

Электронное строение и оптическое поглощение изомеров фуллерена C₉₀

© А.И. Мурзашев, М.Ю. Кокурин, А.П. Жуманазаров, С.К. Паймеров

Марийский государственный университет,
424000 Йошкар-Ола, Россия
e-mail: nanotubes59@mail.ru

Поступила в редакцию 22.10.2021 г.

В окончательной редакции 25.12.2021 г.

Принята к публикации 26.12.2021 г.

Вычислены энергетические спектры и спектры оптического поглощения изомеров №№ 1, 6, 16 и 46 фуллерена C₉₀. Благодаря сопоставлению теоретических и экспериментальных спектров оптического поглощения, идентифицированы три ранее синтезированных изомера фуллерена C₉₀. Расчеты выполнены в рамках развиваемого подхода, учитывающего внутриузельное кулоновское взаимодействие π -электронов, которое играет решающую роль в формировании электронных и оптических свойств фуллеренов.

Ключевые слова: фуллерен, внутриузельное кулоновское взаимодействие, модель Хаббарда, кулоновский интеграл, энергетический спектр, правила отбора, спектр оптического поглощения.

DOI: 10.21883/OS.2022.06.52643.2828-21

1. Введение

Фуллерены были открыты более 35 лет назад. Несмотря на столь длительный период с момента их открытия, они по-прежнему вызывают неослабевающий интерес исследователей. Это обусловлено, прежде всего, их уникальными физическими свойствами. В фуллеренах каждый атом углерода связан с тремя другими атомами углерода. В результате три из четырех валентных электронов углерода гибридизируются и образуют жесткие связи между соседними атомами. Четвертый, не гибридизованный электрон, остается незадействованным в этих связях. Указанные электроны из-за перекрытия волновых функций соседних атомов образуют так называемую π -зону, соответствующее валентное состояние называется sp^2 -гибридизованным состоянием. Важно отметить, что в фуллеренах граница между свободным и заполненным состояниями находится в области энергий π -зоны.

В работе [1] было показано, что в углеродных системах с sp^2 -гибридизацией внутриузельное кулоновское взаимодействие (ВУКВ) π -электронов велико, и кулоновский интеграл достигает значений $U \sim 10$ eV. Это требует существенно иных подходов к изучению электронной структуры фуллеренов и углеродных нанотрубок (УНТ) по сравнению с теми, которые зачастую используются в настоящее время. При больших значениях интеграла кулоновского взаимодействия в электронной подсистеме начинают играть важную роль сильные кулоновские корреляции [2]. В частности, при $U > W$, где W — ширина π -зоны, система становится нестабильной относительно перехода металл–диэлектрик [3,4]. Несмотря на это, в рамках разумных предположений удастся интерпретировать экспериментальные данные в

моделях, в которых ВУКВ никоим образом не учитывается. При этом используется как простое приближение Хюккеля, так и различные методы функционала электронной плотности. Такую парадоксальную ситуацию можно объяснить соображениями, изложенными ниже.

Одной из первых работ по экспериментальному изучению углеродных систем в sp^2 -гибридизованном состоянии является работа Саваги [5], в которой методом оже-спектроскопии измерена плотность электронных состояний. Ширина заполненной части π -электронной зоны оказалась ~ 5.8 eV. Принимая во внимание данные Саваги и результаты Уоллеса [6], согласно которым в углеродной плоскости в приближении сильной связи без учета ВУКВ ширина зоны π -электронов составляет $\sim 6|B|$, можно сделать вывод, что $|B| \sim 2.0$ eV. Здесь B — интеграл перекрытия волновых функций π -электронов между соседними узлами. Дальнейшее уточнение значения этого параметра на основе анализа экспериментальных спектров оптического поглощения (СОП) углеродных наносистем без учета ВУКВ привело к оценке $B \sim 2.6$ eV [7–9].

В рамках этой модели, без учета ВУКВ, все же удастся получить относительно согласующееся с экспериментом представление об электронных и оптических свойствах фуллеренов и других углеродных наносистем. Однако дальнейшее изучение углеродных наносистем привело к появлению ряда противоречий между экспериментальными и теоретическими данными, что и позволяет говорить о неполной адекватности указанной модели. Согласно результатам группы Дресселхаус, полученным без учета кулоновского взаимодействия с интегралом перекрытия $B = -2.6$ eV [10], тип проводимости углеродных УНТ должен критически зависеть от их индексов хиральности. Если разность этих индексов кратна трем,

то УНТ должны быть проводниками, а в противном случае — диэлектриками или полупроводниками. Однако прямые измерения электрического сопротивления УНТ не обнаруживают такой однозначной корреляции [11]. Противоречия теоретических данных, полученных в этой модели, с экспериментальными результатами также возникают и при исследовании фуллеренов. Например, в фуллерене C_{74} согласно этой модели щель между заполненным и вакантным электронными состояниями (НОМО-LUMO) должна быть ~ 0.01 eV [12], но экспериментального подтверждения этому нет. Такая же ситуация наблюдается и при сравнении результатов расчета методом функционала электронной плотности с экспериментальными данными. Так, в [13] энергетический спектр и спектр оптического поглощения изомера № 3 фуллерена C_{82} (номер приведен в соответствии с Атласом фуллеренов [14]), были рассчитаны с использованием стандартного метода TD-DFT без учета ВУКВ. Авторам [13] удалось получить качественное совпадение с экспериментальными данными только за счет искусственного сдвига вычисленных значений энергетических уровней на ~ 0.3 eV.

Исходя из вышесказанного, приходим к необходимости учета ВУКВ в фуллеренах и УНТ. Такая задача корректно может быть выполнена в рамках модели Хаббарда [2]. К сожалению, в рамках этой модели для нетривиальных атомных конфигураций сложно получить точные решения в явном виде. Отметим в этой связи точное решение для бесконечной цепочки атомов [15], что непригодно для описания фуллеренов и УНТ. Метод диаграммной техники [16] и различные методы расщепления [17] позволяют описать ряд интересных явлений, которые наблюдаются в переходных металлах и высокотемпературных сверхпроводниках в купратах. Заметим, что методы работ [16,17] применимы только в пределе $U \gg W$, что, очевидно, не подходит для УНТ и фуллеренов, где, как будет показано ниже, $U \sim 10.0$ eV, а $W \sim 6.0$ eV. Задача упрощается, если рассматривать систему при температурах ~ 300 К. Как известно, при таких температурах можно пренебречь процессами с переворотом спина электронов. Тогда процессы, связанные с ВУКВ, и процессы, связанные с перескоком π -электронов с узла на узел, можно рассматривать отдельно. Эта идея реализуется в рамках приближения статических флуктуаций (ПСФ) [18–20]. Здесь удается точно учесть перескоки π -электронов между соседними узлами и их ВУКВ. Предполагается, что эффекты, связанные интерференцией этих двух процессов, незначительны.

Ранее нами в рамках модели Хаббарда при указанных выше условиях были изучены УНТ различной хиральности и фуллерены C_{60} , C_{70} , C_{72} , C_{74} , C_{80} , C_{84} и C_{96} . Энергетические спектры π -электронов были вычислены в ПСФ, т.е. с учетом ВУКВ. Вычисленные СОП изученных систем на хорошем качественном уровне совпали с экспериментальными [21–29].

Расчеты, выполненные в вышеуказанных работах, ожидаемо показывают, что ВУКВ приводит к расщеп-

лению каждого энергетического уровня π -электронов на два. Это является следствием того, что энергии состояний при однократном и двойном занятии электронами узла различаются на величину U . В результате зона π -электронов расщепляется на две хаббардовских подзоны, ширина каждой из которых составляет $W \sim 6|B|$. Нижняя подзона Хаббарда соответствует состояниям с однократным занятием узла π -электроном, верхняя — с двойным. Расстояние между соответствующими уровнями нижней и верхней хаббардовских подзон составляет примерно U . Если $U > 6|B|$, то в энергетическом спектре имеется щель размера $\Delta \approx U - 6B$. В основном состоянии нижняя хаббардовская подзона полностью заполнена, верхняя — вакантна. Учитывая, что, согласно результатам [6], ширина заполненной π -зоны составляет ~ 5.8 eV, получаем $B \approx -1.0$ eV. Поскольку в фуллерене C_{60} НОМО-LUMO ~ 1.0 eV, то в фуллеренах интеграл кулоновского взаимодействия должен быть $U \sim 7.0$ eV. Отсюда, с учетом результатов [1,2] [21–29] следует, что углеродные наносистемы, фуллерены и УНТ могут быть корректно описаны в рамках модели Хаббарда с параметрами: $B \sim -1.0$ eV и $U \sim 7.0$ eV. Разница между интегралом кулоновского взаимодействия $U \sim 7.0$ eV и результатами [1] объясняется экранированием ВУКВ, кулоновским взаимодействием π -электронов на соседних узлах [30]. Для ширины зоны π -электронов наш анализ приводит к величине $\sim 6|B| + U$, что близко к значению ~ 14 eV, наблюдаемому экспериментально.

Выше было сказано, что результаты экспериментов, в частности по СОП, для многих фуллеренов могут быть объяснены в рамках разумных предположений как в рамках моделей без учета ВУКВ с параметром $B = -2.6$ eV, так и в рамках ПСФ для модели Хаббарда, т.е. с учетом ВУКВ. В связи с этим представляет интерес сравнительное изучение электронной структуры и СОП в рамках этих двух моделей для различных фуллеренов. Целью данной работы является именно такое изучение электронной структуры и оптических свойств изомеров фуллерена C_{90} .

Первые изомеры фуллерена C_{90} были синтезированы в начале 90-х годов прошлого века. В работе [31] из углеродной сажи, полученной при дуговом нагреве, были выделены различные изомеры фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{76} , C_{78} , C_{82} , C_{84} , C_{90} и C_{96} . В настоящее время при поиске и идентификации стабильных фуллеренов исследователи полагаются на „правило изолированных пятиугольников“ (ПИП). Согласно этому правилу, наиболее стабильными изомерами являются те, в которых каждый пятиугольник окружен шестиугольниками. Фуллерен C_{90} , согласно [14], имеет 46 таких изомеров. Из них один изомер имеет симметрию D_{5h} , семь изомеров — симметрию C_{2v} , шесть изомеров — симметрию C_s , шестнадцать изомеров — симметрию C_1 , и шестнадцать изомеров — симметрию C_2 . Нами вычислены энергетические спектры всех этих изомеров фуллерена C_{90} . В настоящей работе мы приводим результаты, касающиеся изомеров №№ 1, 6, 16 и 46. Наш выбор объясняется тем, что

для этих изомеров имеются экспериментально полученные СОП. Для сравнения с экспериментальными данными расчеты были выполнены в рамках двух моделей — в хюккелевском приближении с интегралом перекрытия $B = -2.6 \text{ eV}$, и в рамках модели Хаббарда с учетом ВУКВ. Метод расчета в ПСФ подробно описан в нашей работе [27] (см. также [21–29]). Чтобы не перегружать статью, мы не приводим это описание здесь, отсылая читателя к перечисленным работам.

2. Симметрия и правила отбора для фуллеренов точечных групп C₁, C₂, C_s, C_{2v}, D_{5h}

Для построения СОП фуллерена необходимо учитывать правила отбора, обусловленные симметрией точечной группы этого фуллерена. Для этой цели были изучены группы симметрий, к которым относятся изомеры фуллерена C₉₀, подчиняющиеся ПИП, и найдены правила отбора для дипольных оптических переходов. В этом разделе вкратце изложены полученные результаты.

Для фуллеренов с низкосимметричными группами симметрии (C₁, C₂, C_s) разрешены все переходы между энергетическими уровнями. Эти группы можно описать следующим образом [32].

1) Группа C₁ является тривиальной. Она абелева и имеет единственное неприводимое представление (A).

2) Точечная группа C₂ содержит две операции симметрии: E — тождественное преобразование, C₂ — двойную ось симметрии. Группа абелева, имеет два неприводимых представления (A и B).

3) Точечная группа C_{1s} содержит две операции симметрии: E — тождественное преобразование, $\sigma = \sigma_h$ — зеркальную плоскость симметрии, которую можно считать горизонтальной. Группа абелева, имеет два неприводимых представления (A' и A'').

4) Точечная группа C_{2v} содержит четыре операции симметрии: E — тождественное преобразование, C₂ = C₂(z) — двойную ось симметрии, $\sigma_v = \sigma_v(xz)$ — первую зеркальную плоскость симметрии (xz), $\sigma'_v = \sigma_v(yz)$ — вторую зеркальную плоскость симметрии (yz). Группа абелева, имеет четыре неприводимых представления (A, A₂, B₁, B₂).

5) Точечная группа D_{5h} содержит следующие операции симметрии: E — тождественное преобразование, C₅ — главную ось симметрии 5-го порядка, 5C₂' — пять двойных осей симметрии, ортогональных главной оси, σ_h — горизонтальную зеркальную плоскость, пересекающую главную ось симметрии, 5 σ_v — пять вертикальных зеркальных плоскостей, параллельных главной оси симметрии, S₅ — несобственную ось вращения 5-го порядка. Группа не является абелевой, имеет восемь неприводимых представлений (A₁', A₂', E₁', E₂', A₁'', A₂'', E₁'', E₂'').

Идентификация неприводимых представлений для фуллеренов точечных групп C_{2v} и D_{5h} выполнена с

Таблица 1. Разрешенные дипольные переходы для группы C_{2v}

C _{2v}	A ₁	A ₂	B ₁	B ₂
A ₁	+	–	+	+
A ₂	–	+	+	+
B ₁	+	+	+	–
B ₂	+	+	–	+

Таблица 2. Разрешенные дипольные переходы для группы D_{5h}

D _{5h}	A ₁ '	A ₂ '	E ₁ '	E ₂ '	A ₁ ''	A ₂ ''	E ₁ ''	E ₂ ''
A ₁ '	–	–	+	–	–	+	–	–
A ₂ '	–	–	+	–	+	–	–	–
E ₁ '	+	+	–	+	–	–	+	–
E ₂ '	–	–	+	+	–	–	–	+
A ₁ ''	–	+	–	–	–	–	+	–
A ₂ ''	+	–	–	–	–	–	+	–
E ₁ ''	–	–	+	–	+	+	–	+
E ₂ ''	–	–	–	+	–	–	+	+

использованием компьютерной среды Maple. Затем, используя правила отбора для разрешенных дипольных переходов (табл. 1 и 2), строим СОП фуллеренов, принадлежащих этим группам симметрии.

3. Энергетический спектр и спектр оптического поглощения изомера № 6 фуллерена C₉₀

Фуллерен C₉₀, как упоминалось выше, был впервые выделен еще в 1992 г. [31]. Спектры оптического поглощения изомеров C₇₆, C₇₈, C₈₂, C₈₄, C₉₀ и C₉₆, рассмотренных в этой работе, приведены на рис. 1. Из сравнения кривых авторы работы [31] делают следующий вывод: „видно, что порог поглощения смещается в красную область длин волн за счет увеличения числа атомов углерода“. Этот вывод легко объясняется в рамках нашей модели с учетом ВУКВ. Порог поглощения определяется щелью НОМО-LUMO. Величина этой щели определяется как $\Delta = U - W$, где W — ширина хаббардовской подзоны. Следуя [5,6] и результатам наших расчетов энергетических спектров фуллеренов C₆₀–C₉₆, заключаем, что W увеличивается с ростом числа атомов фуллерена от значений ~ 5.0 eV для C₆₀ до значений ~ 5.8 eV для C₉₆, достигая максимального значения $6|B|$ в графитовой плоскости и УНТ. Учитывая, что $|B| \sim 1.0 \text{ eV}$ и $U \sim 7.0 \text{ eV}$, с увеличением числа атомов щель НОМО-LUMO уменьшается, достигая минимального значения ~ 1.0 eV. В результате порог поглощения смещается в красную область, достигая максимального значения ~ 1200 nm. Вышесказанное справедливо для фуллеренов с низкой симметрией, в которых разрешены все переходы из нижней хаббардовской подзоны в верх-

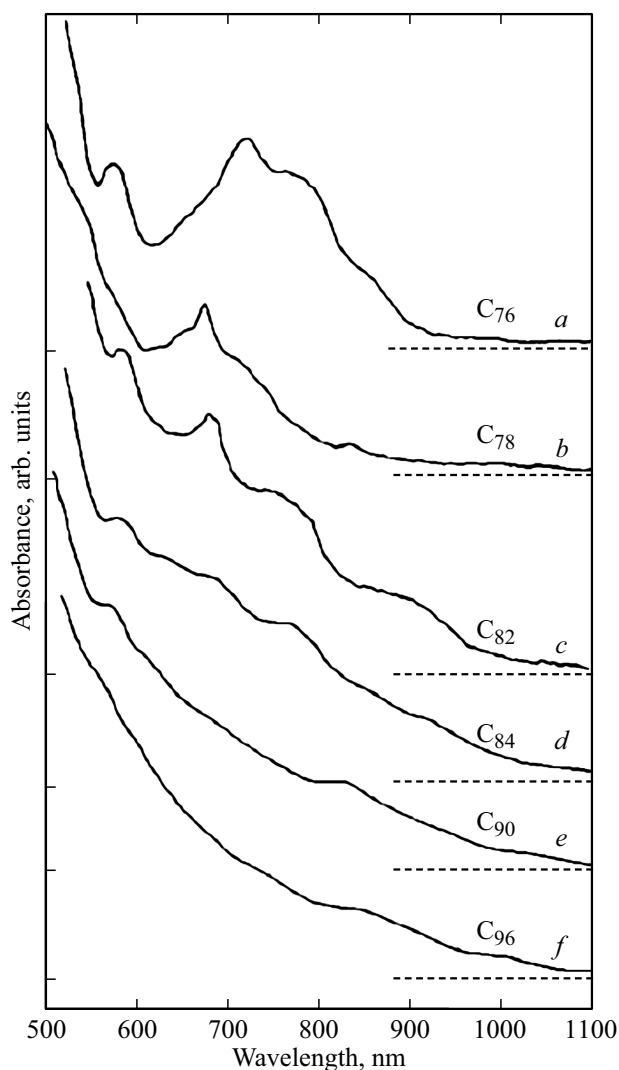


Рис. 1. Экспериментальные СОП синтезированных фуллеренов [33].

ною. В фуллеренах с высокой симметрией вследствие того, что переходы между состояниями с разностью энергий, равной НОМО-LUMO ~ 1.0 eV, могут быть запрещены, край поглощения может быть значительно меньше значения 1200 nm.

Чтобы идентифицировать изомер, выделенный в [31], мы сравнили кривую „e“, приведенную на рис. 1 (взята из [3]), со спектрами оптического поглощения изомеров, полученными в рамках модели Хаббарда. Сравнение показало, что наилучшее соответствие экспериментального СОП с теоретическим наблюдается для СОП изомера № 6 симметрии C_2 при следующих параметрах модели Хаббарда: $B = -1.05$ eV и $U = 7.48$ eV. Спектр оптического поглощения изомера № 6 (C_2) фуллерена C_{90} при этих значениях параметров показан на рис. 2. Из рис. 2 видно, что на экспериментальной кривой имеются максимумы при 570 и 840 nm, а на теоретической им соответствуют максимумы при 590 и 790 nm. Учитывая погрешности измерений и погреш-

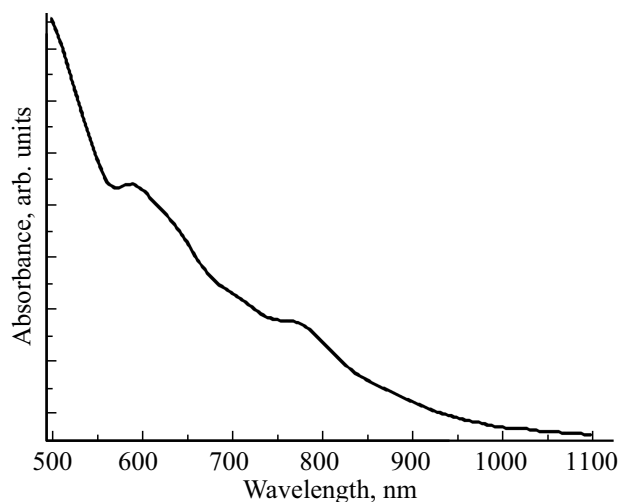


Рис. 2. Спектр оптического поглощения изомера № 6, рассчитанный в рамках модели Хаббарда с $U = 7.48$ eV, $B = -1.05$ eV.

ности модели, можно заключить, что наблюдается достаточно хорошее качественное соответствие. Энергетический спектр рассматриваемого изомера приведен в табл. 3. Видно, что энергетический спектр состоит из 180 энергетических уровней: нижняя хаббардовская подзона (отрицательные значения энергий) имеет 90 уровней, верхняя — 90 уровней (положительные значения энергий). Ширина каждой подзоны составляет ~ 6.06 eV, щель НОМО-LUMO равна 1.41 eV.

Значение НОМО-LUMO = 1.41 eV соответствует краю поглощения ~ 880 nm. Выше было сказано, что в системах с группой симметрии C_2 разрешены все переходы. Поэтому СОП, показанный на рис. 2, образован всеми 8100 переходами между 90 уровнями из нижней хаббардовской подзоны в 90 уровней верхней хаббардовской подзоны. Таким образом, каждая полоса поглощения на кривой рис. 2 сформирована большим количеством переходов между разными уровнями. Кривая СОП задается выражением:

$$\ln(\lambda) \sim \sum_{i,k} M_k M_i \frac{\delta}{(E_k - E_i - \frac{1243}{\lambda})^2 + \delta^2}. \quad (1)$$

Здесь M_k , M_i — кратности вырождения энергетических уровней, δ — феноменологический параметр, характеризующий затухание уровней, λ — длина волны электромагнитного излучения. Суммирование в (1) осуществляется по всем k уровням верхней и по i уровням нижней подзоны. Каждое слагаемое в (1) представляет собой гауссову кривую с максимумом при $\lambda_{\max} = 1243 \cdot (E_k - E_i)$. В (1) энергии уровней E_k , E_i берутся в eV, а длина волны λ — в nm. Очевидно, что максимум на кривой СОП будет в тех областях, где кривые Гаусса расположены гуще. Скажем несколько слов о границе поглощения. На рис. 3 на фоне СОП изображены три гауссовы кривые, которые

Таблица 3. Энергетический спектр изомера № 6 при $U = 7.48$ eV, $B = -1.05$ eV

-6.890	-4.009	0.5900	3.471
-6.746	-3.645	0.7342	3.835
-6.711	-3.577	0.7691	3.903
-6.701	-3.464	0.7792	4.016
-6.454	-3.402	1.026	4.078
-6.428	-3.131	1.052	4.349
-6.401	-2.984	1.079	4.496
-6.358	-2.844	1.122	4.636
-6.320	-2.760	1.160	4.720
-6.039	-2.739	1.441	4.741
-6.039	-2.652	1.441	4.828
-6.003	-2.568	1.477	4.912
-5.942	-2.550	1.538	4.930
-5.879	-2.518	1.601	4.962
-5.836	-2.442	1.644	5.038
-5.808	-2.419	1.672	5.061
-5.577	-2.381	1.903	5.099
-5.563	-2.298	1.917	5.182
-5.483	-2.290	1.997	5.190
-5.407	-2.260	2.073	5.220
-5.379	-2.220	2.101	5.260
-5.335	-2.173	2.145	5.307
-5.320	-2.139	2.160	5.341
-5.238	-2.082	2.242	5.398
-5.177	-2.039	2.303	5.441
-5.008	-1.968	2.472	5.512
-4.989	-1.900	2.491	5.580
-4.943	-1.855	2.537	5.625
-4.904	-1.798	2.576	5.682
-4.902	-1.722	2.578	5.758
-4.823	-1.720	2.657	5.760
-4.782	-1.580	2.698	5.900
-4.746	-1.530	2.734	5.950
-4.711	-1.467	2.769	6.013
-4.652	-1.362	2.828	6.118
-4.638	-1.361	2.842	6.119
-4.558	-1.311	2.922	6.169
-4.544	-1.191	2.936	6.289
-4.539	-1.020	2.941	6.460
-4.525	-1.008	2.955	6.472
-4.433	-0.9834	3.047	6.497
-4.401	-0.9372	3.079	6.543
-4.323	-0.8406	3.157	6.639
-4.238	-0.8284	3.242	6.652
-4.117	-0.8245	3.363	6.655

вносят вклад в СОП вблизи края поглощения. Для наглядности интенсивности этих кривых увеличены в 10 раз. Эти три кривые соответствуют переходам между уровнями с разностью энергий 1.415, 1.418 и 1.431 eV. Они отвечают за поглощение электромагнитных волн длиной 878, 877 и 868 nm (ниже на рис. 5 кривые с $\lambda_{\text{max}} = 878$ и 877 nm объединены). Кроме указанных переходов, в этой области длин волн другие переходы отсутствуют. Ненулевое значение интенсивности поглощения в рассматриваемой области определяется

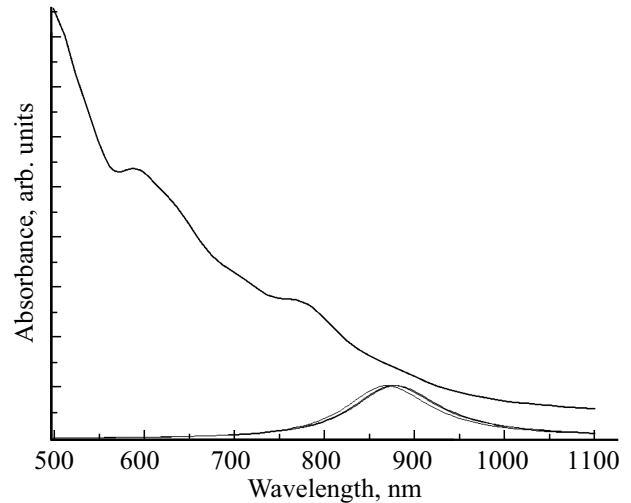


Рис. 3. Демонстрация вклада переходов, образующих край поглощения.

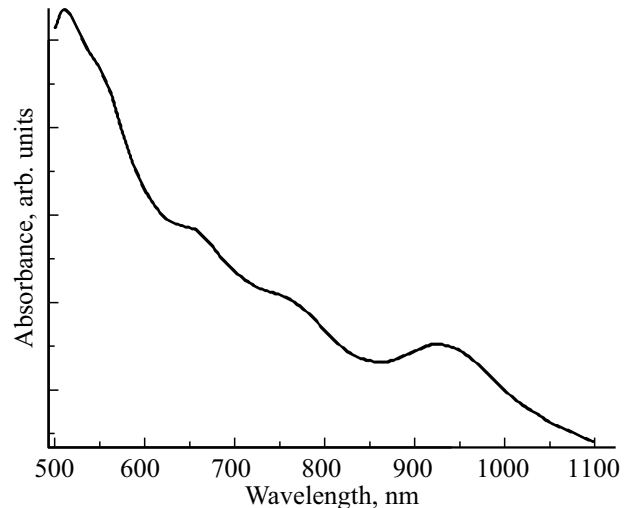


Рис. 4. Спектр оптического поглощения изомера № 6, рассчитанный в хюккелевском приближении с $B = -2.6$ eV.

суммой „хвостов“ большого количества кривых Гаусса, соответствующих поглощению в коротковолновой области.

На рис. 4 приведена кривая, полученная в рамках хюккелевского приближения с $B = -2.6$ eV. Эта кривая существенно отличается от кривой на рис. 1, полученной в [31], что говорит о том, что модель Хаббарда с параметрами $U \approx 7$ eV, $B \approx -1$ eV является более приемлемой по сравнению с моделью, которая не учитывает ВУКВ.

Подводя итоги этого раздела, отметим, что нам удалось идентифицировать изомер фуллерена C₉₀, выделенный в [31], как изомер № 6 симметрии C₂. Подчеркнем, что это удалось сделать именно в рамках модели Хаббарда с параметрами $B = -1.05$ eV и $U = 7.48$ eV.

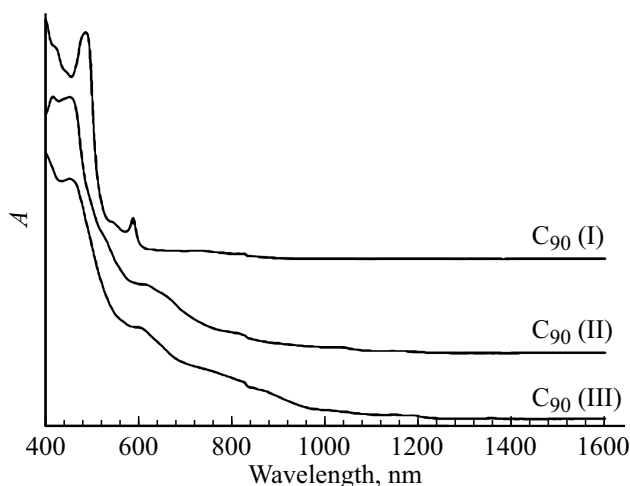


Рис. 5. Экспериментальные СОП синтезированных фуллеренов (по оси абсцисс отложены значения длины волны в нанометрах, по оси ординат — поглощение в относительных единицах) [33].

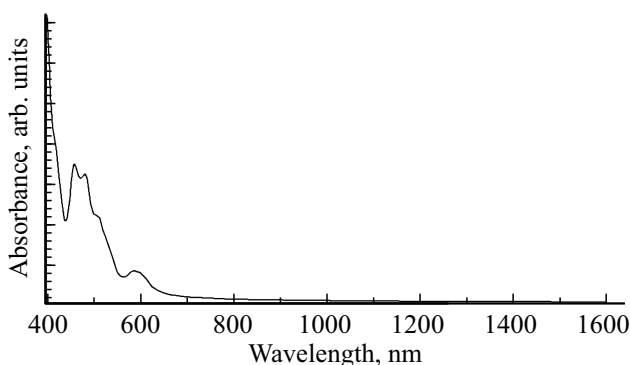


Рис. 6. Спектр оптического поглощения изомера № 1, рассчитанный в рамках модели Хаббарда с $U = 7.22$ eV, $B = -0.9$ eV.

4. Энергетический спектр и спектр оптического поглощения изомера № 1 фуллерена C_{90}

Позднее исследование изомеров фуллерена C_{90} было продолжено в [33]. Были идентифицированы три изомера C_{90} . Спектры оптического поглощения этих изомеров показаны на рис. 5, который соответствует рис. 2 из [33]. Изомер, обозначенный на этом рисунке как C_{90} (I), был идентифицирован авторами указанной работы как имеющий симметрию D_{5h} . Изомером C_{90} , имеющим такую симметрию, согласно [14] является изомер № 1. Спектр оптического поглощения этого изомера, рассчитанный нами в рамках модели Хаббарда, изображён на рис. 6. Прежде чем перейти к обсуждению полученного СОП, остановимся на энергетическом спектре интересующего нас изомера. Наилучшего совпадения с экспериментальной кривой (I) на рис. 5 нам удалось достичь при значениях параметров модели Хаббарда $U = 7.22$ eV,

Таблица 4. Энергетический спектр изомера № 1 при $U = 7.22$ eV, $B = -0.9$ eV

-6.173, 1, $A2'$	-3.237, 1, $A1'$	1.047, 1, $A2'$	3.983, 1, $A1''$
-6.073, 2, $E1'$	-3.075, 2, $E1'$	1.147, 2, $E1'$	4.145, 2, $E1'$
-5.962, 2, $E2'$	-3.034, 1, $A1'$	1.258, 2, $E2'$	4.186, 1, $A1'$
-5.935, 2, $E2''$	-2.961, 2, $E2''$	1.285, 2, $E2''$	4.259, 2, $E2'$
-5.783, 1, $A1''$	-2.915, 2, $E2'$	1.437, 1, $A1''$	4.305, 2, $E2''$
-5.749, 2, $E1''$	-2.862, 2, $E1''$	1.471, 2, $E1''$	4.358, 2, $E1''$
-5.659, 2, $E2'$	-2.847, 1, $A2'$	1.561, 2, $E2'$	4.373, 1, $A2'$
-5.381, 2, $E1'$	-2.847, 2, $E1''$	1.839, 2, $E1'$	4.373, 2, $E1''$
-5.313, 2, $E2''$	-2.656, 2, $E2'$	1.907, 2, $E2''$	4.564, 2, $E2'$
-5.221, 2, $E2'$	-2.547, 2, $E1'$	1.999, 2, $E2'$	4.673, 2, $E1'$
-5.199, 1, $A2'$	-2.547, 2, $E2''$	2.021, 1, $A2'$	4.673, 2, $E2''$
-5.139, 2, $E1''$	-2.532, 2, $E1'$	2.081, 2, $E1''$	4.688, 2, $E1''$
-4.967, 2, $E2''$	-2.411, 1, $A2''$	2.253, 2, $E2''$	4.809, 1, $A2''$
-4.963, 2, $E2'$	-2.258, 2, $E2''$	2.257, 2, $E2'$	4.962, 2, $E2''$
-4.898, 2, $E1'$	-2.114, 2, $E1''$	2.322, 2, $E1'$	5.106, 2, $E1''$
-4.863, 1, $A1'$	-2.098, 2, $E2'$	2.357, 1, $A1'$	5.122, 2, $E2'$
-4.845, 1, $A2''$	-1.952, 2, $E2'$	2.375, 1, $A2''$	5.268, 2, $E2'$
-4.683, 2, $E2'$	-1.933, 1, $A1'$	2.537, 2, $E2'$	5.287, 1, $A1'$
-4.664, 2, $E2''$	-1.691, 2, $E2''$	2.556, 2, $E2''$	5.529, 2, $E2''$
-4.557, 2, $E1'$	-1.644, 2, $E1'$	2.663, 2, $E1'$	5.576, 2, $E1'$
-4.510, 1, $A1''$	-1.593, 1, $A2''$	2.710, 1, $A1''$	5.627, 1, $A2''$
-4.453, 2, $E1''$	-1.447, 2, $E2'$	2.767, 2, $E1''$	5.773, 2, $E2'$
-4.238, 1, $A1'$	-1.282, 1, $A1'$	2.982, 1, $A1'$	5.938, 1, $A1'$
-3.880, 2, $E1''$	-1.280, 2, $E1''$	3.340, 2, $E1''$	5.940, 2, $E1''$
-3.821, 1, $A2'$	-1.083, 2, $E1'$	3.399, 1, $A2'$	6.137, 2, $E1'$
-3.755, 2, $E1'$	-1.016, 1, $A2''$	3.465, 2, $E1'$	6.204, 1, $A2'$
-3.686, 1, $A2''$	-0.9100, 1, $A1'$	3.534, 1, $A2''$	6.310, 1, $A1'$

$B = -0.9$ eV. В табл. 4 приведен энергетический спектр, рассчитанный при этих значениях параметров. Энергетический спектр содержит 108 уровней, из которых 54 находятся в верхней подзоне Хаббарда, 54 — в нижней подзоне. Щель НОМО-LUMO составляет 1.95 eV. Кратности вырождения энергетических уровней принимают значения 1 или 2. Группа симметрии D_{5h} имеет восемь неприводимых представлений: $A1'$, $A1''$, $A2'$, $A2''$, $E1'$, $E1''$, $E2'$, $E2''$. Соответствие энергетического уровня неприводимому представлению указано в таблице. Правила отбора дипольных переходов в группе D_{5h} следующие:

$$A1' \rightarrow A2'', E1'$$

$$A1'' \rightarrow A2', E1''$$

$$A2' \rightarrow A1'', E1'$$

$$A2'' \rightarrow A1', E1''$$

$$E1' \rightarrow A1', A2', E1'', E2'$$

$$E1'' \rightarrow A1'', A2'', E1', E2''$$

$$E2' \rightarrow E1', E2', E2''$$

$$E2'' \rightarrow E1'', E2', E2''.$$

Спектр оптического поглощения рассматриваемого изомера (рис. 6) был получен в соответствии с этими

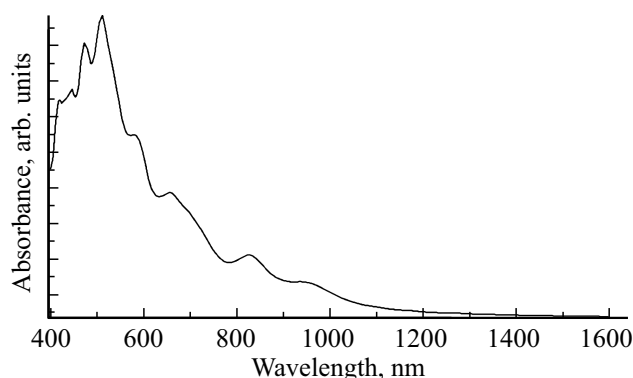


Рис. 7. Спектр оптического поглощения изомера № 1, рассчитанный в хюккелевском приближении с $B = -2.6$ eV.

правилами отбора. На экспериментальной кривой имеются максимумы полос поглощения при 484 и 589 nm, на полученной нами кривой эти максимумы приходятся на достаточно близкие значения 470 и 589 nm. В то же время имеется различие между экспериментальной и теоретической кривыми, состоящее в том, что на теоретической кривой максимум при 470 nm разделяется на два, на экспериментальной кривой такого разделения нет, что может быть связано погрешностями измерений. Минимальная частота перехода, определяемая переходом с уровня 1.047 eV ($A2'$) на уровень -0.9100 eV ($A1'$), равна щели НОМО-LUMO, что соответствует длине волны $\lambda = 958$ nm. На рис. 7 приведен СОП, полученный в рамках хюккелевского приближения при $B = -2.6$ eV. Сравнение этой кривой с кривой на рис. 5, полученной в [33], говорит об их существенном отличии, что опять подтверждает наш вывод о том, что модель Хаббарда с параметрами $U = 7.22$ eV, $B = -0.9$ eV является более приемлемой по сравнению с моделью, которая не учитывает ВУКВ.

5. Энергетический спектр и спектр оптического поглощения изомеров № 16 и № 46 фуллера C_{90}

В дополнение к изомеру № 1 в [33] были выделены еще два изомера, СОП которых изображены на рис. 5 и помечены как C_{90} (II) и C_{90} (III). Авторы [33] не смогли идентифицировать эти изомеры. Мы сравнили полученные нами СОП с этими кривыми. Анализ показал, что наиболее точное совпадение наблюдается для изомера № 46 (C_{2v}) с кривой C_{90} (II) и изомера № 16 (C_{2v}) с кривой C_{90} (III). На рис. 8 приведен СОП изомера № 46, рассчитанный нами в рамках модели Хаббарда. Энергетический спектр этого изомера при значениях параметров $U = 7.48$ eV, $B = -1.0$ eV, обеспечивающих наилучшее соответствие расчетного и экспериментального СОП, показан в табл. 5. Энергии уровней даны в eV,

второе число в ячейке — кратность вырождения уровня, третьим стоит символ неприводимого представления уровня. Энергетический спектр состоит из 178 уровней, из них 89 находятся в верхней хаббардовской подзоне и столько же в нижней подзоне. Щель НОМО-LUMO составляет 1.69 eV. Ширина хаббардовских подзон равна примерно 5.8 eV. В группе симметрии C_{2v} допускаются следующие дипольные переходы:

$$A1 \rightarrow A1, B1, B2$$

$$A2 \rightarrow A2, B1, B2$$

$$B1 \rightarrow A1, A2, B1$$

$$B2 \rightarrow A1, A2, B2.$$

На рис. 9 представлен СОП изомера № 16, полученный в рамках хюккелевского приближения с $B = -2.6$ eV. Видим, что он существенно отличается от экспериментальной кривой.

На рис. 10 представлен СОП изомера № 16, полученный из энергетического спектра, рассчитанного в рамках модели Хаббарда. Энергетический спектр этого изомера

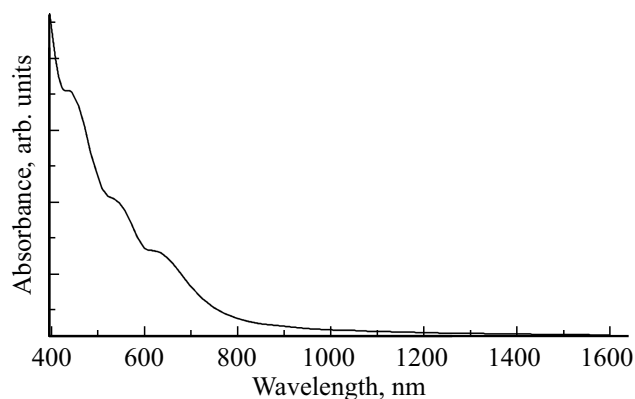


Рис. 8. Спектр оптического поглощения изомера № 46, рассчитанный в рамках модели Хаббарда с $U = 7.48$ eV, $B = -1.0$ eV.

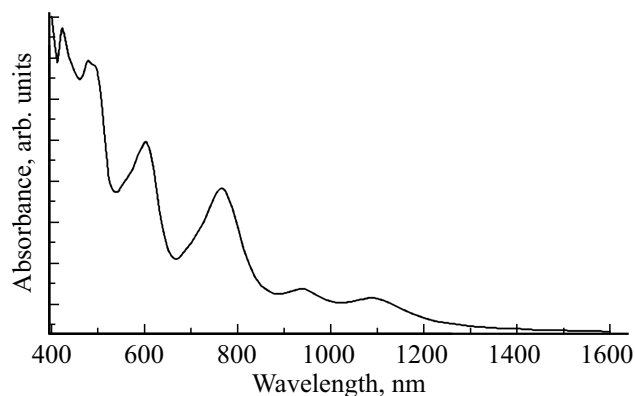


Рис. 9. Спектр оптического поглощения изомера № 46, рассчитанный в хюккелевском приближении с $B = -2.6$ eV.

Таблица 5. Энергетический спектр изомера № 46 при $U = 7.48$ eV, $B = -1.05$ eV

-6.527, 1, B1	-3.306, 1, A1	0.9535, 1, B1	4.174, 1, A1
-6.489, 1, B2	-3.235, 1, A2	0.9907, 1, B2	4.245, 1, A2
-6.478, 1, A2	-3.141, 1, B2	1.002, 1, A2	4.339, 1, B2
-6.425, 1, B2	-3.122, 1, B1	1.055, 1, B2	4.358, 1, B1
-6.399, 1, B1	-3.119, 1, A2	1.081, 1, B1	4.361, 1, A2
-6.391, 1, B2	-3.106, 1, A1	1.089, 1, B2	4.374, 1, A1
-6.268, 1, A1	-3.087, 1, B1	1.212, 1, A1	4.393, 1, B1
-6.199, 1, B1	-2.977, 1, B1	1.281, 1, B1	4.503, 1, B1
-6.066, 1, A2	-2.959, 1, B2	1.414, 1, A2	4.521, 1, B2
-6.000, 1, A1	-2.849, 1, A1	1.480, 1, A1	4.631, 1, A1
-5.895, 1, B2	-2.797, 1, B1	1.585, 1, B2	4.683, 1, B1
-5.882, 1, B1	-2.740, 1, A1	1.598, 1, B1	4.740, 1, A1
-5.853, 1, B1	-2.740, 1, A2	1.627, 1, B1	4.740, 1, A2
-5.772, 1, B2	-2.740, 2, B2	1.708, 1, B2	4.740, 2, B2
-5.748, 1, A2	-2.651, 1, A2	1.732, 1, A2	4.829, 1, A2
-5.721, 1, A1	-2.611, 1, B1	1.759, 1, A1	4.869, 1, B1
-5.610, 1, B2	-2.611, 1, B2	1.870, 1, B2	4.869, 1, B2
-5.557, 1, A2	-2.607, 1, A2	1.923, 1, A2	4.873, 1, A2
-5.486, 1, B1	-2.599, 1, A1	1.994, 1, B1	4.881, 1, A1
-5.358, 1, B1	-2.295, 1, A1	2.122, 1, B1	5.185, 1, A1
-5.334, 1, B2	-2.249, 1, A2	2.146, 1, B2	5.231, 1, A2
-5.323, 1, A2	-2.215, 1, A1	2.157, 1, A2	5.265, 1, A1
-5.290, 1, A1	-2.206, 1, B2	2.190, 1, A1	5.274, 1, B2
-5.224, 1, B2	-2.195, 1, B1	2.256, 1, B2	5.285, 1, B1
-5.180, 1, A2	-2.169, 1, B1	2.300, 1, A2	5.311, 1, B1
-5.177, 1, A1	-2.118, 1, A2	2.303, 1, A1	5.362, 1, A2
-5.129, 1, A1	-2.086, 1, A1	2.351, 1, A1	5.394, 1, A1
-5.114, 1, A2	-1.983, 1, B2	2.366, 1, A2	5.497, 1, B2
-5.096, 1, B1	-1.729, 1, A2	2.384, 1, B1	5.751, 1, A2
-5.045, 1, A1	-1.700, 1, A1	2.435, 1, A1	5.780, 1, A1
-4.926, 1, B1	-1.687, 1, B2	2.554, 1, B1	5.793, 1, B2
-4.903, 1, B2	-1.657, 1, A2	2.577, 1, B2	5.823, 1, A2
-4.740, 1, A1	-1.598, 1, B2	2.740, 1, A1	5.882, 1, B2
-4.740, 1, B1	-1.591, 1, B1	2.740, 1, B1	5.889, 1, B1
-4.740, 1, B2	-1.564, 1, A1	2.740, 1, B2	5.916, 1, A1
-4.698, 1, A1	-1.264, 1, A1	2.782, 1, A1	6.216, 1, A1
-4.692, 1, A2	-1.211, 1, B1	2.788, 1, A2	6.269, 1, B1
-4.673, 1, B2	-1.210, 1, B2	2.807, 1, B2	6.270, 1, B2
-4.591, 1, B1	-1.195, 1, A1	2.889, 1, B1	6.285, 1, A1
-4.319, 1, A2	-1.177, 1, A2	3.161, 1, A2	6.303, 1, A2
-4.134, 1, A1	-0.9143, 1, B2	3.346, 1, A1	6.566, 1, B2
-3.973, 1, B2	-0.8991, 1, A1	3.507, 1, B2	6.581, 1, A1
-3.889, 1, A2	-0.8914, 1, A2	3.591, 1, A2	6.589, 1, A2
-3.723, 1, B1	-0.7400, 1, A1	3.757, 1, B1	6.740, 1, A1
-3.543, 1, B2		3.937, 1, B2	

при параметрах $B = -1.0$ eV, $U = 7.2$ eV, обеспечивающих оптимальное соответствие расчетного и экспериментального СОП, показан в табл. 6. Энергии уровней даны в eV, второе число в ячейке — кратность вырождения, третьим стоит символ неприводимого представления уровня. Энергетический спектр состоит из 180 уровней, половина из которых лежит в верхней подзоне Хаббарда, вторая половина — в нижней подзоне. Щель НОМО-LUMO равна 1.4 eV. Ширина хаббардовских подзон равна примерно 5.8 eV. Правила отбора те же, что

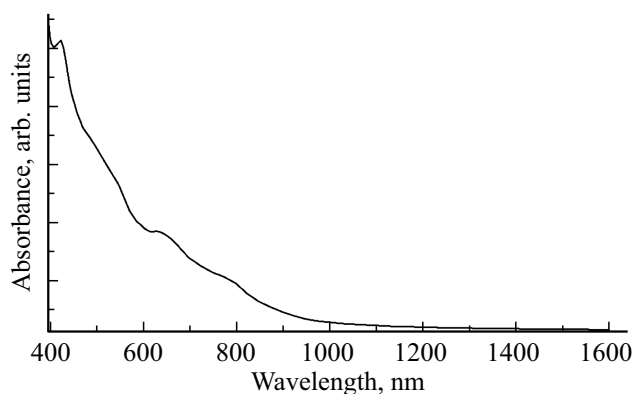


Рис. 10. Спектр оптического поглощения изомера № 16, рассчитанный в рамках модели Хаббарда с $U = 7.2$ eV, $B = -1$ eV.

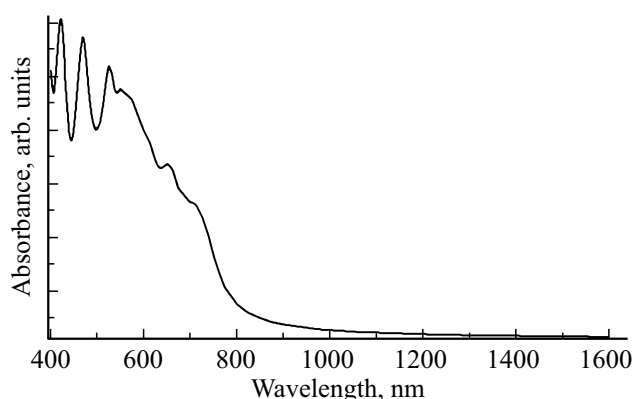


Рис. 11. Спектр оптического поглощения изомера № 16, рассчитанный в хюккелевском приближении с $B = -2.6$ eV.

и для изомера № 16. Спектр оптического поглощения, показанный на рис. 10, получен с учетом этих правил на основе энергетического спектра, представленного в табл. 6. На экспериментальной кривой S_{90} (III) (рис. 5) наблюдается слабо выраженный максимум при 460 nm и небольшое плато от 590 до 620 nm. На теоретической кривой такой же размытый максимум наблюдается при 440 nm и плато в области от 600 до 640 nm. На обеих кривых при 800 nm наблюдается слегка заметное набухание. Анализ СОП показывает, что минимальная частота поглощения формируется переходом между уровнями $[-0.6000, 1, A1]$ и $[0.8135, 1, B1]$ и равна 1.41 eV, что соответствует краю поглощения 882 nm. Видно, что минимальная частота поглощения несколько отличается от НОМО-LUMO, равной 1.4 eV. Это может быть связано с тем, что для данного изомера верхний заполненный уровень (НОМО) равен $[-0.6000, 1, A1]$, а нижний вакантный уровень (LUMO) равен $[0.8003, 1, A2]$, но переход $A1 \rightarrow A2$ запрещен правилами отбора. На рис. 11 представлен СОП, полученный в рамках хюккелевского приближения при $B = -2.6$ eV. Видно, что кривая значительно отличается от экспериментальной. Таким образом, мы снова видим, что модель Хаббарда с параметрами $B = -1.0$ eV, $U = 7.2$ eV для изомера № 46

Таблица 6. Энергетический спектр изомера № 16 при $U = 7.2$ eV, $B = -1$ eV

-6.400, 1, A2	-3.071, 1, B1	0.8003, 1, A2	4.129, 1, B1
-6.387, 1, B1	-3.047, 1, B2	0.8135, 1, B1	4.153, 1, B2
-6.348, 1, B2	-3.002, 1, A1	0.8523, 1, B2	4.198, 1, A1
-6.251, 1, B2	-2.994, 1, A2	0.9486, 1, B2	4.206, 1, A2
-6.249, 1, A1	-2.951, 1, B1	0.9506, 1, A1	4.249, 1, B1
-6.138, 1, B2	-2.909, 1, A1	1.062, 1, B2	4.291, 1, A1
-6.109, 1, B1	-2.874, 1, B1	1.091, 1, B1	4.326, 1, B1
-6.033, 1, B1	-2.819, 1, B2	1.167, 1, B1	4.381, 1, B2
-6.012, 1, A1	-2.813, 1, A2	1.188, 1, A1	4.387, 1, A2
-5.995, 1, A2	-2.714, 1, B2	1.205, 1, A2	4.486, 1, B2
-5.874, 1, A2	-2.712, 1, B1	1.326, 1, A2	4.488, 1, B1
-5.732, 1, B1	-2.705, 1, A1	1.468, 1, B1	4.495, 1, A1
-5.657, 1, B2	-2.600, 1, A1	1.543, 1, B2	4.600, 1, A1
-5.606, 1, A1	-2.600, 1, A2	1.594, 1, A1	4.600, 1, A2
-5.496, 1, B2	-2.600, 1, B2	1.704, 1, B2	4.600, 1, B2
-5.450, 1, B1	-2.525, 1, B1	1.750, 1, B1	4.675, 1, B1
-5.444, 1, A1	-2.511, 1, A2	1.756, 1, A1	4.689, 1, A2
-5.418, 1, A2	-2.481, 1, B2	1.782, 1, A2	4.719, 1, B2
-5.391, 1, A2	-2.423, 1, A1	1.809, 1, A2	4.777, 1, A1
-5.298, 1, B1	-2.358, 1, A2	1.902, 1, B1	4.842, 1, A2
-5.290, 1, B2	-2.155, 1, A1	1.910, 1, B2	5.045, 1, A1
-5.130, 1, A1	-2.137, 1, B1	2.070, 1, A1	5.063, 1, B1
-5.099, 1, B2	-2.108, 1, A2	2.101, 1, B2	5.092, 1, A2
-5.070, 1, A2	-2.071, 1, A1	2.130, 1, A2	5.129, 1, A1
-5.035, 1, B1	-2.070, 1, B2	2.165, 1, B1	5.130, 1, B2
-5.023, 1, A2	-2.049, 1, B1	2.177, 1, A2	5.151, 1, B1
-4.994, 1, B2	-1.975, 1, A2	2.206, 1, B2	5.225, 1, A2
-4.992, 1, A1	-1.965, 1, B2	2.208, 1, A1	5.235, 1, B2
-4.954, 1, A1	-1.769, 1, A1	2.246, 1, A1	5.431, 1, A1
-4.879, 1, B1	-1.589, 1, A2	2.321, 1, B1	5.611, 1, A2
-4.786, 1, A2	-1.560, 1, A1	2.414, 1, A2	5.640, 1, A1
-4.770, 1, A1	-1.556, 1, B2	2.430, 1, A1	5.644, 1, B2
-4.741, 1, B2	-1.514, 1, B1	2.459, 1, B2	5.686, 1, B1
-4.703, 1, B1	-1.508, 1, B2	2.497, 1, B1	5.692, 1, B2
-4.589, 1, A1	-1.413, 1, A1	2.611, 1, A1	5.787, 1, A1
-4.580, 1, B2	-1.399, 1, A2	2.620, 1, B2	5.801, 1, A2
-4.564, 1, B1	-1.123, 1, A1	2.636, 1, B1	6.077, 1, A1
-4.485, 1, A2	-1.113, 1, B1	2.715, 1, A2	6.087, 1, B1
-4.420, 1, A1	-1.083, 1, B2	2.780, 1, A1	6.117, 1, B2
-3.912, 1, A2	-1.032, 1, A1	3.288, 1, A2	6.168, 1, A1
-3.865, 1, B1	-1.021, 1, A2	3.335, 1, B1	6.179, 1, A2
-3.849, 1, B2	-0.7861, 1, B2	3.351, 1, B2	6.414, 1, B2
-3.730, 1, A2	-0.7502, 1, A1	3.470, 1, A2	6.450, 1, A1
-3.727, 1, B2	-0.7494, 1, A2	3.473, 1, B2	6.451, 1, A2
-3.721, 1, A1	-0.6000, 1, A1	3.479, 1, A1	6.600, 1, A1

более адекватна по сравнению с моделью, не учитывающей ВУКВ.

Заключение

Таким образом, из результатов нашего исследования отчетливо следует, что при описании электронной структуры и спектров оптического поглощения фуллеренов необходимо учитывать эффект внутриузельного куло-

новского взаимодействия π -электронов, что позволяет сделать модель Хаббарда.

Финансирование работы

Работа М.Ю. Кокурина в части применения методов линейной алгебры при описании допустимых переходов поддержана РНФ (грант 20-11-20085).

Конфликт интересов

Авторы утверждают, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] T.O. Wehling, E. Şaçıoğlu, C. Friedrich et al. Phys. Rev. Lett., **106** (23), 236805 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.236805
- [2] R.O. Zaitsev. JETP Lett., **94** (3), 206 (2011). DOI: 10.1134/S0021364011150173
- [3] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc., **276** (1365), 238 (1963). DOI: 10.1098/rspa.1963.0204
- [4] M.P. Lopez Sancho, M.C. Munoz, L. Chico. Phys. Rev. B., **63** (16), 165419 (2001). DOI: 10.1103/physrevb.63.165419
- [5] T. Sagawa. J. Phys. Soc. Jpn., **21** (1), 49 (1966). DOI: 10.1143/JPSJ.21.49
- [6] P.R. Wallace. Phys. Rev., **71** (9), 622 (1947). DOI: 10.1103/PhysRev.71.622
- [7] J.W.G. Wilder, L.C. Venema, A.G. Rinzler, R.E. Smalley, C. Dekker. Nature (London, UK), **391** (6662), 59 (1998). DOI: 10.1038/34139
- [8] H. Kuzmany, B. Burger, M. Hulman, J. Kurti, A.G. Rinzler, R.E. Smalley. Europhys. Lett., **44** (4), 518 (1998). DOI: 10.1209/epl/i1998-00504-y
- [9] Ph. Kim, T.W. Odom, J.-L. Huang, Ch.M. Lieber. Phys. Rev. Lett., **82** (6), 1225 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevLett.82.1225
- [10] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito. Phys. Rev. B, **45** (11), 6234 (1992). DOI: 10.1103/PhysRevB.45.6234
- [11] M. Miao. Carbon., **49** (12), 3755 (2011). DOI: 10.1016/j.carbon.2011.05.008
- [12] D.D. Michael, J.M. Alford. Nature (London, UK), **393** (6686), 668 (1998). DOI: 10.1038/31435
- [13] M. Zalibera, A.A. Popov, M. Kalbac, P. Rapta, L. Dunsch. Chem. — Eur. J., **14** (32), 9960 (2008). DOI: 10.1002/chem.200800591
- [14] P.W. Fowler, D.E. Manolopoulos. *An Atlas of Fullerenes* (Oxford Univ. Press, Oxford, 1995).
- [15] E.H. Lieb, F.Y. Wu. Phys. Rev. Lett., **20** (25), 1445 (1968). DOI: 10.1103/PhysRevLett.20.1445
- [16] R.O. Zaitsev. *Diagram Methods in the Theory of Superconductivity and Ferromagnetism* (Editorial URSS, Moscow, 2004).
- [17] Ю.А. Изюмов. УФН, **169** (3), 225 (1999).
- [18] R.R. Nigmatulin, V.A. Toboev. Theor. Math. Phys., **80** (1), 736 (1989). DOI: 10.1007/BF01015312
- [19] Г.И. Миронов. Физика металлов и металловедение, **102** (6), 611 (2006). DOI: 10.1134/S0031918X06120039

- [20] А.И. Мурзашев. ЖЭТФ, **135** (1), 122 (2009).
DOI: 10.1134/S1063776109010142
- [21] А.И. Мурзашев, Е.О. Шадрин. ЖЭТФ., **145** (6), 1161 (2014). DOI: 10.1134/S1063776114050148
- [22] N.V. Melnikova, A.I. Murzashev, T.E. Nazarova, E.O. Shadrin. Synthetic Metals., **220**, 292 (2016).
DOI: 10.1016/j.synthmet.2016.06.024
- [23] Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев. ФТТ, **53** (11), 2273 (2011) .
DOI: 10.1134/S1063783411110199
- [24] А.И. Мурзашев. Изв. вузов. Физика, **55** (5), 49 (2012).
DOI: 10.1007/s11182-012-9843-0
- [25] Б.В. Лобанов, А.И. Мурзашев. ФТТ, **55** (4), 797 (2013).
DOI: 10.1134/S1063783413040173
- [26] А.И. Мурзашев, Т.Э. Назарова. Физика металлов и металловедение, **115** (7), 675 (2014).
DOI: 10.1134/S0031918X14040103
- [27] А.И. Мурзашев, Т.Э. Назарова. ЖЭТФ, **146** (5), 1026 (2014). DOI: 10.1134/S106377611411017X
- [28] И.Е. Кареев, В.П. Бубнов, А.И. Мурзашев, Б.В. Лобанов и др. ФТТ, **57** (11), 2254 (2015).
DOI: 10.1134/S1063783415110189
- [29] А.И. Мурзашев, М.Ю. Кокурин, С.К. Паймеров. Опт. и спектр., **128** (9), 1238 (2020).
DOI: 10.1134/S0030400X20090143
- [30] Г.И. Миронов. ФТТ, **49** (3), 527 (2007).
DOI: 10.1134/S1063783407030316
- [31] K. Kikuchi, N. Nakahara, T. Wakabayashi et al. Chem. Phys. Lett., **188** (3–4), 177 (1992).
DOI: 10.1016/0009-2614(92)90005-8
- [32] Д. Эллиот, К. Добер. *Симметрия в физике* Т. 1 (Мир, Москва, 1983).
- [33] Hua Yang, Christine M. Beavers, Zhimin Wang et al. Angew. Chem. Int. Ed., **49** (5), 886 (2010).
DOI: 10.1002/anie.200906023