

17,09

Энергетический спектр и спектр оптического поглощения экзоэдрального фуллерена $C_{50}Cl_{10}$ в модели Хаббарда

© А.В. Силантьев

Марийский государственный университет,
Йошкар-Ола, Россия

E-mail: kvvant@rambler.ru

Поступила в Редакцию 17 февраля 2022 г.

В окончательной редакции 17 февраля 2022 г.

Принята к публикации 1 марта 2022 г.

В рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций получены энергетические спектры фуллерена C_{50} и экзоэдрального фуллерена $C_{50}Cl_{10}$ с группой симметрии D_{5h} . Используя методы теории групп, проведена классификация энергетических состояний, а также определены разрешенные переходы в энергетических спектрах молекул C_{50} и $C_{50}Cl_{10}$. На основе энергетического спектра молекулы $C_{50}Cl_{10}$ предложена интерпретация наблюдаемых экспериментально полос оптического поглощения экзоэдрального фуллерена $C_{50}Cl_{10}$.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, фуллерены, наносистемы, фуллерен C_{50} , экзоэдральный фуллерен $C_{50}Cl_{10}$.

DOI: 10.21883/FTT.2022.06.52403.290

1. Введение

После открытия в 1985 г. фуллерена C_{60} [1] начались интенсивные экспериментальные исследования по поиску других фуллеренов. Данные исследования показали, что наряду с фуллеренами C_n , где $n > 60$, существуют также так называемые малые фуллерены C_n , для которых $n < 60$. Теоретические исследования показали, что в отличие от фуллеренов C_n , где $n \geq 60$, у малых фуллеренов отсутствуют изомеры, содержащие изолированные пентагоны. Одним из малых фуллеренов является фуллерен C_{50} , который был обнаружен в 1985 г. одновременно с фуллереном C_{60} при изучении масс-спектров паров углеродных кластеров [1].

После открытия фуллеренов начались интенсивные исследования не только их физических свойств, но и их химических свойств. Эти исследования показали, что целый ряд фуллеренов в свободном состоянии являются неустойчивыми молекулами, а их химические соединения являются достаточно устойчивыми структурами. Например, в 2004 г. в результате применения модифицированного метода дугового разряда [2] в газовой среде, состоящей из молекул четыреххлористого углерода CCl_4 при парциальном давлении 0.013 atm и атомов гелия He при парциальном давлении 0.395 atm, было впервые получено соединение $C_{50}Cl_{10}$ в количестве примерно двух миллиграмм с чистотой 99.5% [3]. Исследования молекул $C_{50}Cl_{10}$ при помощи ядерного магнитного резонанса показали, что эти молекулы обладают симметрией D_{5h} . Проведенные исследования также показали, что у $C_{50}Cl_{10}$ статическая поляризуемость и вторая гиперполяризуемость намного больше, чем у C_{60} . Поэтому $C_{50}Cl_{10}$ считается перспективным материалом

для нелинейной оптики [4]. Исследования эндоэдральных фуллеренов $He@C_{50}$, $Ne@C_{50}$ и $Ar@C_{50}$ показали, что эти молекулы, как и молекула $C_{50}Cl_{10}$, также обладают группой симметрии D_{5h} [5].

Фуллерен C_{50} с группой симметрии D_{5h} , как показано на рис. 1, состоит из 15 гексагонов и 12 пентагонов. Отметим, что из 50 атомов углерода можно построить 271 изомер фуллерена C_{50} [6]. Из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 1, видно, что фуллерен C_{50} с группой симметрии D_{5h} содержит шесть неэквивалентных связей и четыре группы неэквивалентных атомов углерода: $G_1 = \{1, 2, 4, 5, 8, 13, 15, 20, 21, 23, 29, 31, 37, 39, 40, 42, 43, 45, 46, 48\}$, $G_2 = \{3, 6, 7, 14, 22, 30, 38, 44, 49, 50\}$, $G_3 = \{10, 11, 17, 18, 25, 26, 27, 33, 34, 35\}$, $G_4 = \{9, 12, 16, 19, 24, 28, 32, 36, 41, 47\}$.

Ко множеству G_1 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения двух гексагонов и одного пентагона, и кроме того, каждый из этих атомов имеет одного ближайшего соседа из этого же множества G_1 . Ко множеству G_2 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения двух пентагонов и одного гексагона, и каждый из этих атомов имеет одного ближайшего соседа из этого же множества G_2 . Ко множеству G_3 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах изолированного пентагона. Ко множеству G_4 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения двух гексагонов и одного пентагона, и кроме того, каждый из этих атомов не имеет ни одного ближайшего соседа из этого же множества G_4 .

Исследования молекул $C_{50}Cl_{10}$, проведенные при помощи ядерного магнитного резонанса, показали, что атомы хлора в этих молекулах связаны с атомами углерода, которые принадлежат множеству G_2 [3], т. е. атомы

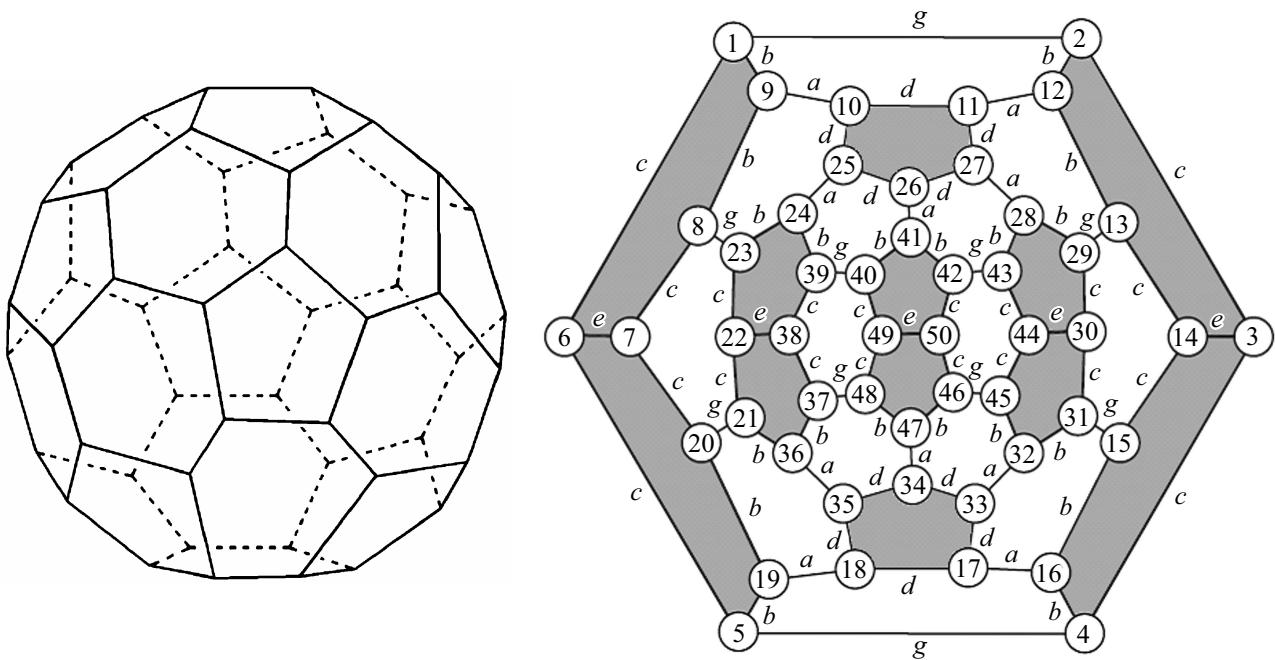


Рис. 1. *a* — фуллерен C_{50} с группой симметрии D_{5h} , *b* — его диаграмма Шлегеля с указанием положения атомов углерода, связей между атомами углерода и пентагонов.

хлора, как показано на рис. 2, образуют вокруг фуллера C_{50} структуру, которая напоминает кольцо Сатурна. Исследованию физических и химических свойств фуллера C_{50} посвящено довольно много работ [7–9].

Для описания электронных свойств углеродных фуллеренов и нанотрубок [10–19] широко используется модель Хаббарда [20].

В рамках этой модели в приближении статических флуктуаций (ПСФ) были получены энергетические спек-

тры и спектры оптического поглощения фуллера C_{80} с группой симметрии I_h [10], фуллера C_{70} [11], фуллера C_{60} [12], фуллера C_{36} с группой симметрии D_{6h} [13], фуллера C_{28} с группой симметрии T_d [14], фуллера C_{26} с группой симметрии D_{3h} [15], фуллера C_{24} с группами симметрии O_h , D_6 и D_{6d} [16] и фуллера C_{20} с группами симметрии I_h , D_{5d} и D_{3d} [17], а в работе [19] были исследованы электронные свойства углеродных нанотрубок. Полученные в работах [10–12] результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Целью настоящей работы является исследование энергетического спектра экзоэдрального фуллера $C_{50}Cl_{10}$ с группой симметрии D_{5h} в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Прежде чем рассматривать энергетический спектр молекулы $C_{50}Cl_{10}$, мы рассмотрим энергетический спектр фуллера C_{50} с группой симметрии D_{5h} .

2. Энергетический спектр фуллера C_{50}

Для описания π -электронной системы фуллера C_{50} воспользуемся моделью Хаббарда [20]:

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

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

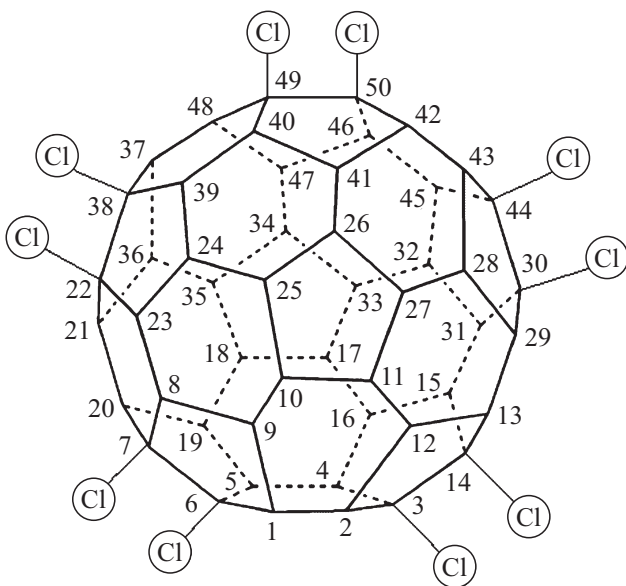


Рис. 2. Молекула $C_{50}Cl_{10}$.

Рассмотрим энергетический спектр экзоэдрального фуллерена $C_{50}Cl_{10}$, который, как показали исследования [4], обладает группой симметрии D_{5h} . Исследования экзоэдрального фуллерена $C_{50}Cl_{10}$ [4] также показали, что расстояния между атомами углерода в этой молекуле имеют следующие значения:

$$x_a = 1.403 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.424 \text{ \AA}, \quad x_c = 1.515 \text{ \AA},$$

$$x_d = 1.430 \text{ \AA}, \quad x_e = 1.598 \text{ \AA}, \quad x_g = 1.373 \text{ \AA}. \quad (11)$$

Из соотношений (6) и (11) следует, что у молекулы $C_{50}Cl_{10}$ интегралы переноса имеют следующие численные значения:

$$t_a = -0.75743 \text{ eV}, \quad t_b = -0.73094 \text{ eV},$$

$$t_c = -0.62645 \text{ eV}, \quad t_d = -0.72354 \text{ eV},$$

$$t_e = -0.54422 \text{ eV}, \quad t_g = -0.79694 \text{ eV}. \quad (12)$$

Зная численные значения для интегралов переноса (12), а также численные значения для параметров $\varepsilon = -7.824 \text{ eV}$ и $U = 5.662 \text{ eV}$, и используя соотношения (5) и (2)–(4), мы получим для молекулы $C_{50}Cl_{10}$

Таблица 2. Энергетический спектр фуллерена $C_{50}Cl_{10}$: значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы D_{5h} , к которым они относятся

№	e_j	$E_j, \text{ eV}$	g_j	Γ_j	№	e_j	$E_j, \text{ eV}$	g_j	Γ_j
1	-4.957	-9.950	1	$E_1(a'_1)$	31	0.705	-4.288	1	$E_{31}(a'_1)$
2	-4.811	-9.804	1	$E_3(a'_2)$	32	0.851	-4.142	1	$E_{33}(a'_2)$
3	-4.709	-9.702	2	$E_2(e'_1)$	33	0.953	-4.040	2	$E_{32}(e'_1)$
4	-4.402	-9.395	2	$E_6(e''_1)$	34	1.260	-3.733	2	$E_{36}(e''_1)$
5	-4.332	-9.325	1	$E_5(a'_1)$	35	1.330	-3.663	1	$E_{35}(a'_1)$
6	-4.324	-9.317	2	$E_4(e'_2)$	36	1.338	-3.655	2	$E_{34}(e'_2)$
7	-3.978	-8.971	1	$E_7(a'_2)$	37	1.684	-3.309	1	$E_{37}(a'_2)$
8	-3.931	-8.924	2	$E_9(e'_2)$	38	1.731	-3.262	2	$E_{39}(e'_2)$
9	-3.836	-8.829	2	$E_8(e'_2)$	39	1.826	-3.167	2	$E_{38}(e'_2)$
10	-3.720	-8.713	2	$E_{10}(e'_1)$	40	1.942	-3.051	2	$E_{40}(e'_1)$
11	-3.428	-8.421	2	$E_{11}(e''_1)$	41	2.234	-2.759	2	$E_{41}(e''_1)$
12	-3.406	-8.399	2	$E_{13}(e'_2)$	42	2.256	-2.737	2	$E_{43}(e'_2)$
13	-3.346	-8.339	2	$E_{12}(e'_1)$	43	2.316	-2.677	2	$E_{42}(e'_1)$
14	-3.288	-8.281	2	$E_{14}(e'_2)$	44	2.374	-2.619	2	$E_{44}(e'_2)$
15	-3.055	-8.048	1	$E_{16}(a'_2)$	45	2.607	-2.386	1	$E_{46}(a'_2)$
16	3.025	-8.018	1	$E_{15}(a'_1)$	46	2.637	-2.356	1	$E_{45}(a'_1)$
17	-2.718	-7.711	2	$E_{17}(e'_1)$	47	2.944	-2.049	2	$E_{47}(e'_1)$
18	-2.446	-7.439	2	$E_{18}(e''_1)$	48	3.216	-1.777	2	$E_{48}(e''_1)$
19	-2.034	-7.027	1	$E_{19}(a'_1)$	49	3.628	-1.365	1	$E_{49}(a'_1)$
20	-1.948	-6.941	1	$E_{20}(a'_2)$	50	3.714	-1.279	1	$E_{50}(a'_2)$
21	-1.892	-6.885	2	$E_{23}(e'_2)$	51	3.770	-1.223	2	$E_{53}(e'_2)$
22	-1.821	-6.814	2	$E_{21}(e'_2)$	52	3.841	-1.152	2	$E_{51}(e'_2)$
23	-1.798	-6.791	1	$E_{22}(a'_1)$	53	3.864	-1.129	1	$E_{52}(a'_1)$
24	-1.777	-6.770	2	$E_{24}(e'_1)$	54	3.885	-1.108	2	$E_{54}(e'_1)$
25	-1.595	-6.588	2	$E_{26}(e'_2)$	55	4.067	-0.926	2	$E_{56}(e'_2)$
26	-1.496	-6.489	2	$E_{25}(e'_1)$	56	4.166	-0.827	2	$E_{55}(e'_1)$
27	-1.266	-6.259	1	$E_{27}(a'_2)$	57	4.396	-0.597	1	$E_{57}(a'_2)$
28	-1.163	-6.156	2	$E_{28}(e'_1)$	58	4.498	-0.494	2	$E_{58}(e'_1)$
29	-0.996	-5.989	2	$E_{29}(e'_2)$	59	4.666	-0.327	2	$E_{59}(e'_2)$
30	-0.882	-5.875	2	$E_{30}(e'_2)$	60	4.780	-0.213	2	$E_{60}(e'_2)$

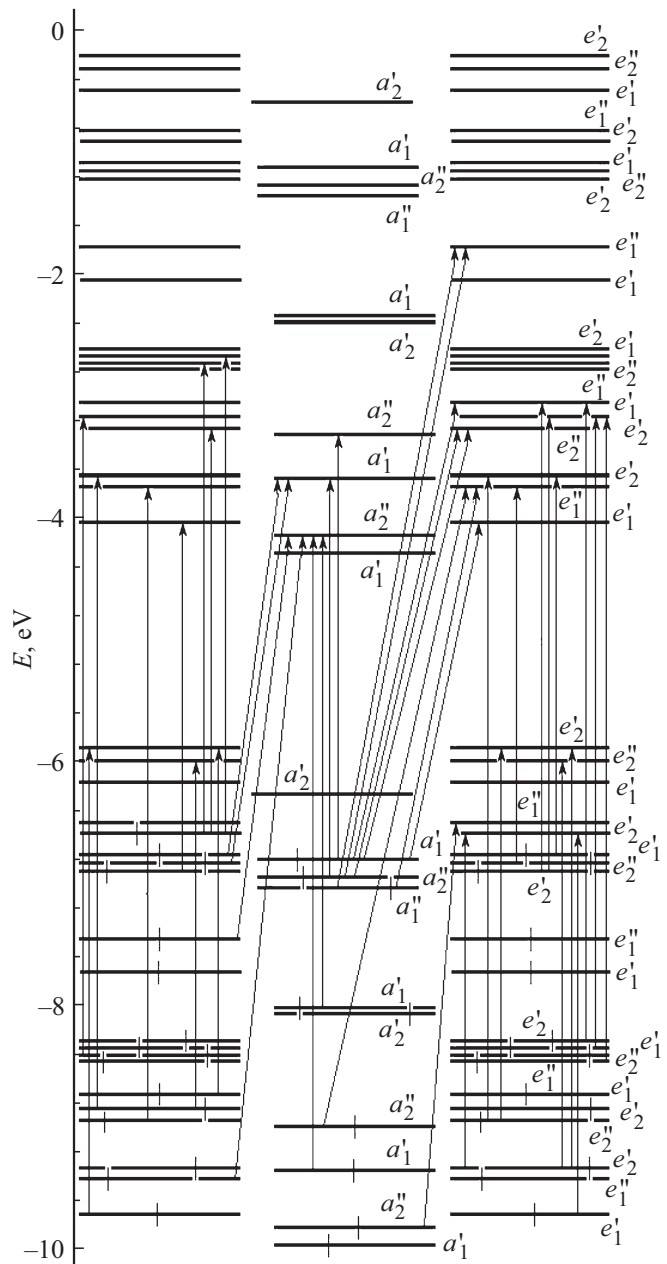


Рис. 4. Энергетический спектр молекулы $C_{50}Cl_{10}$.

численные значения для величин E_k, \bar{e}_k и g_k , см. табл. 2. На рис. 4 изображен энергетический спектр экзоэдрального фуллерена $C_{50}Cl_{10}$. Из рис. 3 и 4 видно, что у фуллерена C_{50} нижняя подзона Хаббарда полностью занята, а у экзоэдрального фуллерена $C_{50}Cl_{10}$ десять энергетических состояний в нижней подзоне Хаббарда свободны. Это связано с тем, что при образовании молекулы $C_{50}Cl_{10}$ десять валентных электронов фуллерена C_{50} пошли на образование прочных химических связей с атомами хлора.

Важной физической характеристикой любой молекулы является ее оптический спектр поглощения. Используя полученный выше энергетический спектр экзоэдрально-

го фуллера C₅₀Cl₁₀ с группой симметрии D_{5h}, можно найти переходы, которые формируют оптический спектр этой молекулы. С помощью теории групп [23] можно по-

Таблица 3. Экспериментальные и теоретические значения длин волн и энергий, которые соответствуют полосам поглощения в оптическом спектре молекулы C₅₀Cl₁₀

Полосы поглощения	[3], λ, nm	[3] E, eV	Теор. E, eV
a	454.6	2.73	2.7294
b	433.8	2.86	2.8448
c	400.8	3.10	3.1076
d	376.6	3.30	3.2971
e	356.6	3.48	3.4822
f	334.0	3.72	3.7177
g	322.0	3.86	3.8510
h	238.5	5.21	5.2295

Таблица 4. Переходы, формирующие полосы поглощения a, b, c, d, e, f, g, h, у молекулы C₅₀Cl₁₀

ΔE	ΔE, eV	δ	ΔE	ΔE, eV	δ	ΔE	ΔE, eV	δ
a			E ₂₇ -E ₆	3.1361	-	E ₄₀ -E ₂₂	3.7398	+
E ₂₇ -E ₇	2.7120	-	E ₃₁ -E ₁₈	3.1505	-	E ₃₁ -E ₁₆	3.7598	-
E ₂₉ -E ₁₀	2.7236	-	E ₃₅ -E ₂₁	3.1509	+	E ₄₀ -E ₂₁	3.7627	-
E ₂₆ -E ₄	2.7294	+	E ₃₆ -E ₂₃	3.1519	-	E ₃₉ -E ₁₉	3.7655	-
E ₃₂ -E ₂₄	2.7307	-	d			E ₃₈ -E ₂₀	3.7747	-
E ₂₆ -E ₅	2.7373	-	E ₃₅ -E ₂₀	3.2786	+	E ₃₅ -E ₁₈	3.7762	-
E ₃₁ -E ₁₉	2.7386	-	E ₃₇ -E ₂₆	3.2789	-	g		
E ₃₃ -E ₂₃	2.7426	-	E ₃₄ -E ₂₀	3.2865	-	E ₂₉ -E ₃	3.8145	-
E ₃₂ -E ₂₂	2.7511	+	E ₃₆ -E ₁₉	3.2945	+	E ₃₀ -E ₂	3.8267	+
E ₂₈ -E ₉	2.7675	-	E ₃₃ -E ₁₈	3.2971	+	E ₄₁ -E ₂₆	3.8286	+
E ₃₂ -E ₂₁	2.7740	-	E ₂₅ -E ₃	3.3153	+	E ₄₀ -E ₂₃	3.8335	-
b			E ₃₉ -E ₂₆	3.3260	+	E ₄₃ -E ₂₆	3.8510	+
E ₂₆ -E ₆	2.8070	-	E ₂₉ -E ₄	3.3275	+	E ₃₈ -E ₁₉	3.8603	-
E ₂₈ -E ₇	2.8145	-	E ₂₉ -E ₅	3.3354	-	E ₃₃ -E ₁₅	3.8762	+
E ₂₅ -E ₄	2.8284	-	e			E ₄₀ -E ₂₀	3.8904	-
E ₂₅ -E ₅	2.8363	-	E ₃₀ -E ₄	3.4420	+	E ₃₃ -E ₁₆	3.9064	-
E ₃₀ -E ₁₀	2.8381	+	E ₂₇ -E ₂	3.4432	+	E ₄₂ -E ₂₆	3.9102	+
E ₂₉ -E ₈	2.8393	+	E ₃₀ -E ₅	3.4499	-	h		
E ₃₂ -E ₂₃	2.8448	+	E ₃₇ -E ₂₄	3.4618	-	E ₄₈ -E ₂₀	5.1645	+
E ₃₆ -E ₂₆	2.8550	-	E ₂₅ -E ₁	3.4619	-	E ₃₅ -E ₈	5.1659	-
E ₃₃ -E ₁₉	2.8851	-	E ₃₇ -E ₂₂	3.4822	+	E ₃₈ -E ₁₂	5.1725	+
E ₃₂ -E ₂₀	2.9018	-	E ₃₇ -E ₂₁	3.5051	-	E ₃₄ -E ₈	5.1739	+
E ₂₅ -E ₆	2.9060	-	E ₃₉ -E ₂₄	3.5089	-	E ₃₃ -E ₄	5.1750	-
c			E ₃₀ -E ₆	3.5196	-	E ₃₃ -E ₅	5.1829	+
E ₃₀ -E ₉	3.0486	+	E ₃₉ -E ₂₂	3.5293	+	E ₃₆ -E ₉	5.1909	+
E ₃₆ -E ₂₂	3.0582	-	f			E ₄₉ -E ₂₆	5.2225	-
E ₂₇ -E ₄	3.0584	-	E ₃₂ -E ₁₇	3.6710	-	E ₄₀ -E ₁₄	5.2295	+
E ₂₇ -E ₅	3.0663	-	E ₃₉ -E ₂₀	3.6800	+	E ₃₈ -E ₁₃	5.2318	+
E ₃₆ -E ₂₁	3.0811	+	E ₂₇ -E ₁	3.6919	-	E ₃₆ -E ₇	5.2380	+
E ₃₀ -E ₇	3.0956	-	E ₃₆ -E ₁₈	3.7064	-	E ₄₈ -E ₁₉	5.2500	+
E ₃₅ -E ₂₄	3.1076	+	E ₂₉ -E ₂	3.7122	-	E ₃₃ -E ₆	5.2527	+
E ₂₆ -E ₂	3.1141	+	E ₃₈ -E ₂₃	3.7177	+	E ₃₈ -E ₁₁	5.2542	+
E ₃₄ -E ₂₄	3.1155	+	E ₃₇ -E ₁₉	3.7184	-	E ₄₁ -E ₁₅	5.2591	-
E ₃₅ -E ₂₂	3.1280	-	E ₄₀ -E ₂₄	3.7194	-	E ₃₅ -E ₉	5.2607	-
E ₃₄ -E ₂₂	3.1359	-	E ₃₁ -E ₁₅	3.7296	-	E ₃₄ -E ₉	5.2686	+

казать, что у молекулы с группой симметрии D_{5h} в энергетическом спектре разрешены следующие переходы:

$$\begin{aligned}
 a'_1 \leftrightarrow e'_1, a'_1 \leftrightarrow a''_2, a'_2 \leftrightarrow e'_1, e'_1 \leftrightarrow e'_2, \\
 e'_1 \leftrightarrow e''_1, e'_2 \leftrightarrow e'_2, e''_2 \leftrightarrow e''_2, a''_1 \leftrightarrow e''_1, \\
 e'_2 \leftrightarrow e''_2, a'_2 \leftrightarrow a''_1, a''_2 \leftrightarrow e''_1, e''_2 \leftrightarrow e''_1. \quad (13)
 \end{aligned}$$

В работе [3] был получен спектр оптического поглощения экзоэдрального фуллера C₅₀Cl₁₀, находящегося в циклогексане. Исследования оптического спектра поглощения этой молекулы показали, что в ее оптическом спектре поглощения можно выделить восемь явно выраженных полос поглощения: a, b, c, d, e, f, g, h, которые представлены в табл. 3.

Зная энергетический спектр экзоэдрального фуллера C₅₀Cl₁₀, можно дать следующую интерпретацию его экспериментально наблюдаемого спектра оптического поглощения. Полосы спектра оптического поглощения молекулы C₅₀Cl₁₀, которые соответствуют экспериментально наблюдаемым энергиям E_a, E_b, E_c, E_d, E_e, E_f, E_g, E_h, представленным в табл. 3, можно интерпретировать как полосы, формирующиеся переходами, которые представлены в табл. 4. Из табл. 4 видно, что энергии этих переходов близки к экспериментальным значениям [3]. Символ δ в табл. 4 показывает, какие переходы с точки зрения симметрии разрешены, а какие запрещены. Если δ = +, то такой переход с точки зрения симметрии разрешен, если же δ = -, то такой переход является запрещенным. Отметим, что в молекуле C₅₀Cl₁₀ атомы совершают малые колебания около положения равновесия. Это приводит к тому, что у молекулы C₅₀Cl₁₀ происходит нарушение симметрии. В результате этого запрещенные согласно симметрии системы оптические переходы становятся разрешенными. Некоторые из запрещенных переходов в результате нарушения симметрии могут сформировать явно наблюдаемую полосу оптического поглощения.

4. Заключение

Таким образом, спектр оптического поглощения экзоэдрального фуллера C₅₀Cl₁₀, который наблюдается экспериментально, достаточно хорошо согласуется со спектром оптического поглощения этой молекулы, который получен из энергетического спектра молекулы C₅₀Cl₁₀ в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

Отметим также, что в работах [12,11,10] были исследованы энергетические спектры фуллеренов C₆₀, C₇₀ и эндоэдральных фуллеренов Lu₃N@C₈₀ и Y₃N@C₈₀, выполненные также в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Данные исследования показали, что спектры оптического поглощения этих молекул, которые наблюдались экспериментально, также достаточно хорошо согласуются со спектрами

оптического поглощения молекул C_{60} , C_{70} , $Y_3N@C_{80}$ и $Y_3N@C_{80}$, 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, что у него нет 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] S. Gao, S.-Y. Xie, R.-B. Huang, L.-S. Zheng. *Chem. Commun.* **9**, 21, 2676 (2003).
- [3] S.-Y. Xie, F. Gao, X. Liu, R.-B. Huang, C.-R. Wang, X. Zhang, M.-L. Liu, S.-L. Deng, S.-L. Zheng. *Sci.* **304**, 5671, 699 (2004).
- [4] Y. Yang, F.-H. Wang, Y.-S. Zhou, L. Yuan, J. Yang. *Phys. Rev. A* **71**, 1, 013202 (2005).
- [5] Н.Н. Бреславская, А.А. Левин, А.Л. Бучаченко. *Изв. АН. Сер. хим.* **53**, 19 (2004).
- [6] P.W. Fowler, D.E. Manolopoulos. *An atlas of fullerenes*. Clarendon: Oxford (1995).
- [7] R.-H. Xie, G.W. Bryant, C.F. Cheung, V.H. Smith Jr, J. Zhao. *J. Chem. Phys.* **121**, 7, 2849 (2004).
- [8] X. Lu, Z.F. Chen, W. Thiel, P.V.R. Schleyer, R.B. Huang, L.S. Zheng. *J. Am. Chem. Soc.* **126**, 45, 14871 (2004).
- [9] L. Zhechkov, T. Heine, G. Seifert. *J. Phys. Chem. A* **108**, 52, 11733 (2004).
- [10] А.В. Силантьев. *ФТТ* **64**, 2, 279 (2022).
- [11] А.В. Силантьев. *Изв. вузов. Физика* **60**, 6, 50 (2017).
- [12] А.В. Силантьев. *ЖЭТФ* **148**, 749 (2015).
- [13] А.В. Силантьев. *Изв. вузов. Физика* **62**, 6, 3 (2019).
- [14] А.В. Силантьев. *ФТТ* **62**, 11, 1960 (2020).
- [15] А.В. Силантьев. *ФТТ* **63**, 11, 1951 (2021).
- [16] А.В. Силантьев. *ФТТ* **62**, 3, 473 (2020).
- [17] А.В. Силантьев. *ФТТ* **61**, 2, 395 (2019).
- [18] А.В. Силантьев. *Изв. вузов. Физика* **56**, 2, 70 (2013).
- [19] Г.С. Иванченко, Н.Г. Лебедев. *ФТТ* **49**, 1, 183 (2007).
- [20] J. Hubbard. *Proc. Roy. Soc. London A* **276**, 1365, 238 (1963).
- [21] С.В. Тябликов. *Методы квантовой теории магнетизма*. Наука, М. (1975).
- [22] R.A. Harris, L.M. Falicov. *J. Chem. Phys.* **51**, 11, 5034 (1969).
- [23] Р. Хохштрассер. *Молекулярные аспекты симметрии*. Мир, М. (1968).

Редактор Е.В. Толстякова