d}{d\tau} \bar{a}_{60\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_{60} \bar{a}_{60\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{59\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{56\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{54\sigma}^+(\tau). \end{cases} \quad (10)$$

Систему уравнений (10) решать не будем, усложним ее с учетом того, что в C₆₀ имеется два типа связей, различающихся длиной, для которых интегралы перескока разные:

$$H = \varepsilon \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma} + B_1 \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}) + B_2 \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (11)$$

С учетом этого система уравнений (10) переписывается в виде

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) &= \varepsilon_1 \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) + B_2 \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) \\ &\quad + B_2 \bar{a}_{5\sigma}^+(\tau) + B_1 \bar{a}_{7\sigma}^+(\tau), \\ \frac{d}{d\tau} \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) &= \varepsilon_2 \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) + B_1 \bar{a}_{8\sigma}^+(\tau) + B_2 \bar{a}_{3\sigma}^+(\tau) \\ &\quad + B_2 \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau), \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{d}{d\tau} \bar{a}_{60\sigma}^+(\tau) &= \varepsilon_{60} \bar{a}_{60\sigma}^+(\tau) + B_1 \bar{a}_{54\sigma}^+(\tau) \\ &\quad + B_2 \bar{a}_{59\sigma}^+(\tau) + B_2 \bar{a}_{56\sigma}^+(\tau). \end{aligned} \right.$$

Здесь B_1 — интеграл перескока для связей на общей стороне двух гексагонов, а B_2 — интеграл перескока для связей на общей стороне пентагона и гексагона. В первом приближении мы в расчетах положили, что $B_2 = B$, $B_1 = 1.03B$.

С помощью изложенного выше метода для фуллерена C₆₀ нами были получены выражения для операторов $a_{i\sigma}^+(\tau)$, которые ввиду их громоздкости приводить не будем; структура их следующая:

$$a_{i,\sigma}^+(\tau) = \sum_{m=1}^{60} a_{m\sigma}^+(0) \sum_{k=1}^{32} M_{k,m} \exp(A_{k,m}\tau) + \sum_{m=1}^{60} \Delta n_{m\bar{\sigma}}(0) \sum_{k=1}^{32} W_{k,m} \exp(Z_{k,m}\tau) a_{k\sigma}^+(0). \quad (12)$$

Здесь величины $M_{k,m}$ и $W_{k,m}$ линейно зависят от среднего числа электронов в узле $n_{\bar{\sigma}} = \langle \hat{n}_{\bar{\sigma}} \rangle$, $A_{k,m}$ и $Z_{k,m}$ линейно зависят от параметров модели B, U и ε , а $a_{k\sigma}^+(0)$ — невозмущенные фермиевские операторы, подчиняющиеся стандартным перестановочным соотношениям. Это позволило нам, следуя [13,16], получить антикоммутирующие функции Грина. Фурье-образ антикоммутирующей функции Грина $\langle\langle a_{i\sigma}^+ | a_{i\sigma} \rangle\rangle_E$ представляется

следующим выражением:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{i\uparrow}^+ | a_{i\uparrow} \rangle\rangle_E &= \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{\frac{1}{12} - \frac{n_{\downarrow}}{24}}{E + 1.304B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{12} - \frac{n_{\downarrow}}{24}}{E - 2.324B - \varepsilon} \right. \\ &+ \frac{\frac{1}{12} - \frac{n_{\downarrow}}{24}}{E + 1.010B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{15} - \frac{n_{\downarrow}}{30}}{E - 1.591B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{60} - \frac{n_{\downarrow}}{120}}{E + 3.030B - \varepsilon} \\ &+ \frac{\frac{1}{20} - \frac{n_{\downarrow}}{40}}{E - 1.824B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{15} - \frac{n_{\downarrow}}{30}}{E + 2.590B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{12} - \frac{n_{\downarrow}}{24}}{E - 0.632B - \varepsilon} \\ &+ \frac{\frac{1}{15} - \frac{n_{\downarrow}}{30}}{E - 1.020B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{20} - \frac{n_{\downarrow}}{40}}{E + 1.442B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{20} - \frac{n_{\downarrow}}{40}}{E + 0.166B - \varepsilon} \\ &+ \frac{\frac{1}{20} - \frac{n_{\downarrow}}{40}}{E - 2.784B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{12} - \frac{n_{\downarrow}}{24}}{E + 1.632B - \varepsilon} \\ &+ \frac{\frac{1}{20} - \frac{n_{\downarrow}}{40}}{E + (1.53 - \sqrt{5}/2)B - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{15} - \frac{n_{\downarrow}}{30}}{E + 2.020B - \varepsilon} \\ &+ \frac{\frac{1}{20} - \frac{n_{\downarrow}}{40}}{E + (1.53 + \sqrt{5}/2)B - \varepsilon} + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{24}}{E + 1.304B - \varepsilon - U} \\ &+ \frac{\frac{n_{\downarrow}}{24}}{E - 1.01B - \varepsilon - U} + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{120}}{E - 3.030B - \varepsilon - U} \\ &+ \frac{\frac{n_{\downarrow}}{30}}{E - 1.591B - \varepsilon - U} + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{30}}{E + 2.020B - \varepsilon - U} \\ &+ \frac{\frac{n_{\downarrow}}{24}}{E - 2.232B - \varepsilon - U} + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{30}}{E + 2.591B - \varepsilon - U} \\ &+ \frac{\frac{n_{\downarrow}}{24}}{E - 0.632B - \varepsilon - U} + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{30}}{E - 1.020B - \varepsilon - U} \\ &+ \frac{\frac{n_{\downarrow}}{40}}{E + 0.166B - \varepsilon - U} + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{40}}{E + 1.442B - \varepsilon - U} \\ &+ \frac{\frac{n_{\downarrow}}{40}}{E - 1.824B - \varepsilon - U} + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{40}}{E - 2.784B - \varepsilon - U} \\ &+ \frac{\frac{n_{\downarrow}}{24}}{E + 1.632B - \varepsilon - U} + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{40}}{E + (1.530 - \sqrt{5}/2)B - \varepsilon - U} \\ &\left. + \frac{\frac{n_{\downarrow}}{40}}{E + (1.530 + \sqrt{5}/2)B - \varepsilon - U} \right\}. \quad (13) \end{aligned}$$

Следует отметить, что в (13) первоначально в знаменателях стояли громоздкие радикалы, вместо них для упрощения мы написали их приближенные численные значения. Аналогичное выражение получается для $\langle\langle a_{i\downarrow}^+ | a_{i\downarrow} \rangle\rangle_E$. Полюса функции Грина (13) определяют энергетический спектр системы. Но для определения спектра нужно найти параметр ε (химический потенциал $\mu = -\varepsilon$). Для этого необходимо, следуя [13,16], сделать аналитическое продолжение и получить выражения для среднего значения оператора числа электронов на каждом узле $\langle\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle\rangle$. Поскольку все узлы в рассматриваемой системе эквивалентны, эти средние значения на каждом узле одинаковы. Сумма (по всем узлам) средних

значений оператора числа электронов должна равняться общему числу электронов в системе (уравнение на химпотенциал):

$$\sum_i \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = N. \quad (14)$$

Здесь N — полное число электронов в системе. Поскольку выражения для функций Грина (13) симметричны относительно спинового индекса, очевидно, что в отсутствие магнитного поля $\langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle = \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle$ для каждого узла i , а все узлы эквивалентны. Таким образом, (14) переписывается в виде

$$120 \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle = N. \quad (15)$$

Решив (15), можно получить значение для ε при заданных параметрах нашей системы U , B и числе электронов N . В электронейтральном фуллерене C_{60} $N = 60$. Зависимость ε от U является существенно нелинейной и отличается от вида $\varepsilon = -U/2$, который характерен для более простых систем [13,14,16], что объясняется наличием в системе пентагонов [15,17].

Для получения энергетического спектра рассматриваемой системы необходимо знать параметры модели U и B . Данные на этот счет в работах, посвященных углеродным наносистемам, весьма неоднозначны. Поэтому, не вдаваясь в анализ данных, представленных в литературе, значения U и B мы выбрали из сравнения основных параметров спектра, полученного в [2], с нашими: и $B = -0.98$ eV, $U = 7.06$ eV. Решение (15) при таких параметрах в случае $N = 60$ дает $\varepsilon = -3.36$ eV. Спектр при данных значениях параметров приведен на рис. 2, справа по аналогии с [2] указаны орбитальные квантовые числа оболочек l . Спектр состоит из двух хаббардовских подзон. Хаббардовские подзоны состоят из 16 электронных уровней. Интерес представляют две пары уровней, которые лежат на расстоянии 0.01 eV друг от друга. Эти уровни на рисунке практически сливаются и расположены при -4.6 eV в нижней подзоне и при 2.5 eV в верхней подзоне. Степень вырождения уровней в паре 4 и 5.

В настоящий момент актуальной проблемой является объяснение спектра оптического поглощения нейтрального C_{60} [7]. Воспользуемся полученным нами спектром для решения этой задачи. Эксперимент для нейтрального C_{60} показывает наличие полос оптического поглощения, например, при 4.84, 5.88 и 6.3 eV [17]. В [18] методом конфигурационных взаимодействий был выполнен расчет энергетического спектра фуллерена C_{60} , на основе которого сделана попытка объяснить указанные полосы оптического поглощения. Согласно этой работе, полоса, которая должна давать значение энергии перехода 5.88 eV, формируется переходами между верхней заполненной молекулярной орбиталью (ВЗМО) и орбиталью, лежащей выше нижней свободной молекулярной орбитали (НСМО+1) ($h_u \rightarrow t_{1g}$), при этом получается значение 6.44 eV вместо 5.88 eV. Полоса

при 6.3 eV формируется переходами между ВЗМО–1 и НСМО ($h_g \rightarrow t_{1u}$), при этом получается значение 6.93 eV вместо 6.3 eV. Авторы [18] высказывают гипотезу, что конфигурационное взаимодействие с другими уровнями приводит к понижению энергий переходов до наблюдаемых экспериментально. В нашей работе энергии этих переходов получаются равными 5.877 и 6.614 eV

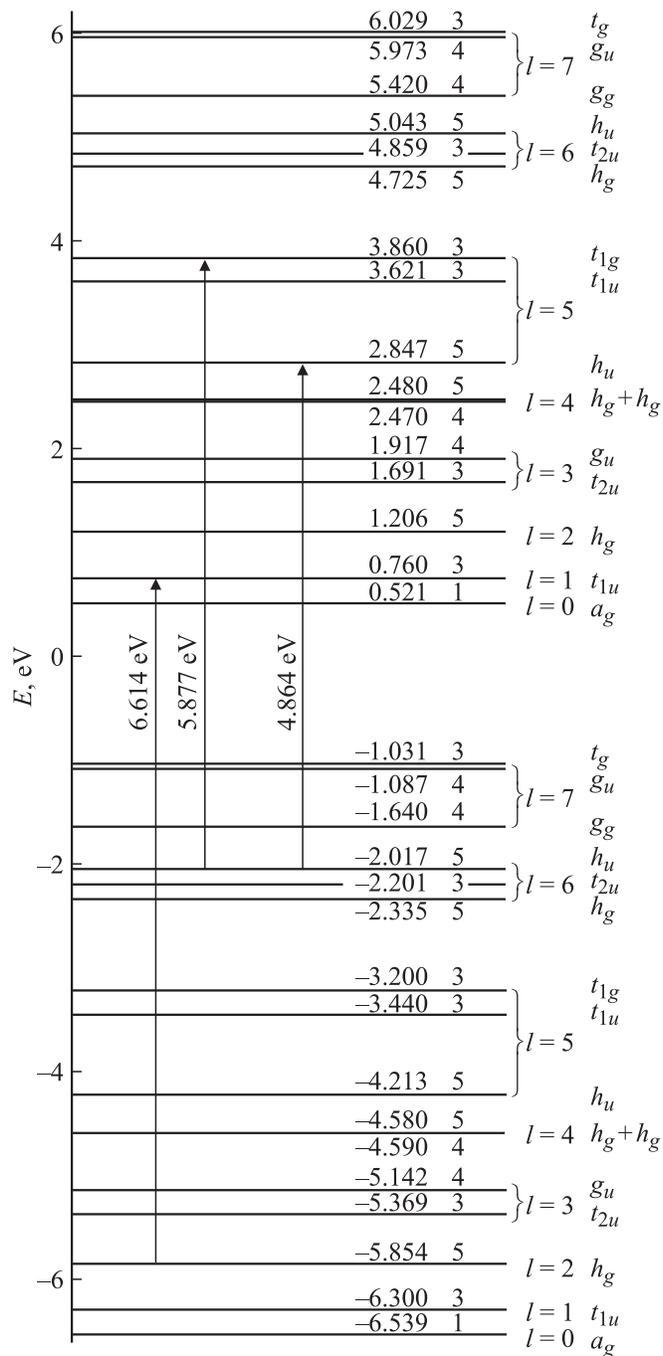


Рис. 2. Энергетический спектр фуллерена C_{60} . На линиях указаны энергии уровней (в eV) и степень вырождения. Стрелками показаны переходы, формирующие оптические полосы поглощения 5.8, 6.3 и 4.87 eV. Буквой l обозначены орбитальные квантовые числа оболочек.

соответственно (на рис. 2 данные переходы указаны стрелками), т. е. энергия первого перехода почти точно совпадает с экспериментальным значением (5.88 eV), а второго — всего на 5% больше экспериментального значения (6.3 eV). В рамках работы [18] полосу поглощения 4.84 eV не удастся объяснить чисто электронными переходами. В [7,19] для интерпретации этой полосы привлекаются сложные рассуждения о снятии запрета на переходы из-за подмешивания колебательных мод. Согласно же результатам настоящей работы, эта полоса обусловлена переходом с энергией 4.864 eV (рис. 2).

Таким образом, энергетический спектр фуллера C₆₀, являющийся важнейшей характеристикой, определяющей основные свойства системы, может быть получен в рамках предложенной нами модели, учитывающей наличие только π -электронов. Его хорошее совпадение со спектром, полученным в [2], и возможность интерпретации на его основе оптических спектров поглощения [17] позволяют надеяться, что методика нашего расчета является адекватной для рассмотренной системы. Следовательно, и другие системы, такие как фуллерены более высокого порядка, нанотрубки и графеновые плоскости, где имеет место sp^2 -гибридизация, также можно исследовать в рамках предложенной модели.

Авторы выражают благодарность Р.Р. Нигматулину за обсуждение результатов.

Список литературы

- [1] R.C. Haddon, L.E. Brus, K. Raghavachari. Chem. Phys. Lett. **131**, 165 (1986).
- [2] R.C. Haddon. Acc. Chem. Res. **25**, 1237 (1992).
- [3] Д.А. Бовчар, Е.Г. Гальперн. ДАН СССР **209**, 610 (1973).
- [4] E. Manousakis. Phys. Rev. B **44**, 10991 (1991).
- [5] W. Andreoni. Ann. Rev. Phys. Chem. **49**, 405 (1998).
- [6] A. Tamai, A.P. Seitsonen, F. Baumberger, M. Hengsberger, Z.-X. Shen, T. Greber, J. Osterwalder. Phys. Rev. B **77**, 075 134 (2008).
- [7] А.В. Николаев, Б.Н. Плахутин. Успехи химии **79**, 803 (2010).
- [8] Э.Г. Раков. Нанотрубки и фуллерены. Физматкнига, М. (2006).
- [9] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
- [10] S.P. Shubin, S.V. Wonsowskii. Proc. Roy. Soc. A **145**, 159 (1934).
- [11] И.А. Мисуркин, А.А. Овчинников. Письма в ЖЭТФ **4**, 248 (1966).
- [12] A. Onipko. Phys. Rev. B **74**, 245 412 (2008).
- [13] Г.И. Миронов. ФТТ **49**, 527 (2007).
- [14] Э.Д. Изергин, Г.И. Миронов. ФНТ **33**, 1 365 (2007).
- [15] А.И. Мурзашев. ЖЭТФ **135**, 122 (2009).
- [16] В.В. Лоскутов, Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматулин. ФНТ **22**, 282 (1996).
- [17] S. Leach, M. Vervloet, A. Desprès, E. Bréheret, J.P. Hare, T.J. Dennis, H.W. Kroto, R. Taylor, D.R.M. Walton. Chem. Phys. **160**, 451 (1992).
- [18] A.V. Nikolaev, I.V. Bodrenko, E.V. Tkalya. Phys. Rev. A **77**, 015 503 (2008).
- [19] A. Hiraya, K. Shobatake. J. Chem. Phys. **94**, 7700 (1991).