

01 Энергетический спектр и оптические свойства фуллерена $C_{50}(D_{5h})$ в модели Хаббарда

© А.В. Силантьев

Марийский государственный университет,
424001 Йошкар-Ола, Россия

e-mail: kvvant@rambler.ru

Поступила в редакцию 14.12.2021 г.

В окончательной редакции 14.12.2021 г.

Принята к публикации 10.02.2022 г.

В рамках модели Хаббарда в приближении среднего поля вычислены энергетические спектры фуллерена C_{50} и молекулы $C_{50}Cl_{10}$ с группами симметрии D_{5h} . Используя методы теории групп, проведена классификация энергетических состояний, а также определены разрешенные переходы в энергетических спектрах молекул C_{50} и $C_{50}Cl_{10}$. Предложена интерпретация наблюдаемых экспериментально полос оптического поглощения молекулы $C_{50}Cl_{10}$.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, наносистемы, фуллерен C_{50} .

DOI: 10.21883/OS.2022.08.52899.3029-21

Введение

В настоящее время довольно много исследований посвящено изучению так называемых малых фуллеренов, т.е. фуллеренов C_n с $n < 60$. Особенностью малых фуллеренов является то, что у этих фуллеренов нет изомеров, которые содержали бы изолированные пентагоны. Одним из малых фуллеренов является фуллерен C_{50} . Фуллерен C_{50} был обнаружен в 1985 г. одновременно с фуллеренами C_{60} и C_{70} при изучении масс-спектров паров углеродных кластеров [1]. Изучение масс-спектров паров углеродных кластеров показало, что фуллерен C_{50} является более стабильным по сравнению с другими малыми фуллеренами [1,2].

Наряду с изучением физических свойств фуллерена C_{50} проводились также исследования его химических свойств. В 2004 г. в результате применения модифицированного метода дугового разряда [3] в газовой среде, состоящей из CCl_4 (0.013 atm) и He (0.395 atm), впервые было получено соединение $C_{50}Cl_{10}$ в количестве примерно двух миллиграмм с чистотой 99.5% [4]. Исследования, проведенные при помощи ядерного магнитного резонанса, показали, что молекула $C_{50}Cl_{10}$ обладает симметрией D_{5h} . Кроме того, было показано, что статическая поляризуемость и вторая гиперполяризуемость $C_{50}Cl_{10}$ намного больше, чем у C_{60} . Поэтому $C_{50}Cl_{10}$ считается перспективным материалом для нелинейной оптики [5]. Исследования эндоэдральных фуллеренов $He@C_{50}$, $Ne@C_{50}$ и $Ar@C_{50}$ показали, что эти молекулы также обладают группой симметрии D_{5h} [6].

Фуллерен C_{50} с группой симметрии D_{5h} состоит из 12 пентагонов и 15 гексагонов, как показано на рис. 1. Отметим, что из 50 атомов углерода можно построить 271 изомер фуллерена C_{50} [7]. Из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 1, видно, что фуллерен C_{50} с группой симметрии D_{5h} содержит шесть неэквивалент-

ных связей и четыре группы неэквивалентных атомов углерода:

$$G_1 = \{1, 2, 4, 5, 8, 13, 15, 20, 21, 23, 29, 31, 37, 39, 40, 42, 43, 45, 46, 48\},$$

$$G_2 = \{3, 6, 7, 14, 22, 30, 38, 44, 49, 50\},$$

$$G_3 = \{10, 11, 17, 18, 25, 26, 27, 33, 34, 35\},$$

$$G_4 = \{9, 12, 16, 19, 24, 28, 32, 36, 41, 47\}.$$

К множеству G_1 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения одного пентагона и двух гексагонов, и, кроме того, каждый из них имеет одного ближайшего соседа из этого же множества G_1 . К множеству G_2 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения одного гексагона и двух пентагонов, и каждый из них имеет одного ближайшего соседа из этого же множества G_2 . К множеству G_3 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах изолированного пентагона. К множеству G_4 принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения одного пентагона и двух гексагонов, и, кроме того, каждый из них не имеет ни одного ближайшего соседа из этого же множества G_4 . Исследования, проведенные при помощи ядерного магнитного резонанса, показали, что атомы хлора в молекуле $C_{50}Cl_{10}$ связаны с атомами углерода, которые принадлежат множеству G_2 [4], т.е. атомы хлора образуют вокруг фуллерена C_{50} структуру, которая напоминает кольцо у Сатурна, как показано на рис. 2. Исследованию физических и химических свойств фуллерена C_{50} посвящено довольно много работ [8–10].

Для описания электронных свойств углеродных наносистем широко используется модель Хаббарда [11]. В рамках этой модели в приближении среднего поля были получены энергетические спектры и спектры оптического поглощения фуллерена C_{80} с группой симметрии I_h [12], фуллерена C_{70} [13], фуллерена C_{60} [14], фуллерена C_{36} с группой симметрии D_{6h} [15], фуллерена C_{28} с группой симметрии T_d [16], фуллерена C_{26} с

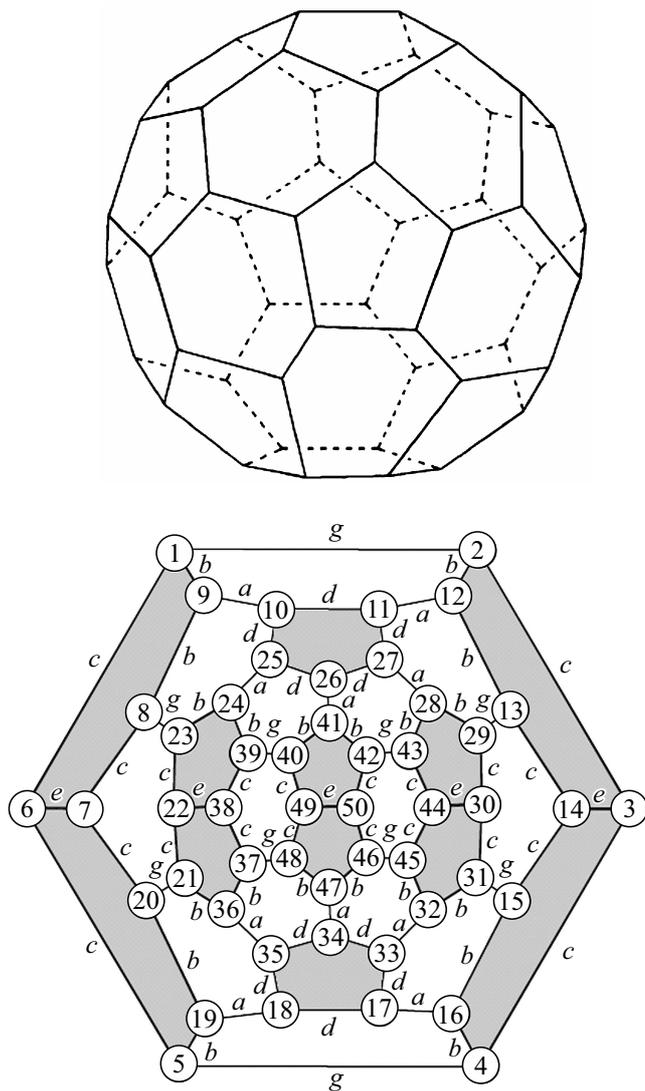


Рис. 1. Фуллерен C_{50} с группой симметрии D_{5h} и его диаграмма Шлегеля с указанием положения атомов углерода, связей между атомами углерода и пентагонов.

группой симметрии D_{3h} [17], фуллерена C_{24} с группами симметрии O_h , D_6 и D_{6d} [18] и фуллерена C_{20} с группами симметрии I_h , D_{5d} и D_{3d} [19], а в работе [20] были исследованы электронные свойства углеродных нанотрубок. Полученные в работах [13–15] результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Целью данной работы является исследование энергетических спектров фуллерена C_{50} и молекулы $C_{50}Cl_{10}$ с группами симметрии D_{5h} в рамках модели Хаббарда в приближении среднего поля.

Энергетический спектр фуллерена C_{50}

Как известно, электронные свойства углеродных фуллеренов и нанотрубок в основном зависят от поведения π -электронов в этих молекулах. Для описания π -электронной системы в фуллерене C_{50} воспользуемся

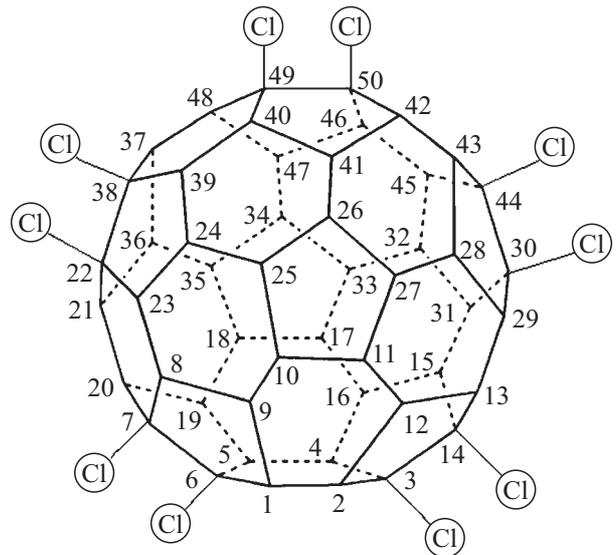


Рис. 2. Молекула $C_{50}Cl_{10}$.

моделью Хаббарда [11]:

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

где $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов со спином σ на узле i ; $n_{i\sigma}$ — оператор числа частиц со спином σ на узле i ; ε_i — энергия одноэлектронного атомного состояния на узле i ; t_{ij} — интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с узла i на узел j ; U_i — энергия кулоновского отталкивания двух электронов, находящихся на узле i ; $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Для того чтобы получить энергетический спектр молекулы C_{50} в приближении среднего поля, в гамильтониане (1) следует сделать следующую замену:

$$n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \rightarrow n_{i\sigma} \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle + n_{i\bar{\sigma}} \langle n_{i\sigma} \rangle, \quad (2)$$

где $\langle n_{i\sigma} \rangle$ — среднее число электронов со спином σ , находящихся на узле i .

Подставив (2) в выражение (1), получим гамильтониан модели Хаббарда в приближении среднего поля:

$$H = \sum_{\sigma,i} \varepsilon'_{i\sigma} n_{i\sigma} + \sum_{\sigma,i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}, \quad (3)$$

где

$$\varepsilon'_{i\sigma} = \varepsilon_i + U \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle \quad (4)$$

Проведенные исследования показали, что у фуллерена C_{50} с группой симметрии D_{5h} [21] расстояния между атомами углерода имеют следующие значения:

$$\begin{aligned} x_a &= 1.399 \text{ \AA}, & x_b &= 1.449 \text{ \AA}, & x_c &= 1.444 \text{ \AA}, \\ x_d &= 1.450 \text{ \AA}, & x_e &= 1.400 \text{ \AA}, & x_g &= 1.387 \text{ \AA}. \end{aligned} \quad (5)$$

Таблица 1. Энергетический спектр молекулы C_{50} с группой симметрии D_{5h} : значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы D_{5h} , к которым они относятся

№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$	№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$
1	-4.975	-9.954	1	$E_1(a'_1)$	16	-0.883	-5.068	1	$E_{16}(a'_2)$
2	-4.531	-9.511	2	$E_2(e'_1)$	17	0.534	-4.445	2	$E_{17}(e'_1)$
3	-4.410	-9.390	1	$E_3(a''_2)$	18	1.171	-3.809	2	$E_{18}(e''_1)$
4	-3.668	-8.647	2	$E_4(e'_2)$	19	1.876	-3.104	1	$E_{19}(a''_2)$
5	-3.586	-8.566	2	$E_5(e''_1)$	20	2.116	-2.863	1	$E_{20}(a''_1)$
6	-3.509	-8.489	1	$E_6(a'_1)$	21	2.125	-2.854	1	$E_{21}(a'_1)$
7	-2.550	-7.529	2	$E_7(e'_2)$	22	2.225	-2.754	2	$E_{22}(e''_2)$
8	-2.494	-7.473	2	$E_8(e'_2)$	23	2.408	-2.572	2	$E_{23}(e'_2)$
9	-2.478	-7.457	1	$E_9(a''_2)$	24	2.561	-2.418	2	$E_{24}(e'_1)$
10	-2.338	-7.318	2	$E_{10}(e'_1)$	25	3.060	-1.920	2	$E_{25}(e'_2)$
11	-1.542	-6.522	2	$E_{11}(e''_1)$	26	3.063	-1.916	2	$E_{26}(e''_1)$
12	-1.466	-6.445	2	$E_{12}(e''_2)$	27	4.133	-0.846	2	$E_{27}(e''_2)$
13	-1.391	-6.371	2	$E_{13}(e'_2)$	28	4.150	-0.829	2	$E_{28}(e'_1)$
14	-1.271	-6.251	2	$E_{14}(e'_1)$	29	4.161	-0.818	1	$E_{29}(a'_2)$
15	-0.610	-5.589	1	$E_{15}(a'_1)$	30	4.428	-0.551	2	$E_{30}(e'_2)$

можно описать следующим образом. При образовании молекулы $C_{50}Cl_{10}$ десять валентных электронов фуллерена C_{50} и по одному валентному электрону у десяти атомов хлора спариваются и образуют прочные связи между атомами углерода и хлора.

Проведенные в работе [21] исследования показали, что молекула $C_{50}Cl_{10}$ обладает группой симметрии D_{5h} и, кроме того, эти исследования показали, что расстояния между атомами углерода в этой молекуле имеют следующие значения:

$$x_a = 1.403 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.424 \text{ \AA}, \quad x_c = 1.515 \text{ \AA}, \\ x_d = 1.430 \text{ \AA}, \quad x_e = 1.598 \text{ \AA}, \quad x_g = 1.373 \text{ \AA}. \quad (15)$$

Подставляя (15) в соотношение (6), получим численные значения для интегралов переноса у молекулы $C_{50}Cl_{10}$:

$$t_a = -1.92172 \text{ eV}, \quad t_b = -1.69348 \text{ eV}, \quad t_c = -1.979125 \text{ eV}, \\ t_d = -1.63340 \text{ eV}, \quad t_e = -1.59404 \text{ eV}, \quad t_g = -2.30214 \text{ eV}. \quad (16)$$

Используя соотношения (16), (12), (8) и (9), получим для молекулы $C_{50}Cl_{10}$ численные значения для величин e_k , которые приведены в табл. 2.

Из соотношения (14) следует, что при образовании молекулы $C_n^q X_k^{(-q)}$ происходит изменение энергии ε' :

$$\varepsilon' = \begin{cases} \varepsilon'_{C_n}, & \text{для } C_n, \\ \varepsilon'_{C_n} - qU/n, & \text{для } C_n^{+q} X_k^{(-q)}, \end{cases} \quad (17)$$

где ε'_{C_n} — соответствует фуллерену C_n ; q — число электронов, перешедших с фуллерена C_n на k атомов X .

Из соотношения (17) следует, что:

$$\varepsilon'_{C_{50}Cl_{10}} = \varepsilon'_{C_{50}} - \frac{qU}{n} = -4.979 - \frac{10 \cdot 5.662}{50} = 6.111 \text{ eV}, \quad (18)$$

где $U = 5.662 \text{ eV}$ [24], $\varepsilon' = -4.979 \text{ eV}$ [13].

Теперь, подставляя численные значения для e_k из табл. 2, а также численное значение для $\varepsilon' = \varepsilon'_{C_{50}Cl_{10}}$ в соотношение (13), получим энергетический спектр молекулы $C_{50}Cl_{10}$ с группой симметрии D_{5h} . Результаты вычислений приведены в табл. 2, а также на рис. 4.

Из рис. 3 и 4, табл. 1 и 2 видно, что энергетические спектры молекул C_{50} и $C_{50}Cl_{10}$ отличаются друг от друга относительным расположением энергетических состояний $E_2(a'_1)$, $E_3(a''_2)$, $E_4(e'_2)$, $E_5(e''_1)$, $E_9(a''_2)$, $E_{20}(a''_1)$, $E_{21}(a'_1)$, $E_{23}(e'_2)$, $E_{24}(e'_1)$, $E_{27}(e''_2)$, $E_{28}(e'_1)$, $E_{29}(a'_2)$.

Важной характеристикой любой молекулы является ее спектр оптического поглощения. Используя полученные выше энергетические спектры молекул C_{50} и $C_{50}Cl_{10}$ с группой симметрии D_{5h} , можно с помощью теории групп найти переходы, которые обуславливают оптические спектры этих молекул. Можно показать, что в энергетическом спектре молекулы с группой симметрии D_{5h} разрешены следующие переходы [23]:

$$a'_1 \leftrightarrow e'_1, \quad a'_1 \leftrightarrow a''_2, \quad a'_2 \leftrightarrow e'_1, \quad e'_1 \leftrightarrow e'_2, \\ e'_1 \leftrightarrow e''_1, \quad e'_2 \leftrightarrow e'_2, \quad e''_2 \leftrightarrow e''_2, \quad a''_1 \leftrightarrow e''_1, \\ e'_2 \leftrightarrow e''_2, \quad a'_2 \leftrightarrow a''_1, \quad a''_2 \leftrightarrow e'_1, \quad e''_2 \leftrightarrow e''_1. \quad (19)$$

Из энергетических спектров молекул C_{50} и $C_{50}Cl_{10}$ с группой симметрии D_{5h} и соотношений (19) следует, что у фуллерена C_{50} имеется 94 разрешенных переходов, а у молекулы $C_{50}Cl_{10}$ имеется 90 разрешенных переходов. Из рис. 3 и 4 видно, что при образовании молекулы $C_{50}Cl_{10}$ из фуллерена C_{50} исчезает 20 разрешенных переходов и одновременно появляется 16 разрешенных переходов.

В работе [4] были проведены экспериментальные исследования, посвященные изучению спектра оптического поглощения молекулы $C_{50}Cl_{10}$ в циклогексане.

Таблица 2. Энергетический спектр молекулы C₅₀Cl₁₀ с группой симметрии D_{5h}: значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы D_{5h}, к которым они относятся

№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$	№	e_j , eV	E_j , eV	g_j	$E(\Gamma_j)$
1	-4.907	-11.018	1	$E_1(a'_1)$	16	-0.179	-6.290	1	$E_{16}(a'_2)$
2	-4.773	-10.884	1	$E_3(a''_2)$	17	0.262	-5.849	2	$E_{17}(e'_1)$
3	-4.196	-10.307	2	$E_2(e'_1)$	18	1.130	-4.981	2	$E_{18}(e''_1)$
4	-3.916	-10.027	2	$E_5(e'_1)$	19	1.137	-4.974	2	$E_{23}(e'_2)$
5	-3.221	-9.332	2	$E_4(e'_2)$	20	1.807	-4.304	2	$E_{24}(e'_1)$
6	-3.176	-9.287	1	$E_6(a'_1)$	21	2.024	-4.087	1	$E_{19}(a''_2)$
7	-2.820	-8.931	1	$E_9(a''_2)$	22	2.187	-3.924	1	$E_{21}(a'_1)$
8	-2.799	-8.910	2	$E_7(e'_2)$	23	2.302	-3.809	1	$E_{20}(a''_1)$
9	-1.939	-8.050	2	$E_8(e'_2)$	24	2.494	-3.617	2	$E_{22}(e''_2)$
10	-1.931	-8.042	2	$E_{10}(e'_1)$	25	2.749	3.362	2	$E_{25}(e'_2)$
11	-1.590	-7.701	2	$E_{11}(e''_1)$	26	3.075	-3.036	1	$E_{29}(a'_2)$
12	-1.530	-7.641	2	$E_{12}(e'_2)$	27	3.367	-2.744	2	$E_{26}(e''_1)$
13	-0.703	-6.814	2	$E_{13}(e'_2)$	28	3.708	-2.403	2	$E_{28}(e'_1)$
14	-0.659	-6.770	2	$E_{14}(e'_1)$	29	4.478	-1.633	2	$E_{27}(e''_2)$
15	-2.670	-6.378	1	$E_{15}(a'_1)$	30	4.620	1.491	2	$E_{30}(e'_2)$

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

Полосы поглощения	[4] λ , nm	[4] E , eV	Теория E , eV
<i>a</i>	454.6	2.73	2.67
<i>b</i>	433.8	2.86	2.91
<i>c</i>	400.8	3.10	3.07
<i>d</i>	376.6	3.30	3.36
<i>e</i>	356.6	3.48	3.48
<i>f</i>	334.0	3.72	3.75
<i>g</i>	322.0	3.86	3.89
<i>h</i>	238.5	5.21	5.20

Проведенные исследования показали, что в оптическом спектре поглощения молекулы C₅₀Cl₁₀ можно выделить восемь явно выраженных полос поглощения: *a*, *b*, *c*, *d*, *e*, *f*, *g*, *h*, которые представлены в табл. 3.

Зная энергетический спектр молекулы C₅₀Cl₁₀, можно дать следующую интерпретацию ее экспериментально наблюдаемого спектра оптического поглощения. Полосы спектра оптического поглощения, которые соответствуют экспериментально наблюдаемым энергиям $E_a, E_b, E_c, E_d, E_e, E_f, E_g, E_h$, представленным в табл. 3, можно интерпретировать как полосы, формирующиеся переходами, представленными в табл. 4. Как видно из табл. 4, энергии этих переходов близки к экспериментальным значениям [4]. В табл. 4 символ δ показывает, какие переходы с точки зрения симметрии разрешены, а какие запрещены. Если $\delta = +$, то такой переход разрешен с точки зрения симметрии, если $\delta = -$, то такой переход является запрещенным. Следует сказать, что в молекуле C₅₀Cl₁₀ атомы совершают малые колебания около положения равновесия. Это приводит к тому, что происходит

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

ΔE	ΔE , eV	δ	ΔE	ΔE , eV	δ	ΔE	ΔE , eV	δ
<i>a</i>			<i>d</i>			<i>g</i>		
$E_{18}-E_{12}$	2.66	-	$E_{22}-E_{10}$	3.21	-	$E_{20}-E_{12}$	3.83	-
$E_{23}-E_{12}$	2.67	+	$E_{14}-E_5$	3.26	+	$E_{20}-E_{11}$	3.89	+
$E_{18}-E_{11}$	2.72	-	$E_{24}-E_{12}$	3.34	-	$E_{15}-E_2$	3.93	-
$E_{23}-E_{11}$	2.73	-	<i>e</i>			$E_{18}-E_7$	3.93	-
<i>b</i>			$E_{17}-E_6$	3.44	+	<i>h</i>		
$E_{15}-E_6$	2.91	-	$E_{17}-E_4$	3.48	+	$E_{17}-E_1$	5.17	+
$E_{15}-E_4$	2.95	-	$E_{13}-E_2$	3.49	+	$E_{19}-E_6$	5.20	+
<i>c</i>			<i>f</i>			$E_{28}-E_{12}$	5.24	-
$E_{17}-E_7$	3.06	-	$E_{21}-E_{12}$	3.72	-	$E_{19}-E_4$	5.24	-
$E_{18}-E_{10}$	3.06	+	$E_{24}-E_{10}$	3.74	-			
$E_{18}-E_8$	3.07	-	$E_{16}-E_5$	3.74	-			
$E_{23}-E_{10}$	3.07	+	$E_{24}-E_8$	3.75	+			
$E_{17}-E_9$	3.08	-	$E_{21}-E_{11}$	3.78	-			
$E_{23}-E_8$	3.08	+						

нарушение симметрии молекулы C₅₀Cl₁₀. В результате этого запрещенные согласно симметрии системы оптические переходы становятся разрешенными. Некоторые из запрещенных переходов в результате нарушения симметрии могут сформировать явно наблюдаемую полосу оптического поглощения. В случае молекулы C₅₀Cl₁₀ такой полосой поглощения является полоса поглощения с энергией E_b .

Заключение

Проведенные исследования показали, что спектр оптического поглощения молекулы C₅₀Cl₁₀, который наблюдается экспериментально [4], достаточно хорошо согласуется со спектром оптического поглощения этой

- [6] Н.Н. Бреславская, А.А. Левин, А.Л. Бучаченко. Известия Академии наук, серия химическая, **53**, 19 (2004). [N.N. Breslavskaya, A.A. Levin, A.L. Buchachenko. Russian Chemical Bulletin, **53**(1), 18 (2004). DOI: 10.1023/B:RUCB.0000024824.35542.0e].
- [7] P.W. Fowler, D.E. Manolopoulos. *An atlas of fullerenes* (Clarendon, Oxford, 1995).
- [8] A. Bihlmeier. J. Chem. Phys., **135**, 044310 (2011). DOI: 10.1063/1.3615502
- [9] R.-H. Xie, G.W. Bryant, C.F. Cheung, H. Smith, J. Zhao. J. Chem. Phys., **121**, 2849 (2004). DOI: 10.1063/1.1782451
- [10] A. Miralrio, A. Munoz-Castro, R.B. King, L.E. Sansores. J. Phys. Chem., **123**, 1429 (2019). DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b08789
- [11] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. London A, **276**, 238 (1963). DOI: 10.1098/rspa.1963.0204
- [12] А.В. Силантьев. Опт. и спектр., **129** (10), 1227 (2021). DOI: 10.21883/OS.2021.10.51486.2188-21 [A.V. Silant'ev. Opt. Spectrosc., **130** (2), 73 (2022). DOI: 10.1134/S0030400X22010131].
- [13] А.В. Силантьев. Опт. и спектр., **124** (2), 159 (2018). DOI: 10.21883/OS.2018.02.45517.211-17 [A.V. Silant'ev. Opt. Spectrosc., **124** (2), 155 (2018). DOI: 10.1134/S0030400X18020157].
- [14] А.В. Силантьев. Физика металлов и металловедение, **118** (1), 3 (2017). DOI: 10.7868/S0015323016100119 [A.V. Silant'ev. Phys. Met. Metallogr., **118** (1), 1 (2017). DOI: 10.1134/S0031918X16100112].
- [15] А.В. Силантьев. Опт. и спектр., **127** (2), 191 (2019). DOI: 10.21883/OS.2019.08.48028.215-18 [A.V. Silant'ev. Opt. Spectrosc., **127** (2), 190 (2019). DOI: 10.1134/S0030400X19080265].
- [16] А.В. Силантьев. Физика металлов и металловедение, **121** (6), 557 (2020). DOI: 10.31857/S0015323020060145 [A.V. Silant'ev. Phys. Met. Metallogr., **121** (6), 501 (2020). DOI: 10.1134/S0031918X20060149].
- [17] А.В. Силантьев. Физика металлов и металловедение, **122** (4), 339 (2021). DOI: 10.31857/S0015323021040094 [A.V. Silant'ev. Phys. Met. Metallogr., **122** (4), 315 (2021). DOI: 10.1134/S0031918X21040098].
- [18] А.В. Силантьев. Физика металлов и металловедение, **121** (3), 227 (2020). DOI: 10.31857/S0015323020010167 [A.V. Silant'ev. Phys. Met. Metallogr., **121** (3), 205 (2020). DOI: 10.1134/S0031918X20010160].
- [19] А.В. Силантьев. Физика металлов и металловедение, **119** (6), 541 (2018). DOI: 10.7868/S0015323018060013 [A.V. Silant'ev. Phys. Met. Metallogr., **119** (6), 511 (2018). DOI: 10.1134/S0031918X18060133].
- [20] Г.С. Иванченко, Н.Г. Лебедев. ФТТ, **49** (1), 183 (2007). [G.S. Ivanchenko, N.G. Lebedev. Phys. Solid State, **49** (1), 189 (2007). DOI: 10.1134/S1063783407010301].
- [21] Z. Xu, J. Han, Z. Zhu, W. Zhang. J. Phys. Chem. A., **111**, 656 (2007). DOI: 10.1021/jp064500b
- [22] С.В. Тябликов. *Методы квантовой теории магнетизма*, 2-е изд. (Наука, Москва, 1975).
- [23] Р. Хохштрассер. *Молекулярные аспекты симметрии* (Мир, Москва, 1968).
- [24] А.В. Силантьев. ЖЭТФ, **148** (4), 749 (2015). DOI: 10.7868/S0044451015100120 [A.V. Silant'ev. J. Exp. Theor. Phys., **121** (4), 653 (2015). DOI: 10.1134/S1063776115110084].