

17,09

Энергетический спектр и спектр оптического поглощения фуллерена C₂₄ в модели Хаббарда

© А.В. Силантьев

Марийский государственный университет,
Йошкар-Ола, Россия

E-mail: kvvant@rambler.ru

Поступила в Редакцию 5 августа 2019 г.

В окончательной редакции 11 ноября 2019 г.

Принята к публикации 18 ноября 2019 г.

В рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций получены в аналитическом виде антикоммутирующие функции Грина и энергетические спектры фуллерена C₂₄ с группами симметрии D₆, D_{6d}, и O_h. Используя методы теории групп проведена классификация энергетических состояний, а также определены разрешенные переходы в энергетических спектрах фуллерена C₂₄.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, наносистемы, фуллерен C₂₄.

DOI: 10.21883/FTT.2020.03.49016.563

1. Введение

В настоящее время имеется большое число исследований посвященных изучению физических свойств так называемых малых фуллеренов C_n с n < 60 [1,2]. Одним из малых фуллеренов является фуллерен C₂₄, который в первые был зафиксирован в 1993 г. [3]. Достаточно большое количество фуллерена C₂₄ было обнаружено также в 2003 г. при исследовании масс-спектра углеродных кластеров [4]. Дальнейшие исследования [5] показали, что фуллерен C₂₄ может быть двух типов, т. е. он может состоять, как из пентагонов и гексагонов, так и из гексагонов и квадратов. Исследования фуллере-

на C₂₄ первого типа показали, что пустой фуллерен C₂₄ обладает группой симметрии D₆ [6], а эндоэдральные фуллерены X@C₂₄ (X=He, Ne, Ar) обладают группой симметрии D_{6d} [7]. Фуллерен C₂₄ второго типа был открыт в 2001 г. [8]. Он представляет собой усеченный октаэдр и обладает группой симметрии O_h. Исследованию свойств фуллерена C₂₄ посвящено довольно много работ [9–11].

Фуллерен C₂₄ с группой симметрии D₆ состоит из 12 пентагонов и 2 гексагонов, как показано на рис. 1. Из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 1, видно, что фуллерен C₂₄ с группой симметрии D₆ содержит четыре неэквивалентных

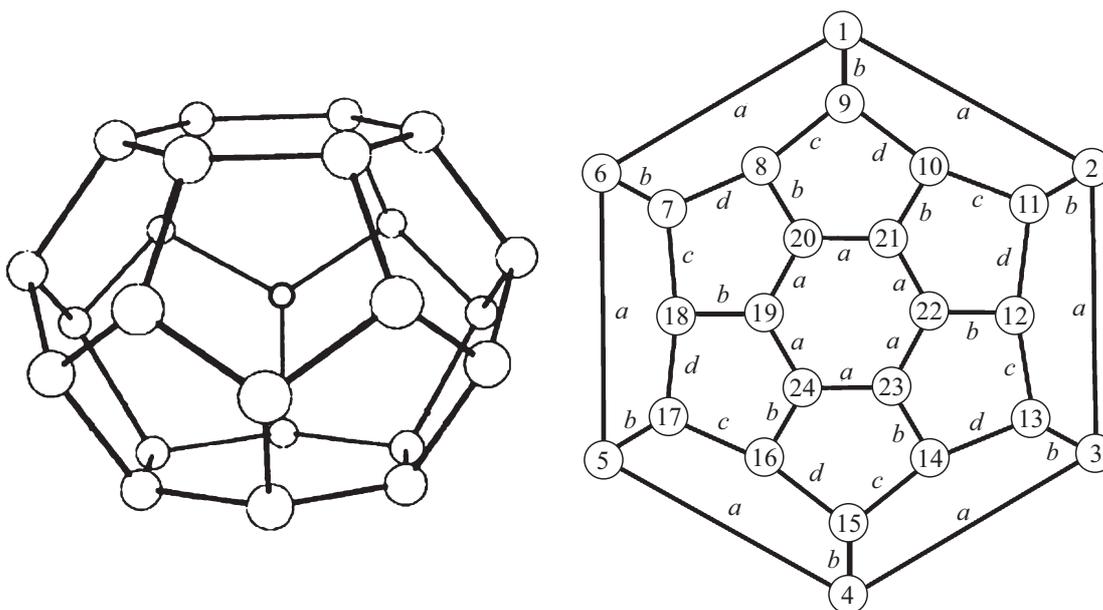


Рис. 1. Фуллерен C₂₄ с группой симметрии D₆ и его диаграмма Шлегеля с указанием положения атомов углерода и связей между атомами углерода.

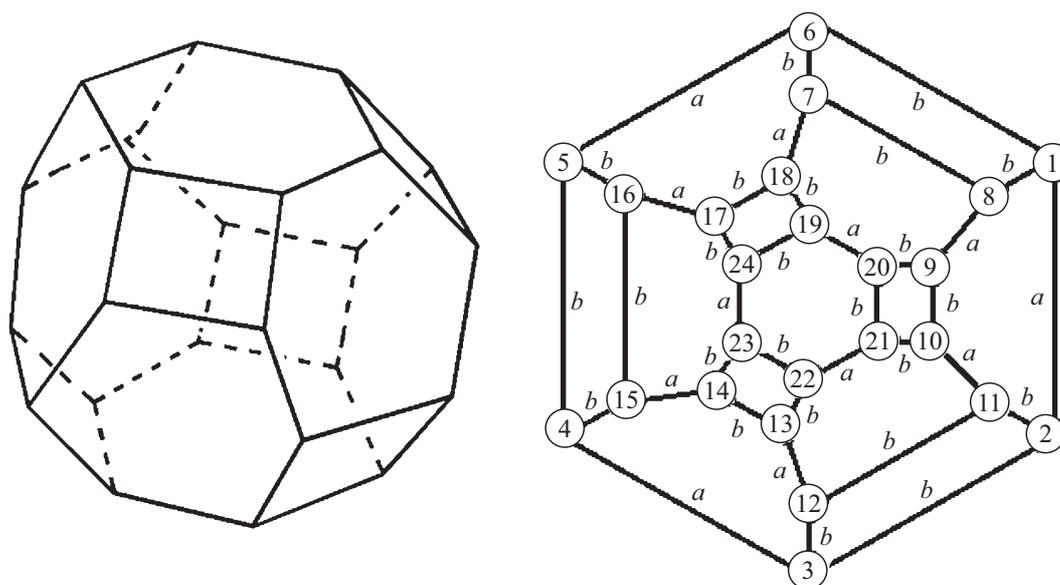


Рис. 2. Фуллерен C_{24} с группой симметрии O_h и его диаграмма Шлегеля с указанием положения атомов углерода и связей между атомами углерода.

связи и две группы неэквивалентных атомов углерода: $G_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 19, 20, 21, 22, 23, 24\}$, $G_2 = \{7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18\}$. К множеству G_1 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения одного гексагона и двух пентагонов. К множеству G_2 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения трех пентагонов.

Фуллерен C_{24} с группой симметрии O_h состоит из 6 четырехугольников и 8 гексагонов, как показано на рис. 2. Из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 2, видно, что фуллерен C_{24} с группой симметрии O_h содержит две неэквивалентных связи, а все атомы углерода эквивалентны.

Изучение углеродных наноструктур показало, что электронные свойства этих систем в основном определяются π -электронами, причем эффективное взаимодействие двух π -электронов, находящихся на одном узле, составляет ~ 5 eV [12,13]. Для описания электронных свойств углеродных наносистем широко используется модель Хаббарда [14]. В рамках модели Хаббарда были изучены электронные и оптические свойства углеродных фуллеренов и нанотрубок [13,15–23]. Отметим, что при исследовании квантовых систем, используются разнообразные приближенные методы. Одним из таких приближенных методов является приближение статических флуктуаций (ПСФ). Это приближение первоначально было разработано для исследования физических свойств спиновых систем [24]. В дальнейшем ПСФ стало использоваться не только при исследовании спиновых систем, но бозе-систем и ферми-систем: жидкий гелий-4 [25], жидкий гелий-3 [26], $^3\text{He-HeII}$ [27], конечные фермисистемы [28] и др. В рамках модели Хаббарда в ПСФ были получены энергетические спектры и спектры оп-

тического поглощения фуллерена C_{60} с группой симметрии I_h [13], фуллерена C_{70} с группой симметрии D_{6d} [16], фуллерена C_{20} с группами симметрии I_h , D_{5d} , и D_{3d} [17], а также фуллерена C_{36} и эндоэдрального фуллерена $\text{La}@C_{36}$ с группами симметрии D_{6h} [18], эндоэдрального фуллерена $\text{Cd}_2\text{C}_2@C_{82}$ [22], углеродных нанотрубок [23]. Полученные в работе [13] теоретические результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментально наблюдаемыми спектрами оптического поглощения фуллерена C_{60} , находящегося в газовой фазе при температуре 650°C [29], а также находящегося в растворе n -гексана [30]. Полученные в работе [16] теоретические результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментально наблюдаемыми спектрами оптического поглощения фуллерена C_{70} , находящегося в газовой фазе при температуре 925°K [31], а также находящегося в растворе n -гексана [32].

Целью данной работы является исследование энергетического спектра фуллерена C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} , и O_h . в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

2. Энергетический спектр фуллерена C_{24}

Для описания π -электронной системы фуллерена C_{24} воспользуемся моделью Хаббарда [14]:

$$H = \sum_{\sigma,i} \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{\sigma,i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,i} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}, \quad (1)$$

где $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов со спином σ на узле i ; $n_{i\sigma}$ — оператор числа

частиц со спином σ на узле i ; ε_i — энергия одноэлектронного атомного состояния на узле i ; t_{ij} — интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с узла i на узел j ; U_i — энергия кулоновского отталкивания двух электронов, находящихся на i -ом узле; $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Прежде чем искать энергетические спектры фуллерена C₂₄ с группами симметрии D₆, D_{6d} и O_h найдем неэквивалентные интегралы переноса в этих молекулах. Как следует из рис. 1 и 2, в фуллерене C₂₄ с группами симметрии D₆, D_{6d} и O_h можно выделить четыре, три и две неэквивалентные связи соответственно. Таким образом, фуллерену C₂₄ с группами симметрии D₆, D_{6d} и O_h можно сопоставить следующие интегралы переноса.

Для фуллерена C₂₄ с группой симметрии D₆:

$$\begin{aligned} t_{1,2} = t_{2,3} = t_{3,4} = t_{4,5} = t_{5,6} = t_{6,1} = t_{19,20} \\ = t_{20,21} = t_{21,22} = t_{22,23} = t_{23,24} = t_{24,19} = t_a, \\ t_{1,9} = t_{2,11} = t_{3,13} = t_{4,15} = t_{5,17} = t_{6,7} = t_{8,20} = t_{10,21} \\ = t_{12,22} = t_{14,23} = t_{16,24} = t_{18,19} = t_b, \\ t_{8,9} = t_{10,11} = t_{12,13} = t_{14,15} = t_{16,17} = t_{18,7} = t_c, \\ t_{7,8} = t_{9,10} = t_{11,12} = t_{13,14} = t_{15,16} = t_{17,18} = t_d. \end{aligned}$$

Для фуллерена C₂₄ с группой симметрии D_{6d}:

$$\begin{aligned} t_{1,2} = t_{2,3} = t_{3,4} = t_{4,5} = t_{5,6} = t_{6,1} = t_{19,20} = t_{20,21} \\ = t_{21,22} = t_{22,23} = t_{23,24} = t_{24,19} = t_a, \\ t_{1,9} = t_{2,11} = t_{3,13} = t_{4,15} = t_{5,17} = t_{6,7} = t_{8,20} = t_{10,21} \\ = t_{12,22} = t_{14,23} = t_{16,24} = t_{18,19} = t_b, \\ t_{8,9} = t_{10,11} = t_{12,13} = t_{14,15} = t_{16,17} = t_{18,7} = t_{7,8} \\ = t_{9,10} = t_{11,12} = t_{13,14} = t_{15,16} = t_{17,18} = t_c. \end{aligned}$$

Для фуллерена C₂₄ с группой симметрии O_h:

$$\begin{aligned} t_{1,2} = t_{3,4} = t_{5,6} = t_{7,18} = t_{16,17} = t_{12,13} = t_{14,15} = t_{8,9} \\ = t_{10,11} = t_{19,20} = t_{21,22} = t_{23,24} = t_a, \\ t_{2,3} = t_{4,5} = t_{6,1} = t_{1,8} = t_{9,10} = t_{2,11} = t_{11,12} = t_{3,12} \\ = t_{13,14} = t_{4,15} = t_{15,16} = t_{5,16} = t_{17,18} = t_{6,7} = t_{7,8} \\ = t_{9,10} = t_{10,21} = t_{20,9} = t_{20,21} = t_{13,22} = t_{14,23} \\ = t_{22,23} = t_{17,24} = t_{18,19} = t_{19,24} = t_b. \end{aligned}$$

Используя гамильтониан (1), рис. 1 и рис. 2 запишем уравнения движения для всех операторов рождения

$c_{j\sigma}^+(\tau)$, заданных в представлении Гейзенберга

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{1\sigma}^+ + t_a(c_{2\sigma}^+ + c_{6\sigma}^+) + t_b c_{k\sigma}^+ \\ \frac{dc_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U) \cdot c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}} + t_a(c_{2\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}} + c_{6\sigma}^+ n_{6\bar{\sigma}}) \\ &\quad + t_b c_{k\sigma}^+ n_{k\bar{\sigma}} \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dc_{24\sigma}^+}{d\tau} &= (\varepsilon + U) \cdot c_{24\sigma}^+ + t_a(c_{19\sigma}^+ + c_{23\sigma}^+) + t_b c_{m\sigma}^+ \\ \frac{dc_{24\sigma}^+ n_{24\bar{\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U) \cdot c_{24\sigma}^+ n_{24\bar{\sigma}} + t_a(c_{19\sigma}^+ n_{19\bar{\sigma}} \\ &\quad + c_{23\sigma}^+ n_{23\bar{\sigma}}) + t_b c_{m\sigma}^+ n_{m\bar{\sigma}} \end{aligned} \right. \quad (2)$$

где $k = 9$ и $m = 16$ для фуллерена C₂₄ с группой симметрии D₆, $k = 8$ и $m = 17$ для фуллерена C₂₄ с группой симметрии O_h.

Система уравнений (2) имеет точное аналитическое решение. Используя это решение можно найти фурье-образы антикоммутирующих функций Грина

$$\begin{aligned} \langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^p \frac{Q_{j,m}}{E - E_m + ih}, \\ E_m &= \varepsilon + e_m, \end{aligned} \quad (3)$$

где — для фуллерена C₂₄ с группой симметрии D₆

$$\begin{aligned} e_1 &= \frac{1}{2} \left(2t_a + t_c + t_d - \sqrt{(t_d + t_c - 2t_a)^2 + 4t_b^2} \right), \\ e_2 &= \frac{1}{2} \left(t_a - \sqrt{A_1} - \sqrt{\frac{2t_a(t_d t_c + t_d^2 + t_c^2)}{\sqrt{A_1}} + 2A_1 - 3z_1} \right), \\ e_3 &= \frac{1}{2} \left(2t_a - t_c - t_d - \sqrt{(t_d + t_c + 2t_a)^2 + 4t_b^2} \right), \\ e_4 &= \frac{1}{2} \left(-t_a - \sqrt{A_2} - \sqrt{\frac{2t_a(t_d t_c - t_d^2 - t_c^2)}{\sqrt{A_2}} + 2A_2 - 3z_2} \right), \\ e_5 &= \frac{1}{2} \left(t_a - \sqrt{A_1} + \sqrt{\frac{2t_a(t_d t_c + t_d^2 + t_c^2)}{\sqrt{A_1}} + 2A_1 - 3z_1} \right), \\ e_6 &= \frac{1}{2} \left(2t_a + t_c + t_d + \sqrt{(t_d + t_c - 2t_a)^2 + 4t_b^2} \right), \\ e_7 &= \frac{1}{2} \left(t_a + \sqrt{A_1} - \sqrt{\frac{2t_a(t_d t_c + t_d^2 + t_c^2)}{\sqrt{A_1}} + 2A_1 - 3z_1} \right), \\ e_8 &= \frac{1}{2} \left(-2t_a + t_c - t_d - \sqrt{(t_d - t_c - 2t_a)^2 + 4t_b^2} \right), \\ e_9 &= \frac{1}{2} \left(-2t_a - t_c + t_d - \sqrt{(t_d - t_c + 2t_a)^2 + 4t_b^2} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 e_{10} &= \frac{1}{2} \left(-t_a - \sqrt{A_2} + \sqrt{\frac{2t_a(t_d t_c - t_d^2 - t_c^2)}{\sqrt{A_2}} + 2A_2 - 3z_2} \right), \\
 e_{11} &= \frac{1}{2} \left(-t_a + \sqrt{A_2} - \sqrt{\frac{2t_a(-t_d t_c + t_d^2 + t_c^2)}{\sqrt{A_2}} + 2A_2 - 3z_2} \right), \\
 e_{12} &= \frac{1}{2} \left(-t_a + \sqrt{A_2} + \sqrt{\frac{2t_a(-t_d t_c + t_d^2 + t_c^2)}{\sqrt{A_2}} + 2A_2 - 3z_2} \right), \\
 e_{13} &= \frac{1}{2} \left(t_a + \sqrt{A_1} + \sqrt{-\frac{2t_a(t_d t_c + t_d^2 + t_c^2)}{\sqrt{A_1}} + 2A_1 - 3z_1} \right), \\
 e_{14} &= \frac{1}{2} \left(2t_a - t_c - t_d + \sqrt{(t_d + t_c + 2t_a)^2 + 4t_b^2} \right), \\
 e_{15} &= \frac{1}{2} \left(-2t_a + t_c - t_d + \sqrt{(t_d - t_c - 2t_a)^2 + 4t_b^2} \right), \\
 e_{16} &= \frac{1}{2} \left(-2t_a - t_c + t_d + \sqrt{(t_d - t_c + 2t_a)^2 + 4t_b^2} \right), \\
 A_1 &= \frac{1}{3} (t_a^2 + 2t_c^2 + 2t_d^2 + 2t_c t_d + 4t_b^2) + z_1, \\
 A_2 &= \frac{1}{3} (t_a^2 + 2t_c^2 + 2t_d^2 - 2t_c t_d + 4t_b^2) + z_2, \\
 z_1 &= \frac{2}{3} \sqrt{(t_a^2 - t_c^2 - t_d^2 - t_c t_d + 4t_b^2)^2 + 12t_b^2(t_c^2 + t_d^2 + t_c t_d)} \\
 &\quad \times \cos\left(\frac{\varphi_1}{3}\right), \\
 z_2 &= \frac{2}{3} \sqrt{(t_a^2 - t_c^2 - t_d^2 + t_c t_d + 4t_b^2)^2 + 12t_b^2(t_c^2 + t_d^2 - t_c t_d)} \\
 &\quad \times \cos\left(\frac{\varphi_2}{3}\right), \tag{4}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \varphi_1 &= \arccos \left(\frac{(t_a^2 - t_c^2 - t_c t_d - t_d^2 + 4t_b^2)[(t_a^2 - t_c^2 - t_c t_d - t_d^2 + 4t_b^2)^2 + 18t_b^2(t_c^2 + t_d^2 + t_c t_d)]}{[(t_a^2 - t_c^2 - t_c t_d - t_d^2 + 4t_b^2)^2 + 12t_b^2(t_c^2 + t_d^2 + t_c t_d)]^{3/2}} \right), \\
 \varphi_2 &= \arccos \left(\frac{(t_a^2 - t_c^2 + t_c t_d - t_d^2 + 4t_b^2)[(t_a^2 - t_c^2 + t_c t_d - t_d^2 + 4t_b^2)^2 + 18t_b^2(t_c^2 + t_d^2 - t_c t_d)]}{[(t_a^2 - t_c^2 + t_c t_d - t_d^2 + 4t_b^2)^2 + 12t_b^2(t_c^2 + t_d^2 - t_c t_d)]^{3/2}} \right).
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Q_{x,m} &= \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m + t_c + t_d}{2e_m + t_d + t_c - 2t_a} \quad m = 3, 14 \\
 Q_{x,m} &= \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m - t_c - t_d}{2e_m - t_d - t_c - 2t_a} \quad m = 1, 6 \\
 Q_{x,m} &= \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m + t_c - t_d}{2e_m - t_d + t_c + 2t_a} \quad m = 9, 16 \\
 Q_{x,m} &= \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m - t_c + t_d}{2e_m + t_d - t_c + 2t_a} \quad m = 8, 15
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Q_{x,m} &= \frac{1}{6} \cdot \frac{e_m^3 - t_a e_m^2 - (t_b^2 + t_c^2 + t_d^2 + t_c t_d) e_m + t_a(t_c t_d + t_d^2 + t_c^2)}{2e_m^3 - 3t_a e_m^2 + (-2t_b^2 - t_c t_d + t_a^2 - t_c^2 - t_d^2) e_m + t_a(t_c t_d + t_d^2 + t_b^2 + t_c^2)} \\
 &\quad m = 2, 5, 7, 13 \\
 Q_{x,m} &= \frac{1}{6} \cdot \frac{e_m^3 + t_a e_m^2 + (t_c t_d - t_b^2 - t_c^2 - t_d^2) e_m + t_a(t_c t_d - t_d^2 - t_c^2)}{2e_m^3 + 3t_a e_m^2 + (-2t_b^2 + t_c t_d + t_a^2 - t_c^2 - t_d^2) e_m + t_a(t_c t_d - t_d^2 - t_b^2 - t_c^2)} \\
 &\quad m = 4, 10, 11, 12 \\
 Q_{y,m} &= \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m + 2t_a}{2e_m - t_d + t_c + 2t_a} \quad m = 9, 16 \\
 Q_{y,m} &= \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m - 2t_a}{2e_m + t_d + t_c - 2t_a} \quad m = 3, 14 \\
 Q_{y,m} &= \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m - 2t_a}{2e_m - t_d - t_c - 2t_a} \quad m = 1, 6 \\
 Q_{y,m} &= \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m + 2t_a}{2e_m + t_d - t_c + 2t_a} \quad m = 8, 15 \\
 Q_{y,m} &= \frac{1}{6} \cdot \frac{(e_m + t_a)(e_m^2 + t_a e_m - t_b^2)}{2e_m^3 + 3t_a e_m^2 + (-2t_b^2 + t_c t_d + t_a^2 - t_c^2 - t_d^2) e_m + t_a(t_c t_d - t_d^2 - t_b^2 - t_c^2)} \\
 &\quad m = 4, 10, 11, 12 \\
 Q_{y,m} &= \frac{1}{6} \cdot \frac{(e_m - t_a)(e_m^2 - t_a e_m - t_b^2)}{2e_m^3 - 3t_a e_m^2 + (-2t_b^2 - t_c t_d + t_a^2 - t_c^2 - t_d^2) e_m + t_a(t_c t_d + t_d^2 + t_b^2 + t_c^2)} \\
 &\quad m = 2, 5, 7, 13 \\
 &\quad x \in G_1, \quad y \in G_2. \tag{5}
 \end{aligned}$$

— для фуллерена C_{24} с группой симметрии O_h

$$\begin{aligned}
 e_1 &= t_a + 2t_b, \quad e_2 = -\sqrt{t_a^2 + t_b^2} + t_b, \\
 e_3 &= -\sqrt{t_a^2 - 2t_a t_b + 4t_b^2}, \quad e_4 = t_a, \\
 e_5 &= -t_b - \sqrt{t_a^2 + t_b^2}, \quad e_6 = \sqrt{t_a^2 + t_b^2} + t_b, \quad e_7 = -t_a, \\
 e_8 &= \sqrt{t_a^2 - 2t_a t_b + 4t_b^2}, \quad e_9 = -t_b + \sqrt{t_a^2 + t_b^2}, \\
 e_{10} &= -t_a - 2t_b. \tag{6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Q_{j,1} &= Q_{j,10} = 1/24, \\
 Q_{j,2} &= Q_{j,3} = Q_{j,5} = Q_{j,6} = Q_{j,8} = Q_{j,9} = 1/8, \\
 Q_{j,4} &= Q_{j,7} = 1/12, \quad p = 20. \tag{7}
 \end{aligned}$$

Зная фурье-образ антикоммутирующей функции Грина, можно найти энергетический спектр квантовой системы,

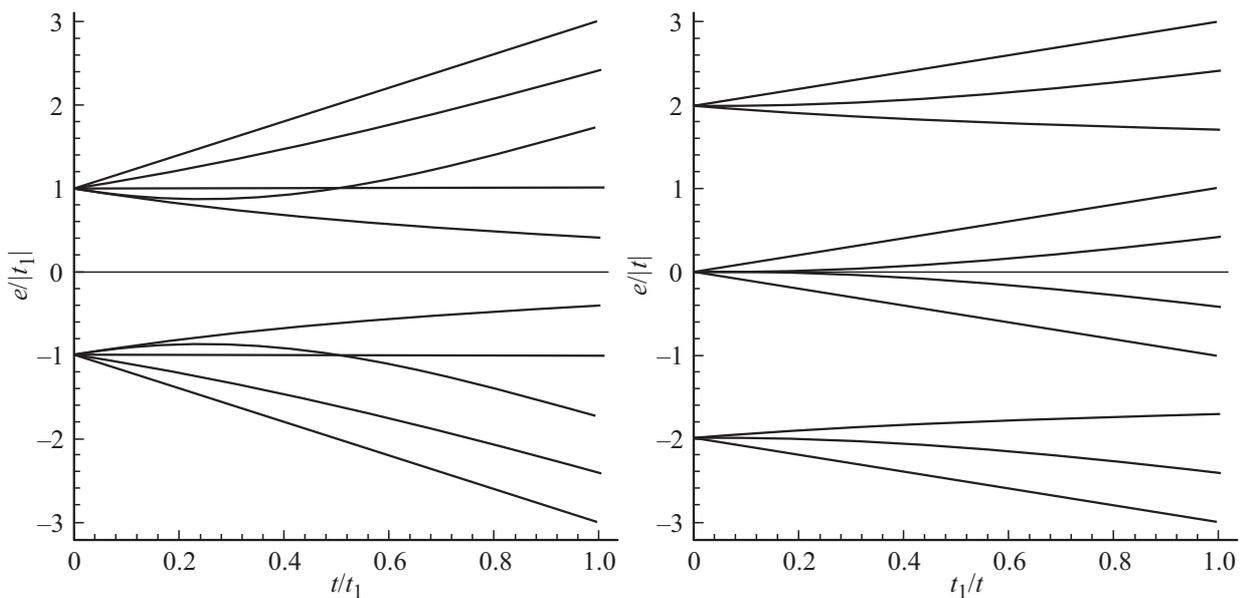


Рис. 3. Зависимость e_i от интегралов перескока t и t_1 для фуллера C_{24} с группой симметрии O_h .

который определяется полюсами функции Грина [33]. Следовательно, энергетический спектр фуллера C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} и O_h определяются величинами E_m , которые входят в функцию Грина (3).

Энергетические состояния фуллера C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} и O_h можно классифицировать в соответствии с неприводимыми представлениями этих групп. Как известно, группа D_6 имеет четыре одномерных неприводимых представлений a_1, a_2, b_1, b_2 и два двумерных неприводимых представлений e_1, e_2 ; группа D_{6d} имеет четыре одномерных неприводимых представлений a_1, a_2, b_1, b_2 и пять двумерных неприводимых представлений e_1, e_2, e_3, e_4, e_5 ; а группа O_h имеет четыре одномерных неприводимых представлений $a_{1g}, a_{2g}, a_{1u}, a_{2u}$, два двумерных неприводимых представления e_g, e_u и четыре трехмерных неприводимых представления $t_{1g}, t_{2g}, t_{1u}, t_{2u}$ [34]. Используя теорию групп [34,35] можно показать, что энергетические состояния фуллера C_{24} , определяемые полюсами функции Грина (3), связаны следующим образом с неприводимыми представлениями группы:

Для фуллера C_{24} с группой симметрии D_6

$E_1(a_1), E_2(e_1), E_3(a_2), E_4(e_2), E_5(e_1), E_6(a_1), E_7(e_1), E_8(b_2), E_9(b_1), E_{10}(e_2), E_{11}(e_2), E_{12}(e_2), E_{13}(e_1), E_{14}(a_2), E_{15}(b_2), E_{16}(b_1), E_{17}(a_1), E_{18}(e_1), E_{19}(a_2), E_{20}(e_2), E_{21}(e_1), E_{22}(a_1), E_{23}(e_1), E_{24}(b_2), E_{25}(b_1), E_{26}(e_2), E_{27}(e_2), E_{28}(e_2), E_{29}(e_1), E_{30}(a_2), E_{31}(b_2), E_{32}(b_1)$.

Для фуллера C_{24} с группой симметрии D_{6d}

$E_1(a_1), E_2(e_1), E_3(b_2), E_4(a_1), E_5(e_2), E_6(e_5), E_7(e_1), E_8(e_3), E_{10}(e_4), E_{11}(e_2), E_{12}(e_4), E_{14}(e_3), E_{13}(e_5), E_{15}(b_2), E_{17}(a_1), E_{18}(e_1), E_{19}(b_2), E_{20}(a_1), E_{21}(e_2), E_{22}(e_5), E_{23}(e_1), E_{24}(e_3), E_{26}(e_4), E_{27}(e_2), E_{28}(e_4), E_{30}(e_3), E_{29}(e_5), E_{31}(b_2)$.

Для фуллера C_{24} с группой симметрии O_h

$E_1(a_{1g}), E_2(t_{1u}), E_3(e_g), E_4(t_{2g}), E_5(t_{2u}), E_6(t_{1u}), E_7(t_{1g}), E_8(e_g), E_9(t_{2u}), E_{10}(a_{2g}), E_{11}(a_{1g}), E_{12}(t_{1u}), E_{13}(e_g), E_{14}(t_{2g}), E_{15}(t_{2u}), E_{16}(t_{1u}), E_{17}(t_{1g}), E_{18}(e_g), E_{19}(t_{2u}), E_{20}(a_{2g})$.

Важной физической характеристикой энергетического спектра квантовой системы является степень вырождения энергетических уровней спектра. Для того чтобы найти степень вырождения энергетических уровней фуллера C_{24} , воспользуемся следующим соотношением [13,21]:

$$g_i = \sum_{j=1}^N Q_{j,i}, \tag{8}$$

где N — число узлов в наносистеме.

Подставляя величины $Q_{j,i}$, которые определяются соотношениями (5) и (7), в формулу (8) получим для степеней вырождения энергетических уровней фуллера C_{24} следующие значения:

Для фуллера C_{24} с группой симметрии D_6

$$\begin{aligned} g_1 = g_3 = g_6 = g_8 = g_9 = g_{14} = g_{15} = g_{16} = g_{17} \\ = g_{19} = g_{22} = g_{24} = g_{25} = g_{30} = g_{31} = g_{32} = 1, \\ g_2 = g_4 = g_5 = g_7 = g_{10} = g_{11} = g_{12} = g_{13} = g_{18} \\ = g_{20} = g_{21} = g_{23} = g_{26} = g_{27} = g_{28} = g_{29} = 2. \end{aligned} \tag{9}$$

Для фуллера C_{24} с группой симметрии D_{6d}

$$\begin{aligned} g_1 = g_3 = g_6 = g_{14} = g_{17} = g_{19} = g_{22} = g_{30} = 1, \\ g_2 = g_4 = g_5 = g_7 = g_8 = g_{10} = g_{11} = g_{12} = g_{13} \\ = g_{15} = g_{18} = g_{20} = g_{21} = g_{23} = g_{24} = g_{26} \\ = g_{27} = g_{28} = g_{29} = g_{31} = 2. \end{aligned} \tag{10}$$

Для фуллера C_{24} с группой симметрии O_h

$$\begin{aligned} g_1 = g_{10} = g_{11} = g_{20} = 1, \\ g_3 = g_8 = g_{13} = g_{18} = 2, \\ g_2 = g_4 = g_5 = g_6 = g_7 = g_9 = g_{12} = g_{14} = g_{15} \\ = g_{16} = g_{17} = g_{19} = 3. \end{aligned} \quad (11)$$

Таким образом, соотношения (4), (6), (9), (10) и (11) описывают энергетические спектры фуллера C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} и O_h в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

Относительное расположение энергетических уровней у фуллера C_{24} зависит от соотношения между интегралами переноса. Это, например, хорошо видно из рис. 3, на котором представлена зависимость величин e_i , которые определяют характер энергетического спектра фуллера C_{24} с группой симметрии O_h , от интегралов переноса. В этом спектре можно выделить две особенности. Во-первых, при $t = 0$ ($t_1 = 0$) энергетический спектр фуллера C_{24} переходит в энергетический спектр димера (квадрата). Это связано с тем, что в этих предельных случаях фуллерен C_{24} распадается на изолированные димеры и квадраты, соответственно. Во-вторых, в энергетическом спектре фуллера C_{24} при $t_1 = t/2$ происходит случайное вырождение энергетических уровней E_3 и E_4 , E_7 и E_8 , E_{13} и E_{14} , E_{17} и E_{18} .

3. Обсуждение результатов

Исследования, выполненные в работах [6,7,36], показали, что расстояния между атомами углерода в фуллере C_{24} имеют следующие значения.

Для фуллера C_{24} с группой симметрии D_6 [6]:

$$\begin{aligned} x_a = 1.437 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.523 \text{ \AA}, \\ x_c = 1.398 \text{ \AA}, \quad x_d = 1.457 \text{ \AA}. \end{aligned} \quad (12)$$

Для фуллера C_{24} с группой симметрии D_{6d} [7]:

$$x_a = 1.421 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.532 \text{ \AA}, \quad x_c = 1.382 \text{ \AA}. \quad (13)$$

Для фуллера C_{24} с группой симметрии O_h [36]:

$$x_a = 1.386 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.503 \text{ \AA}. \quad (14)$$

Для того чтобы найти численные значения для интегралов переноса, которые соответствуют фуллеру C_{24} , воспользуемся следующим соотношением [16,17]:

$$t_s = -8.17065 \cdot \exp(-1.69521 \cdot x_s). \quad (15)$$

Подставляя (12)–(14) в формулу (15) мы получим численные значения для интегралов переноса.

Для фуллера C_{24} с группой симметрии D_6 :

$$\begin{aligned} t_a = -0.71501 \text{ eV}, \quad t_b = -0.61801 \text{ eV}, \\ t_c = -0.76387 \text{ eV}, \quad t_d = -0.69117 \text{ eV}. \end{aligned} \quad (16)$$

Для фуллера C_{24} с группой симметрии D_{6d} :

$$\begin{aligned} t_a = -0.73466 \text{ eV}, \quad t_b = -0.60865 \text{ eV}, \\ t_c = -0.78488 \text{ eV}. \end{aligned} \quad (17)$$

Для фуллера C_{24} с группой симметрии O_h :

$$t_a = -0.77957 \text{ eV}, \quad t_b = -0.63932 \text{ eV}. \quad (18)$$

Подставляя численные значения для интегралов переноса (16)–(18) в соотношения (4) и (6) получим для фуллера C_{24} численные значения для величин e_k , которые приведены в табл. 1–3.

Теперь для того чтобы получить энергетические спектры фуллера C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} и O_h воспользуемся формулой, которая следует из функции Грина (3):

$$E_k = \varepsilon + \frac{U}{2} + \bar{e}_k, \quad (19)$$

где \bar{e}_k — это энергия k -го энергетического уровня относительно энергии $\varepsilon + U/2$

$$\bar{e}_k = \begin{cases} e_k - \frac{U}{2}, & k = 1 \dots p/2 \\ e_k + \frac{U}{2}, & k = p/2 + 1 \dots p \end{cases}. \quad (20)$$

Как видно из соотношений (19) и (20) для того чтобы найти энергетический спектр фуллера C_{24} , необходимо определить еще численные значения параметров ε и U . В работе [13] исходя из экспериментально наблюдаемого оптического спектра поглощения фуллера C_{60} в рамках модели Хаббарда в ПСФ были вычислены эти параметры $\varepsilon = -7.824 \text{ eV}$, $U = 5.662 \text{ eV}$. Поэтому при вычислении энергетического спектра фуллера C_{24} воспользуемся этими значениями. Отметим, что $U = 5.662 \text{ eV}$ согласуется с результатами работы [12], где было показано, что $U \sim 5 \text{ eV}$. Подставляя численные значения для e_k из табл. 1–3, а также численные значения для ε и U в соотношения (19) и (20) получим энергетический спектр фуллера C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} и O_h . Результаты вычислений приведены в табл. 4–6, а также на рис. 4–6. Как видно из соотношений (24), (25) и рис. 2–4, энергетические состояния фуллера C_{24} образуют две подзоны Хаббарда, при чем энергетические состояния, образующие нижнюю подзону Хаббарда, сосредоточены вблизи энергии ε , а энергетические состояния, образующие верхнюю подзону Хаббарда, сосредоточены вблизи энергии $\varepsilon + U$.

Из соотношений (4), (9) и (10) следует, что при понижении симметрии фуллера C_{24} от D_{6d} до D_6 энергетические уровни данного фуллера изменяются

Таблица 1. Энергетический спектр фуллера C_{24} с группой симметрии D_6 : значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы D_6 , к которым они относятся

№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$	№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$
1	-4.892	-9.885	1	$E_1(a_1)$	17	0.770	-4.223	1	$E_{17}(a_1)$
2	-4.494	-9.487	2	$E_2(e_1)$	18	1.168	-3.825	2	$E_{18}(e_1)$
3	-4.388	-9.381	1	$E_3(a_2)$	19	1.274	-3.719	1	$E_{19}(a_2)$
4	-3.789	-8.782	2	$E_4(e_2)$	20	1.873	-3.120	2	$E_{20}(e_2)$
5	-3.723	-8.716	2	$E_5(e_1)$	21	1.939	-3.054	2	$E_{21}(e_1)$
6	-3.655	-8.648	1	$E_6(a_1)$	22	2.007	-2.986	1	$E_{22}(a_1)$
7	-3.143	-8.136	2	$E_7(e_1)$	23	2.519	-2.474	2	$E_{23}(e_1)$
8	-3.125	-8.118	1	$E_8(b_2)$	24	2.537	-2.456	1	$E_{24}(b_2)$
9	-2.997	-7.991	1	$E_9(b_1)$	25	2.664	-2.329	1	$E_{25}(b_1)$
10	-2.726	-7.719	2	$E_{10}(e_2)$	26	2.936	-2.057	2	$E_{26}(e_2)$
11	-1.888	-6.881	2	$E_{11}(e_2)$	27	3.774	-1.219	2	$E_{27}(e_2)$
12	-1.490	-6.483	2	$E_{12}(e_2)$	28	4.172	-0.821	2	$E_{28}(e_2)$
13	-1.393	-6.386	2	$E_{13}(e_1)$	29	4.269	-0.724	2	$E_{29}(e_1)$
14	-1.249	-6.242	1	$E_{14}(a_2)$	30	4.413	-0.580	1	$E_{30}(a_2)$
15	-1.179	-6.172	1	$E_{15}(b_2)$	31	4.483	-0.510	1	$E_{31}(b_2)$
16	-1.162	-6.155	1	$E_{16}(b_1)$	32	4.500	-0.493	1	$E_{32}(b_1)$

Таблица 2. Энергетический спектр фуллера C_{24} с группой симметрии D_{6d} : значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы D_{6d} , к которым они относятся

№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$	№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$
1	-4.961	-9.954	1	$E_1(a_1)$	15	0.701	-4.292	1	$E_{17}(a_1)$
2	-4.562	-9.555	2	$E_2(e_1)$	16	1.100	-3.893	2	$E_{18}(e_1)$
3	-4.418	-9.411	1	$E_3(b_2)$	17	1.244	-3.749	1	$E_{19}(b_2)$
4	-3.830	-8.823	2	$E_4(e_2)$	18	1.832	-3.161	2	$E_{20}(e_2)$
5	-3.740	-8.733	1	$E_6(a_1)$	19	1.922	-3.071	1	$E_{22}(a_1)$
6	-3.730	-8.723	2	$E_5(e_5)$	20	1.932	-3.061	2	$E_{21}(e_5)$
7	-3.194	-8.187	2	$E_7(e_1)$	21	2.468	-2.525	2	$E_{23}(e_1)$
8	-3.050	-8.043	2	$E_8(e_3)$	22	2.612	-2.381	2	$E_{24}(e_3)$
9	-2.680	-7.673	2	$E_{10}(e_4)$	23	2.982	-2.011	2	$E_{26}(e_4)$
10	-1.883	-6.876	2	$E_{11}(e_2)$	24	3.779	-1.214	2	$E_{27}(e_2)$
11	-1.462	-6.455	2	$E_{12}(e_4)$	25	4.200	-0.793	2	$E_{28}(e_4)$
12	-1.308	-6.301	2	$E_{13}(e_5)$	26	4.354	-0.639	2	$E_{29}(e_5)$
13	-1.144	-6.137	1	$E_{14}(b_2)$	27	4.518	-0.475	1	$E_{30}(b_2)$
14	-1.142	-6.135	2	$E_{15}(e_3)$	28	4.520	-0.473	2	$E_{31}(e_3)$

Таблица 3. Энергетический спектр фуллера C_{24} с группой симметрии O_h : значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы O_h , к которым они относятся

№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$	№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$
1	-4.889	-9.882	1	$E_1(a_{1g})$	11	0.773	-4.220	1	$E_{11}(a_{1g})$
2	-4.479	-9.472	3	$E_2(t_{1u})$	12	1.183	-3.810	3	$E_{12}(t_{1u})$
3	-3.947	-8.940	2	$E_3(e_g)$	13	1.715	-3.278	2	$E_{13}(e_g)$
4	-3.611	-8.604	3	$E_4(t_{2g})$	14	2.051	-2.942	3	$E_{14}(t_{2g})$
5	-3.200	-8.193	3	$E_5(t_{2u})$	15	2.462	-2.531	3	$E_{15}(t_{2u})$
6	-2.462	-7.455	3	$E_6(t_{1u})$	16	3.200	-1.793	3	$E_{16}(t_{1u})$
7	-2.051	-7.044	3	$E_7(t_{1g})$	17	3.611	-1.382	3	$E_{17}(t_{1g})$
8	-1.715	-6.708	2	$E_8(e_g)$	18	3.947	-1.046	2	$E_{18}(e_g)$
9	-1.183	-6.176	3	$E_9(t_{2u})$	19	4.479	-0.514	3	$E_{19}(t_{2u})$
10	-0.773	-5.766	1	$E_{10}(a_{2g})$	20	4.889	-0.104	1	$E_{20}(a_{2g})$

Таблица 4. Разрешенные переходы в энергетическом спектре фуллерена C_{24} с группой симметрии D_6

№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$
1	E ₁₇ –E ₁₄	2.019	37	E ₂₅ –E ₁₁	4.552	73	E ₂₇ –E ₁₁	5.662	109	E ₂₇ –E ₉	6.772
2	E ₁₇ –E ₁₃	2.163	38	E ₂₀ –E ₁₀	4.599	74	E ₂₆ –E ₁₀	5.662	110	E ₂₁ –E ₁	6.830
3	E ₁₈ –E ₁₄	2.417	39	E ₂₁ –E ₁₀	4.665	75	E ₂₈ –E ₁₂	5.662	111	E ₂₈ –E ₁₀	6.898
4	E ₁₈ –E ₁₃	2.561	40	E ₂₆ –E ₁₁	4.823	76	E ₃₁ –E ₁₆	5.644	112	E ₂₇ –E ₈	6.899
5	E ₁₈ –E ₁₂	2.658	41	E ₁₈ –E ₆	4.823	77	E ₃₂ –E ₁₅	5.680	113	E ₂₃ –E ₃	6.907
6	E ₁₉ –E ₁₃	2.667	42	E ₂₀ –E ₉	4.870	78	E ₂₁ –E ₄	5.728	114	E ₂₇ –E ₇	6.918
7	E ₂₀ –E ₁₆	3.034	43	E ₁₈ –E ₅	4.891	79	E ₂₂ –E ₅	5.730	115	E ₂₉ –E ₁₀	6.995
8	E ₂₀ –E ₁₅	3.052	44	E ₁₉ –E ₆	4.930	80	E ₂₉ –E ₁₂	5.759	116	E ₂₃ –E ₂	7.013
9	E ₁₈ –E ₁₁	3.055	45	E ₂₇ –E ₁₆	4.936	81	E ₁₉ –E ₂	5.769	117	E ₂₈ –E ₉	7.169
10	E ₂₁ –E ₁₄	3.188	46	E ₂₇ –E ₁₅	4.954	82	E ₂₅ –E ₈	5.790	118	E ₃₁ –E ₁₀	7.209
11	E ₂₂ –E ₁₄	3.256	47	E ₁₈ –E ₄	4.957	83	E ₃₀ –E ₁₃	5.806	119	E ₃₂ –E ₁₀	7.227
12	E ₂₀ –E ₁₃	3.266	48	E ₁₉ –E ₅	4.998	84	E ₂₆ –E ₉	5.933	120	E ₂₈ –E ₈	7.297
13	E ₂₁ –E ₁₃	3.332	49	E ₂₀ –E ₈	4.998	85	E ₃₁ –E ₁₂	5.973	121	E ₂₃ –E ₁	7.410
14	E ₂₀ –E ₁₂	3.363	50	E ₂₀ –E ₇	5.016	86	E ₃₂ –E ₁₂	5.991	122	E ₂₉ –E ₇	7.412
15	E ₂₂ –E ₁₃	3.400	51	E ₂₁ –E ₇	5.082	87	E ₂₈ –E ₁₁	6.059	123	E ₂₆ –E ₂	7.430
16	E ₂₁ –E ₁₂	3.429	52	E ₂₂ –E ₇	5.150	88	E ₁₈ –E ₁	6.059	124	E ₃₁ –E ₉	7.480
17	E ₂₄ –E ₁₆	3.699	53	E ₁₇ –E ₃	5.158	89	E ₂₆ –E ₈	6.061	125	E ₂₇ –E ₅	7.498
18	E ₂₀ –E ₁₁	3.760	54	E ₂₇ –E ₁₃	5.167	90	E ₂₆ –E ₇	6.079	126	E ₃₀ –E ₇	7.556
19	E ₂₃ –E ₁₄	3.768	55	E ₂₃ –E ₁₀	5.245	91	E ₂₉ –E ₁₁	6.157	127	E ₂₇ –E ₄	7.564
20	E ₂₁ –E ₁₁	3.826	56	E ₂₄ –E ₁₀	5.263	92	E ₁₉ –E ₁	6.166	128	E ₃₂ –E ₈	7.625
21	E ₂₅ –E ₁₅	3.844	57	E ₁₇ –E ₂	5.265	93	E ₂₃ –E ₆	6.174	129	E ₂₈ –E ₅	7.895
22	E ₁₈ –E ₁₀	3.894	58	E ₂₇ –E ₁₂	5.265	94	E ₂₃ –E ₅	6.242	130	E ₂₉ –E ₆	7.924
23	E ₂₃ –E ₁₃	3.912	59	E ₂₈ –E ₁₆	5.333	95	E ₂₃ –E ₄	6.308	131	E ₂₈ –E ₄	7.961
24	E ₁₇ –E ₇	3.914	60	E ₂₈ –E ₁₅	5.351	96	E ₂₈ –E ₇	7.315	132	E ₂₉ –E ₅	7.992
25	E ₂₃ –E ₁₂	4.009	61	E ₂₅ –E ₁₀	5.391	97	E ₂₄ –E ₄	6.326	133	E ₂₉ –E ₄	8.058
26	E ₂₄ –E ₁₂	4.027	62	E ₂₉ –E ₁₄	5.518	98	E ₂₁ –E ₃	6.326	134	E ₃₀ –E ₆	8.068
27	E ₂₆ –E ₁₆	4.097	63	E ₂₄ –E ₉	5.534	99	E ₂₀ –E ₂	6.367	135	E ₃₀ –E ₅	8.136
28	E ₂₆ –E ₁₅	4.115	64	E ₁₈ –E ₃	5.555	100	E ₃₁ –E ₁₁	6.370	136	E ₂₇ –E ₂	8.269
29	E ₂₅ –E ₁₂	4.155	65	E ₂₈ –E ₁₃	5.565	101	E ₃₂ –E ₁₁	6.388	137	E ₃₁ –E ₄	8.272
30	E ₁₈ –E ₇	4.311	66	E ₂₁ –E ₆	5.594	102	E ₂₂ –E ₃	6.394	138	E ₃₂ –E ₄	8.290
31	E ₂₆ –E ₁₃	4.329	67	E ₂₀ –E ₅	5.596	103	E ₂₁ –E ₂	6.433	139	E ₂₉ –E ₃	8.657
32	E ₂₃ –E ₁₁	4.406	68	E ₂₁ –E ₅	5.662	104	E ₂₅ –E ₄	6.454	140	E ₂₈ –E ₂	8.666
33	E ₁₉ –E ₇	4.417	69	E ₂₃ –E ₇	5.662	105	E ₂₂ –E ₂	6.501	141	E ₂₉ –E ₂	8.763
34	E ₂₄ –E ₁₁	4.425	70	E ₂₀ –E ₄	5.662	106	E ₂₇ –E ₁₀	6.501	142	E ₃₀ –E ₂	8.907
35	E ₂₆ –E ₁₂	4.426	71	E ₁₈ –E ₂	5.662	107	E ₂₆ –E ₅	6.659	143	E ₂₉ –E ₁	9.161
36	E ₁₇ –E ₅	4.494	72	E ₂₉ –E ₁₃	5.662	108	E ₂₆ –E ₄	6.725	144	E ₃₀ –E ₁	9.305

Таблица 5. Разрешенные переходы в энергетическом спектре фуллерена C_{24} с группой симметрии D_{6d}

№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$
1	E ₁₇ –E ₁₄	1.845	20	E ₁₈ –E ₅	4.830	39	E ₂₉ –E ₁₂	5.817	58	E ₂₇ –E ₈	6.830
2	E ₁₈ –E ₁₃	2.407	21	E ₁₈ –E ₆	4.840	40	E ₃₀ –E ₁₃	5.826	59	E ₂₇ –E ₇	6.973
3	E ₁₉ –E ₁₃	2.552	22	E ₂₆ –E ₁₁	4.864	41	E ₃₁ –E ₁₂	5.982	60	E ₁₇ –E ₁₀	7.035
4	E ₂₀ –E ₁₅	2.975	23	E ₂₀ –E ₈	4.883	42	E ₂₆ –E ₈	6.032	61	E ₁₇ –E ₁₀	7.200
5	E ₁₈ –E ₁₁	2.982	24	E ₂₇ –E ₁₅	4.922	43	E ₁₈ –E ₁	6.061	62	E ₂₈ –E ₈	7.250
6	E ₂₂ –E ₁₄	3.066	25	E ₁₈ –E ₄	4.929	44	E ₂₈ –E ₁₁	6.083	63	E ₂₃ –E ₁	7.429
7	E ₂₁ –E ₁₄	3.076	26	E ₁₉ –E ₅	4.974	45	E ₂₃ –E ₅	6.198	64	E ₂₉ –E ₇	7.548
8	E ₂₀ –E ₁₂	3.294	27	E ₁₉ –E ₆	4.984	46	E ₁₉ –E ₁	6.206	65	E ₃₁ –E ₈	7.570
9	E ₂₁ –E ₁₂	3.394	28	E ₂₀ –E ₇	5.026	47	E ₂₃ –E ₆	6.210	66	E ₂₈ –E ₅	7.930
10	E ₂₄ –E ₁₅	3.754	29	E ₂₂ –E ₇	5.116	48	E ₂₃ –E ₄	6.298	67	E ₂₈ –E ₄	8.030
11	E ₂₃ –E ₁₃	3.776	30	E ₁₇ –E ₃	5.118	49	E ₂₂ –E ₃	6.340	68	E ₃₀ –E ₅	8.248
12	E ₁₇ –E ₇	3.895	31	E ₂₇ –E ₁₂	5.241	50	E ₂₁ –E ₃	6.350	69	E ₃₀ –E ₆	8.258
13	E ₂₄ –E ₁₂	4.074	32	E ₁₇ –E ₂	5.263	51	E ₂₀ –E ₂	6.395	70	E ₂₇ –E ₂	8.342
14	E ₂₆ –E ₁₅	4.124	33	E ₂₄ –E ₁₀	5.292	52	E ₃₁ –E ₁₁	6.402	71	E ₃₁ –E ₄	8.349
15	E ₂₆ –E ₁₃	4.289	34	E ₂₈ –E ₁₅	5.342	53	E ₂₄ –E ₄	6.441	72	E ₂₉ –E ₃	8.772
16	E ₂₃ –E ₁₁	4.351	35	E ₂₉ –E ₁₄	5.498	54	E ₂₇ –E ₁₀	6.460	73	E ₂₉ –E ₂	8.917
17	E ₂₄ –E ₁₁	4.494	36	E ₂₈ –E ₁₃	5.507	55	E ₂₂ –E ₂	6.484	74	E ₃₀ –E ₁	9.479
18	E ₂₀ –E ₁₀	4.513	37	E ₂₄ –E ₈	5.662	56	E ₂₆ –E ₅	6.711			
19	E ₂₁ –E ₁₀	4.613	38	E ₃₁ –E ₁₅	5.662	57	E ₂₆ –E ₄	6.811			

Таблица 6. Разрешенные переходы в энергетическом спектре фуллера C_{24} с группой симметрии O_h

№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$
1	$E_{12}-E_8$	2.898	11	$E_{17}-E_9$	4.794	21	$E_{15}-E_4$	6.073	31	$E_{16}-E_4$	6.810
2	$E_{13}-E_9$	2.898	12	$E_{12}-E_4$	4.794	22	$E_{17}-E_6$	6.073	32	$E_{17}-E_5$	6.810
3	$E_{14}-E_9$	3.235	13	$E_{13}-E_5$	4.915	23	$E_{20}-E_9$	6.073	33	$E_{16}-E_3$	7.147
4	$E_{15}-E_{10}$	3.235	14	$E_{16}-E_8$	4.915	24	$E_{12}-E_1$	6.073	34	$E_{18}-E_5$	7.147
5	$E_{11}-E_6$	3.235	15	$E_{18}-E_9$	5.131	25	$E_{13}-E_2$	6.193	35	$E_{16}-E_1$	8.089
6	$E_{12}-E_7$	3.235	16	$E_{12}-E_3$	5.131	26	$E_{19}-E_8$	6.193	36	$E_{17}-E_2$	8.089
7	$E_{13}-E_6$	4.177	17	$E_{11}-E_2$	5.251	27	$E_{15}-E_3$	6.409	37	$E_{19}-E_4$	8.089
8	$E_{15}-E_8$	4.177	18	$E_{14}-E_5$	5.251	28	$E_{18}-E_6$	6.409	38	$E_{20}-E_5$	8.089
9	$E_{14}-E_6$	4.514	19	$E_{16}-E_7$	5.251	29	$E_{14}-E_2$	6.530	39	$E_{18}-E_2$	8.426
10	$E_{15}-E_7$	4.514	20	$E_{19}-E_{10}$	5.251	30	$E_{19}-E_7$	6.530	40	$E_{19}-E_3$	8.426

следующим образом:

$$\begin{aligned}
 & E_1(a_1) \rightarrow E_1(a_1), \quad E_2(e_1) \rightarrow E_2(e_1), \\
 & E_3(b_2) \rightarrow E_3(a_2), \quad E_4(e_2) \rightarrow E_4(e_2), \\
 & E_5(e_5) \rightarrow E_5(e_1), \quad E_6(a_1) \rightarrow E_6(a_1), \\
 & E_7(e_1) \rightarrow E_7(e_1), \quad E_8(e_3) \rightarrow \{E_8(b_2), E_9(b_1)\} \\
 & E_{10}(e_4) \rightarrow E_{10}(e_2), \quad E_{11}(e_2) \rightarrow E_{11}(e_2), \\
 & E_{12}(e_4) \rightarrow E_{12}(e_2), \quad E_{13}(e_5) \rightarrow E_{13}(e_1), \\
 & E_{14}(b_2) \rightarrow E_{14}(a_2), \quad E_{15}(e_3) \rightarrow \{E_{15}(b_2), E_{16}(b_1)\}, \\
 & E_{17}(a_1) \rightarrow E_{17}(a_1), \quad E_{18}(e_1) \rightarrow E_{18}(e_1), \\
 & E_{19}(b_2) \rightarrow E_{19}(a_2), \quad E_{20}(e_2) \rightarrow E_{20}(e_2), \\
 & E_{21}(e_5) \rightarrow E_{21}(e_1), \quad E_{22}(a_1) \rightarrow E_{22}(a_1), \\
 & E_{23}(e_1) \rightarrow E_{23}(e_1), \quad E_{24}(e_3) \rightarrow \{E_{24}(b_2), E_{25}(b_1)\}, \\
 & E_{26}(e_4) \rightarrow E_{26}(e_2), \quad E_{27}(e_2) \rightarrow E_{27}(e_2), \\
 & E_{28}(e_4) \rightarrow E_{28}(e_2), \quad E_{29}(e_5) \rightarrow E_{29}(e_1), \\
 & E_{30}(b_2) \rightarrow E_{30}(a_2), \quad E_{31}(e_3) \rightarrow \{E_{31}(b_2), E_{32}(b_1)\}.
 \end{aligned}
 \tag{21}$$

Из (21) следует, что при понижении симметрии фуллера C_{24} от D_{6d} до D_6 энергетические уровни $E_8(e_3)$, $E_{15}(e_3)$, $E_{24}(e_3)$ и $E_{31}(e_3)$, расщепляются.

Найдем теперь какие переходы у молекулы C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} и O_h разрешены, а какие запрещены с точки зрения симметрии. Используя теорию групп [34,35] можно показать, что в энергетическом спектре молекулы разрешены следующие переходы.

Для молекулы с группой симметрии D_6 :

$$\begin{aligned}
 & a_1 \leftrightarrow a_2, \quad b_1 \leftrightarrow b_2, \quad e_1 \leftrightarrow e_1, \quad e_2 \leftrightarrow e_2; \\
 & e_1 \leftrightarrow \{a_1, a_2, e_2\}, \quad e_2 \leftrightarrow \{b_1, b_2\},
 \end{aligned}
 \tag{22}$$

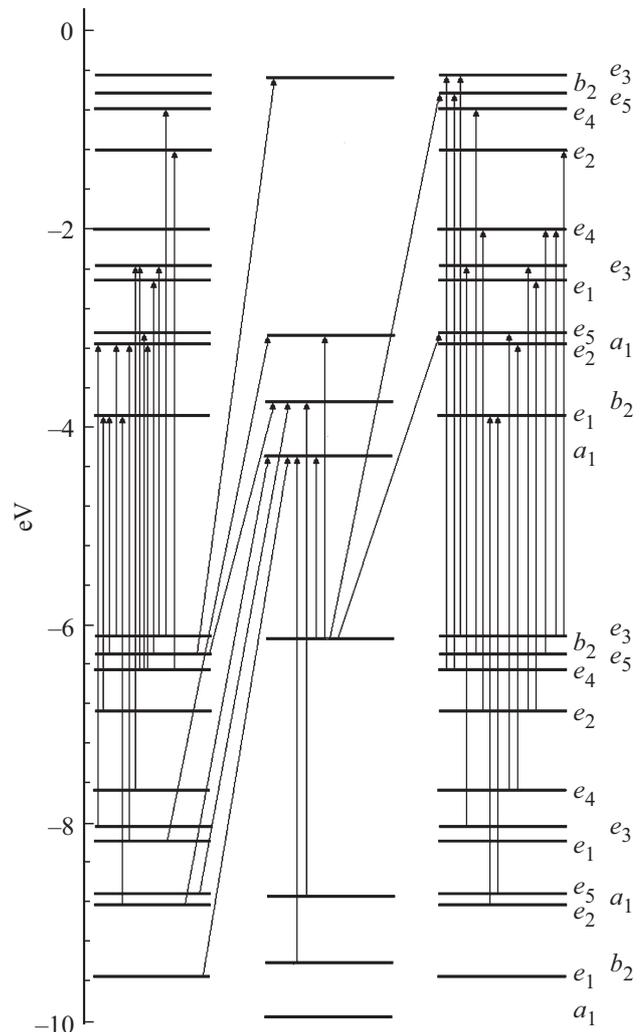


Рис. 4. Энергетический спектр фуллера C_{24} с группой симметрии D_{6d} .

Для молекулы с группой симметрии D_{6d}

$$\begin{aligned}
 & a_1 \leftrightarrow b_2, \quad a_2 \leftrightarrow b_1, \quad e_1 \leftrightarrow e_5, \quad e_2 \leftrightarrow e_4, \quad e_3 \leftrightarrow e_3; \\
 & e_1 \leftrightarrow \{a_1, a_2, e_2\}, \quad e_3 \leftrightarrow \{e_2, e_4\}, \quad e_5 \leftrightarrow \{b_1, b_2, e_4\},
 \end{aligned}
 \tag{23}$$

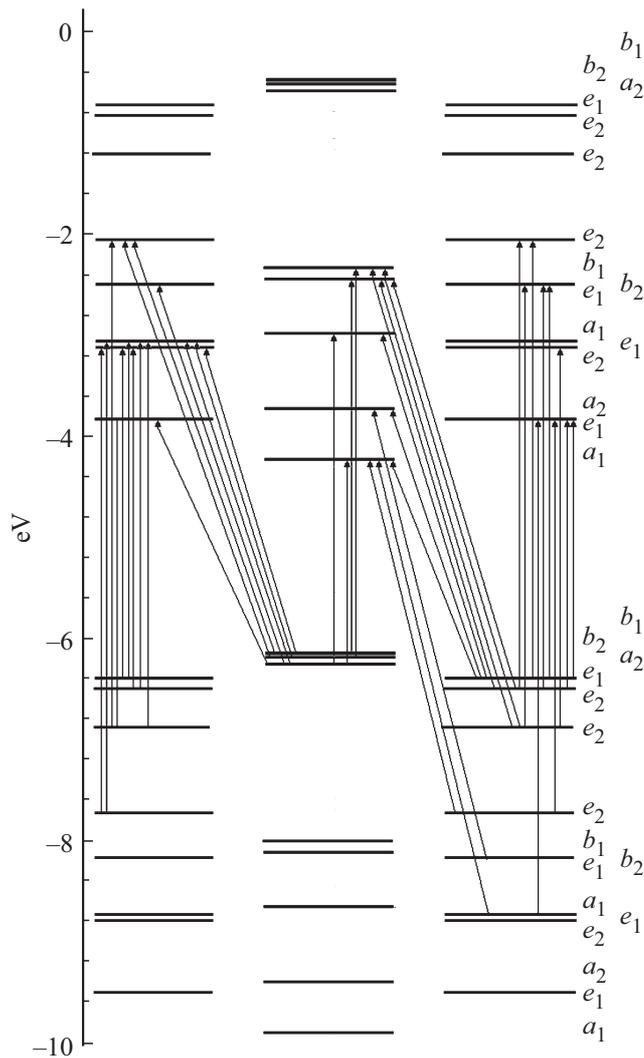


Рис. 5. Энергетический спектр фуллерена C_{24} с группой симметрии D_6 .

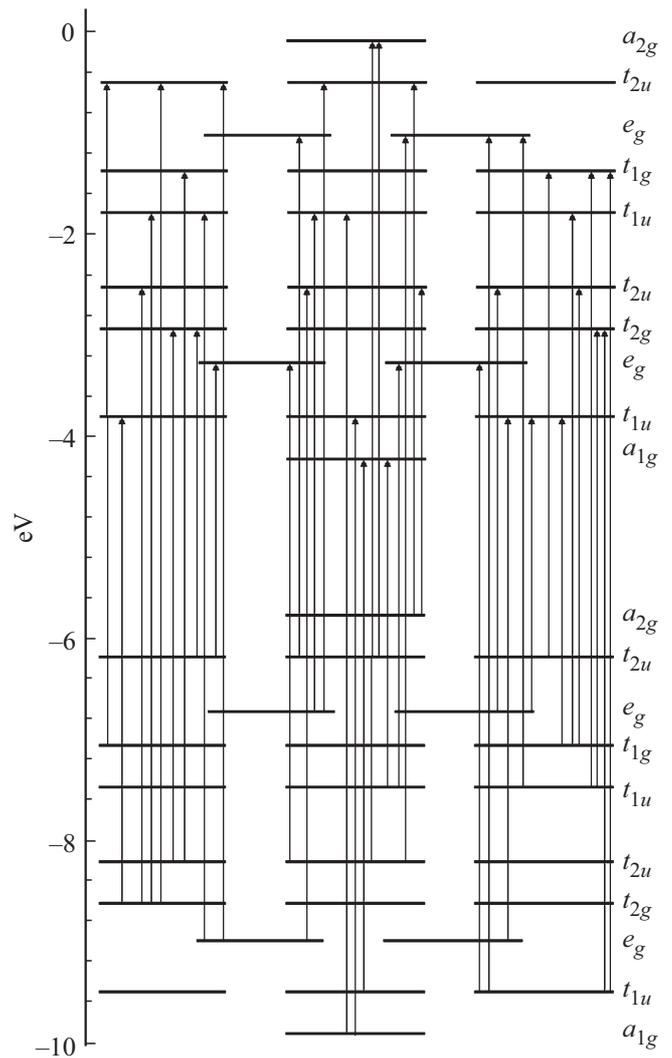


Рис. 6. Энергетический спектр фуллерена C_{24} с группой симметрии O_h .

Для молекулы с группой симметрии O_h :

$$\begin{aligned}
 t_{1g} &\leftrightarrow \{a_{1u}, e_u, t_{1u}, t_{2u}\}, & t_{2g} &\leftrightarrow \{a_{2u}, e_u, t_{1u}, t_{2u}\}, \\
 t_{1u} &\leftrightarrow \{a_{1g}, e_g, t_{1g}, t_{2g}\}, & t_{2u} &\leftrightarrow \{a_{2g}, e_g, t_{1g}, t_{2g}\}. \quad (24)
 \end{aligned}$$

Остальные переходы являются запрещенными.

Из энергетических спектров молекулы C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} , O_h , представленных на рис. 4–6, и соотношений (22)–(24) следует, что у фуллерена C_{24} с группой симметрии D_6 имеется 144 разрешенных переходов, у фуллерена C_{24} с группой симметрии D_{6d} имеется 74 разрешенных переходов, а у фуллерена C_{24} с группой симметрии O_h имеется 40 разрешенных переходов. На рис. 4 и 5 приведены разрешенные переходы для фуллерена C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} в видимой и ультрафиолетовой областях, а на рис. 6 приведены все разрешенные переходы для фуллерена C_{24} с группой симметрии O_h .

4. Заключение

Исследование фуллерена C_{24} с группами симметрии D_6 , D_{6d} , O_h в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций показало, что в этих молекулах нижняя подзона Хаббарда полностью занята, в то время как верхняя подзона Хаббарда свободна. Кроме того, данные исследования показали, что при понижении симметрии фуллерена C_{24} от D_{6d} до D_6 происходит расщепление четырех энергетических уровня: двух энергетических уровней $E_8(e_3)$, $E_{15}(e_3)$, расположенных в нижней подзоне Хаббарда, и двух энергетических уровней $E_{24}(e_3)$, $E_{31}(e_3)$, расположенных в верхней подзоне Хаббарда.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] О.Е. Глухова, А.И. Жбанов, А.Г. Резков. ФТТ **47**, 376 (2005).
- [2] K.S. Grishakov, K.P. Katin, M.M. Maslov. *Diamond Rel. Mater.* **84**, 112 (2018).
- [3] G. von Helden, M.T. Hsu, N.G. Gotts, P.R. Kemper, M.T. Bowers. *Chem. Phys. Lett.* **204**, 15 (1993).
- [4] M.N. Akhtar, B. Ahmad, S. Ahmad. *Nuclear Instrumen. Meth. Phys. Res. B* **207**, 333 (2003).
- [5] H.S. Wu, J.F. Jia. *Chinese J. Struct. Chem.* **23**, 580 (2004).
- [6] F. Jensen. *J. Chem. Phys.* **108**, 3213 (1998).
- [7] N.N. Breslavskaya, A.A. Levin, A.L. Buchachenko. *Russ. Chem. Bull.* **53**, 18 (2004).
- [8] T. Oku, M. Kuno, H. Kitahara, I. Navita. *Int. J. Inorg. Mater.* **3**, 597 (2001).
- [9] W. An, N. Shao, S. Bulusu, X.C. Zeng. *J. Chem. Phys.* **128**, 084301 (2008).
- [10] V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov. *J. Phys. Conf. Ser.* **447**, 012018 (2018).
- [11] Y. Zhang, X. Chem. Phys. **505**, 26 (2018).
- [12] R.A. Harris, L.M. Falicov. *J. Chem. Phys.* **51**, 5034 (1969).
- [13] А.В. Силантьев. ЖЭТФ **148**, 749 (2015).
- [14] J. Hubbard. *Proc. Roy. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [15] Г.С. Иванченко, Н.Г. Лебедев. ФТТ **49**, 183 (2007).
- [16] А.В. Силантьев. Изв. вуз. Физика **60**, 6, 50 (2017).
- [17] А.В. Силантьев. ФТТ **61**, 2, 395 (2019).
- [18] А.В. Силантьев. Изв. вуз. Физика **62**, 6, 60 (2019).
- [19] А.В. Силантьев. Изв. вуз. Физика **57**, 11, 37 (2014).
- [20] А.В. Силантьев. Изв. вуз. Поволжский регион. Физико-математические науки. **1**, 168 (2015).
- [21] А.В. Силантьев, Изв. вуз. Физика **56**, 2, 70 (2013).
- [22] И.Е. Каресев, В.П. Бубнов, А.И. Мурзашев, Б.В. Лобанов. ФТТ **57**, 2254 (2015).
- [23] N. Melnikova, A. Murzashev, T. Nazarova, E. Shadrin, A. Ponomarev. *Fullerenes, Nanotub. Carbon Nanostruct.* **25**, 379 (2017).
- [24] R.R. Nigmatullin. *Physica A* **116**, 612 (1982).
- [25] M.K. Al-Sugheir, H.B. Ghassib, R.R. Nigmatullin. *Int. J. Theor. Phys.* **40**, 1033 (2001).
- [26] M.K. Al-Sugheir, H.B. Ghassib. *Int. J. Theor. Phys.* **41**, 705 (2002).
- [27] M.K. Al-Sugheir. *Int. J. Theor. Phys.* **43**, 1527 (2004).
- [28] А.А. Хамзин, А.С. Никитин, А.С. Ситдииков. *Ядерная физика* **78**, 909 (2015).
- [29] G. Zimmerman, A.L. Smith, *Chemical Properties of the Fullerenes*. Drexel university, Philadelphia (1993).
- [30] E. Menendez-Proupin, A. Delgado, A.L. Montero-Alejo, J.M. Garcia de la Vega. *Chem. Phys. Lett.* **593**, 72 (2014).
- [31] P.F. Coheur, M. Carleer, R. Colin. *J. Phys. B* **29**, 4987 (1996).
- [32] J.P. Hare, H.W. Kroto, R. Taylor. *Chem. Phys. Lett.* **177**, 394 (1991).
- [33] С.В. Тябликов. *Методы квантовой теории магнетизма*. Наука, М. (1975).
- [34] И.Г. Каплан. *Симметрия многоэлектронных систем*. Наука, М. (1969).
- [35] М. Хамермеш. *Теория групп и ее применение к физическим проблемам*. Мир, М. (1966).
- [36] В.В. Покропивный, А.Л. Ивановский. *Успехи химии* **77**, 899 (2008).

Редактор Т.Н. Василевская