

01

Спинорное представление двойной группы икосаэдра и запутанные состояния волновых функций для фуллерена C_{60}

© А.Г. Сухарев

АО „ГНЦ РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований“,
108840 Троицк, Москва, Россия

e-mail: sure@triniti.ru

Поступила в редакцию 01.02.2022 г.

В окончательной редакции 20.04.2022 г.

Принята к публикации 02.05.2022 г.

Симметрия группы икосаэдра — инструмент, позволяющий получить аналитическое описание свойств фуллерена в рамках модели молекулярных орбиталей. Дальнейшее развитие модели фуллерена связано с учетом полуцелой статистики электронных состояний. Двойная группа икосаэдра описывает объекты обеих статистик, однако мы ограничимся ее подмножеством для фермионов — спинорным представлением группы икосаэдра. В этом представлении удастся снять ограничение на четность координатной части волновой функции и построить таблицу характеров для произвольных значений суммарного момента. Симметрия икосаэдра создает алгебраическую структуру кольца вычетов по модулю пять для проекций момента на выбранную ось. Поэтому состояния с проекцией суммарного момента $\pm 5/2$ целиком попадают в одно представление. Заполнение состояний с моментом выше $5/2$ приводит к возникновению волновых функций, состоящих из нескольких сцепленных спиноров.

Ключевые слова: двойная группа икосаэдра, неприводимые представления, спиноры, спин-орбитальное взаимодействие, запутывание.

DOI: 10.21883/OS.2022.07.52720.3215-22

1. Введение

В публикации мы покажем, что фуллерен, как и его двухмерный аналог — графен, обладает необычными топологическими свойствами. Известно, что созданная на основе графена односторонняя поверхность [1] (лента Мебиуса) превращает проводник в топологический изолятор (ток может течь только по краю ленты). Сворачивание ленты в трубку переключает свойства от проводника до полупроводника или изолятора в зависимости от способа склейки [2].

Фуллерен, как и его двухмерный аналог, также обнаружил необычные свойства. Так, Rb_3C_{60} при 30 К проявляет сверхпроводящее состояние [3]. Самое необычное свойство молекулы фуллерена — это симметрия икосаэдра. Этот тип симметрии долгое время существовал чисто гипотетически. С открытием молекулы C_{60} [4] стало возможным экспериментально исследовать свойства, вызванные этой точечной симметрией. Свойства симметрии позволяют описать структуру электронных уровней π -электронов для атомов, расположенных в узлах усеченного икосаэдра. Этой же симметрии подчинена также колебательная структура молекулы. И если фононная подсистема может рассматриваться в целочисленной статистике, то волновые свойства электронов подчиняются полуцелой статистике. Поэтому группа икосаэдра была расширена рассмотрением данного типа статистики. Данный объект получил название двойной группы икосаэдра. Если не учитывать влияние спинов на расположение электронных уровней энергии, то

обычная группа икосаэдра дает 10 представлений симметрии. Шестьдесят π -электронов формируют 60 различных типов уровней. Тридцать из них будет заполнено (по два электрона на уровень с учетом спина). Остальные свободны. Теория представлений позволяет предсказать тип каждого уровня (т.е. из какого он представления и его энергию). Размерность представления определяет степень вырождения уровня энергии (число подуровней с одним и тем же значением энергии). Рассмотрение фермионов в рамках двойной группы икосаэдра усложняет описание. Теперь число уровней удваивается — их число 120. Заполнено будет 60 нижних из них, если молекула находится в основном состоянии. Волновые функции описываются спинорами, уровни энергии, без учета обменных сил, сохраняются. Однако элементы представлений — новые. И это приводит к новым неожиданным результатам топологического характера. Однако для выявления этих особенностей пришлось построить полную таблицу волновых функций (здесь приводим первые 60 элементов для заполненных уровней системы) в рамках спинорного представления двойной группы икосаэдра. Неоднозначность разложения по новым представлениям группы снимается наложением слабого спин-орбитального взаимодействия.

2. Постановка задачи

В работе рассмотрена модель молекулы с симметрией икосаэдра, C_{12} и C_{60} . В каждой вершине расположен

один атом углерода, нижний индекс — число атомов. Первый случай — правильный икосаэдр, второй — усеченный икосаэдр. Подход молекулярных орбиталей Хюккеля применим в обоих случаях. Гамильтониан для метода молекулярных орбиталей в первом случае описывает взаимодействие между ближайшими соседями с помощью одной константы связи. В табличном представлении гамильтониана фигурирует только топология связей молекулы. Ранг матрицы можно понизить до 6 с помощью разделения решений по симметрии относительно центра инверсии. Молекула C_{12} обладает симметрией икосаэдра. Полная группа икосаэдра имеет 120 элементов. Ее подгруппа, включающая все повороты вокруг осей пятого, третьего и второго порядков, содержит вдвое меньше — 60 элементов. Между подгруппой поворотов и знакопеременной группой A_5 можно установить изоморфизм. Поэтому группу икосаэдра можно изучать на языке алгебры и на языке геометрии. Здесь выбран второй вариант. Группа из вершин C_{12} имеет меньшую размерность, чем размерность самой группы икосаэдра. А это дает возможность проследить, как заполняются неприводимые представления. Кстати, та же симметрию имеет двойственный правильный додекаэдр, но уже имеет 20 вершин. Группа икосаэдра имеет $5 \times 2 = 10$ классов сопряженных элементов, поэтому возможно 10 неприводимых представлений. Анализ знакопеременной группы A_5 позволяет прогнозировать набор представлений размерности 1, 3, 3, 4, 5. Каждое представление в наборе может быть как четным (индекс g), так и нечетным (индекс u). В геометрическом описании ось пятого порядка приводит к пяти видам круговой симметрии вида $e^{im\phi}$, где целое число $m = 0, \pm 1, \pm 2$. Представления различны по набору чисел m . Представление A имеет только $m = 0$. У представления T_1 размерность 3 и $m = 0, \pm 1$, у T_2 — размерность 3 и $m = 0, \pm 2$. Представление G — размерности 4, набор чисел имеет варианты $m = \pm 1, \pm 2$. Представление H охватывает весь набор из 5 чисел. В квантовой механике эти числа — проекция орбитального момента на ось. Решение задачи на собственные значения матрицы шестого ранга в модели молекулярных орбиталей позволяет найти два представления (A_g и H_g) в четном случае с $\lambda_{\text{even}} = 2 \pm 3$, а также два представления (T_{1u} и T_{2u}) в нечетном случае с $\lambda_{\text{odd}} = \pm\sqrt{5}$. Суммарная размерность пространств в обоих случаях равна 6. Представление G отсутствует. Анализ методом молекулярных орбиталей молекулы C_{60} также приводит к решению задачи на собственное значение матриц ранга 6. Отличие здесь в том, что в усеченном икосаэдре описание требует введения двух разных констант связи, поскольку длина ребер в пятиугольнике одна, а соединение пятиугольников происходит по ребру шестиугольника другой длины. Матрица гамильтониана для молекулы из 60 вершин имеет ранг 60, который с помощью выбора симметрии посредством квантового числа m и четности решения вновь понижается до матриц ранга 6. Поскольку число вершин совпадает с порядком группы A_5 , то полное

число реализующихся представлений совпадает с порядком группы, как это следует из теории представлений, т.е. $1^2 + 3^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2 = 60$. Так, представления T_1 и T_2 входят три раза. Два раза как нечетное и один раз как четное представление. Происходит так называемое спонтанное нарушение симметрии, так как 3 можно разбить на сумму двух целых только таким образом $3 = 2 + 1$. Аналогично $5 = 2 + 3$ и представление H появляется 5 раз, в том числе 3 раза как четное. Представление A_g представлено один раз, а A_u ни разу. Представление G дважды присутствует как четное и дважды как нечетное.

Таким образом, в модели молекулярных орбиталей переход от икосаэдра к усеченному икосаэдру позволяет заполнить девять из десяти строк таблицы характеров группы икосаэдра вдоль измерения неприводимых представлений. В группе из 60 вершин, собранных в позициях атомов углерода молекулы C_{60} , а значит, обладающих симметрией икосаэдра, нет только представления A_u . Таблица характеров позволяет ввести операцию скалярного произведения. Разные неприводимые представления ортогональны, а квадрат модуля неприводимого представления равен порядку группы. Также любой объект в пространстве представлений может быть разложен по неприводимым представлениям.

Таблица представлений может быть использована как для описания колебаний атомов в молекуле фуллере-на [5], так и для описания электронных состояний системы π -электронов для атомов углерода, связанных в молекулу фуллерена. В простейшем варианте теории на каждом уровне, полученном в рамках модели, расположено по 2 электрона с противоположными спинами. Заполняются они, как обычно, со дна ямы. Спины электронов между собой не взаимодействуют.

Идея двойной группы принадлежит Бете [6]. Г. Бете ввел операцию R для обозначения поворота на 360° . В то время как для обычных точечных групп из I_h поворот на 2π есть единичная операция, то в двойной группе симметрии I_h^D этот поворот дает другой эффект для новых неприводимых представлений $\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D) \subset \mathfrak{I}(I_h^D)$. Для них только двукратный повтор преобразования R есть единичная операция. То есть $R^2 = 1$ и $R = -1$ для новых представлений, что есть признак полуцелой статистики. Таким образом, в ячейках таблицы характеров, порожденной новой операцией R , представления $A, T_1, T_2, G, H \subset \mathfrak{I}(I_h^D)$ генерируют те же значения, что были без этой операции. Характеристики новых представлений после операции R меняют знак. Размерности новых неприводимых представлений четные числа: 2, 2, 4, 6. Сумма их квадратов вновь приводит к числу вершин $2^2 + 2^2 + 4^2 + 6^2 = 60$. Эту часть неприводимых представлений двойной группы будем называть спинорной $\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$, поскольку волновые функции свободных нерелятивистских частиц со спином $\frac{1}{2}$ ($SU(2)$ симметрия) представляются посредством шаровых спиноров [7]. Для представлений из $\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$

мы выбрали следующие обозначения $\Gamma_6 \equiv \Gamma_{1/2}$, $\Gamma_7 \equiv \Gamma_{7/2}$ и $\Gamma_8 \equiv G_{3/2}$, $\Gamma_9 \equiv I_{5/2}$. Их ортогональность неприводимым представлениям группы икосаэдра $\mathfrak{I}(I_h)$ обеспечивается только на расширенном наборе классов сопряженных элементов (операций). Из-за четности представлений операция поворота относительно осей второго порядка приводит к нулевому значению в соответствующем столбце таблицы характеров. Общее число (как четных, так и нечетных) неприводимых представлений таково: 2 двумерных в каждом неприводимом представлении, 4 четырехмерных и 6 шести-мерных. Ожидается, что по четности ситуация симметрична.

3. Неприводимые представления группы икосаэдра

Усеченный икосаэдр имеет $B = 12 \times 5 = 60$ вершин, $P = 30 + 12 \times 5 = 90$ ребер и $\Gamma = 20 + 12 = 32$ граней. Размещая в каждой вершине усеченного икосаэдра атом углерода, получаем модель фуллера C_{60} . В рамках теории молекулярных орбиталей Хюккеля мы можем отслеживать состояние волновой функции в 60 вершинах, ограничиваясь тем же числом взаимодействующих наименее связанных π -электронов, считая, что в каждом таком узле сидит по одному π -электрону. Поскольку группа икосаэдра содержит 120 элементов, из которых 60 соответствуют поворотам, то числа вершин в усеченном икосаэдре недостаточно, чтобы реализовать полную 10×10 систему характеров (табл. 1). Число представлений и классов сопряженных преобразований равно 10 (с учетом инверсии P). Классы формируются из единичного преобразования, поворотов относительно оси пятого порядка $12C_5, 12C_5^2$ (здесь 12 — число элементов в классе) и поворотов относительно осей третьего и второго порядков C_3, C_2 . Остальные классы наряду с поворотом включают инверсию [8]. В колонке единичного преобразования E прослеживается размерность пространства каждого из неприводимых представлений. Полное число волновых функций (состояний электронов) совпадает с рангом матрицы гамильтониана, т.е. с числом вершин. Размерность пространства представлений $\mathfrak{I}(I_h)$ задается этим числом. В разбиении на неприводимые представления коэффициенты кратности показывают, сколько раз данное представление появляется в $\mathfrak{I}(I_h)$. Если кратность ставить перед представлением, то в фуллере реализуется следующая композиция неприводимых представлений: $1A_g, 2T_{1u}, 2T_{2u}, 1T_{1g}, 1T_{2g}, 2G_u, 2G_g, 2H_u, 3H_g$. Без учета четности: $1A, 3T_1, 3T_2, 4G, 5H$, кратность неприводимого представления равна его размерности (число вершин совпадает с порядком знакопеременной группы A_5), и суммарная размерность представлений совпадает с порядком группы. Также нет неприводимого представления A_u .

Направим ось z через центр усеченного икосаэдра и центр грани пятиугольника, как представлено на

Таблица 1. Таблица характеров неприводимых представлений группы икосаэдра $\mathfrak{I}(I_h)$, $r = (1 + \sqrt{5})/2$ — корень уравнения $r^2 = r + 1$. Индекс g означает четное, а u — нечетное представления относительно центральной инверсии P

$\mathfrak{I}(I_h)$	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	P	$12S_6^3$	$12S_{10}$	$20S_3$	$15\sigma_v$
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
T_{1g}	+3	+r	1-r	0	-1	+3	r	1-r	0	-1
T_{2g}	+3	1-r	r	0	-1	+3	1-r	r	0	-1
G_g	+4	-1	-1	+1	0	+4	-1	-1	+1	0
H_g	+5	0	0	-1	+1	+5	0	0	-1	+1
A_u	+1	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1	-1
T_{1u}	+3	+r	1-r	0	-1	-3	-r	r-1	0	+1
T_{2u}	+3	1-r	r	0	-1	-3	r-1	-r	0	+1
G_u	+4	-1	-1	+1	0	-4	+1	+1	-1	0
H_u	+5	0	0	-1	+1	-5	0	0	+1	= 1

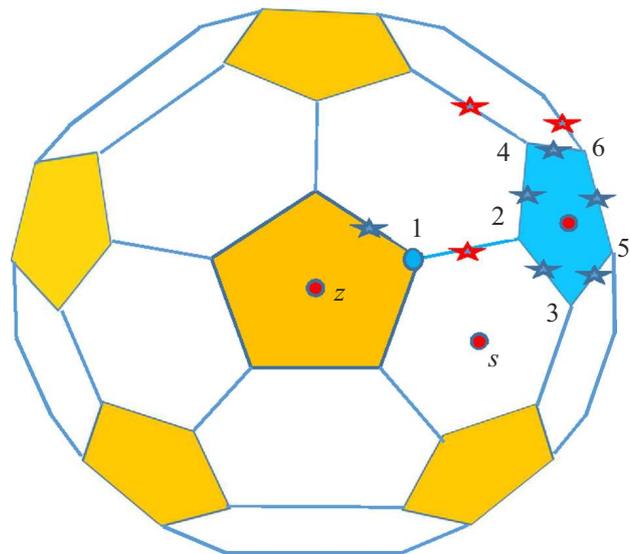


Схема фуллера и шаблона для группы поворотов из I_h .

рисунке. Определим декартову тройку осей так, чтобы ось симметрии фигуры-шаблона из 6 точек, выделенной цветом, проектировалась на ось x . Данная фигура при повороте вокруг оси z на угол, кратный $2\pi/5$, покрывает все точки тела в верхней части полупространства. Задав только 6 вершин на указанном фрагменте усеченного икосаэдра, с помощью двух квантовых чисел, задающих свойства симметрии относительно оси пятого порядка и инверсии относительно центра икосаэдра, можно описать все состояния системы. Первое квантовое число обозначим буквой m , второе — буквой p . Представления $A_g, T_{1g}, T_{2g} \dots$ симметричны относительно инверсии, и квантовое число p равно 1. Для представ-

Таблица 2. Формулы характеров неприводимых представлений группы икосаэдра

Представление I_h	Формула для характера $\chi(\varphi)$
A	1
T_1	$1 + 2 \cos \varphi$
T_2	$1 + 2 \cos 7\varphi$
G	$2 \cos 3\varphi + 2 \cos 4\varphi$
H	$1 + 2 \cos \varphi + 2 \cos 2\varphi$

Таблица 3. Таблица характеров χ для неприводимых представлений двойной группы икосаэдра, C_i — пять разных классов сопряженных поворотов из группы икосаэдра

$\mathfrak{I}(I_h^D)$	C_i	$P \times C_i$	$R \times C_i$	$R \times P \times C_i$
$\mathfrak{I}(I_h)$	$\chi(\mathfrak{I}(I_h))$		$\chi(\mathfrak{I}(I_h))$	
$\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$	$\chi(\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D))$		$-\chi(\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D))$	

лений T_{1u}, T_{2u}, G_u, H_u реализуется антисимметричная комбинация значений волновых функций относительно операции инверсии, и квантовое число p равно -1 . Квантовое число m задает множитель перед волновой функцией $\eta^m = \exp(i \frac{2\pi}{5} m)$, описывающий осцилляции волновой функции при каждом повороте шаблона. Всего существует пять нетривиальных вариантов или состояний (с $m = 0, \pm 1, \pm 2$). Неприводимые представления отличаются набором комбинаций состояния числа m . Представление A_g содержит только состояние с $m = 0$. Представление H включает все возможные состояния. Представление G задается четырьмя проекциями с $m = \pm 1, \pm 2$, представление T_1 — тремя проекциями с $m = 0, \pm 1$. Самая необычное представление T_2 , в нем нет проекций ± 1 (т.е. $m = 0, \pm 2$). Таким образом, число m соответствует проекции орбитального момента $L = 2$ на ось z для неприводимого представления группы вращений $SO(3)$ [9]. Отметим, что проекция момента на ось z определяется набором целых чисел, не превышающих 2 по абсолютной величине (группа икосаэдра). На заданном наборе поворотов, сохраняющем усеченный икосаэдр на месте, можно получить таблицу характеров для орбитального момента l . Представление из $SO(3)$ с заданным орбитальным моментом есть прямая сумма ряда неприводимых представлений икосаэдра (только для $L \leq 2$ представления эквивалентны друг другу).

Для характеров в левой части табл. 1 (без операции инверсии P) их значения могут быть представлены формулами из табл. 2 как функции угла, где $\varphi = 0, \frac{2\pi}{5}, \frac{4\pi}{5}, \frac{2\pi}{3}, \pi$.

4. Неприводимые представления двойной группы икосаэдра

Идея двойной группы симметрии была введена достаточно давно [6]. В работе мы следуем подходу из работы [10], реализующему эти идеи применительно к группе икосаэдра. Бете ввел операцию R для обозначения поворота на 2π , который для элементов целочисленной статистики совпадает с обычным поворотом, так что значение характера после него не изменяется, а для полуцелой — происходит смена знака по отношению к элементу таблицы без этой операции (табл. 3). В первом случае это представления, представленные ранее в табл. 1 (неприводимые представления A, T_1, T_2, G, H). Если бы можно было использовать язык непрерывных групп Ли, то вторая часть представлений обладала бы симметрией $SU(2)$. Однако у нас конечные точечные группы. Элементы неприводимых представлений для второго случая обозначают как $\Gamma_6 \equiv E_{1/2}, \Gamma_7 \equiv E_{7/2}$ и $\Gamma_8 \equiv G_{3/2}, \Gamma_9 \equiv I_{5/2}$. В статье [10] автор для представлений $\mathfrak{I}(I_h)$ предлагает рассматривать операцию R как движение по нормально склеенной ленте без скрутки. Во втором случае для элементов неприводимых представлений из $\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$ лента перекручена в одностороннюю поверхность — ленту Мебиуса. Только при двукратном обороте точка возвращается в исходную позицию.

Возможности исходного набора классов сопряженных элементов (без операции R) продемонстрированы в источниках [11,12]. Усеченную таблицу характеров двойной группы икосаэдра строят, разбивая элементы разной статистики по четности. Так, из табл. 1 берутся только четные представления $A_g, T_{1g}, T_{2g}, G_g, H_g$, а из табл. 4 — нечетные неприводимые представления. Это два двумерных представления $E_{u1/2}, E_{u7/2}$, одно четырехмерное $G_{u3/2}$ и одно шестимерное $I_{u5/2}$ представления. Представления разной четности будут ортогональны в усеченной таблице характеров, построенной только на десяти классах сопряженных элементов. Представления одной четности теряют в ней ортогональность, что позволяет связать эти представления между собой. Таблица 4 — таблица характеров неприводимых представлений из набора с полуцелой статистикой $\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$ на исходном множестве из десяти классов сопряженных элементов. Остальная часть таблицы характеров этого представления находится из табл. 3.

Для характеров в левой части табл. 4 (без операции инверсии P) их значения могут быть представлены формулами из табл. 5. Теперь операции над характерами можно проводить с помощью формул. Характер прямого произведения групп задается на каждом элементе группы как произведение характеров. Из табл. 5 следует, что множитель $2 \cos(\varphi/2)$ присутствует во всех представлениях и может быть факторизован. Множитель в фигурных скобках ассоциируется с представлениями из группы икосаэдра $\mathfrak{I}(I_h)$

Таблица 4. Таблица характеров для неприводимых представлений $\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$ из двойной группы икосаэдра с полуцелой статистикой

$\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	P	$12S_{10}^3$	$12S_{10}$	$20S_3$	$15\sigma_v$
$E_{g1/2}$	+2	+r	r - 1	+1	0	+2	+r	r - 1	+1	0
$E_{g7/2}$	+2	1 - r	-r	+1	0	+2	1 - r	-r	+1	0
$G_{g3/2}$	+4	+1	-1	-1	0	+4	+1	-1	-1	0
$I_{g5/2}$	+6	-1	+1	0	0	+6	-1	+1	0	0
$E_{u1/2}$	+2	+r	r - 1	+1	0	-2	-r	1 - r	-1	0
$E_{u7/2}$	+2	1 - r	-r	+1	0	-2	r - 1	r	-1	0
$G_{u3/2}$	+4	+1	-1	-1	0	-4	-1	+1	+1	0
$I_{u5/2}$	+6	-1	+1	0	0	-6	+1	-1	0	0

Таблица 5. Формулы характеров для неприводимых представлений \mathfrak{I}_σ группы I_h^D и разложение некоторых тензорных произведений представлений

$\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$	Формула для характера $\chi(\varphi)$
$E_{1/2}$	$2 \cos(\varphi/2) = 2 \cos(\varphi/2)\{1\}$
$E_{7/2}$	$2 \cos(7\varphi/2) = 2 \cos(\varphi/2)\{2 \cos 3\varphi - 2 \cos 2\varphi + 2 \cos \varphi - 1\}$
$G_{3/2}$	$2 \cos(\varphi/2) + 2 \cos(3\varphi/2) = 2 \cos(\varphi/2)\{2 \cos \varphi\}$
$I_{5/2}$	$2 \cos(\varphi/2) + 2 \cos(3\varphi/2) + 2 \cos(5\varphi/2) = 2 \cos(\varphi/2)\{2 \cos(2\varphi) + 1\}$
$E_{1/2} \otimes T_2 = I_{5/2}$ $E_{1/2} \otimes G = I_{5/2} \oplus E_{7/2}$ $E_{1/2} \otimes T_1 = E_{1/2} \oplus G_{3/2}$ $E_{1/2} \otimes H = G_{3/2} \oplus I_{5/2}$	$2 \cos(\varphi/2)(1 + 2 \cos 7\varphi) = 2 \cos(\varphi/2)(1 + 2 \cos 2\varphi)$ $4 \cos(\frac{\varphi}{2})(\cos 3\varphi + \cos 4\varphi) = 4 \cos(\frac{\varphi}{2})(\cos 3\varphi + \cos \varphi)$ $2 \cos(\varphi/2)(1 + 2 \cos \varphi)$ $2 \cos(\varphi/2)/\{2 \cos 2\varphi + 2 \cos \varphi + 1\}$

Таблица 6. Разложение представления с заданным полуцелым моментом J в прямую сумму неприводимых представлений из двойной группы икосаэдра

Модуль суммарного момента $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$	Сумма представлений в $\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$	Сумма размерностей в $\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$
$J = 1/2$	$E_{1/2}$	2
$J = 3/2$	$G_{3/2}$	4
$J = 5/2$	$I_{5/2}$	6
$J = 7/2$	$E_{7/2} \oplus I_{5/2}$	2 + 6
$J = 9/2$	$G_{3/2} \oplus I_{5/2}$	4 + 6
$J = 11/2$	$E_{1/2} \oplus G_{3/2} \oplus I_{5/2}$	2 + 4 + 6
$J = 13/2$	$E_{1/2} \oplus E_{7/2} \oplus G_{3/2} \oplus I_{5/2}$	2 + 2 + 4 + 6
$J = 15/2$	$G_{3/2} \oplus 2I_{5/2}$	4 + 2 × 6

с целочисленной статистикой. То есть $E_{1/2} = A \otimes E_{1/2}$. Представления T_u и H_g соответствуют состояниям с целыми орбитальными моментами $L = 1, 2$. Прямое произведение представления $E_{1/2}$ на них есть сумма следующих представлений: $E_{1/2} \otimes T_1 = E_{1/2} \oplus G_{3/2}$ и $E_{1/2} \otimes H = G_{3/2} \oplus I_{5/2}$. Так как на семействе поворотов икосаэдра два тригонометрических выражения совпадают $\cos 4\varphi + \cos 7\varphi = \cos \varphi + \cos 2\varphi$, то $I_{5/2} \oplus (E_{7/2} \oplus I_{5/2}) = E_{1/2} \otimes \{G \oplus T_2\}$. Как видно из этих примеров, представление $G \oplus T_2$ с орбитальным моментом $L = 3$ при умножении на представление со спином $\frac{1}{2}$ расщепляется на два представления с полуцелым моментом $L \pm \frac{1}{2} \rightarrow J_{L \pm \frac{1}{2}}$. Эти представления будут запутаны между собой. В группе вращения $SO(3)$ неприводимые представления различаются моментом J , а их характеры задаются [13] формулой $\chi_J(C_\varphi) = \sin[(2J + 1)\varphi/2] / \sin(\varphi/2)$, φ — угол поворота оператора C_φ . Разложения по неприводимым представлениям даны в табл. 6. Четность координатной части представления совпадает с четностью числа L .

Теперь описание свойств электронных состояний фуллерена с полуцелым моментом можно изучать с помощью данных работы [8], в которой получено наилучшее приближение представлений из $\mathfrak{I}(I_h)$ через сферические функции. Эти данные теперь можно применить при разложении представлений из $\mathfrak{I}(I_h^D)$ по спинарам.

5. Представление спиноров

Свободный нерелятивистский электрон с полным моментом $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ может быть описан спинорами посредством техники $3j$ -символов Вигнера. Так как спин принимает значения $\sigma = \pm 1/2$, то волновая функция электрона определяется набором квантовых чисел $j, l = j \mp 1/2, m$. Здесь l — орбитальный момент, j, m — полуцелый суммарный момент и его проекция на ось z . Итак, волновая функция равна сумме двух компонент [14]:

$$\psi_{jl}^m = (-1)^{l-j+1/2} c_{jl,+m} \Phi_{l,m-1/2}(\mathbf{r}) \chi(\uparrow) + c_{jl,-m} \Phi_{l,m+1/2}(\mathbf{r}) \chi(\downarrow).$$

Когда $l = j - 1/2$, $c_{jl,+m} = \sqrt{\frac{l+m}{2j}}$ и $\Phi_{l,m \mp 1/2} = Y_{l,m \mp 1/2}$ — сферические функции. В случае, когда $l = j + 1/2$, $c_{jlm} = \sqrt{\frac{l-m+1}{2j+2}}$, координатная функция сохраняет вид, но перед первым слагаемым возникает знак минус. В двухкомпонентной форме спинор $\psi_{jl}^m \equiv \begin{pmatrix} m \\ jl \end{pmatrix}$ будем записывать как

$$\begin{pmatrix} (-1)^{l-j+1/2} c_{jl,+m} Y_{l,m-1/2} \\ c_{jl,-m} Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix}.$$

Как уже обсуждалось, гамильтониан для π -электрона в состоянии с симметрией, описываемой группой икосаэдра, может быть описан матрицей 6×6 . Для двойной группы икосаэдра размерность матрицы удваивается, поскольку есть две спиновые компоненты. Обращаясь к рисунку, можно увидеть, что вершина 6 шаблона имеет связь с вершиной в нижней полусфере (обозначена красной звездочкой). Для вычисления взаимодействия вершины 6 по связи с вершиной в нижней полусфере необходимо, используя операции поворота вокруг оси z и инверсии, получить значение волновой функции из исходного шаблона. Отметим, что спин является аксиальным вектором. При инверсии такие векторы не меняют знак, а также сохраняют значение проекции на ось z . Отсюда следует, что при инверсии каждая из компонент спинора может преобразовываться только через саму себя,

$$P \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix} \rightarrow \pm i \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Константа после двукратного применения инверсии равна -1 в случае фермиона. При повороте вокруг оси z каждая из компонент спинора также преобразуется только через саму себя:

$$U_z(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix}.$$

Лишь поворот вокруг осей x или y переворачивает спин. Поэтому вид гамильтониана с симметрией двойной группы икосаэдра можно представить в блочно-диагональном виде:

$$\hat{H}^D \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H} & 0 \\ 0 & \hat{H} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Проскольку спектр собственных значений диагональных блоков гамильтониана определяется набором неприводимых представлений из $\mathfrak{I}(I_h)$, то решение в $\mathfrak{I}(I_h^D)$ можно сконструировать с тем же собственным числом, когда одно и то же неприводимое представление берется для верхней и нижней частей спинора (если размерность неприводимых представлений больше 1, сами волновые функции будут разными!). Остается найти нормировочные множители.

Задача на собственное значение таким образом — это задача с матрицей 6×6 , как в случае группы икосаэдра I_h . Матричный гамильтониан содержит только вещественные числа. С помощью унитарного преобразование U гамильтониан $\hat{H} = U^+ H U$ можно привести [8,9] к виду (3) (см. ниже).

Спектр собственных значений следует из уравнения на равенство нулю детерминанта $\det(\hat{H} - \lambda E) = 0$. Здесь введены обозначения $c_m = \cos(\frac{2\pi m}{5})$, $s_m = \sin(\frac{2\pi m}{5})$ и $\eta^m = \exp(i\frac{2\pi}{5}m)$, $\eta^m + \eta^{-m} = 2c_m$. Матрица унитарного

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\alpha 2c_m & -(2-\alpha) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(2-\alpha) & 0 & -\alpha\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha\sqrt{2} & -(2-\alpha)c_m & (2-\alpha)s_m & -\alpha & 0 \\ 0 & 0 & (2-\alpha)s_m & (2-\alpha)c_m & 0 & -\alpha \\ 0 & 0 & -\alpha & 0 & -\alpha - (2-\alpha)pc_{3m} & (2-\alpha)ps_{3m} \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha & (2-\alpha)ps_{3m} & \alpha + (2-\alpha)pc_{3m} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

преобразования равна

$$U = \begin{pmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & T & 0 \\ 0 & 0 & T \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix}.$$

Первые 18 неприводимых представлений в спинорном представлении группы икосаэдра приведены в табл. 7.

В случае $L \leq 2$ решение находится просто, поскольку представление имеет решение в виде одного спинора. Проекция $\pm \frac{5}{2}$ есть только в представлении $I_{g5/2}$! Нетривиальные моменты возникают уже при рассмотрении орбитального момента, равного трем. Представление с орбитальным моментом $L = 3$ разлагается на сумму двух неприводимых представлений $G_u \oplus T_{2u}$, которые отличаются набором доступных проекций. Представление G_u не имеет нулевой проекции, а T_{2u} — проекций с $m = \pm 1$. Кроме того, выше показано, что $E_{1/2} \otimes T_2 = I_{5/2}$ и $E_{1/2} \otimes G = I_{5/2} \oplus E_{7/2}$.

Рассмотрим случай с $L = 3$. Проекция на ось z орбитального момента $m = 2$ неотличима на наборе поворотов группы икосаэдра от проекции момента $m = -3$. Именно это свойство и лежит в основе алгебры кольца (вычетов) по модулю простого числа пять. Поэтому, когда суммарный момент возникает на основе орбитального момента, равного трем и выше, представление формируется как минимум двумя спинорами с разными проекциями суммарного момента. Рассмотрим комбинацию спиноров вида

$$\begin{aligned} & \left(-\sqrt{\frac{3}{5}} \left|_{5/2,3}^{5/2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} \left|_{7/2,3}^{-5/2} \right\rangle \right) \\ &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{7}} \left(\sqrt{\frac{3}{5}} Y_{3,2} + \sqrt{\frac{2}{5}} Y_{3,-3} \right)_{T_u} \\ \sqrt{\frac{6}{7}} \left(-\sqrt{\frac{3}{5}} Y_{3,3} + \sqrt{\frac{2}{5}} Y_{3,-2} \right)_{\bar{G}_u} \end{pmatrix}. \quad (4) \end{aligned}$$

Верхняя компонента спинора имеет вид представления T_u , нижняя — \bar{G}_u , где черта означает инвертирование координаты z . С помощью комбинации спиноров

$$\left(\sqrt{\frac{6}{7}} \left|_{5/2,3}^{5/2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{7}} \left|_{7/2,3}^{-5/2} \right\rangle \right) = \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{3,3} \end{pmatrix}$$

нижнюю компоненту спинора можно привести также к представлению T_u , $\sqrt{5}$ — нормировочный множитель:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \left(\sqrt{\frac{3}{5}} Y_{3,2} + \sqrt{\frac{2}{5}} Y_{3,-3} \right)_{T_u} \\ 2 \left(-\sqrt{\frac{2}{5}} Y_{3,3} + \sqrt{\frac{3}{5}} Y_{3,-2} \right)_{T_u} \end{pmatrix} \\ &= \sqrt{\frac{7}{5}} \times \left\{ \left(-\sqrt{\frac{3}{5}} \left|_{5/2,3}^{5/2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} \left|_{7/2,3}^{-5/2} \right\rangle \right) \right. \\ & \left. + \sqrt{\frac{2}{35}} \left(\sqrt{\frac{6}{7}} \left|_{5/2,3}^{5/2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{7}} \left|_{7/2,3}^{-5/2} \right\rangle \right) \right\}. \end{aligned}$$

Если использовать комбинацию спиноров

$$\left(\sqrt{\frac{1}{7}} \left|_{5/2,3}^{-5/2} \right\rangle + \sqrt{\frac{6}{7}} \left|_{7/2,3}^{-5/2} \right\rangle \right) = \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{3,-2} \end{pmatrix},$$

то спинорное представление будет иметь другой коэффициент в нижней части спинора

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{7}{10}} \left(-\sqrt{\frac{3}{5}} \left|_{5/2,3}^{5/2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} \left|_{7/2,3}^{-5/2} \right\rangle \right) + \sqrt{\frac{1}{10}} \left(\sqrt{\frac{1}{7}} \left|_{5/2,3}^{-5/2} \right\rangle \right. \\ & \left. + \sqrt{\frac{6}{7}} \left|_{7/2,3}^{-5/2} \right\rangle \right) = \sqrt{\frac{1}{10}} \begin{pmatrix} \left(\sqrt{\frac{3}{5}} Y_{3,2} + \sqrt{\frac{2}{5}} Y_{3,-3} \right)_{T_u} \\ 3 \left(-\sqrt{\frac{2}{5}} Y_{3,3} + \sqrt{\frac{3}{5}} Y_{3,-2} \right)_{T_u} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Эта неоднозначность показывает, что можно выбрать два ортогональных вектора на базе этих двух комбинаций. Результат этих и других вариантов спиноров сведен в продолжениях последней таблицы (табл. 7–10).

Поскольку $E_{1/2} \otimes G = I_{5/2} \oplus E_{7/2}$, исходное представление $5G_u(3)$ распадается на два представления — двумерное $E_{7/2}$ и шестимерное $I_{5/2}$. Проекции суммарного момента $m_j = \pm 3/2$ дублируются в обоих представлениях. Это представление 25–26 и 29–30. Выбор разбиения в этом случае достаточно условный, так как оба представления имеют равную энергию уровней. Ниже мы снимем эту неопределенность. Ортогональность набора элементов представлений обеспечена по построению. Подчеркнем, что основные сложности в представлении возникают из-за пропуска некоторых проекций момента на ось в базовом представлении. Так, представление 19, построенное на базе $4T_{2u}(3)$, не имеет проекций орбитального момента, равных ± 1 . Поэтому коэффициент нижней компоненты волновой функции перед $Y_{3,1}$ должен быть нулем. Это обеспечивается суперпозицией вида $\sqrt{3/7} \left|_{5/2,3}^{1/2} \right\rangle - \sqrt{4/7} \left|_{7/2,3}^{1/2} \right\rangle$. Аналогично и в остальных

Таблица 7. Неприводимые представления двойной группы икосаэдра I_h^D , $L \leq 2$

Представление		Волновая функция (и разложение по спинорам)
$\mathfrak{I}(I_h)(L)$	$\mathfrak{I}_\sigma(I_h^D)$	$\Psi_{j,l}^m \equiv j,l\rangle$
$1A_g(0)$	$E_{g1/2}$	1. $\begin{pmatrix} Y_{00} \\ 0 \end{pmatrix} = 1/2,0\rangle$ 2. $\begin{pmatrix} 0 \\ Y_{00} \end{pmatrix} = 1/2,0\rangle$
$2T_{1u}(1)$	$E_{u1/2}$	3. $\begin{pmatrix} -\sqrt{1/3}Y_{1,0} \\ \sqrt{2/3}Y_{1,1} \end{pmatrix} = 1/2,1\rangle$ 4. $\begin{pmatrix} -\sqrt{2/3}Y_{1,-1} \\ \sqrt{1/3}Y_{1,0} \end{pmatrix} = 1/2,1\rangle$
$2T_{1u}(1)$	$G_{u3/2}$	5. $\begin{pmatrix} \sqrt{2/3}Y_{1,0} \\ \sqrt{1/3}Y_{1,1} \end{pmatrix} = 3/2,1\rangle$ 6. $\begin{pmatrix} \sqrt{1/3}Y_{1,-1} \\ \sqrt{2/3}Y_{1,0} \end{pmatrix} = 3/2,1\rangle$ 7. $\begin{pmatrix} Y_{1,1} \\ 0 \end{pmatrix} = 3/2,1\rangle$ 8. $\begin{pmatrix} 0 \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix} = 3/2,1\rangle$
$3H_g(2)$	$G_{g3/2}$	9. $\begin{pmatrix} -\sqrt{2/5}Y_{2,0} \\ \sqrt{3/5}Y_{2,1} \end{pmatrix} = 3/2,2\rangle$ 10. $\begin{pmatrix} -\sqrt{3/5}Y_{2,-1} \\ \sqrt{2/5}Y_{2,0} \end{pmatrix} = 3/2,2\rangle$ 11. $\begin{pmatrix} -\sqrt{1/5}Y_{2,1} \\ \sqrt{4/5}Y_{2,2} \end{pmatrix} = 3/2,2\rangle$ 12. $\begin{pmatrix} -\sqrt{4/5}Y_{2,-2} \\ \sqrt{1/5}Y_{2,-1} \end{pmatrix} = 3/2,2\rangle$
$3H_g(2)$	$I_{g5/2}$	13. $\begin{pmatrix} \sqrt{3/5}Y_{2,0} \\ \sqrt{2/5}Y_{2,1} \end{pmatrix} = 5/2,2\rangle$ 14. $\begin{pmatrix} \sqrt{2/5}Y_{2,-1} \\ \sqrt{3/5}Y_{2,0} \end{pmatrix} = 5/2,2\rangle$ 15. $\begin{pmatrix} \sqrt{4/5}Y_{2,1} \\ \sqrt{1/5}Y_{2,2} \end{pmatrix} = 5/2,2\rangle$ 16. $\begin{pmatrix} \sqrt{1/5}Y_{2,-2} \\ \sqrt{4/5}Y_{2,-1} \end{pmatrix} = 5/2,2\rangle$ 17. $\begin{pmatrix} Y_{2,2} \\ 0 \end{pmatrix} = 5/2,2\rangle$ 18. $\begin{pmatrix} 0 \\ Y_{2,-2} \end{pmatrix} = 5/2,2\rangle$

случаях. Таким образом, на этом примере (табл. 8) мы видим, что представления для $L = 3$ являются суперпозицией спиноров с $J = 5/2$ и $J = 7/2$. И они запутаны, чтобы обеспечить групповые свойства системы. Отметим, обе компоненты координатной части волновой функции (верхняя и нижняя) должны быть решением гамильтониана с одной и той же энергией, что приводит к требованию о принадлежности к одному и тому же представлению. В конечном итоге это накладывает определенные ограничения топологического характера: чистых jj -представлений нет. Наличие спина у электрона и связанного с ним магнитного момента приводит к дополнительному взаимодействию между электроном и атомом. Движение электрона в электростатическом поле ядра атома приводит к возникновению магнитного поля в системе координат электрона. Магнитное поле — результат векторного произведения скорости электрона на электрическое поле ядра. Поле направлено по радиусу-вектору, а векторное произведение $[\mathbf{r} \times \mathbf{v}]$ продуцирует орбитальный момент электрона. Поэтому данное взаимодействие называют спин–орбитальным. С учетом экранировки ядра прочими электронами в случае молекулы C_{60} получим оценку спин–орбитального взаимодействия [15]:

$$V = \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \left(\frac{dU}{dr} \right) \Big|_{r=1.4a_B} \frac{\mathbf{ls}}{R_f} = R_y \frac{a_B}{R_f} \frac{\alpha^2}{2} (\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2).$$

Здесь $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ — радиус Бора, $R_y = \frac{e^2}{2a_B}$ — единица энергии ридберг, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ — постоянная тонкой структу-

ры. $R_f/a_B = 6.62$ — радиус молекулы фуллера в атомных единицах. Поскольку $\langle \mathbf{l}^2 \rangle = L(L + 1)$, $\langle \mathbf{s}^2 \rangle = 3/4$, а разность значений величины $\langle \mathbf{j}^2 \rangle$ между состояниями с полными моментами $J = 5/2$ и $J = 7/2$ ($L = 3$) равна 7, максимальное расщепление энергии подуровней разных спинорных представлений не превышает величину

$$\Delta V = R_y \frac{7a_B}{R_f} \frac{\alpha^2}{2} = 0.4 \text{ meV}. \tag{5}$$

Оценка (5) учитывает, что разные подуровни имеют разные весовые коэффициенты в суперпозициях спиноров. Таблица раскрывает набор собственных функций для заполненных состояний электронов в фуллере. За редким исключением происходит запутывание спиноров с моментами $J = L - 1/2 \oplus J = L + 1/2$. Если учитывать спин-орбитальное взаимодействие, то вырождение может исчезнуть. В этом случае разложение исходного представления, например $E_{1/2} \otimes H = G_{3/2} \oplus I_{5/2}$, будет происходить таким образом, чтобы энергия элементов внутри новых представлений была одинакова. Пока мы не ввели спин-орбитальное расщепление, сохраняется произвол в выборе подпространств $G_{3/2} \oplus I_{5/2}$ из-за совпадения уровней по энергии. Учет спин-орбитального взаимодействия позволяет ввести инвариант, определяющий уровень энергии внутри новых представлений (инвариант задается суммированием квадратов ненулевых амплитуд спиноров в рассматриваемом представлении с весами $\xi_{1,2}$, зависящими от мо-

Таблица 8. Продолжение табл. 7. Неприводимые представления двойной группы икосаэдра I_h^D с $L = 3$ и разложение по спинорам $\Psi_{jl}^m = \sum \alpha_{jlm} |j,l\rangle$

Представление		Волновая функция (и разложение по спинорам)
$\mathfrak{T}(I_h)(L)$	$\mathfrak{T}_\sigma(I_h^D)$	$\Psi_{jl}^m = \sum \alpha_{jlm} j,l\rangle$
$4T_{2u}(3)$	$I_{u5/2}$ $Inv = 0$	19. $\begin{pmatrix} -Y_{3,0} \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{3/7} _{5/2,3}^{1/2} \rangle - \sqrt{4/7} _{7/2,3}^{1/2} \rangle$
		20. $\begin{pmatrix} 0 \\ Y_{3,0} \end{pmatrix} = \sqrt{3/7} _{5/2,3}^{-1/2} \rangle + \sqrt{4/7} _{7/2,3}^{-1/2} \rangle$
		21. $\frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{3}Y_{3,2} + \sqrt{2}Y_{3,-3} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{3}{5}} (\sqrt{\frac{5}{7}} _{5/2,3}^{3/2} \rangle + \sqrt{\frac{2}{7}} _{7/2,3}^{3/2} \rangle) + \sqrt{\frac{2}{5}} _{7/2,3}^{-7/2} \rangle$
		22. $\frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \sqrt{2}Y_{3,3} - \sqrt{3}Y_{3,-2} \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{3}{5}} (\sqrt{\frac{5}{7}} _{5/2,3}^{-3/2} \rangle + \sqrt{\frac{2}{7}} _{7/2,3}^{-3/2} \rangle) + \sqrt{\frac{2}{5}} _{7/2,3}^{7/2} \rangle$
$5G_u(3)$	$E_{u7/2}$ $Inv = \frac{3}{2}$	23. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} \sqrt{3}Y_{3,2} + \sqrt{2}Y_{3,-3} \\ \sqrt{3}Y_{3,-2} - \sqrt{2}Y_{3,3} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \times \{(-\sqrt{\frac{27}{35}} _{5/2,3}^{5/2} \rangle$ $\sqrt{\frac{8}{35}} _{7/2,3}^{5/2} \rangle) + (-\sqrt{\frac{3}{35}} _{5/2,3}^{-5/2} \rangle + \sqrt{\frac{32}{35}} _{7/2,3}^{-5/2} \rangle)\}$
		24. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} \sqrt{2}Y_{3,-3} + \sqrt{3}Y_{3,2} \\ \sqrt{2}Y_{3,3} - \sqrt{3}Y_{3,-2} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \times \{(-\sqrt{\frac{27}{35}} _{5/2,3}^{-5/2} \rangle$ $-\sqrt{\frac{8}{35}} _{7/2,3}^{-5/2} \rangle) + (\sqrt{\frac{3}{35}} _{5/2,3}^{5/2} \rangle + \sqrt{\frac{32}{35}} _{7/2,3}^{-5/2} \rangle)\}$
		25. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} -\sqrt{5}Y_{3,1} \\ -\sqrt{2}Y_{3,2} + \sqrt{3}Y_{3,-3} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10}} (-\sqrt{7} _{7/2,3}^{3/2} \rangle + \sqrt{3} _{7/2,3}^{-7/2} \rangle)$
		26. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} -\sqrt{2}Y_{3,-2} - \sqrt{3}Y_{3,3} \\ -\sqrt{5}Y_{3,-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10}} (-\sqrt{7} _{7/2,3}^{-3/2} \rangle - \sqrt{3} _{7/2,3}^{7/2} \rangle)$
$5G_u(3)$	$I_{u5/2}$ $Inv = -\frac{1}{2}$	27. $\begin{pmatrix} 0 \\ Y_{3,1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{7}} (\sqrt{4} _{5/2,3}^{1/2} \rangle + \sqrt{3} _{7/2,3}^{1/2} \rangle)$
		28. $\begin{pmatrix} -Y_{3,-1} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{7}} (\sqrt{4} _{5/2,3}^{-1/2} \rangle - \sqrt{3} _{7/2,3}^{-1/2} \rangle)$
		29. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} \sqrt{5}Y_{3,1} \\ -\sqrt{2}Y_{3,2} + \sqrt{3}Y_{3,-3} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ $\times \{(-\sqrt{\frac{8}{7}} _{5/2,3}^{3/2} \rangle + \sqrt{\frac{9}{35}} _{7/2,3}^{3/2} \rangle) + \sqrt{\frac{3}{5}} _{7/2,3}^{-7/2} \rangle\}$
		30. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} -\sqrt{2}Y_{3,-2} - \sqrt{3}Y_{3,3} \\ \sqrt{5}Y_{3,-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ $\times \{(-\sqrt{\frac{8}{7}} _{5/2,3}^{-3/2} \rangle + \sqrt{\frac{9}{35}} _{7/2,3}^{-3/2} \rangle) - \sqrt{\frac{3}{5}} _{7/2,3}^{7/2} \rangle\}$
		31. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} \sqrt{3}Y_{3,-3} - \sqrt{2}Y_{3,2} \\ -\sqrt{2}Y_{3,-2} - \sqrt{3}Y_{3,3} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \times \{(-\sqrt{\frac{32}{35}} _{5/2,3}^{-5/2} \rangle$ $-\sqrt{\frac{3}{35}} _{7/2,3}^{-5/2} \rangle) + (-\sqrt{\frac{8}{35}} _{5/2,3}^{5/2} \rangle - \sqrt{\frac{27}{35}} _{7/2,3}^{5/2} \rangle)\}$
		32. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} -\sqrt{2}Y_{3,2} + \sqrt{3}Y_{3,-3} \\ \sqrt{3}Y_{3,3} + \sqrt{2}Y_{3,-2} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \times \{(\sqrt{\frac{32}{35}} _{5/2,3}^{5/2} \rangle$ $-\sqrt{\frac{3}{35}} _{7/2,3}^{5/2} \rangle) + (-\sqrt{\frac{8}{35}} _{5/2,3}^{-5/2} \rangle + \sqrt{\frac{27}{35}} _{7/2,3}^{-5/2} \rangle)\}$

мента J):

$$\xi_{1,2} = \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) - 3/4) = \frac{-L-1}{2}, \frac{L}{2},$$

$$Inv = \xi_1 \sum_p |\alpha_{L-1/2,L}^p|^2 + \xi_2 \sum_r |\alpha_{L+1/2,L}^r|^2. \quad (6)$$

Чтобы возмущение гамильтониана V сохраняло симметрию икосаэдра и не снимало вырождения уровней по энергии внутри представления, необходимо для всех волновых функций из одного представления выполнить условие $Inv = \text{const}$. Такая задача оказалась разрешима. Результаты представлены в таблицах. Так, для строки

Таблица 9. Продолжение табл. 7. Неприводимые представления I_h^D для $L = 4$

Представление		Волновая функция (и разложение по спинорам)
$\mathfrak{T}(I_h)(L)$	$\mathfrak{T}_\sigma(I_h^D)$	$\Psi_{jl}^m = \sum \alpha_{jlm} j, l\rangle$
$6G_g(4)$	$E_{g7/2}$ $Inv = -\frac{5}{2}$	33. $\frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} \sqrt{7}Y_{4,1} - \sqrt{8}Y_{4,-4} \\ -\sqrt{14}Y_{4,2} + Y_{4,-3} \end{pmatrix} = (-\sqrt{\frac{7}{10}} _{\frac{7}{2},4}^{3/2}) + \sqrt{\frac{3}{10}} _{\frac{7}{2},4}^{-7/2})$ 34. $\frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} \sqrt{14}Y_{4,-2} + Y_{4,3} \\ -(\sqrt{7}Y_{4,-1} + \sqrt{8}Y_{4,4}) \end{pmatrix} = -\sqrt{\frac{7}{10}} _{\frac{7}{2},4}^{-3/2}) - \sqrt{\frac{3}{10}} _{\frac{7}{2},4}^{7/2})$
	$I_{g5/2}$ $Inv = \frac{5}{6}$	35. $\sqrt{\frac{1}{15}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{7}Y_{4,1} - \sqrt{8}Y_{4,-4} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{7}{15}} (\sqrt{\frac{2}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{1/2}) + \sqrt{\frac{4}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{1/2}) - \sqrt{\frac{8}{15}} _{\frac{7}{2},4}^{-9/2})$ 36. $\sqrt{\frac{1}{15}} \begin{pmatrix} -\sqrt{7}Y_{4,-1} - \sqrt{8}Y_{4,4} \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{7}{15}} (\sqrt{\frac{2}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{-1/2}) - \sqrt{\frac{4}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{-1/2}) - \sqrt{\frac{8}{15}} _{\frac{7}{2},4}^{9/2})$ 37. $\sqrt{\frac{1}{30}} \begin{pmatrix} \sqrt{7}Y_{4,1} - \sqrt{8}Y_{4,-4} \\ (\sqrt{14}Y_{4,2} - Y_{4,-3}) \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{30}} \times \{ (\sqrt{\frac{7}{3}} _{\frac{7}{2},4}^{3/2}) + 2\sqrt{\frac{14}{3}} _{\frac{7}{2},4}^{3/2}) + (\frac{7}{3} _{\frac{7}{2},4}^{-7/2}) - \frac{2}{3}\sqrt{8} _{\frac{7}{2},4}^{-7/2}) \}$ 38. $\frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} \sqrt{14}Y_{4,-2} + Y_{4,3} \\ \sqrt{7}Y_{4,-1} + \sqrt{8}Y_{4,4} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{30}} \times \{ (-\sqrt{\frac{7}{3}} _{\frac{7}{2},4}^{-3/2}) + 2\sqrt{\frac{14}{3}} _{\frac{7}{2},4}^{-3/2}) + (\frac{7}{3} _{\frac{7}{2},4}^{7/2}) + \frac{2}{3}\sqrt{8} _{\frac{7}{2},4}^{7/2}) \}$ 39. $\frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} \sqrt{14}Y_{4,2} - Y_{4,-3} \\ Y_{4,3} + \sqrt{14}Y_{4,-2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{30}} \times \{ (-\sqrt{\frac{7}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{5/2}) + 8\sqrt{\frac{2}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{5/2}) + (3\sqrt{\frac{7}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{-5/2}) + 6\sqrt{\frac{2}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{-5/2}) \}$ 40. $\frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} \sqrt{14}Y_{4,2} - Y_{4,-3} \\ -(Y_{4,3} + \sqrt{14}Y_{4,-2}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{30}} \times \{ (-3\sqrt{\frac{7}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{5/2}) + 6\sqrt{\frac{2}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{5/2}) - (\sqrt{\frac{7}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{-5/2}) + 8\sqrt{\frac{2}{9}} _{\frac{7}{2},4}^{-5/2}) \}$
$7H_g(4)$	$G_{g3/2}$ $Inv = 2$ $s = 2c$ $s = 2c$	41. $\sqrt{\frac{1}{15}} \begin{pmatrix} c\sqrt{15}Y_{4,0} \\ s(\sqrt{8}Y_{4,1} + \sqrt{7}Y_{4,-4}) \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \{ \sqrt{18} _{\frac{7}{2},4}^{1/2}) + \sqrt{7} _{\frac{7}{2},4}^{-9/2}) \}$ $c = \sqrt{2/5}, s = \sqrt{3/5}$ 42. $\sqrt{\frac{1}{15}} \begin{pmatrix} s(\sqrt{8}Y_{4,-1} - \sqrt{7}Y_{4,4}) \\ c\sqrt{15}Y_{4,0} \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \{ \sqrt{18} _{\frac{7}{2},4}^{-1/2}) - \sqrt{7} _{\frac{7}{2},4}^{9/2}) \}$ 43. $\frac{1}{\sqrt{15}} \begin{pmatrix} c(\sqrt{8}Y_{4,1} + \sqrt{7}Y_{4,-4}) \\ s(Y_{4,2} + \sqrt{14}Y_{4,-3}) \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \{ 2 _{\frac{7}{2},4}^{3/2}) + \sqrt{21} _{\frac{7}{2},4}^{-7/2}) \}$ 44. $\frac{1}{\sqrt{15}} \begin{pmatrix} s(Y_{4,-2} - \sqrt{14}Y_{4,3}) \\ c(\sqrt{8}Y_{4,-1} - \sqrt{7}Y_{4,4}) \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \{ 2 _{\frac{7}{2},4}^{-3/2}) - \sqrt{21} _{\frac{7}{2},4}^{7/2}) \}$
	$I_{g5/2}$ $Inv = -\frac{4}{3}$ $s = 2c$	45. $\frac{1}{\sqrt{15}} \begin{pmatrix} -s\sqrt{15}Y_{4,0} \\ c(\sqrt{8}Y_{4,1} + \sqrt{7}Y_{4,-4}) \end{pmatrix} = \frac{1}{3\sqrt{15}} \times \{ (\sqrt{40}c + \sqrt{60}s) _{\frac{7}{2},4}^{1/2}) + (\sqrt{32}c - \sqrt{75}s) _{\frac{7}{2},4}^{1/2}) + 3c\sqrt{7} _{\frac{7}{2},4}^{-9/2}) \}, \frac{s}{c} = \sqrt{\frac{3}{2}}$ 46. $\sqrt{\frac{1}{15}} \begin{pmatrix} c(\sqrt{8}Y_{4,-1} - \sqrt{7}Y_{4,4}) \\ -s\sqrt{15}Y_{4,0} \end{pmatrix} = \frac{1}{3\sqrt{15}} \times \{ -(c\sqrt{40} + s\sqrt{60}) _{\frac{7}{2},4}^{-1/2}) + (c\sqrt{32} - s\sqrt{75}) _{\frac{7}{2},4}^{-1/2}) - 3c\sqrt{7} _{\frac{7}{2},4}^{9/2}) \}$ 47. $\frac{1}{\sqrt{15}} \begin{pmatrix} s(\sqrt{8}Y_{4,1} + \sqrt{7}Y_{4,-4}) \\ -c(Y_{4,2} + \sqrt{14}Y_{4,-3}) \end{pmatrix} = \frac{1}{3\sqrt{15}} \{ (-\sqrt{6}(2s + c) _{\frac{7}{2},4}^{3/2}) + \sqrt{3}(4s - c) _{\frac{7}{2},4}^{3/2}) - (\sqrt{14}(2s + c) _{\frac{7}{2},4}^{-7/2}) + \sqrt{7}(4c - s) _{\frac{7}{2},4}^{-7/2}) \}$

под номером 41 (табл. 9) волновая функция есть

$$\frac{1}{3} \sqrt{\frac{1}{15}} \left(-(c\sqrt{60} - s\sqrt{40}) \Big|_{\frac{7}{2}, 4}^{1/2} \right) + (\sqrt{32}s + \sqrt{75}c) \Big|_{\frac{9}{2}, 4}^{1/2} \Big) + 3\sqrt{7}s \Big|_{\frac{9}{2}, 4}^{-9/2} \Big). \quad (7)$$

Здесь параметры $c = \cos \beta$ и $s = \sin \beta$

$$\begin{aligned} Inv &= \frac{1}{135} \left(\left(-\frac{5}{2} \right) (60c^2 + 40s^2 - 40\sqrt{6}cs) \right. \\ &+ \left. 2(32s^2 + 75c^2 + 40\sqrt{6}sc + 63s^2) \right) = \frac{1}{3} (2s^2 + 4\sqrt{6}sc) \\ &= 2 = 2(c^2 + s^2) \Rightarrow 2s^2 - 2\sqrt{6}cs + 3c^2 = 0, \\ & \quad s/c = \sqrt{3/2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Из выражения (7) следует, что корень уравнения s/c кратный, $c = \sqrt{2/5}$, $s = \sqrt{3/5}$. Далее подставим найденный корень в (6). Результат упрощения приводит к

$$\frac{1}{5} (\sqrt{18} \Big|_{\frac{9}{2}, 4}^{1/2} + \sqrt{7} \Big|_{\frac{9}{2}, 4}^{-9/2}).$$

Аналогично волновая функция 45 (табл. 9) определена как

$$\frac{1}{3\sqrt{15}} \left\{ (\sqrt{40}c + \sqrt{60}s) \Big|_{\frac{7}{2}, 4}^{1/2} \right) + (\sqrt{32}c - \sqrt{75}s) \Big|_{\frac{9}{2}, 4}^{1/2} \Big) + 3c\sqrt{7} \Big|_{\frac{9}{2}, 4}^{-9/2} \Big\}. \quad (9)$$

Вычисление инварианта дает

$$\begin{aligned} Inv &= \frac{1}{135} \left(\left(-\frac{5}{2} \right) (40c^2 + 60s^2 + 40\sqrt{6}cs) \right. \\ &+ \left. 2(32c^2 + 75s^2 - 40\sqrt{6}sc + 63c^2) \right) = \frac{1}{3} (2c^2 - 4\sqrt{6}sc) \\ &= -\frac{4}{3} = -\frac{4}{3} (c^2 + s^2) \Rightarrow 2s^2 - 2\sqrt{6}cs + 3c^2 = 0, \\ & \quad s/c = \sqrt{3/2}. \end{aligned} \quad (10)$$

Как видим, корни уравнений, полученных из инвариантов в формулах (8) и (10), совместны. Отметим, что инварианты представлений с моментом $L = 4$, а именно $G_{g3/2}$, ($dim = 4$) и $I_{g5/2}$, ($dim = 6$), связаны между собой формулой с нулевой правой частью $2 \times 4 + (-\frac{4}{3}) \times 6 = 0$. Поэтому значение инварианта находится однозначно из представления для волновой функции под номером 49 (или 50), когда волновая функция представлена суперпозицией спиноров с проекциями момента J , равными $m = \pm \frac{5}{2}$. Верхняя и нижняя компоненты представления волновой функции с точностью до нормировки имеют вид, задаваемый соответствующим представлением группы икосаэдра, полученным ранее в

работе [8]. Название этого (исходного) представления приводится в первой колонке таблицы. Вторая колонка содержит представление спинорной группы икосаэдра и значение инварианта (в некоторых строках для компактности также отношение величин s и c для волновых функций из третьей колонки на этой же строке). Третья колонка содержит выражение волновой функции и ее разложение по спинорам. Итак, идея ввести в рассмотрение малое спин-орбитальное взаимодействие позволяет однозначно разложить двумерные пространства, возникающие при переходе от группы икосаэдра к двойной группе икосаэдра, по одномерным, которые лежат в своих неприводимых представлениях. Все подуровни этих новых представлений вырождены по энергии. Расщепление энергии между смежными представлениями, полученными операцией вида $E_{1/2} \otimes H = G_{3/2} \oplus I_{5/2}$, мало из-за большого радиуса фуллера.

6. Заключение

Итак, мы рассмотрели первые 60 волновых функций электронных состояний фуллера, лежащих ниже уровня Ферми (заполненных). Каждое состояние с проекцией суммарного момента, равной $\pm \frac{1}{2}$, $\pm \frac{3}{2}$, в спинорном представлении представлено двумерным пространством. Учет спин-орбитального взаимодействия позволяет разбить такие пространства на два одномерных, отнеся соответствующие подпространства в свои представления, например, в $G_{3/2}$ или $I_{5/2}$, как это продемонстрировано выше для волновых функций 41 и 45. Укажем, что для моментов с проекцией, равной $\pm \frac{5}{2}$, соответствующие состояния неотличимы в поле симметрии икосаэдра. Поэтому соответствующее им двумерное пространство целиком попадает в одно представление (функции 49–50). Функции 41 и 45 не только принадлежат разным представлениям, но и их уровни энергии слегка отличаются по величине. Разница — 0.36 meV. Напомним, что при комнатной температуре $kT = 25$ meV. С учетом момента инерции молекулы фуллера C_{60} ($I = 10^{-43}$ kg · m², $\epsilon = \hbar^2/2I = 3.3 \cdot 10^{-4}$ meV) число заселенных вращательных состояний при этой температуре будет порядка 275 (т.е. $N(N+1)\epsilon = 25$), а величина вращательного кванта перехода порядка 0.2 meV ($2N\epsilon = 0.2$). Молекула в возбужденном состоянии, когда электрон из состояния 41 (или 45) отправляется в зону выше уровня Ферми, обретает возможность осциллировать между состояниями 41 и 45 за счет взаимодействия через обмен квантом между спин-электронным и вращательным состояниями, если вращательная температура молекулы будет порядка 100 meV для обеспечения резонанса между ними. Аналогичный эффект возникает для всех расщепленных из-за спин-орбитального взаимодействия электронных состояний. Так как характерная энергия колебательных квантов лежит в зоне 20–200 meV, то влияние колебательных состояний молекулы на спин-орбитальные процессы не играет роли.

Таблица 10. Продолжение табл. 7. Неприводимые представления I_h^D для $L = 4, 5$

Представление		Волновая функция (и разложение по спинорам)
$\mathfrak{T}(I_h)(L)$	$\mathfrak{T}_\sigma(I_h^D)$	$\Psi_{jl}^m = \sum \alpha_{jlm} j, l, m\rangle$
$7H_g(4)$	$I_{g5/2}$	48. $\frac{1}{\sqrt{15}} \begin{pmatrix} c(Y_{4,-2} - \sqrt{14}Y_{4,3}) \\ -s(\sqrt{8}Y_{4,-1} - \sqrt{7}Y_{4,4}) \end{pmatrix} = \frac{1}{3\sqrt{15}} \{ -(\sqrt{6}(c+2s) _{\frac{7}{2},4}^{-3/2}) + \sqrt{3}(4s-c) _{\frac{9}{2},4}^{-3/2}) + \sqrt{14}(c+2s) _{\frac{7}{2},4}^{7/2}) - \sqrt{7}(4c-s) _{\frac{9}{2},4}^{7/2}) \}, \frac{s}{c} = 2$
	$Imv = -\frac{4}{3}$	49. $\frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} (\sqrt{14}Y_{4,-3} + Y_{4,2}) \\ (Y_{4,-2} - \sqrt{14}Y_{4,3}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{30}} \times \{ (-\sqrt{8} _{\frac{7}{2},4}^{-5/2}) + \sqrt{7} _{\frac{9}{2},4}^{-5/2}) - \frac{1}{3}(8\sqrt{2} _{\frac{7}{2},4}^{5/2}) + \sqrt{7} _{\frac{9}{2},4}^{5/2}) \}$
		50. $\frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} (\sqrt{14}Y_{4,-3} + Y_{4,2}) \\ -(Y_{4,-2} - \sqrt{14}Y_{4,3}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{30}} \times \{ \frac{1}{3}(-8\sqrt{2} _{\frac{7}{2},4}^{-5/2}) + \sqrt{7} _{\frac{9}{2},4}^{-5/2}) + (\sqrt{8} _{\frac{7}{2},4}^{5/2}) + \sqrt{7} _{\frac{9}{2},4}^{5/2}) \}$
$8H_u(5)$	$G_{u3/2}$	51. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} c(\sqrt{5}Y_{5,-5} + \sqrt{5}Y_{5,5}) \\ s(\sqrt{3}Y_{5,-4} - \sqrt{7}Y_{5,1}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10 \times 11}} \{ \frac{-7}{\sqrt{3}} _{\frac{9}{2},5}^{-9/2}) + \sqrt{32} _{\frac{11}{2},5}^{-9/2}) + \sqrt{22} _{\frac{11}{2},5}^{11/2}) - \sqrt{\frac{21}{5}}(\sqrt{6} _{\frac{9}{2},5}^{1/2}) + \sqrt{5} _{\frac{11}{2},5}^{1/2}) \}, \frac{s}{c} = \sqrt{\frac{3}{2}}$
		52. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} s(\sqrt{7}Y_{5,-1} + \sqrt{3}Y_{5,4}) \\ c(\sqrt{5}Y_{5,-5} + \sqrt{5}Y_{5,5}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10 \times 11}} \{ \frac{7}{\sqrt{3}} _{\frac{9}{2},5}^{9/2}) + \sqrt{32} _{\frac{11}{2},5}^{9/2}) + \sqrt{22} _{\frac{11}{2},5}^{-11/2}) - \sqrt{\frac{21}{5}}(\sqrt{6} _{\frac{9}{2},5}^{-1/2}) - \sqrt{5} _{\frac{11}{2},5}^{-1/2}) \}$
		53. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} c(\sqrt{3}Y_{5,-4} - \sqrt{7}Y_{5,1}) \\ s(-\sqrt{6}Y_{5,-3} - \sqrt{4}Y_{5,2}) \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{10 \times 11}} \{ -\sqrt{3}(7 _{\frac{9}{2},5}^{-7/2}) + 5\sqrt{2} _{\frac{11}{2},5}^{-7/2}) - 2\sqrt{7} _{\frac{9}{2},5}^{3/2}) - 15 _{\frac{11}{2},5}^{3/2}) \}, s = 2c$
	$Imv = \frac{3}{4}$	54. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} -s(\sqrt{4}Y_{5,-2} - \sqrt{6}Y_{5,3}) \\ c(-\sqrt{7}Y_{5,-1} - \sqrt{3}Y_{5,4}) \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{10 \times 11}} \{ +\sqrt{3}(-7 _{\frac{9}{2},5}^{7/2}) + 5\sqrt{2} _{\frac{11}{2},5}^{7/2}) + 2\sqrt{7} _{\frac{9}{2},5}^{-3/2}) - 15 _{\frac{11}{2},5}^{-3/2}) \}$
		$I_{u5/2}$
$Imv = -\frac{1}{2}$	56. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} -c(\sqrt{7}Y_{5,-1} + \sqrt{3}Y_{5,4}) \\ s(\sqrt{5}Y_{5,-5} + \sqrt{5}Y_{5,5}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10 \times 11}} \{ \sqrt{33} _{\frac{11}{2},5}^{-11/2}) + \sqrt{\frac{14}{5}}(\sqrt{6} _{\frac{9}{2},5}^{-1/2}) - \sqrt{5} _{\frac{11}{2},5}^{-1/2}) + (\frac{6\sqrt{6}}{\sqrt{5}} _{\frac{9}{2},5}^{9/2}) - \sqrt{3} _{\frac{11}{2},5}^{9/2}) \}, \frac{s}{c} = \sqrt{\frac{3}{2}}$	
	57. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} s(\sqrt{3}Y_{5,-4} - \sqrt{7}Y_{5,1}) \\ c(\sqrt{6}Y_{5,-3} + \sqrt{4}Y_{5,2}) \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{10 \times 11}} \{ \sqrt{3}(-4 _{\frac{9}{2},5}^{-7/2}) + 5\sqrt{2} _{\frac{11}{2},5}^{-7/2}) + (6\sqrt{7} _{\frac{9}{2},5}^{3/2}) - 10 _{\frac{11}{2},5}^{3/2}) \}, \frac{s}{c} = 2$	
	58. $\frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} -c(\sqrt{4}Y_{5,-2} - \sqrt{6}Y_{5,3}) \\ s(\sqrt{7}Y_{5,-1} + \sqrt{3}Y_{5,4}) \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{10 \times 11}} \{ +\sqrt{3}(4 _{\frac{9}{2},5}^{7/2}) + 5\sqrt{2} _{\frac{11}{2},5}^{7/2}) + (6\sqrt{7} _{\frac{9}{2},5}^{-3/2}) + 10 _{\frac{11}{2},5}^{-3/2}) \}, \frac{s}{c} = 2$	
	59. $\frac{1}{5} \begin{pmatrix} (-\sqrt{3}Y_{5,-3} - \sqrt{2}Y_{5,2}) \\ 2(-\sqrt{2}Y_{5,-2} + \sqrt{3}Y_{5,3}) \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{11}}{5} _{\frac{11}{2},5}^{-5/2}) + \frac{1}{\sqrt{11}} (\sqrt{6} _{\frac{9}{2},5}^{5/2}) + \frac{2}{5} _{\frac{11}{2},5}^{5/2})$	
60. $\frac{1}{5} \begin{pmatrix} 2(\sqrt{3}Y_{5,-3} + \sqrt{2}Y_{5,2}) \\ (-\sqrt{2}Y_{5,-2} + \sqrt{3}Y_{5,3}) \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{11}}{5} _{\frac{11}{2},5}^{5/2}) + \frac{1}{\sqrt{11}} (-\sqrt{6} _{\frac{9}{2},5}^{-5/2}) + \frac{2}{5} _{\frac{11}{2},5}^{-5/2})$		

Волновая функция разлагается в сумму спиноров. В общем случае в сумму входят спиноры, имеющие оба значения полного момента $J = L \mp 1/2$ (однако

одинаковые проекции момента на ось z). То есть в силу топологии молекулы волновые функции содержат спиноры в запутанных состояниях. Отметим также, что

в сумму входят наборы проекций момента, совпадающих в кольце по модулю 5. Так, для волновой функции 41 наряду с проекцией $\frac{1}{2}$ входит также проекция $-\frac{9}{2}$. Попытка классификации волновых функций группы икосаэдра (включая двойную) проводилась ранее в работе [16], однако в ней не учтено влияние спин-орбитального взаимодействия и есть несоответствия ряда функций с классическими источниками [3,17], например, для $T_{2u}(L=3)$. Принятая в нашей работе система обозначений позволяет классифицировать волновые функции как через сферические гармоники, так и с использованием классического определения спиноров [14]. Напомним, что вид представлений группы икосаэдра был получен точным решением матрицы гамильтониана и последующим проектированием точечного решения в пространство сферических функций. Коэффициенты разложения по сферическим функциям находились методом псевдообратной матрицы. Это наилучшее приближение в смысле метода наименьших квадратов. Все коэффициенты оказались корнями из отношений целых чисел. Набор собственных волновых функций гамильтониана позволяет построить матричные элементы для сечений возбуждения электронных состояний выше уровня Ферми.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта ГК „Росатом“ 313/1731-Д от 19.09.2019. Особенную признательность за поддержку при выполнении работ выражаю И.В. Кочетову и руководителю проекта А.Д. Михайлову.

Список литературы

- [1] Lang-Tao Huang, Dung-Hai Lee. Phys. Rev., **B84**, 193106 (2011).
- [2] П.Н. Дьячков. *Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения* (Бином. Лаб. знаний, Москва, 2006).
- [3] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes* (Academic Press, San Diego, Boston, New York, London, Sydney, Tokyo, Toronto, 1996).
- [4] H. Kroto, J. Heath, S. O'Brien et al. Nature, **318**, 162–163 (1985).
- [5] О.Н. Бубель, С.А. Вырко, Е.Ф. Кисляков, Н.А. Поклонский. Письма в ЖЭТФ, **71** (12), 741–744 (2000).
- [6] H. Bethe. Ann. Phys., **3**, 133 (1929).
- [7] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика*, том 4. *Квантовая электродинамика* (Наука, Москва, 1989).
- [8] А.Г. Сухарев. Опт. и спектр., **129** (2), 132–145 (2021).
- [9] Y. Deng, C.N. Yang. Phys. Lett., A **170**, 116–126 (1992).
- [10] K. Balasubramanian. Chem. Phys. Lett., **260**, 476–484 (1996).
- [11] C.C. Chancey, M.C.M. O'Brien. *The Jahn-Teller Effect in C₆₀ and Other Icosahedral Complexes* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1997).
- [12] G. Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure. III. Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules* (Krieger publishing company, Krieger Drive Malabar, Florida, 1966).
- [13] P.W. Atkins, R.S. Friedman. *Molecular Quantum Mechanics, 3d-edition*. (Oxford University Press, Oxford, New York, 1996).
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика*, том 3. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (Наука, Москва, 1989).
- [15] И.И. Собельман. *Введение в теорию атомных спектров* (Наука, Москва, 1977).
- [16] Koun Shirai. J. of the Phys. Society of Japan, **61** (8), 2735–2747 (1992).
- [17] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito. Materials Science and Engineering, **B19**, 122–128 (1993).