

17,09

Энергетический спектр и спектр оптического поглощения эндоэдральных фуллеренов $\text{Lu}_3\text{N@C}_{80}$ и $\text{Y}_3\text{N@C}_{80}$ в модели Хаббарда

© А.В. Силантьев

Марийский государственный университет,
Йошкар-Ола, Россия

E-mail: kvvant@rambler.ru

Поступила в редакцию 27 сентября 2021 г.

В окончательной редакции 27 сентября 2021 г.

Принята к публикации 12 октября 2021 г.

В рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций получены в аналитическом виде антикоммутирующие функции Грина и энергетические спектры фуллерена C_{80} , эндоэдральных фуллеренов $\text{Lu}_3\text{N@C}_{80}$ и $\text{Y}_3\text{N@C}_{80}$ с группой симметрии I_h . Используя методы теории групп проведена классификация энергетических состояний, а также определены разрешенные переходы в энергетических спектрах молекул C_{80} , $\text{Lu}_3\text{N@C}_{80}$ и $\text{Y}_3\text{N@C}_{80}$. На основе энергетических спектров предложена интерпретация наблюдаемых экспериментально полос оптического поглощения эндоэдральных фуллеренов $\text{Lu}_3\text{N@C}_{80}$ и $\text{Y}_3\text{N@C}_{80}$.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, наносистемы, фуллерен C_{80} , эндоэдральный фуллерен $\text{Lu}_3\text{N@C}_{80}$, эндоэдральный фуллерен $\text{Y}_3\text{N@C}_{80}$.

DOI: 10.21883/FTT.2022.02.51942.213

1. Введение

После открытия в 1985 г. фуллеренов [1] началось интенсивное исследование как физических, так и химических свойств этих молекул. Исследования целого ряда фуллеренов показали, что те фуллерены, которые подчиняются правилу изолированных пентагонов [2], являются наиболее устойчивыми. Кроме того, эти исследования также показали, что некоторые фуллерены, подчиняющиеся правилу изолированных пентагонов, являются неустойчивыми молекулами, которые после внедрения внутрь углеродной оболочки атомов или молекул становятся устойчивыми. Одним из таких фуллеренов является фуллерен C_{80} с группой симметрии I_h , который в виде пустой (то есть не содержащей внутри атомов или молекул) молекулы выделить не удастся. Исследования эндоэдральных фуллеренов M@C_{80} с группой симметрии I_h , например, $\text{Tm}_3\text{@C}_{80}$ [3], $\text{Dy}_3\text{N@C}_{80}$ [4], $\text{Lu}_3\text{N@C}_{80}$ [5], $\text{Y}_3\text{N@C}_{80}$ [6], показали, что данные молекулы являются устойчивыми.

Фуллерен C_{80} состоит из 12 пентагонов, 30 гексагонов и содержит 80 атомов углерода, из которых можно построить 31924 изомера этого фуллерена. Исследования показали, что только семь изомеров фуллерена C_{80} имеют изолированные пентагоны: $\text{C}_{80}(I_h)$, $\text{C}_{80}(C_{2v})$, $\text{C}_{80}(C_{2v}')$, $\text{C}_{80}(D_{5h})$, $\text{C}_{80}(D_{5d})$, $\text{C}_{80}(D_2)$, $\text{C}_{80}(D_3)$ [7]. Среди этих изомеров особое внимание привлекает фуллерен C_{80} с группой симметрии I_h , который изображен на рис. 1. Этот изомер фуллерена C_{80} , как и фуллерен C_{60} , имеет самую высокую симметрию усеченного икосаэдра I_h . Из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 1, видно, что фуллерен C_{80} с группой симметрии I_h содержит две группы неэквивалентных связей, при чем

одну группу эквивалентных связей составляют связи, расположенные на границе гексагона и пентагона, а другую группу эквивалентных связей составляют связи, расположенные на границе двух гексагонов. Кроме того, из диаграммы Шлегеля видно, что у этого изомера фуллерена C_{80} имеется две группы неэквивалентных атомов углерода, при чем одну группу эквивалентных атомов составляют атомы, которые находятся в вершинах пентагона, а другую группу эквивалентных атомов составляют атомы, которые находятся в вершинах сочленения трех гексагонов. Отметим, что в фуллерене C_{60} все атомы углерода эквивалентны, а связи, как и в фуллерене C_{80} , делятся на два класса. Исследованию свойств фуллерена C_{80} посвящено довольно много работ [3–6,8–10].

Для описания электронных свойств углеродных фуллеренов и нанотрубок широко используется модель Хаббарда [11]. В рамках этой модели были изучены электронные и оптические свойства различных углеродных наносистем [12–20]. Так, например, в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций были получены энергетические спектры и спектры оптического поглощения фуллерена C_{20} с группами симметрии I_h , D_{5d} и D_{3d} [12], фуллерена C_{24} с группами симметрии O_h , D_6 и D_{6d} [13], фуллерена C_{26} с группой симметрии D_{3h} [14], фуллерена C_{28} с группой симметрии T_d [15], фуллерена C_{36} с группой симметрии D_{6h} [16], фуллерена C_{60} [17] и фуллерена C_{70} [18], а в работе [19] были исследованы электронные свойства углеродных нанотрубок. Полученные в работах [17,18] результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Целью настоящей работы является исследование энергетических спектров эндоэдральных фуллеренов

где

$$\begin{aligned}
 Q_{1,1} &= -\frac{e_1}{120\sqrt{t^2 + 3t_1^2}}, \\
 Q_{1,m} &= -\frac{1}{20} \left[4e_m^5 + 18t_1^4 e_m - 9te_m^4 + 36t_1^2 te_m^2 - 2t^2 e_m^3 \right. \\
 &\quad - 27tt_1^4 - 18t_1^2 e_m^3 - 10t^2 t_1^2 e_m + 8t^3 e_m^2 \left. \right] \left[8t^4 e_m - 24t^3 e_m^2 \right. \\
 &\quad + 4t^3 t_1^2 + 4t^2 e_m^3 + 20t^2 t_1^2 e_m + 15te_m^4 - 54tt_1^2 e_m^2 + 27tt_1^4 \\
 &\quad \left. - 6e_m^5 + 24t_1^2 e_m^3 - 18t_1^4 e_m \right]^{-1}, \quad m = 2, 5, 8, 9, 15, 20; \\
 Q_{1,m} &= -\frac{2te_m^2 + 3t^2 e_m - tt_1^2 + 6t_1^2 e_m - 3e_m^3}{12(2t^3 + tt_1^2 - 6(t^2 + t_1^2)e_m - 3te_m^2 + 4e_m^3)}, \\
 &\quad m = 3, 7, 13, 17; \\
 Q_{1,m} &= -\frac{2e_m^2 - 3t_1^2 + te_m}{15(t^2 + 3t_1^2 - 2te_m - 3e_m^2)}, \\
 &\quad m = 4, 6, 11, 12, 18, 19; \\
 Q_{1,10} &= Q_{1,16} = \frac{2}{15}, \\
 Q_{1,14} &= \frac{e_{14}}{120\sqrt{t^2 + 3t_1^2}}, \\
 Q_{2,1} &= 3Q_{1,14}, \\
 Q_{2,m} &= -\frac{3}{10} (e_m - 2t)(e_m^4 - te_m^3 - 3(t_1^2 + t^2)e_m^2 + 2t^3 e_m \\
 &\quad + 3tt_1^2 e_m + t^2 t_1^2) \left[8t^4 e_m - 24t^3 e_m^2 + 4t^3 t_1^2 \right. \\
 &\quad + 4t^2 e_m^3 + 20t^2 t_1^2 e_m + 15te_m^4 - 54tt_1^2 e_m^2 + 27tt_1^4 \\
 &\quad \left. - 6e_m^5 + 24t_1^2 e_m^3 - 18t_1^4 e_m \right]^{-1}, \quad m = 2, 5, 8, 9, 15, 20; \\
 Q_{2,m} &= \frac{(e_m - 2t)(-t^2 + e_m^2 + te_m)}{4(2t^3 + tt_1^2 - 6(t^2 + t_1^2)e_m - 3te_m^2 + 4e_m^3)}, \\
 &\quad m = 3, 7, 13, 17; \\
 Q_{2,m} &= -\frac{-t^2 + e_m^2 + te_m}{5(t^2 + 3t_1^2 - 2te_m - 3e_m^2)}, \\
 &\quad m = 4, 6, 11, 12, 18, 19; \\
 Q_{2,10} &= Q_{2,16} = 0, \\
 Q_{2,14} &= 3Q_{1,14}, \\
 e_1 &= t - \sqrt{t^2 + 3t_1^2}, \\
 e_2 &= x_1, \\
 e_3 &= \frac{1}{4} \left(t - (9t^2 + 8t_1^2 + 4z)^{1/2} \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{2(9t^2 + 8t_1^2 - 2z - t(9t^2 + 8t_1^2 + 4z)^{1/2}) \right. \\
 &\quad \left. - 4((z - t_1^2 - t^2)^2 - 28t^2 t_1^2)^{1/2} \right),
 \end{aligned}$$

(4)

$$\begin{aligned}
 e_4 &= -\frac{2}{3} \sqrt{4t^2 + 9t_1^2} \cos\left(\frac{\varphi_2}{3}\right) - \frac{t}{3}, \\
 e_5 &= x_2, \\
 e_6 &= -\frac{2}{3} \sqrt{4t^2 + 9t_1^2} \cos\left(\frac{\varphi_1}{3}\right) - \frac{t}{3}, \\
 e_7 &= \frac{1}{4} \left(t + (9t^2 + 8t_1^2 + 4z)^{1/2} \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{2(9t^2 + 8t_1^2 - 2z + t(9t^2 + 8t_1^2 + 4z)^{1/2}) \right. \\
 &\quad \left. + 4((z - t_1^2 - t^2)^2 - 28t^2 t_1^2)^{1/2} \right), \\
 e_8 &= x_3, \\
 e_9 &= x_4, \\
 e_{10} &= (-1 + \sqrt{5})t/2, \\
 e_{11} &= \frac{2}{3} \sqrt{4t^2 + 9t_1^2} \cos\left(\frac{\varphi_1}{3} + \frac{\pi}{3}\right) - \frac{t}{3}, \\
 e_{12} &= \frac{2}{3} \sqrt{4t^2 + 9t_1^2} \cos\left(\frac{\varphi_2}{3} + \frac{\pi}{3}\right) - \frac{t}{3}, \\
 e_{13} &= \frac{1}{4} \left(t + (9t^2 + 8t_1^2 + 4z)^{1/2} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{2(9t^2 + 8t_1^2 - 2z + t(9t^2 + 8t_1^2 + 4z)^{1/2}) \right. \\
 &\quad \left. + 4((z - t_1^2 - t^2)^2 - 28t^2 t_1^2)^{1/2} \right), \\
 e_{14} &= t + \sqrt{t^2 + 3t_1^2}, \\
 e_{15} &= x_5, \\
 e_{16} &= -(1 + \sqrt{5})t/2, \\
 e_{17} &= \frac{1}{4} \left(t - (9t^2 + 8t_1^2 + 4z)^{1/2} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{2(9t^2 + 8t_1^2 - 2z - t(9t^2 + 8t_1^2 + 4z)^{1/2}) \right. \\
 &\quad \left. - 4((z - t_1^2 - t^2)^2 - 28t^2 t_1^2)^{1/2} \right), \\
 e_{18} &= \frac{2}{3} \sqrt{4t^2 + 9t_1^2} \sin\left(\frac{\varphi_2}{3} + \frac{\pi}{6}\right) - \frac{t}{3}, \\
 e_{19} &= \frac{2}{3} \sqrt{4t^2 + 9t_1^2} \cos\left(\frac{\varphi_1}{3} - \frac{\pi}{3}\right) - \frac{t}{3}, \\
 e_{20} &= x_6, \\
 z &= \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{3t_1^4 + 35t^2 t_1^2 + 5t^4} \cos\left(\frac{\varphi_3}{3}\right), \\
 \varphi_1 &= \arccos\left(\frac{t(11t^2 + 54t_1^2)}{2(4t^2 + 9t_1^2)^{3/2}}\right), \\
 \varphi_2 &= \arccos\left(\frac{t(11t^2 - 54t_1^2)}{2(4t^2 + 9t_1^2)^{3/2}}\right), \\
 \varphi_3 &= \arccos\left(\frac{3^{3/2} t_1^2 (29t^4 - t_1^4 + 25t^2 t_1^2)}{(5t^4 + 35t^2 t_1^2 + 3t_1^4)^{3/2}}\right).
 \end{aligned}$$

(5)

Таблица 1. Энергетический спектр фуллерена Lu₃N@C₈₀ с группой симметрии I_h: значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы I_h, к которым они относятся

№	<i>e_j</i> , eV	<i>E_j</i> , eV	<i>g_j</i>	<i>E</i> (Γ _{<i>j</i>})	№	<i>e_j</i> , eV	<i>E_j</i> , eV	<i>g_j</i>	<i>E</i> (Γ _{<i>j</i>})
1	-4.993	-9.986	1	<i>E</i> ₁ (<i>a_g</i>)	21	0.669	-4.324	1	<i>E</i> ₂₁ (<i>a_g</i>)
2	-4.861	-9.854	3	<i>E</i> ₂ (<i>t_{1u}</i>)	22	0.801	-4.192	3	<i>E</i> ₂₂ (<i>t_{1u}</i>)
3	-4.612	-9.605	5	<i>E</i> ₃ (<i>h_g</i>)	23	1.050	-3.943	5	<i>E</i> ₂₃ (<i>h_g</i>)
4	-4.320	-9.313	3	<i>E</i> ₅ (<i>t_{2u}</i>)	24	1.342	-3.651	3	<i>E</i> ₂₅ (<i>t_{2u}</i>)
5	-4.218	-9.211	4	<i>E</i> ₄ (<i>g_u</i>)	25	1.444	-3.549	4	<i>E</i> ₂₄ (<i>g_u</i>)
6	-3.881	-8.874	5	<i>E</i> ₇ (<i>h_g</i>)	26	1.781	-3.212	5	<i>E</i> ₂₇ (<i>h_g</i>)
7	-3.833	-8.826	4	<i>E</i> ₆ (<i>g_g</i>)	27	1.829	-3.164	4	<i>E</i> ₂₆ (<i>g_g</i>)
8	-3.562	-8.555	3	<i>E</i> ₈ (<i>t_{2u}</i>)	28	2.100	-2.893	3	<i>E</i> ₂₈ (<i>t_{2u}</i>)
9	-3.547	-8.540	3	<i>E</i> ₉ (<i>t_{1u}</i>)	29	2.115	-2.878	3	<i>E</i> ₂₉ (<i>t_{1u}</i>)
10	-3.272	-8.265	5+3	<i>E</i> _{10,1} (<i>h_u</i>), <i>E</i> _{10,2} (<i>t_{1g}</i>)	30	2.390	-2.603	5+3	<i>E</i> _{30,1} (<i>h_u</i>), <i>E</i> _{30,2} (<i>t_{1g}</i>)
11	-3.028	-8.021	4	<i>E</i> ₁₁ (<i>g_g</i>)	31	2.634	-2.359	4	<i>E</i> ₃₁ (<i>g_g</i>)
12	-2.316	-7.309	4	<i>E</i> ₁₂ (<i>g_u</i>)	32	3.346	-1.647	4	<i>E</i> ₃₂ (<i>g_u</i>)
13	-2.107	-7.100	5	<i>E</i> ₁₃ (<i>h_g</i>)	33	3.555	-1.438	5	<i>E</i> ₃₃ (<i>h_g</i>)
14	-2.097	-7.090	1	<i>E</i> ₁₄ (<i>a_g</i>)	34	3.565	-1.428	1	<i>E</i> ₃₄ (<i>a_g</i>)
15	-1.953	-6.946	3	<i>E</i> ₁₅ (<i>t_{1u}</i>)	35	3.709	-1.284	3	<i>E</i> ₃₅ (<i>t_{1u}</i>)
16	-1.676	-6.669	5+3	<i>E</i> _{16,1} (<i>h_u</i>), <i>E</i> _{16,2} (<i>t_{2g}</i>)	36	3.986	-1.007	5+3	<i>E</i> _{36,1} (<i>h_u</i>), <i>E</i> _{36,2} (<i>t_{2g}</i>)
17	-1.437	-6.430	5	<i>E</i> ₁₇ (<i>h_g</i>)	37	4.225	-0.768	5	<i>E</i> ₃₇ (<i>h_g</i>)
18	-1.246	-6.239	4	<i>E</i> ₁₈ (<i>g_u</i>)	38	4.416	-0.577	4	<i>E</i> ₃₈ (<i>g_u</i>)
19	-0.918	-5.911	4	<i>E</i> ₁₉ (<i>g_g</i>)	39	4.744	-0.249	4	<i>E</i> ₃₉ (<i>g_g</i>)
20	-0.883	-5.876	3	<i>E</i> ₂₀ (<i>t_{2u}</i>)	40	4.779	-0.214	3	<i>E</i> ₄₀ (<i>t_{2u}</i>)

$$\begin{aligned}
 g_2 &= g_5 = g_8 = g_9 = g_{15} = g_{20} = g_{22} = g_{25} \\
 &= g_{28} = g_{29} = g_{35} = g_{40} = 3, \\
 g_4 &= g_6 = g_{11} = g_{12} = g_{18} = g_{19} = g_{24} \\
 &= g_{26} = g_{31} = g_{32} = g_{38} = g_{39} = 4, \\
 g_3 &= g_7 = g_{13} = g_{17} = g_{23} = g_{27} = g_{33} = g_{37} = 5, \\
 g_{10} &= g_{16} = g_{30} = g_{36} = 8. \tag{10}
 \end{aligned}$$

Из соотношений (7), (8) и (5) следует, что в энергетическом спектре фуллерена C₈₀ можно выделить следующие особенности. Энергетический спектр фуллерена C₈₀, как следует из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 1, при *t*₁ = 0 переходит в энергетический спектр пентагона и изолированного атома, а при *t* = 0 энергетический спектр этого фуллерена переходит в энергетический спектр квантовой системы, состоящей из одного атома, связанного еще с тремя изолированными атомами. Из соотношений (5) и рис. 2 следует, что у фуллерена C₈₀ происходит случайное вырождение некоторых энергетических уровней при некоторых значениях интегралов переноса. Кроме того, как видно из рис. 2, в спектре фуллерена C₈₀ наблюдается случайное вырождение энергетических уровней (*E*_{10,1}(*h_u*) и *E*_{10,2}(*t_{1g}*); *E*_{16,1}(*h_u*) и *E*_{16,2}(*t_{2g}*); *E*_{30,1}(*h_u*) и *E*_{30,2}(*t_{1g}*); *E*_{36,1}(*h_u*) и *E*_{36,2}(*t_{2g}*)), которое не снимается при изменении интегралов переноса.

Таким образом, энергетический спектр фуллерена C₈₀ с группой симметрии I_h в модели Хаббарда в ПСФ описывается соотношениями (5), (7), (8), (9) и (10).

3. Обсуждение результатов

Рассмотрим энергетические спектры эндоэдральных фуллеренов Lu₃N@C₈₀ и Y₃N@C₈₀, которые, как показали исследования [5,6], обладают группой симметрии I_h.

Исследования эндоэдрального фуллерена Lu₃N@C₈₀ [5] показали, что расстояния между атомами углерода в этой молекуле имеют следующие значения:

$$x_{1,2} = 1.438 \text{ \AA}, \quad x_{1,9} = 1.427 \text{ \AA}. \tag{11}$$

Для того чтобы найти численные значения для интегралов переноса, которые соответствуют эндоэдральному фуллерену Lu₃N@C₈₀, воспользуемся следующим соотношением [12,18]:

$$t_s = -8.17065 \exp(-1.69521x_s). \tag{12}$$

Из соотношений (11) и (12) следует, что у эндоэдрального фуллерена Lu₃N@C₈₀ с группой симметрии I_h интегралы переноса имеют следующие численные значения:

$$t = t_{1,2} = -0.714 \text{ eV}, \quad t_1 = t_{1,9} = -0.727 \text{ eV}. \tag{13}$$

Из соотношений (7) и (8) следует, что для того чтобы построить энергетический спектр эндоэдрального фуллерена Lu₃N@C₈₀, необходимо знать численные значения параметров ϵ и *U*. В работе [17], исходя из экспериментально наблюдаемого оптического спектра поглощения фуллерена C₆₀, в рамках модели Хаббарда в ПСФ были найдены численные значения этих

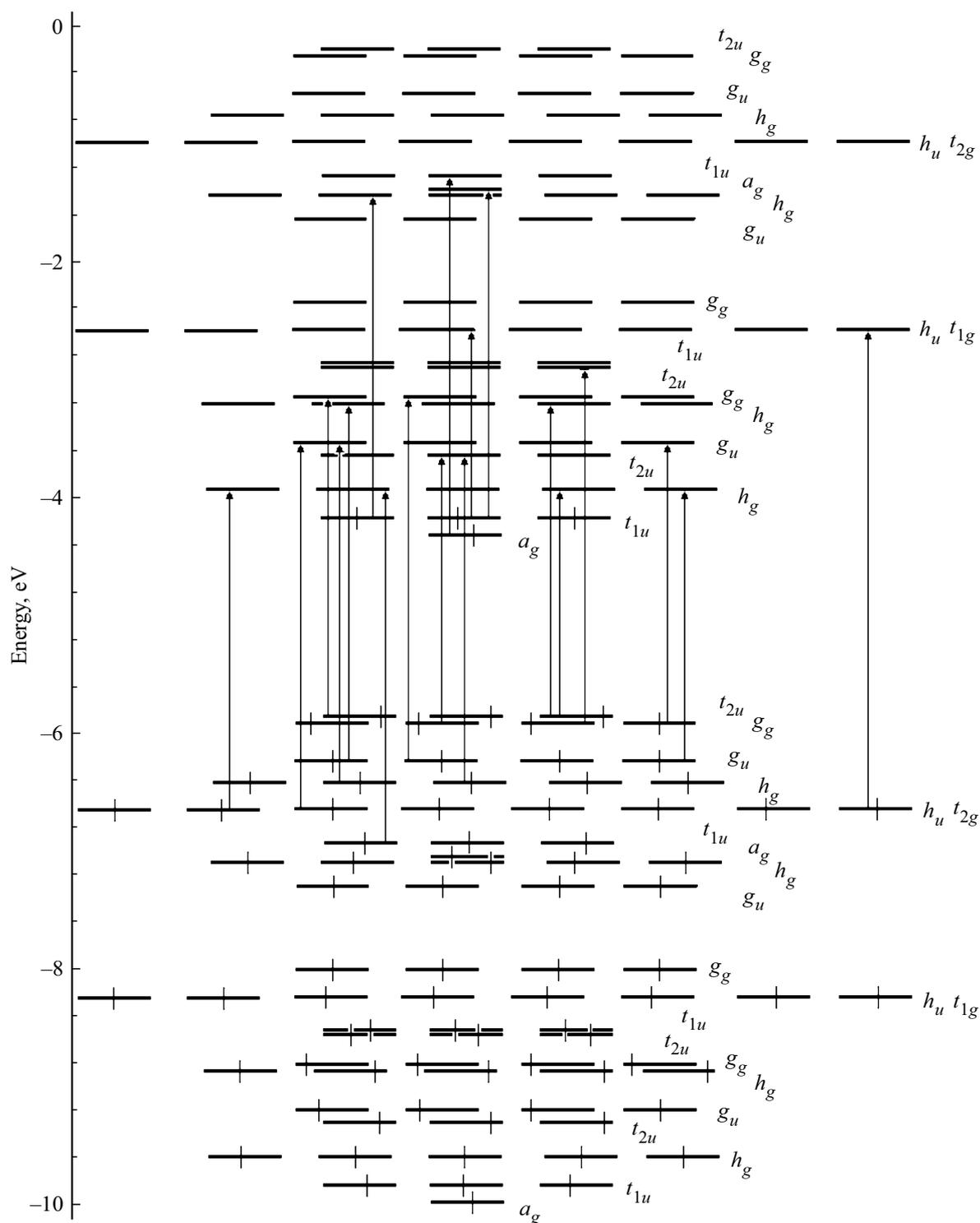


Рис. 3. Энергетический спектр фуллера $\text{Lu}_3\text{N}@\text{C}_{80}$ с группой симметрии I_h .

параметров $\varepsilon = -7.824 \text{ eV}$, $U = 5.662 \text{ eV}$. Отметим, что $U = 5.662 \text{ eV}$ согласуется с результатами работы [24], согласно которой $U \sim 5 \text{ eV}$. Подставляя ε , U , t и t_1 из (13) в соотношения (7), (8), (5) и (6), получим численные значения для величин $\bar{\varepsilon}_k$, E_k для эндоэдрального фуллера $\text{Lu}_3\text{N}@C_{80}$. Эти значения приведены

в табл. 1, а энергетический спектр эндоэдрального фуллера $\text{Lu}_3\text{N}@C_{80}$ изображен на рис. 3.

Рассмотрим теперь электронную структуру эндоэдрального фуллера $\text{Lu}_3\text{N}@C_{80}$. Считается, что внедрение молекулы внутрь фуллера не приводит к существенному изменению его энергетических уровней [21].

Таблица 2. Энергетический спектр фуллерена $Y_3N@C_{80}$ с группой симметрии I_h : значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы I_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	-4.929	-9.922	1	$E_1(a_g)$	21	0.733	-4.260	1	$E_{21}(a_g)$
2	-4.802	-9.795	3	$E_2(t_{1u})$	22	0.860	-4.133	3	$E_{22}(t_{1u})$
3	-4.561	-9.554	5	$E_3(h_g)$	23	1.101	-3.892	5	$E_{23}(h_g)$
4	-4.287	-9.280	3	$E_5(t_{2u})$	24	1.375	-3.619	3	$E_{25}(t_{2u})$
5	-4.168	-9.161	4	$E_4(g_u)$	25	1.494	-3.499	4	$E_{24}(g_u)$
6	-3.854	-8.847	5	$E_7(h_g)$	26	1.808	-3.185	5	$E_{27}(h_g)$
7	-3.794	-8.787	4	$E_6(g_g)$	27	1.868	-3.125	4	$E_{26}(g_g)$
8	-3.530	-8.523	3	$E_8(t_{2u})$	28	2.132	-2.861	3	$E_{28}(t_{2u})$
9	-3.530	-8.523	3	$E_9(t_{1u})$	29	2.132	-2.861	3	$E_{29}(t_{1u})$
10	-3.263	-8.256	5+3	$E_{10,1}(h_u), E_{10,2}(t_{1g})$	30	2.399	-2.594	5+3	$E_{30,1}(h_u), E_{30,2}(t_{1g})$
11	-3.023	-8.016	4	$E_{11}(g_g)$	31	2.639	-2.354	4	$E_{31}(g_g)$
12	-2.332	-7.325	4	$E_{12}(g_u)$	32	3.330	-1.663	4	$E_{32}(g_u)$
13	-2.132	-7.125	5	$E_{13}(h_g)$	33	3.530	-1.463	5	$E_{33}(h_g)$
14	-2.132	-7.125	1	$E_{14}(a_g)$	34	3.530	-1.463	1	$E_{34}(a_g)$
15	-1.992	-6.985	3	$E_{15}(t_{1u})$	35	3.670	-1.323	3	$E_{35}(t_{1u})$
16	-1.699	-6.692	5+3	$E_{16,1}(h_u), E_{16,2}(t_{2g})$	36	3.963	-1.030	5+3	$E_{36,1}(h_u), E_{36,2}(t_{2g})$
17	-1.477	-6.470	5	$E_{17}(h_g)$	37	4.185	-0.808	5	$E_{37}(h_g)$
18	-1.293	-6.286	4	$E_{18}(g_u)$	38	4.369	-0.624	4	$E_{38}(g_u)$
19	-0.977	-5.970	4	$E_{19}(g_g)$	39	4.685	-0.308	4	$E_{39}(g_g)$
20	-0.943	-5.936	3	$E_{20}(t_{2u})$	40	4.719	-0.274	3	$E_{40}(t_{2u})$

фуллерена $Y_3N@C_{80}$ расстояния между атомами углерода в этой молекуле имеют следующие значения:

$$x_{1,2} = 1.45 \text{ \AA}, \quad x_{1,9} = 1, 45 \text{ \AA}. \quad (14)$$

Из соотношений (12) и (14) следует, что у эндоэдрального фуллерена $Y_3N@C_{80}$ с группой симметрии I_h интегралы переноса имеют следующие численные значения:

$$t = t_{1,2} = -0.699 \text{ eV}, \quad t_1 = t_{1,9} = -0.699 \text{ eV}. \quad (15)$$

Подставляя ϵ, U, t и t_1 из (15) в соотношения (7), (8), (5) и (6), получим численные значения для величин \bar{e}_k, E_k для эндоэдрального фуллерена $Y_3N@C_{80}$. Эти значения приведены в табл. 2, а энергетический спектр эндоэдрального фуллерена $Y_3N@C_{80}$ изображен на рис. 4. При внедрении молекулы Y_3N внутрь фуллерена C_{80} четыре валентных электрона этой молекулы, как и в случае молекулы Lu_3N , переходят в остов фуллерена C_{80} и, как видно из рис. 4, занимают энергетические уровни $E_{21}(a_g)$ и $E_{22}(t_{1u})$. Из рис. 3, 4, табл. 1 и 2 видно, что энергетические уровни $E_8(t_{2u})$ и $E_9(t_{1u})$, $E_{13}(h_g)$ и $E_{14}(a_g)$, $E_{28}(t_{2u})$ и $E_{29}(t_{1u})$, $E_{34}(h_g)$ и $E_{35}(a_g)$ у эндоэдрального фуллерена $Y_3N@C_{80}$ в отличие от молекулы $Lu_3N@C_{80}$ становятся вырожденными. Это, как видно из рис. 2, связано с тем, что у молекулы $Y_3N@C_{80}$ оба интеграла переноса одинаковы.

Важной физической характеристикой молекулы является ее оптический спектр поглощения. Используя полученные выше энергетические спектры эндоэдральных фуллеренов $Lu_3N@C_{80}$ и $Y_3N@C_{80}$ с группой симметрии I_h , можно найти переходы, которые обуславливают

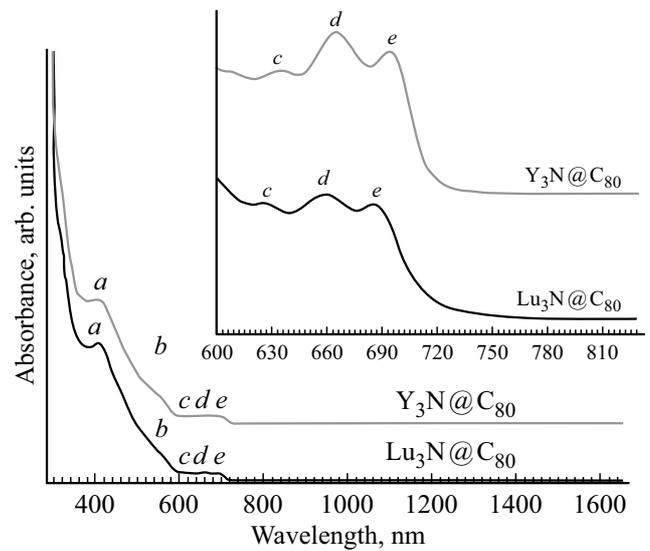


Рис. 5. Спектр поглощения $Y_3N@C_{80}$ и $Lu_3N@C_{80}$ в растворе толуола [26]. На вставке изображен спектр поглощения $Y_3N@C_{80}$ и $Lu_3N@C_{80}$ при более высокой их концентрации в растворе.

оптические спектры этих молекул. С помощью теории групп [23] можно показать, что у молекулы с группой симметрии I_h в энергетическом спектре разрешены следующие переходы:

$$t_{1g} \leftrightarrow a_u, \quad t_{1g} \leftrightarrow h_u, \quad t_{1u} \leftrightarrow a_g, \\ t_{1u} \leftrightarrow t_{1g}, \quad t_{1u} \leftrightarrow h_g, \quad t_{2u} \leftrightarrow g_g,$$

Таблица 3. Разрешенные переходы в энергетическом спектре эндоэдрального фуллерена Lu₃N@C₈₀ с группой симметрии I_h

№	ΔE	ΔE, eV	№	ΔE	ΔE, eV	№	ΔE	ΔE, eV	№	ΔE	ΔE, eV
1	E ₂₃ –E ₂₂	0.250	43	E ₃₁ –E _{16.1}	4.310	85	E _{30.2} –E _{10.1}	5.662	127	E ₃₉ –E ₁₂	7.060
2	E ₂₇ –E ₂₂	0.980	44	E ₂₃ –E _{10.1}	4.322	86	E ₄₀ –E ₁₉	5.697	128	E ₃₃ –E ₉	7.102
3	E ₂₉ –E ₂₁	1.445	45	E _{30.2} –E ₁₅	4.343	87	E ₃₅ –E ₁₄	5.806	129	E ₂₉ –E ₁	7.107
4	E _{30.2} –E ₂₂	1.589	46	E ₂₅ –E ₁₁	4.370	88	E ₃₅ –E ₁₃	5.816	130	E ₃₄ –E ₉	7.112
5	E ₂₃ –E ₂₀	1.934	47	E ₃₃ –E ₂₀	4.438	89	E ₃₈ –E ₁₇	5.854	131	E ₃₃ –E ₈	7.117
6	E ₂₅ –E ₁₉	2.260	48	E ₂₄ –E ₁₁	4.472	90	E ₃₃ –E ₁₂	5.871	132	E ₃₂ –E ₆	7.179
7	E ₂₃ –E ₁₈	2.296	49	E _{30.1} –E ₁₃	4.497	91	E ₃₇ –E _{16.1}	5.901	133	E ₃₂ –E ₇	7.227
8	E ₂₄ –E ₁₉	2.362	50	E ₂₃ –E ₉	4.598	92	E ₃₁ –E _{10.1}	5.906	134	E _{30.2} –E ₂	7.251
9	E ₂₇ –E ₂₀	2.664	51	E ₂₃ –E ₈	4.613	93	E ₂₃ –E ₂	5.912	135	E _{36.2} –E _{10.1}	7.258
10	E ₂₆ –E ₂₀	2.712	52	E ₃₂ –E ₁₇	4.784	94	E ₂₈ –E ₆	5.933	136	E _{36.1} –E _{10.2}	7.258
11	E ₂₃ –E _{16.1}	2.726	53	E ₃₃ –E ₁₈	4.800	95	E _{30.2} –E ₉	5.937	137	E ₃₈ –E ₁₁	7.444
12	E ₃₃ –E ₂₂	2.754	54	E _{36.1} –E ₁₉	4.904	96	E ₂₅ –E ₃	5.954	138	E ₃₇ –E _{10.1}	7.497
13	E ₃₄ –E ₂₂	2.764	55	E ₃₁ –E ₁₂	4.950	97	E ₂₈ –E ₇	5.981	139	E ₃₅ –E ₇	7.590
14	E ₂₅ –E ₁₇	2.780	56	E ₃₂ –E _{16.2}	5.022	98	E ₃₉ –E ₁₈	5.989	140	E ₃₃ –E ₄	7.772
15	E ₂₄ –E ₁₇	2.882	57	E ₂₇ –E _{10.1}	5.053	99	E ₂₉ –E ₇	5.996	141	E ₃₇ –E ₉	7.772
16	E ₂₃ –E ₁₅	3.003	58	E ₂₆ –E _{10.1}	5.101	100	E ₂₇ –E ₄	5.998	142	E ₃₇ –E ₈	7.787
17	E ₂₈ –E ₁₉	3.018	59	E ₃₇ –E ₂₀	5.108	101	E ₂₆ –E ₄	6.047	143	E ₄₀ –E ₁₁	7.807
18	E ₂₇ –E ₁₈	3.026	60	E ₂₈ –E ₁₁	5.128	102	E ₂₄ –E ₃	6.056	144	E _{36.1} –E ₆	7.819
19	E ₃₅ –E ₂₁	3.039	61	E ₃₅ –E ₁₇	5.146	103	E ₃₈ –E _{16.2}	6.092	145	E _{36.1} –E ₇	7.867
20	E _{30.2} –E _{16.1}	3.066	62	E ₂₅ –E ₆	5.175	104	E _{36.1} –E ₁₃	6.093	146	E ₃₃ –E ₅	7.875
21	E ₂₆ –E ₁₈	3.075	63	E ₂₅ –E ₇	5.223	105	E ₂₇ –E ₅	6.101	147	E ₃₂ –E ₃	7.958
22	E ₂₄ –E _{16.2}	3.120	64	E ₃₃ –E _{16.1}	5.231	106	E ₂₆ –E ₅	6.149	148	E ₃₉ –E _{10.1}	8.016
23	E _{30.1} –E ₁₉	3.308	65	E _{36.2} –E ₁₈	5.232	107	E ₃₇ –E ₁₅	6.178	149	E _{36.2} –E ₄	8.204
24	E ₂₃ –E ₁₂	3.366	66	E ₂₃ –E ₄	5.268	108	E ₃₁ –E ₈	6.196	150	E ₃₈ –E ₆	8.249
25	E ₃₇ –E ₂₂	3.424	67	E ₂₄ –E ₆	5.277	109	E ₄₀ –E ₁₇	6.216	151	E ₃₈ –E ₇	8.298
26	E ₂₅ –E ₁₃	3.449	68	E ₂₄ –E ₇	5.326	110	E _{30.1} –E ₆	6.223	152	E ₃₉ –E ₈	8.306
27	E ₂₇ –E _{16.1}	3.457	69	E ₂₇ –E ₉	5.328	111	E _{30.1} –E ₇	6.271	153	E ₃₅ –E ₃	8.321
28	E ₂₆ –E _{16.1}	3.505	70	E ₃₈ –E ₁₉	5.335	112	E _{36.2} –E ₁₂	6.302	154	E ₃₃ –E ₂	8.416
29	E ₃₁ –E ₂₀	3.517	71	E ₂₇ –E ₈	5.343	113	E ₃₂ –E ₁₁	6.374	155	E ₃₄ –E ₂	8.426
30	E ₂₈ –E ₁₇	3.537	72	E ₂₃ –E ₅	5.370	114	E ₃₉ –E _{16.1}	6.420	156	E ₃₇ –E ₄	8.442
31	E ₂₉ –E ₁₇	3.552	73	E ₂₉ –E _{10.2}	5.387	115	E ₃₈ –E ₁₃	6.524	157	E ₃₇ –E ₅	8.544
32	E ₂₄ –E ₁₃	3.552	74	E ₂₆ –E ₈	5.391	116	E ₃₇ –E ₁₂	6.540	158	E _{36.1} –E ₃	8.598
33	E ₂₇ –E ₁₅	3.734	75	E _{30.1} –E ₁₁	5.418	117	E ₂₇ –E ₂	6.642	159	E ₄₀ –E ₆	8.612
34	E _{30.1} –E ₁₇	3.827	76	E _{36.1} –E ₁₇	5.423	118	E ₂₈ –E ₃	6.711	160	E ₄₀ –E ₇	8.660
35	E ₃₁ –E ₁₈	3.880	77	E ₃₂ –E ₁₃	5.453	119	E ₂₉ –E ₃	6.726	161	E ₃₅ –E ₁	8.701
36	E _{30.1} –E _{16.2}	4.066	78	E ₃₇ –E ₁₈	5.470	120	E ₃₃ –E _{10.1}	6.827	162	E ₃₉ –E ₄	8.962
37	E ₂₇ –E ₁₂	4.097	79	E ₃₃ –E ₁₅	5.508	121	E ₃₁ –E ₄	6.852	163	E ₃₈ –E ₃	9.028
38	E ₂₆ –E ₁₂	4.145	80	E ₃₄ –E ₁₅	5.518	122	E ₄₀ –E ₁₃	6.886	164	E ₃₉ –E ₅	9.064
39	E ₂₈ –E ₁₃	4.207	81	E ₃₉ –E ₂₀	5.627	123	E ₃₁ –E ₅	6.954	165	E ₃₇ –E ₂	9.086
40	E ₂₉ –E ₁₄	4.212	82	E _{30.1} –E _{10.2}	5.662	124	E ₃₅ –E _{10.2}	6.981	166	E ₄₀ –E ₃	9.390
41	E ₂₉ –E ₁₃	4.222	83	E _{36.2} –E _{16.1}	5.662	125	E _{30.1} –E ₃	7.002			
42	E ₃₂ –E ₁₉	4.264	84	E _{36.1} –E _{16.2}	5.662	126	E _{36.1} –E ₁₁	7.014			

$$\begin{aligned}
 t_{2u} &\leftrightarrow h_g, & t_{2g} &\leftrightarrow g_u, & t_{2g} &\leftrightarrow h_u, \\
 g_u &\leftrightarrow g_g, & g_u &\leftrightarrow h_g, & g_g &\leftrightarrow h_u, \\
 h_g &\leftrightarrow h_u. & & & &
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

Из энергетических спектров эндоэдральных фуллеренов Lu₃N@C₈₀ и Y₃N@C₈₀ с группой симметрии I_h и соотношений (16) следует, что у этих молекул имеется 166 разрешенных переходов, которые приведены в табл. 3 и 4.

В работе [26] были получены спектры оптического поглощения эндоэдральных фуллеренов Lu₃N@C₈₀ и

Y₃N@C₈₀, находящихся в растворе толуола. Проведенные исследования показали, что в оптических спектрах поглощения этих молекул можно выделить, как это видно из рис. 5, пять явно выраженных полос поглощения: *a, b, c, d, e*, из которых две полосы поглощения *a* и *b* имеют достаточно большую интенсивность, а три полосы поглощения *c, d* и *e* имеют довольно малую интенсивность и наблюдаются при увеличении концентрации эндоэдральных фуллеренов Lu₃N@C₈₀ и Y₃N@C₈₀ в растворе толуола. В табл. 5 и 6 приведены экспериментальные значения для длин волн и энергий, которые соответствуют полосам поглоще-

Таблица 4. Разрешенные переходы в энергетическом спектре эндоэдрального фуллерена $Y_3N@C_{80}$ с группой симметрии I_h

№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$
1	$E_{23}-E_{22}$	0.241	43	$E_{31}-E_{16.1}$	4.338	85	$E_{30.2}-E_{10.1}$	5.662	127	$E_{39}-E_{12}$	7.017
2	$E_{27}-E_{22}$	0.948	44	$E_{23}-E_{10.1}$	4.364	86	$E_{40}-E_{19}$	5.696	128	$E_{33}-E_9$	7.060
3	$E_{29}-E_{21}$	1.399	45	$E_{30.2}-E_{15}$	4.391	87	$E_{35}-E_{14}$	5.802	129	$E_{34}-E_9$	7.060
4	$E_{30.2}-E_{22}$	1.539	46	$E_{25}-E_{11}$	4.397	88	$E_{35}-E_{13}$	5.802	130	$E_{29}-E_1$	7.061
5	$E_{23}-E_{20}$	2.044	47	$E_{33}-E_{20}$	4.473	89	$E_{38}-E_{17}$	5.846	131	$E_{33}-E_8$	7.092
6	$E_{25}-E_{19}$	2.351	48	$E_{24}-E_{11}$	4.517	90	$E_{33}-E_{12}$	5.862	132	$E_{32}-E_6$	7.124
7	$E_{23}-E_{18}$	2.394	49	$E_{30.1}-E_{13}$	4.531	91	$E_{37}-E_{16.1}$	5.884	133	$E_{32}-E_7$	7.184
8	$E_{24}-E_{19}$	2.471	50	$E_{23}-E_9$	4.631	92	$E_{31}-E_{10.1}$	5.902	134	$E_{30.2}-E_2$	7.201
9	$E_{33}-E_{22}$	2.670	51	$E_{23}-E_8$	4.663	93	$E_{23}-E_2$	5.903	135	$E_{36.2}-E_{10.1}$	7.226
10	$E_{34}-E_{22}$	2.670	52	$E_{32}-E_{17}$	4.807	94	$E_{28}-E_6$	5.926	136	$E_{36.1}-E_{10.2}$	7.226
11	$E_{27}-E_{20}$	2.751	53	$E_{33}-E_{18}$	4.823	95	$E_{30.2}-E_9$	5.929	137	$E_{38}-E_{11}$	7.392
12	$E_{23}-E_{16.1}$	2.800	54	$E_{36.1}-E_{19}$	4.940	96	$E_{25}-E_3$	5.935	138	$E_{37}-E_{10.1}$	7.448
13	$E_{26}-E_{20}$	2.811	55	$E_{31}-E_{12}$	4.971	97	$E_{28}-E_7$	5.986	139	$E_{35}-E_7$	7.524
14	$E_{25}-E_{17}$	2.851	56	$E_{32}-E_{16.2}$	5.029	98	$E_{27}-E_4$	5.976	140	$E_{33}-E_4$	7.698
15	$E_{35}-E_{21}$	2.937	57	$E_{27}-E_{10.1}$	5.071	99	$E_{39}-E_{18}$	5.978	141	$E_{37}-E_9$	7.715
16	$E_{24}-E_{17}$	2.971	58	$E_{37}-E_{20}$	5.128	100	$E_{29}-E_7$	5.986	142	$E_{40}-E_{11}$	7.742
17	$E_{23}-E_{15}$	3.093	59	$E_{26}-E_{10.1}$	5.131	101	$E_{26}-E_4$	6.036	143	$E_{37}-E_8$	7.747
18	$E_{27}-E_{18}$	3.101	60	$E_{35}-E_{17}$	5.147	102	$E_{24}-E_3$	6.055	144	$E_{36.1}-E_6$	7.757
19	$E_{28}-E_{19}$	3.109	61	$E_{28}-E_{11}$	5.155	103	$E_{38}-E_{16.2}$	6.068	145	$E_{36.1}-E_7$	7.817
20	$E_{26}-E_{18}$	3.161	62	$E_{25}-E_6$	5.168	104	$E_{36.1}-E_{13}$	6.095	146	$E_{33}-E_5$	7.817
21	$E_{24}-E_{16.2}$	3.193	63	$E_{25}-E_7$	5.228	105	$E_{27}-E_5$	6.095	147	$E_{32}-E_3$	7.891
22	$E_{37}-E_{22}$	3.325	64	$E_{33}-E_{16.1}$	5.229	106	$E_{26}-E_5$	6.155	148	$E_{39}-E_{10.1}$	7.948
23	$E_{30.1}-E_{19}$	3.376	65	$E_{36.2}-E_{18}$	5.256	107	$E_{37}-E_{15}$	6.177	149	$E_{36.2}-E_4$	8.131
24	$E_{23}-E_{12}$	3.433	66	$E_{23}-E_4$	5.269	108	$E_{30.1}-E_6$	6.193	150	$E_{38}-E_6$	8.163
25	$E_{25}-E_{13}$	3.506	67	$E_{24}-E_6$	5.288	109	$E_{40}-E_{17}$	6.196	151	$E_{38}-E_7$	8.223
26	$E_{27}-E_{16.1}$	3.507	68	$E_{27}-E_9$	5.338	110	$E_{31}-E_8$	6.201	152	$E_{35}-E_3$	8.231
27	$E_{26}-E_{16.1}$	3.567	69	$E_{38}-E_{19}$	5.346	111	$E_{30.1}-E_7$	6.253	153	$E_{34}-E_2$	8.332
28	$E_{31}-E_{20}$	3.582	70	$E_{24}-E_7$	5.348	112	$E_{36.2}-E_{12}$	6.295	154	$E_{33}-E_2$	8.332
29	$E_{28}-E_{17}$	3.609	71	$E_{27}-E_8$	5.370	113	$E_{32}-E_{11}$	6.353	155	$E_{39}-E_8$	8.247
30	$E_{29}-E_{17}$	3.609	72	$E_{23}-E_5$	5.388	114	$E_{39}-E_{16.1}$	6.384	156	$E_{37}-E_4$	8.353
31	$E_{24}-E_{13}$	3.626	73	$E_{29}-E_{10.2}$	5.395	115	$E_{38}-E_{13}$	6.501	157	$E_{37}-E_5$	8.472
32	$E_{27}-E_{15}$	3.800	74	$E_{26}-E_8$	5.430	116	$E_{37}-E_{12}$	6.517	158	$E_{40}-E_6$	8.513
33	$E_{30.1}-E_{17}$	3.876	75	$E_{36.1}-E_{17}$	5.440	117	$E_{27}-E_2$	6.610	159	$E_{36.1}-E_3$	8.524
34	$E_{31}-E_{18}$	3.932	76	$E_{30.1}-E_{11}$	5.422	118	$E_{28}-E_3$	6.693	160	$E_{40}-E_7$	8.573
35	$E_{30.2}-E_{16.1}$	4.098	77	$E_{32}-E_{13}$	5.462	119	$E_{29}-E_3$	6.693	161	$E_{35}-E_1$	8.599
36	$E_{30.1}-E_{16.2}$	4.098	78	$E_{37}-E_{18}$	5.478	120	$E_{33}-E_{10.1}$	6.793	162	$E_{39}-E_4$	8.853
37	$E_{27}-E_{12}$	4.200	79	$E_{33}-E_{15}$	5.522	121	$E_{31}-E_4$	6.807	163	$E_{38}-E_3$	8.930
38	$E_{26}-E_{12}$	4.200	80	$E_{34}-E_{15}$	5.522	122	$E_{40}-E_{13}$	6.851	164	$E_{39}-E_5$	8.972
39	$E_{28}-E_{13}$	4.264	81	$E_{39}-E_{20}$	5.628	123	$E_{31}-E_5$	6.926	165	$E_{37}-E_2$	8.987
40	$E_{29}-E_{14}$	4.264	82	$E_{30.1}-E_{10.2}$	5.662	124	$E_{35}-E_{10.2}$	6.933	166	$E_{40}-E_3$	9.280
41	$E_{29}-E_{13}$	4.264	83	$E_{36.2}-E_{16.1}$	5.662	125	$E_{30.1}-E_3$	6.960			
42	$E_{32}-E_{19}$	4.307	84	$E_{36.1}-E_{16.2}$	5.662	126	$E_{36.1}-E_{11}$	6.986			

ния (буквы соответствуют местоположению полос поглощения на кривых, изображенных на рис. 5). Из рис. 5 также видно, что формирование полос поглощения у молекулы $Lu_3N@C_{80}$ начинается с 807 нм (1.539 eV), а у молекулы $Y_3N@C_{80}$ начинается с 786 нм (1.581 eV) [26].

Зная энергетические спектры эндоэдральных фуллеренов $Lu_3N@C_{80}$ и $Y_3N@C_{80}$, можно дать следующую интерпретацию оптических спектров поглощения этих молекул. Полосы оптического поглощения молекул $Lu_3N@C_{80}$ и $Y_3N@C_{80}$, которые соответствуют энергиям E_a, E_b, E_c, E_d, E_e на рис. 5, можно интерпретиро-

вать как полосы, формирующиеся следующими переходами

для молекулы $Lu_3N@C_{80}$

$$E_a = E_{26} - E_{18}, E_b = E_{25} - E_{19}, E_c = E_{23} - E_{19}, \\ E_c = E_{31} - E_{21}, E_d = E_{23} - E_{20}, E_e = E_{31} - E_{22}, \quad (17)$$

для молекулы $Y_3N@C_{80}$

$$E_a = E_{23} - E_{15}, E_b = E_{25} - E_{19}, E_c = E_{23} - E_{20}, \\ E_d = E_{31} - E_{21}, E_e = E_{31} - E_{22}. \quad (18)$$

Таблица 5. Экспериментальные и теоретические значения длин волн и энергий, которые соответствуют полосам поглощения в оптическом спектре $\text{Lu}_3\text{N}@C_{80}$

Параметр	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>
λ , nm [26]	403	548	626	658	685
E , eV [26]	3.083	2.267	1.985	1.888	1.814
E , eV, теория	3.075	2.260	1.965;1.968	1.934	1.833

Таблица 6. Экспериментальные и теоретические значения длин волн и энергий, которые соответствуют полосам поглощения в оптическом спектре $\text{Y}_3\text{N}@C_{80}$

Параметр	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>
λ , nm [26]	407	549	633	665	694
E , eV [26]	3.053	2.263	1.963	1.868	1.790
E , eV, теория	3.093	2.351	2.044	1.906	1.779

Численные значения энергий, которые соответствуют энергиям E_a, E_b, E_c, E_d, E_e из (17) и (18), представлены в табл. 5 и 6. Из табл. 5 и 6 видно, что теоретические значения энергий близки к экспериментальным значениям [26]. Отметим, что для молекулы $\text{Lu}_3\text{N}@C_{80}$ энергии E_a, E_b, E_d соответствуют разрешенным переходам, а энергии E_c, E_e соответствуют запрещенным переходам. Для молекулы $\text{Y}_3\text{N}@C_{80}$ энергии E_a, E_b, E_c соответствуют разрешенным переходам, а энергии E_d, E_e соответствуют запрещенным переходам. Запрещенные переходы могут себя проявлять вследствие нарушения симметрии, которое возникает вследствие того, что атомы в молекуле совершают малые колебания около положения равновесия. В результате нарушения симметрии запрещенные согласно симметрии оптические переходы становятся разрешенными с небольшой интенсивностью. Поэтому запрещенные переходы формируют полосы поглощения с очень малой интенсивностью.

4. Заключение

Таким образом, спектры оптического поглощения эндодральных фуллеренов $\text{Lu}_3\text{N}@C_{80}$ и $\text{Y}_3\text{N}@C_{80}$, которые наблюдаются экспериментально, достаточно хорошо согласуются со спектрами оптического поглощения этих молекул, которые получены из энергетических спектров молекул $\text{Lu}_3\text{N}@C_{80}$ и $\text{Y}_3\text{N}@C_{80}$ в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

Отметим также, что в работах [17,18] были исследованы энергетические спектры фуллеренов C_{60} и C_{70} , выполненные также в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Данные исследования показали, что спектры оптического поглощения этих фуллеренов, которые наблюдались экспериментально, также достаточно хорошо согласуются со спектрами оп-

тического поглощения молекул C_{60} и C_{70} , которые были получены в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Это позволяет считать, что модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций достаточно хорошо описывает электронные свойства углеродных наносистем.

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. *Nature* **318**, 162 (1985).
- [2] H.W. Kroto. *Nature* **329**, 529 (1987).
- [3] M. Krause, J. Wong, L. Dunsch. *Chem. Eur. J.* **11**, 706 (2005).
- [4] S. Yang, L. Dunsch. *J. Phys. Chem. B* **109**, 12320 (2005).
- [5] S. Stevenson, H.M. Lee, M.M. Olmstead, C. Kozikowski, P. Stevenson, A.L. Balch. *Chem. Eur. J.* **8**, 19, 4528 (2002).
- [6] L. Echegoyen, C.J. Chancellor, C.M. Cardona, B. Elliott, J. Rivera, M.M. Olmstead, A.L. Balch. *Chem. Commun.* 2653 (2006).
- [7] P.W. Fowler, D.E. Manolopoulos. *An atlas of fullerenes*. Clarendon, Oxford (1995).
- [8] О.Е. Глухова, А.И. Жбанов, А.Г. Резков. *ФТТ* **47**, 2, 376 (2005).
- [9] J. Ding, S. Yang. *Angew. Chem. Int. Ed.* **35**, 2234 (1996).
- [10] J.C. Duchamp, A. Demortier, K.R. Fletcher, D. Dorn, E.B. Iezzi, T. Glass, H.C. Dorn. *Chem. Phys. Lett.* **375**, 655 (2003).
- [11] J. Hubbard. *Proc. Roy. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [12] А.В. Силантьев. *ФТТ* **61**, 2, 395 (2019).
- [13] А.В. Силантьев. *ФТТ* **62**, 3, 473 (2020).
- [14] А.В. Силантьев. *ФТТ* **63**, 11, 1951 (2021).
- [15] А.В. Силантьев. *ФТТ* **62**, 11, 1960 (2020).
- [16] А.В. Силантьев. *Изв. вузов. Физика* **62**, 6, 3 (2019).
- [17] А.В. Силантьев. *ЖЭТФ* **148**, 749 (2015).
- [18] А.В. Силантьев. *Изв. вузов. Физика* **60**, 6, 50 (2017).
- [19] Г.С. Иванченко, Н.Г. Лебедев. *ФТТ* **49**, 183 (2007).
- [20] А.В. Силантьев, *Изв. вузов. Физика* **56**, 2, 70 (2013).
- [21] А.В. Елецкий. *УФН* **170**, 2, 113 (2000).
- [22] С.В. Тябликов. *Методы квантовой теории магнетизма*. Наука, М. (1975).
- [23] Р. Хохштрассер. *Молекулярные аспекты симметрии*. Мир, М. (1968).
- [24] R.A. Harris, L.M. Falicov. *J. Chem. Phys.* **51**, 5034 (1969).
- [25] L. Basurto, F. Amerikheirabadi, R. Zope, T. Baruah. *J. Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 5832 (2015).
- [26] S. Yang, A.A. Popov, L. Dunsch. *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 8196 (2008).

Редактор Ю.Э. Кутаев