

17,09

## Влияние деформации на энергетический спектр и спектр оптического поглощения фуллерена $C_{20}$ в модели Хаббарда

© А.В. Силантьев

Марийский государственный университет,  
Йошкар-Ола, Россия

E-mail: kvvant@rambler.ru

(Поступила в Редакцию 13 августа 2018 г.)

В рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций получены в аналитическом виде антикоммутирующие функции Грина и энергетические спектры фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$ , и  $D_{3d}$ . Используя методы теории групп проведена классификация энергетических состояний и определены разрешенные переходы в энергетических спектрах фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$ , и  $D_{3d}$ . Показано также как расщепляются энергетические уровни фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$  при понижении симметрии.

DOI: 10.21883/FTT.2019.02.47143.231

### 1. Введение

После открытия в 1985 г. фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$  [1] начался интенсивный поиск фуллеренов с другим содержанием атомов углерода. Эти исследования привели к открытию целого ряда фуллеренов  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{82}$ ,  $C_{84}$ ,  $C_{90}$ ,  $C_{94}$ ,  $C_{96}$  [2], а также нанотрубок [3]. Дальнейшие исследования показали, что кроме фуллеренов, кластеры которых являются пустыми, могут существовать также так называемые эндоэдральные фуллерены  $A@C_n$ , кластеры которых внутри содержат атомы металлов  $Cd@C_{82}$  [4], атомы неметаллов  $He@C_{60}$  [5] и молекулы  $Sc_2C_2@C_{84}$  [6]. Исследования также проводились по поиску простейшего фуллерена  $C_{20}$ , который состоит из 20 атомов углерода, см. рис. 1. Из теоремы Эйлера для полиэдра следует, что простейший фуллерен  $C_{20}$  состоит из 12 пентагонов и не содержит гексагонов. Фуллерен  $C_{20}$  был открыт в 2000 г. [7].

Простейшей структурой фуллерена  $C_{20}$  может служить додекаэдр с группой симметрии  $I_h$ , в вершинах которого располагаются атомы углерода. Однако теоретические исследования [8,9], выполненные полуэмпирическими методами, показали, что фуллерен  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$ , является неустойчивой молекулой, которая при нарушении симметрии  $I_h$  переходит в более устойчивое состояние. В работе [8] изучался фуллерен  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{5d}$ , а в работе [9] изучался этот же фуллерен, но с группой симметрии  $D_{3d}$ . Переход фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$  в  $C_{20}$  с группами симметрии  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  может происходить следующим образом. Если нарушение симметрии у фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$  происходит вдоль оси симметрии пятого порядка, то это приводит к фуллерену  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{5d}$ , а если нарушение симметрии происходит вдоль оси симметрии третьего порядка, то это приводит к фуллерену  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$ . Отметим, что исследования наночастицы  $C_{20}@C_{80}$ , выполненные в работе [10] показали, что

при помещении фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$  во внутрь фуллерена  $C_{80}$  с группой симметрии  $I_h$  группа симметрии фуллерена  $C_{20}$  повышается до  $I_h$ .

Как известно, в фуллеренах углерод находится в  $sp^2$ -гибридизированном состоянии [11], при чем гибридные электроны участвуют в образовании прочных связей между атомами углерода, а негибридизированные электроны являются достаточно свободными и могут перескакивать с одного атома углерода на другой. Поэтому считается, что  $\pi$ -электроны в основном определяют как электронные, так и химические свойства фуллеренов.

Исследование различных углеродных систем показало, что в этих структурах кулоновское взаимодействие  $\pi$ -электронов, находящихся на одном узле, является довольно большим и может достигать  $\sim 10$  eV [12–14]. В работе [15] отмечается, что значение эффективной энергии кулоновского взаимодействия двух  $\pi$ -электронов, находящихся на одном узле, сильно зависит от того, как эту величину вычислять. Если при вычислении эффективной энергии кулоновского взаимодействия двух электронов не учитывать экранирование, которое создается ядром и электронами, которые лежат более глубоко, чем  $\pi$ -электроны, то в этом случае получим  $U \sim 17$  eV. Если эффективную энергию взаимодействия  $\pi$ -электронов вычислять в приближении Хартри, то в этом случае мы получим  $U \sim 11$  eV. Если же учесть еще вклад, который вносит взаимодействие от электронов, находящихся на соседних узлах, то получим  $U \sim 5$  eV.

При исследовании физических систем, в которых кулоновское взаимодействие двух электронов, находящихся на одном узле является довольно большим, используется модель Хаббарда [16], подробный обзор которой содержится в работах [17,18]. В целом ряде работ [19–24] при исследовании физических свойств наносистем в рамках модели Хаббарда используется приближение статических флуктуаций (ПСФ). В работе [19] в рамках

модели Хаббарда в ПСФ был получен энергетический спектр и спектр оптического поглощения фуллерена  $C_{60}$ , а также вычислены параметры, которыми этот фуллерен характеризуется в рамках модели Хаббарда. Отметим, что в работе [19] при изучении оптического спектра поглощения фуллерена  $C_{60}$  в рамках модели Хаббарда, исходя из экспериментально наблюдаемого спектра поглощения этого фуллерена было показано, что  $U \approx 5.662 \text{ eV}$ . Мы видим, что данный результат согласуется с результатом работы [15]. В работе [20] в рамках модели Хаббарда в ПСФ был получен энергетический спектр и спектр оптического поглощения фуллерена  $C_{70}$ . Полученные в работах [19,20] результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Целью данной работы является в рамках модели Хаббарда в ПСФ исследование влияния деформации фуллерена  $C_{20}$  на энергетический спектр и спектр оптического поглощения этого фуллерена.

## 2. Энергетический спектр фуллерена $C_{20}$

Для описания  $\pi$ -электронной системы фуллерена  $C_{20}$  воспользуемся моделью Хаббарда [16]

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

где  $c_{i\sigma}^+, c_{j\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов со спином  $\sigma$  на узле  $i$ ;  $n_{i\sigma}$  — оператор числа частиц со спином  $\sigma$  на узле  $i$ ;  $\varepsilon_i$  — 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 с разными спинами, которые находятся на  $i$ -узле;  $\bar{\sigma} = -\sigma$ .

Найдем энергетический спектр фуллерена  $C_{20}$ . Для этого, как известно [25], необходимо вычислить антикоммутирующие функции Грина

$$\langle\langle c_{f\sigma}^+ | c_{f\sigma} \rangle\rangle = \langle [c_{f\sigma}^+(\tau), c_{f\sigma}(0)]_+ \rangle \quad (2)$$

для любых неэквивалентных узлов данного фуллерена.

Для того чтобы найти функции Грина, прежде всего определим зависимость операторов рождения от времени в ПСФ. Для этого, как и в работах [19,20], запишем в ПСФ уравнения движения для операторов  $c_{1,\sigma}^+(\tau), c_{1,\sigma}^+ n_{1,\bar{\sigma}}(\tau), \dots, c_{20,\sigma}^+(\tau), c_{20,\sigma}^+ n_{20,\bar{\sigma}}(\tau)$ , заданных в представлении Гейзенберга

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{1\sigma}^+ + t_{1,2}c_{2\sigma}^+ + t_{1,5}c_{5\sigma}^+ \\ &\quad + t_{1,8}c_{8\sigma}^+ + U c_{1\sigma}^+ n_{1,\bar{\sigma}} \\ \frac{d(c_{1\sigma}^+ n_{1,\bar{\sigma}})}{d\tau} &= (\varepsilon + U)c_{1\sigma}^+ n_{1,\bar{\sigma}} + t_{1,2}c_{2\sigma}^+ n_{2,\bar{\sigma}} \\ &\quad + t_{1,5}c_{5\sigma}^+ n_{5,\bar{\sigma}} + t_{1,8}c_{8\sigma}^+ n_{8,\bar{\sigma}} \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dc_{20\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{20\sigma}^+ + t_{20,13}c_{13\sigma}^+ + t_{20,16}c_{16\sigma}^+ + t_{20,19}c_{19\sigma}^+ \\ &\quad + U c_{20\sigma}^+ n_{20,\bar{\sigma}} \\ \frac{d(c_{20\sigma}^+ n_{20,\bar{\sigma}})}{d\tau} &= (\varepsilon + U)c_{20\sigma}^+ n_{20,\bar{\sigma}} + t_{20,13}c_{13\sigma}^+ n_{13,\bar{\sigma}} \\ &\quad + t_{20,16}c_{16\sigma}^+ n_{16,\bar{\sigma}} + t_{20,19}c_{19\sigma}^+ n_{19,\bar{\sigma}} \end{aligned} \right. \quad (3)$$

где  $\tau = it$ .

Система уравнений (3) представляет собой замкнутую систему дифференциальных уравнений. Прежде чем решать систему уравнений (3) найдем неэквивалентные интегралы переноса для фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h, D_{5d}$  и  $D_{3d}$ .

Рассмотрим фуллерен  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$ . В этом фуллерене, как видно из рис. 1, все атомы углерода, а также связи между ними эквивалентны. Поэтому

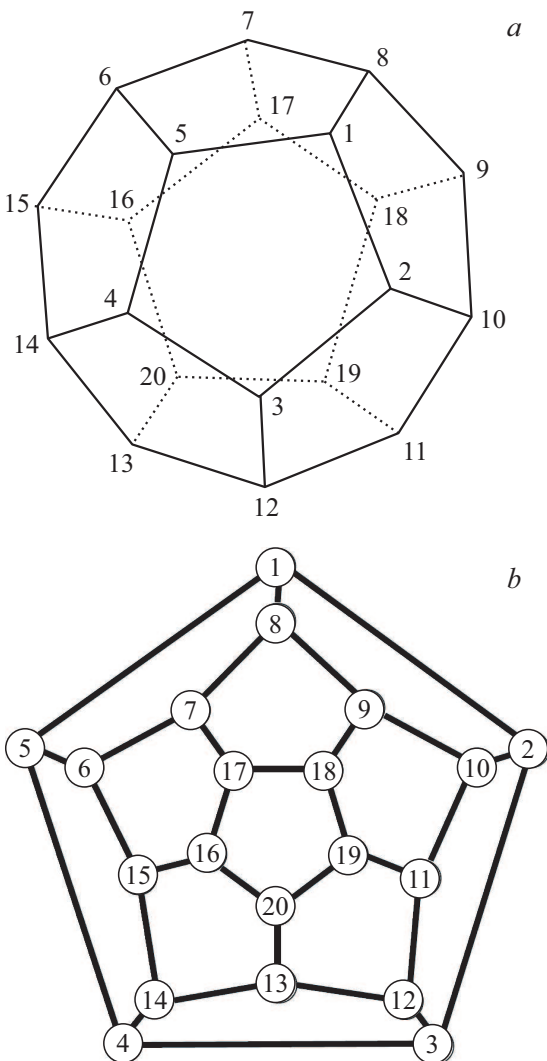


Рис. 1. Фуллерен  $C_{20}$  (a) и его диаграмма Шлегеля (b) с указанием положения атомов углерода.

для описания фуллера C<sub>20</sub> с группой симметрии I<sub>h</sub> в рамках модели Хаббарда необходимо ввести один интеграл переноса, который обозначим через -b.

Если деформацию фуллера C<sub>20</sub> с группой симметрии I<sub>h</sub> осуществить вдоль оси симметрии пятого порядка, проходящей через две плоскости, одна из которых содержит атомы углерода 1, 2, 3, 4, 5, а другая — 16, 17, 18, 19, 20, то в результате такой деформации симметрия фуллера C<sub>20</sub> изменится и будет характеризоваться группой D<sub>5d</sub>. В результате такой деформации, как следует из рис. 1, все углерода можно разбить на два неэквивалентных множества G<sub>5,1</sub> = {1, 2, 3, 4, 5, 16, 17, 18, 19, 20}, G<sub>5,2</sub> = {6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15}. В такой структуре можно выделить три типа неэквивалентных связей, которым в рамках модели Хаббарда можно сопоставить три различных интеграла переноса

$$\begin{aligned}
 t_{1,2} &= t_{1,5} = t_{2,1} = t_{2,3} = t_{3,2} = t_{3,4} = t_{4,5} = t_{5,1} = t_{16,17} \\
 &= t_{16,20} = t_{17,18} = t_{18,19} = t_{19,20} = -b, \\
 t_{1,8} &= t_{2,10} = t_{3,12} = t_{4,14} = t_{5,6} = t_{7,17} = t_{9,18} = t_{10,2} \\
 &= t_{11,19} = t_{12,3} = t_{13,20} = t_{15,16} = -b_1, \\
 t_{6,7} &= t_{6,15} = t_{7,8} = t_{8,9} = t_{9,10} = t_{10,11} = t_{11,12} = t_{12,13} \\
 &= t_{13,14} = t_{14,15} = -b_2.
 \end{aligned}$$

Если деформацию фуллера C<sub>20</sub> с группой симметрии I<sub>h</sub> осуществить вдоль оси, проходящей через атомы углерода 1 и 20, то в результате такой деформации симметрия фуллера C<sub>20</sub> изменится и будет характеризоваться группой D<sub>3d</sub>. В результате такой деформации, как следует из рис. 1, все углероды можно разбить на три неэквивалентных множества G<sub>3,1</sub> = {1, 20}, G<sub>3,2</sub> = {2, 5, 8, 13, 16, 19}, G<sub>3,3</sub> = {3, 4, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 17, 18}. В такой структуре можно выделить четыре типа неэквивалентных связей, которым в рамках модели Хаббарда можно сопоставить четыре различных интеграла переноса

$$\begin{aligned}
 t_{1,2} &= t_{1,5} = t_{1,8} = t_{13,20} = t_{16,20} = t_{19,20} = -b, \\
 t_{2,3} &= t_{2,10} = t_{4,5} = t_{5,6} = t_{7,8} = t_{8,9} = t_{11,19} \\
 &= t_{12,13} = t_{13,14} = t_{15,16} = t_{16,17} = t_{18,19} = -b_1, \\
 t_{3,4} &= t_{6,7} = t_{9,10} = t_{11,12} = t_{14,15} = t_{17,18} = -b_2, \\
 t_{3,12} &= t_{4,14} = t_{6,15} = t_{7,17} = t_{9,18} = t_{10,11} = -b_3.
 \end{aligned}$$

Можно показать, что система уравнений (3) для фуллера C<sub>20</sub> с группами симметрии I<sub>h</sub>, D<sub>5d</sub> и D<sub>3d</sub> имеет точные аналитические решения. Подставляя решения системы уравнений (3) в соотношение (2) можно найти фурье-образы антикоммутирующих функций Грина для всех узлов фуллера C<sub>20</sub> с группами симметрии

I<sub>h</sub>, D<sub>5d</sub> и D<sub>3d</sub>

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^p \frac{F_{j,m}}{E - E_m + i\hbar}$$

$$\begin{aligned}
 E_k &= \varepsilon + e_k, \quad E_{k+p/2} = E_k + U \quad F_{j,m} = q_m \cdot Q_{j,m}, \\
 Q_{j,k+p/2} &= Q_{j,k}, \quad k = 1 \dots p/2, \\
 q_m &= \begin{cases} 1 - \frac{n}{2}, & m = 1 \dots p/2 \\ \frac{n}{2}, & m = p/2 + 1 \dots p \end{cases},
 \end{aligned} \tag{4}$$

где

— для фуллера C<sub>20</sub> с группой симметрии I<sub>h</sub>

$$\begin{aligned}
 Q_{j,1} &= \frac{1}{20}, \quad Q_{j,2} = Q_{j,6} = \frac{3}{20}, \\
 Q_{j,3} &= \frac{1}{4}, \quad Q_{j,4} = Q_{j,5} = \frac{1}{5}, \\
 e_1 &= -3b, \quad e_2 = -\sqrt{5}b, \quad e_3 = -b, \quad e_4 = 0, \\
 e_5 &= 2b, \quad e_6 = \sqrt{5}b, \quad p = 12,
 \end{aligned} \tag{5}$$

— для фуллера C<sub>20</sub> с группой симметрии D<sub>5d</sub>

$$\begin{aligned}
 Q_{s,m} &= \frac{1}{5} \cdot \frac{e_m b(1 - \sqrt{5}) + 2(b_1^2 + b b_2 \delta_2)}{e_m(b(1 - \sqrt{5}) + b_2 \delta_2(1 + \sqrt{5})) + 4(b_1^2 + b b_2 \delta_2)}, \\
 Q_{s,m} &= \frac{1}{5} \cdot \frac{e_m b(1 + \sqrt{5}) + 2(b_1^2 + b b_2 \delta_3)}{e_m(b(1 + \sqrt{5}) + b_2 \delta_3(1 - \sqrt{5})) + 4(b_1^2 + b b_2 \delta_3)}, \\
 Q_{s,m} &= \frac{1}{20} \cdot \frac{e_m + 2b_2 \delta_1}{e_m + b + b_2 \delta_1}, \\
 Q_{z,m} &= \frac{1}{20} \cdot \frac{e_m + 2b}{e_m + b + b_2 \delta_1}, \\
 Q_{z,m} &= \frac{1}{5} \cdot \frac{e_m b_2 \delta_2(1 + \sqrt{5}) + 2(b_1^2 + b b_2 \delta_2)}{e_m(b(1 - \sqrt{5}) + b_2 \delta_2(1 + \sqrt{5})) + 4(b_1^2 + b b_2 \delta_2)}, \\
 Q_{z,m} &= \frac{1}{5} \cdot \frac{e_m b_2 \delta_3(1 - \sqrt{5}) + 2(b_1^2 + b b_2 \delta_3)}{e_m(b(1 + \sqrt{5}) + b_2 \delta_3(1 - \sqrt{5})) + 4(b_1^2 + b b_2 \delta_3)}, \\
 s &\in G_{5,1}, z \in G_{5,2},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \delta_1 &= \begin{cases} 1, & m = 1, 4 \\ -1, & m = 3, 12 \end{cases}, \quad \delta_2 = \begin{cases} 1, & m = 5, 10 \\ -1, & m = 2, 7 \end{cases}, \\
 \delta_3 &= \begin{cases} 1, & m = 6, 9 \\ -1, & m = 8, 11 \end{cases}, \quad p = 24.
 \end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned}
 e_1 &= -b - b_2 - h_1, \quad e_2 = \frac{1}{4} (b - b_2 - \sqrt{5}b - \sqrt{5}b_2 - h_5), \\
 e_3 &= -b + b_2 - h_2, \quad e_4 = \frac{1}{4} (b + b_2 - \sqrt{5}b + \sqrt{5}b_2 - h_3), \\
 e_5 &= -b - b_2 + h_1, \quad e_6 = \frac{1}{4} (b + b_2 + \sqrt{5}b - \sqrt{5}b_2 - h_4), \\
 e_7 &= \frac{1}{4} (b - b_2 - \sqrt{5}b - \sqrt{5}b_2 + h_5),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 e_8 &= \frac{1}{4} (b - b_2 + \sqrt{5}b + \sqrt{5}b_2 - h_6), \\
 e_9 &= \frac{1}{4} (b + b_2 + \sqrt{5}b - \sqrt{5}b_2 + h_4), \\
 e_{10} &= \frac{1}{4} (b + b_2 - \sqrt{5}b + \sqrt{5}b_2 + h_3), \\
 e_{11} &= \frac{1}{4} (b - b_2 + \sqrt{5}b + \sqrt{5}b_2 + h_6), \\
 e_{12} &= -b + b_2 + h_2, \\
 h_1 &= \sqrt{(b - b_2)^2 + b_1^2}, \quad h_2 = \sqrt{(b + b_2)^2 + b_1^2}, \\
 h_3 &= \sqrt{6b^2 + 8b \cdot b_2 + 6b_2^2 + 16b_1^2 + 2\sqrt{5}(b_2^2 - b^2)}, \\
 h_4 &= \sqrt{6b^2 + 8b \cdot b_2 + 6b_2^2 + 16b_1^2 - 2\sqrt{5}(b_2^2 - b^2)}, \\
 h_5 &= \sqrt{6b^2 - 8b \cdot b_2 + 6b_2^2 + 16b_1^2 + 2\sqrt{5}(b_2^2 - b^2)}, \\
 h_6 &= \sqrt{6b^2 - 8b \cdot b_2 + 6b_2^2 + 16b_1^2 - 2\sqrt{5}(b_2^2 - b^2)}, \quad (8)
 \end{aligned}$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$

$$\begin{aligned}
 Q_{s,2} &= Q_{s,5} = Q_{s,6} = Q_{s,7} = Q_{s,8} = Q_{s,10} = Q_{s,12} \\
 &= Q_{s,13} = Q_{z,7} = Q_{z,10} = 0,
 \end{aligned}$$

$$Q_{s,m} = \frac{1}{2} \cdot \frac{e_m^2 + e_m(b_2 + \delta_1 b_3) - 2b_1^2}{3e_m^2 + 2e_m(b_2 + \delta_1 b_3) - 2b_1^2 - 3b^2},$$

$$Q_{z,m} = \frac{1}{6} \cdot \frac{e_m(e_m + b_2 + \delta_1 b_3)}{3e_m^2 + 2e_m(b_2 + \delta_1 b_3) - 2b_1^2 - 3b^2},$$

$$Q_{z,m} = \frac{1}{3} \cdot \frac{e_m^2 - b_2^2 - b_3^2 + \delta_2 b_2 b_3}{3e_m^2 - 2b_1^2 - b_2^2 - b_3^2 + \delta_2 b_2 b_3},$$

$$Q_{x,m} = \frac{1}{12} \cdot \frac{e_m^2 - 3b^2}{3e_m^2 + 2e_m(b_2 + \delta_1 b_3) - 2b_1^2 - 3b^2},$$

$$Q_{x,m} = \frac{1}{3} \cdot \frac{e_m^2 - b_1^2}{3e_m^2 - 2b_1^2 - b_2^2 - b_3^2 + \delta_2 b_2 b_3};$$

$$Q_{x,7} = Q_{x,10} = \frac{1}{12}; \quad s \in G_{3,1}, \quad z \in G_{3,2}, \quad x \in G_{3,3},$$

$$\delta_1 = \begin{cases} 1, & m = 1, 4, 11 \\ -1, & m = 3, 9, 14 \end{cases},$$

$$\delta_2 = \begin{cases} 1, & m = 5, 6, 12 \\ -1, & m = 2, 8, 13 \end{cases}, \quad p = 28. \quad (9)$$

$$e_1 = -\frac{1}{3} (2h_9 \cdot \sin(\frac{\varphi_2}{3} + \frac{\pi}{6}) + b_2 + b_3),$$

$$e_2 = -2h_8 \cdot \sin(\frac{\varphi_4}{3} + \frac{\pi}{6}),$$

$$e_3 = -\frac{1}{3} (2h_{10} \cdot \cos(\frac{\varphi_3}{3}) + b_2 - b_3),$$

$$e_4 = -\frac{1}{3} (2h_9 \cdot \cos(\frac{\varphi_2}{3} + \frac{\pi}{3}) + b_2 + b_3),$$

$$\begin{aligned}
 e_5 &= -2h_7 \cdot \sin(\frac{\varphi_1}{3} + \frac{\pi}{6}), \\
 e_6 &= -2h_7 \cdot \cos(\frac{\varphi_1}{3} + \frac{\pi}{3}), \\
 e_7 &= b_2 - b_3, \\
 e_8 &= -2h_8 \cdot \cos(\frac{\varphi_4}{3} + \frac{\pi}{3})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 e_9 &= \frac{1}{3} (2h_{10} \cdot \cos(\frac{\varphi_3}{3} + \frac{\pi}{3}) - b_2 + b_3), \\
 e_{10} &= b_2 + b_3,
 \end{aligned}$$

$$e_{11} = \frac{1}{3} (2h_9 \cdot \cos(\frac{\varphi_2}{3}) - b_2 - b_3),$$

$$e_{12} = 2h_7 \cdot \cos(\frac{\varphi_1}{3}),$$

$$e_{13} = 2h_8 \cdot \cos(\frac{\varphi_4}{3}),$$

$$e_{14} = \frac{1}{3} (2h_{10} \cdot \sin(\frac{\varphi_3}{3} + \frac{\pi}{6}) - b_2 + b_3),$$

$$\varphi_1 = \arccos\left(\frac{b_1^2 \cdot (b_2 + b_3)}{2h_7^3}\right),$$

$$\varphi_2 = \arccos\left(\frac{(b_2 + b_3)(27b^2 - 9b_1^2 - (b_2 + b_3)^2)}{h_9^3}\right),$$

$$\varphi_3 = \arccos\left(\frac{(-b_2 + b_3)(27b^2 - 9b_1^2 - (b_2 - b_3)^2)}{h_{10}^3}\right),$$

$$\varphi_4 = \arccos\left(\frac{b_1^2 \cdot (b_2 - b_3)^2}{2h_8^3}\right),$$

$$h_7 = \sqrt{\frac{1}{3} \cdot (2b_1^2 + b_2^2 - b_2 b_3 + b_3^2)},$$

$$h_8 = \sqrt{\frac{1}{3} \cdot (2b_1^2 + b_2^2 + b_2 b_3 + b_3^2)},$$

$$h_9 = \sqrt{9b^2 + 6b_1^2 + (b_2 + b_3)^2},$$

$$h_{10} = \sqrt{9b^2 + 6b_1^2 + (b_2 - b_3)^2}, \quad (10)$$

Зная фурье-образ антикоммутирующей функции Грина, можно найти энергетический спектр квантовой системы, который определяется полюсами функции Грина [25]. Следовательно, энергетические спектры фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  определяются величинами  $E_m$ , которые входят в функцию Грина (4).

Энергетические состояния фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  можно классифицировать в соответствии с неприводимыми представлениями групп  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$ . Можно показать, что энергетические состояния фуллерена  $C_{20}$ , определяемые полюсами функции Грина (4), связаны с неприводимыми представлениями групп  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  следующим образом:

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$ :

$$E_1(a_g), E_2(t_{1u}), E_3(h_g), E_4(g_u), E_5(g_g), E_6(t_{2u}), E_7(a_g), E_8(t_{1u}), E_9(h_g), E_{10}(g_u), E_{11}(g_g), E_{12}(t_{2u}),$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{5d}$ :

$$E_1(a_{1g}), E_2(e_{1u}), E_3(a_{2u}), E_4(e_{1g}), E_5(a_{1g}), E_6(e_{2g}), E_7(e_{1u}), E_8(e_{2u}), E_9(e_{2g}), E_{10}(e_{1g}), E_{11}(e_{2u}), E_{12}(a_{2u}), E_{13}(a_{1g}), E_{14}(e_{1u}), E_{15}(a_{2u}), E_{16}(e_{1g}), E_{17}(a_{1g}), E_{18}(e_{2g}), E_{19}(e_{1u}), E_{20}(e_{2u}), E_{21}(e_{2g}), E_{22}(e_{1g}), E_{23}(e_{2u}), E_{24}(a_{2u}),$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$ :

$$E_1(a_{1g}), E_2(e_u), E_3(a_{2u}), E_4(a_{1g}), E_5(e_g), E_6(e_g), E_7(a_{1u}), E_8(e_u), E_9(a_{2u}), E_{10}(a_{2g}), E_{11}(a_{1g}), E_{12}(e_g), E_{13}(e_u), E_{14}(a_{2u}), E_{15}(a_{1g}), E_{16}(e_u), E_{17}(a_{2u}), E_{18}(a_{1g}), E_{19}(e_g), E_{20}(e_g), E_{21}(a_{1u}), E_{22}(e_u), E_{23}(a_{2u}), E_{24}(a_{2g}), E_{25}(a_{1g}), E_{26}(e_g), E_{27}(e_u), E_{28}(a_{2u}).$$

Важной характеристикой каждого энергетического уровня является степень его вырождения. Для того чтобы найти степень вырождения энергетических уровней фуллерена  $C_{20}$ , воспользуемся следующим соотношением [19]

$$g_i = \sum_{j=1}^N Q_{j,i}, \quad (11)$$

где  $N$  — число узлов в наносистеме.

Подставляя величины  $Q_{j,i}$ , которые определяются соотношениями (5), (7) и (9), в формулу (11) получим, что энергетические уровни фуллерена  $C_{20}$  имеют следующие степени вырождения:

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$ :

$$g_1 = g_7 = 1, \quad g_2 = g_6 = g_8 = g_{12} = 3, \\ g_3 = g_9 = 5, \quad g_4 = g_5 = g_{10} = g_{11} = 4, \quad (12)$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{5d}$ :

$$g_1 = g_3 = g_5 = g_{12} = g_{13} = g_{15} = g_{17} = g_{24} = 1, \\ g_2 = g_4 = g_6 = g_7 = g_8 = g_9 = g_{10} = g_{11} = g_{14} \\ = g_{16} = g_{18} = g_{19} = g_{20} = g_{21} = g_{22} = g_{23} = 2, \quad (13)$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$ :

$$g_1 = g_3 = g_4 = g_9 = g_7 = g_{10} = g_{11} = g_{14} = g_{15} \\ = g_{17} = g_{18} = g_{23} = g_{21} = g_{24} = g_{25} = g_{28} = 1, \\ g_2 = g_5 = g_6 = g_8 = g_{12} = g_{13} = g_{16} = g_{19} \\ = g_{20} = g_{22} = g_{26} = g_{27} = 2. \quad (14)$$

Таким образом, соотношения (4), (6), (8), (10) и (12)–(14) описывают энергетические спектры фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  в модели Хаббарда в ПСФ.

### 3. Обсуждение результатов

Исследования, выполненные в работах [8–10], показали, что расстояния между атомами углерода в фуллерене  $C_{20}$  имеют следующие значения:

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$  [10]

$$x = 1.425 \text{ \AA}, \quad (15)$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{5d}$  [8]:

$$x_a = 1.425 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.474 \text{ \AA}, \quad x_c = 1.416 \text{ \AA}, \quad (16)$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$  [9]:

$$x_a = 1.409 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.443 \text{ \AA}, \\ x_c = 1.450 \text{ \AA}, \quad x_d = 1.51 \text{ \AA}. \quad (17)$$

Численные значения для интегралов переноса, которые соответствуют фуллерену  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$ , найдем следующим образом. Как известно [15], зависимость интегралов переноса от расстояния между атомами можно представить в следующем виде:

$$t_s = k \cdot \exp(m \cdot x_s), \quad (18)$$

где  $x_s$  — расстояние между атомами,  $k$  и  $m$  — константы.

Для того чтобы по формуле (18) найти интегралы переноса, определим константы  $k$  и  $m$  следующим образом. Как известно, у фуллерена  $C_{60}$  имеется два типа связей. Исследования, выполненные с помощью газовой электрографии, показали, что расстояния между атомами углерода в фуллерене  $C_{60}$  имеют следующие значения: длина связи на границе двух гексагонов составляет  $1.401 \text{ \AA}$ , а на границе гексагон–пентагон —  $1.458 \text{ \AA}$  [26]. В работе [19] с помощью оптического спектра поглощения фуллерена  $C_{60}$  были найдены интегралы переноса для фуллерена  $C_{60}$ : интеграл переноса на границе двух гексагонов составляет  $-0.76 \text{ eV}$ , а на границе гексагон–пентагон составляет  $-0.69 \text{ eV}$ . Подставляя данные величины в соотношение (18) и решая полученную систему уравнений, мы получим

$$k = -8.17065 \text{ eV}, \quad m = -1.69521 \text{ \AA}^{-1}. \quad (19)$$

Теперь подставляя (19) в соотношение (18) мы получим

$$t_s = -8.17065 \cdot \exp(-1.69521 \cdot x_s). \quad (20)$$

Подставляя (15)–(17) в соотношение (20) мы получим численные значения для интегралов переноса:

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$ :

$$t_a = -0.7297 \text{ eV}, \quad (21)$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{5d}$ :

$$t_a = -0.7297 \text{ eV}, \quad t_b = -0.67154 \text{ eV}, \\ t_c = -0.74092 \text{ eV}, \quad (22)$$

— для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$ :

$$t_a = -0.74976 \text{ eV}, \quad t_b = -0.70777 \text{ eV}, \\ t_c = -0.69942 \text{ eV}, \quad t_d = -0.63178 \text{ eV}. \quad (23)$$

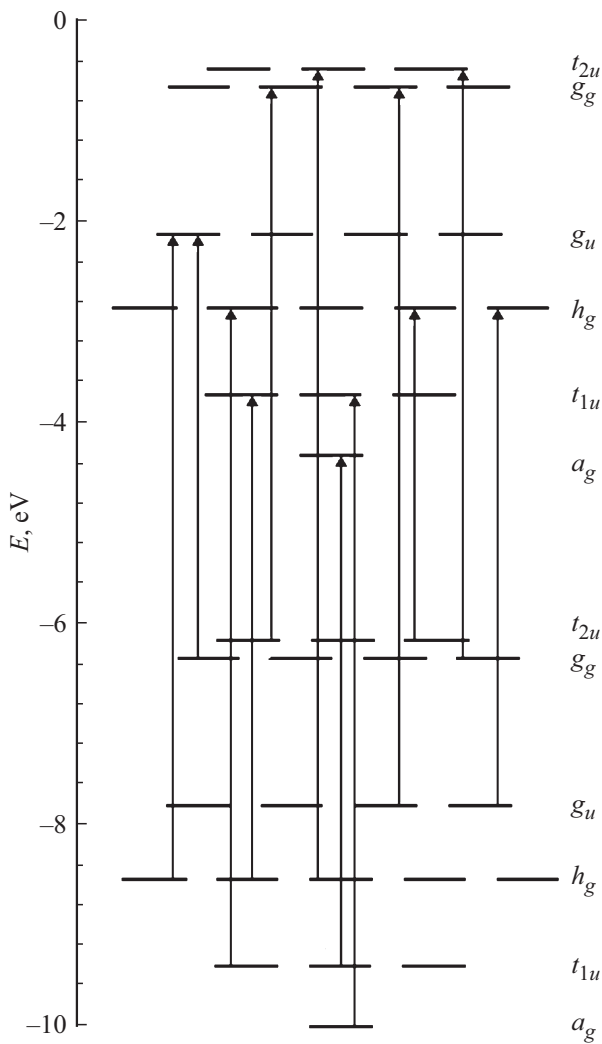


Рис. 2. Энергетический спектр фуллерена C<sub>20</sub> с группой симметрии I<sub>h</sub>.

Теперь для того чтобы получить энергетические спектры фуллерена C<sub>20</sub> с группами симметрии I<sub>h</sub>, D<sub>5d</sub>, D<sub>3d</sub> воспользуемся формулой, которая следует из функции Грина (4)

$$E_k = \varepsilon + \frac{U}{2} + \bar{e}_k, \quad (24)$$

где  $\bar{e}_k$  — это энергия  $k$ -го энергетического уровня относительно энергии  $\varepsilon + U/2$ :

$$\bar{e}_k = \begin{cases} e_k - \frac{U}{2}, & k = 1 \dots p/2 \\ e_k + \frac{U}{2}, & k = p/2 + 1 \dots p. \end{cases} \quad (25)$$

Как видно из соотношений (24) и (25) для того чтобы найти энергетический спектр фуллерена C<sub>20</sub>, необходимо определить еще численные значения параметров  $\varepsilon$  и  $U$ . В работе [19] исходя из экспериментально наблюдаемого оптического спектра поглощения фуллерена C<sub>60</sub> в рамках модели Хаббарда в ПСФ были

вычислены эти параметры  $\varepsilon = -7.824$  eV,  $U = 5.662$  eV. Поэтому при вычислении энергетического спектра фуллерена C<sub>20</sub> воспользуемся этими значениями. Отметим, что  $U = 5.662$  eV согласуется с результатами работы [15], согласно которой значение эффективной энергии кулоновского взаимодействия двух  $\pi$ -электронов, находящихся на одном узле, составляет  $\sim 5$  eV.

Подставляя численные значения для интегралов переноса (21)–(23) и численные значения для  $\varepsilon$  и  $U$  в соотношения (6), (8), (10), (24) и (25) мы получим для фуллерена C<sub>20</sub> с группами симметрии I<sub>h</sub>, D<sub>5d</sub>, D<sub>3d</sub> численные значения для величин  $\bar{e}_k$ ,  $E_k$ , которые приведены в табл. 1–3.

Рассмотрим теперь структуру энергетических спектров фуллерена C<sub>20</sub> с группами симметрии I<sub>h</sub>, D<sub>5d</sub> и D<sub>3d</sub>, которые изображены на рис. 2–4. Как видно из соотношений (24), (25) и рис. 2–4, энергетические состояния фуллерена C<sub>20</sub> образуют две подзоны Хаббарда. Энергетические состояния, образующие нижнюю

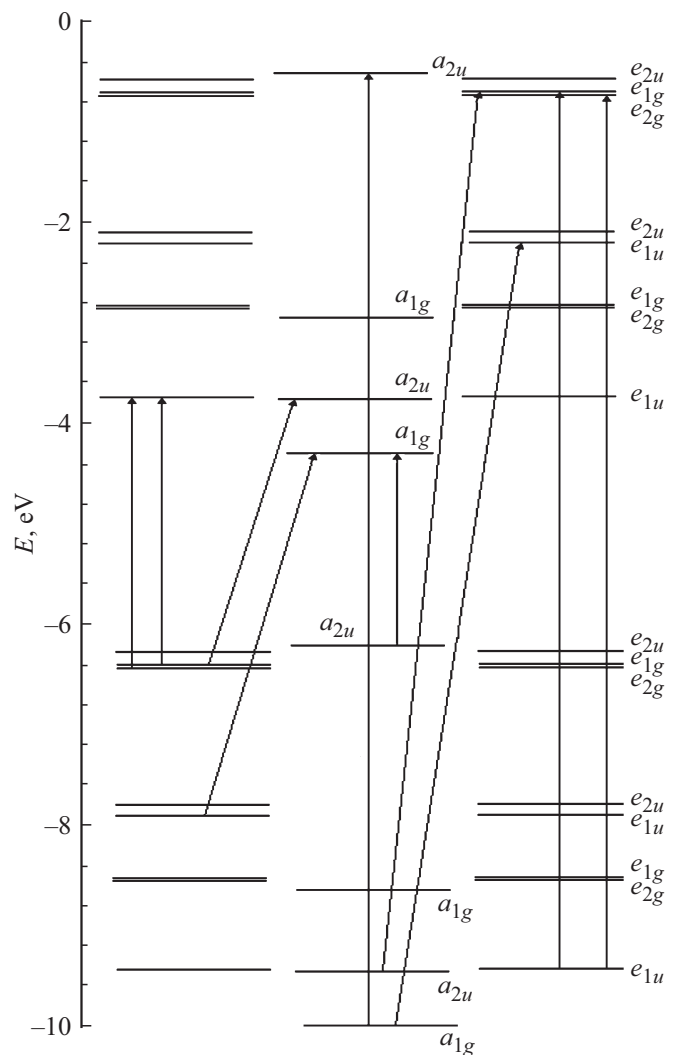


Рис. 3. Энергетический спектр фуллерена C<sub>20</sub> с группой симметрии D<sub>5d</sub>.

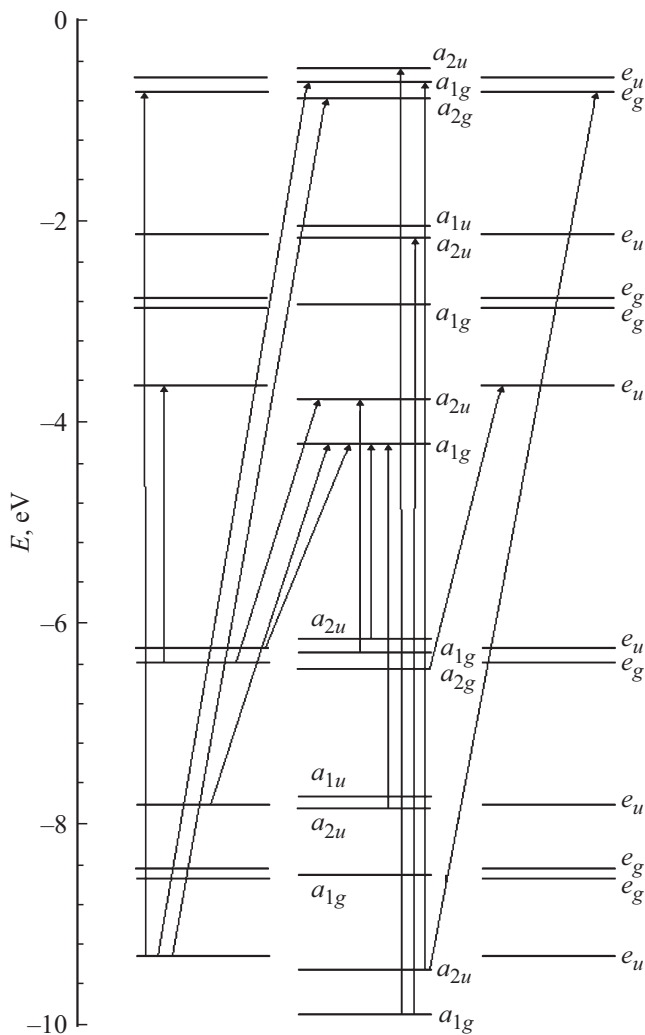


Рис. 4. Энергетический спектр фуллерена C<sub>20</sub> с группой симметрии D<sub>3d</sub>.

подзону Хаббарда, сосредоточены вблизи энергии  $\varepsilon$ , а энергетические состояния, образующие верхнюю подзону Хаббарда, сосредоточены вблизи энергии  $\varepsilon + U$ .

Из соотношений (6), (8), (24) и (25) следует, что при понижении симметрии фуллерена C<sub>20</sub> от  $I_h$  до  $D_{5d}$  энергетические уровни данного фуллерена расщепляются следующим образом:

$$\begin{aligned}
 E_1(a_g) &\rightarrow E_1(a_{1g}), \\
 E_2(t_{1u}) &\rightarrow \{E_2(e_{1u}), E_3(a_{2u})\}, \\
 E_3(h_g) &\rightarrow \{E_4(e_{1g}), E_5(a_{1g}), E_6(e_{2g})\}, \\
 E_4(g_u) &\rightarrow \{E_7(e_{1u}), E_8(e_{2u})\}, \\
 E_5(g_g) &\rightarrow \{E_9(e_{2g}), E_{10}(e_{1g})\}, \\
 E_6(t_{2u}) &\rightarrow \{E_{11}(e_{2u}), E_{12}(a_{2u})\}, \\
 E_7(a_g) &\rightarrow E_{13}(a_{1g}),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E_8(t_{1u}) &\rightarrow \{E_{14}(e_{1u}), E_{15}(a_{2u})\}, \\
 E_9(h_g) &\rightarrow \{E_{16}(e_{1g}), E_{17}(a_{1g}), E_{18}(e_{2g})\}, \\
 E_{10}(g_u) &\rightarrow \{E_{19}(e_{1u}), E_{20}(e_{2u})\}, \\
 E_{11}(g_g) &\rightarrow \{E_{21}(e_{2g}), E_{22}(e_{1g})\}, \\
 E_{12}(t_{2u}) &\rightarrow \{E_{23}(e_{2u}), E_{24}(a_{2u})\}. \tag{26}
 \end{aligned}$$

Из соотношений (6), (10), (24) и (25) следует, что при понижении симметрии фуллерена C<sub>20</sub> от  $I_h$  до  $D_{3d}$  энергетические уровни данного фуллерена расщепляются следующим образом:

$$\begin{aligned}
 E_1(a_g) &\rightarrow E_1(a_{1g}), \\
 E_2(t_{1u}) &\rightarrow \{E_2(e_u), E_3(a_{2u})\}, \\
 E_3(h_g) &\rightarrow \{E_4(a_{1g}), E_5(e_g), E_6(e_g)\}, \\
 E_4(g_u) &\rightarrow \{E_7(a_{1u}), E_8(e_u), E_9(a_{2u})\}, \\
 E_5(g_g) &\rightarrow \{E_{10}(a_{2g}), E_{11}(a_{1g}), E_{12}(e_g)\}, \\
 E_6(t_{2u}) &\rightarrow \{E_{13}(e_u), E_{14}(a_{2u})\}, \\
 E_7(a_g) &\rightarrow E_{15}(a_{1g}), \\
 E_8(t_{1u}) &\rightarrow \{E_{16}(e_u), E_{17}(a_{2u})\}, \\
 E_9(h_g) &\rightarrow \{E_{18}(a_{1g}), E_{19}(e_g), E_{20}(e_g)\}, \\
 E_{10}(g_u) &\rightarrow \{E_{21}(a_{1u}), E_{22}(e_u), E_{23}(a_{2u})\}, \\
 E_{11}(g_g) &\rightarrow \{E_{24}(a_{2g}), E_{25}(a_{1g}), E_{26}(e_g)\}, \\
 E_{12}(t_{2u}) &\rightarrow \{E_{27}(e_u), E_{28}(a_{2u})\}. \tag{27}
 \end{aligned}$$

Относительное расположение энергетических уровней фуллерена C<sub>20</sub> с группами симметрии  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  зависит от соотношения между интегралами перескока. Например, из соотношений (24) и (8) следует, что для фуллерена C<sub>20</sub> с группой симметрии  $D_{5d}$

$$E_7(e_{1u}) = E_8(e_{2u}) = \varepsilon,$$

$$E_{19}(e_{1u}) = E_{20}(e_{2u}) = \varepsilon + U \quad \text{при} \quad b \cdot b_2 = b_1^2,$$

то есть в этом случае происходит случайное вырождение энергетических состояний. Из соотношений (24) и (8) также следует, что

$$\begin{aligned}
 E_7(e_{1u}) < \varepsilon < E_8(e_{2u}), \quad E_{19}(e_{1u}) < \varepsilon + U < E_{20}(e_{2u}) \\
 &\text{при} \quad b \cdot b_2 > b_1^2, \\
 E_8(e_{2u}) < \varepsilon < E_7(e_{1u}), \quad E_{20}(e_{2u}) < \varepsilon + U < E_{19}(e_{1u}) \\
 &\text{при} \quad b \cdot b_2 < b_1^2,
 \end{aligned}$$

Одной из важнейших характеристик квантовой системы является ее спектр оптического поглощения. Используя полученные выше энергетические спектры фуллерена C<sub>20</sub> с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$ , можно найти

**Таблица 1.** Энергетический спектр фуллера  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$ : значения энергии (eV) уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы  $I_h$ , к которым они относятся

№	$\bar{e}_k$ , eV	$E_k$ , eV	$g_k$	$E(\Gamma_k)$	№	$\bar{e}_k$ , eV	$E_k$ , eV	$g_k$	$E(\Gamma_k)$
1	-5.0201	-10.013	1	$E_1(a_g)$	7	0.6419	-4.3511	1	$E_7(a_g)$
2	-4.4627	-9.4557	3	$E_2(t_{1u})$	8	1.1993	-3.7937	3	$E_8(t_{1u})$
3	-3.5607	-8.5537	5	$E_3(h_g)$	9	2.1013	-2.8917	5	$E_9(h_g)$
4	-2.831	-7.824	4	$E_4(g_u)$	10	2.831	-2.162	4	$E_{10}(g_u)$
5	-1.3716	-6.3646	4	$E_5(g_g)$	11	4.2904	-0.7026	4	$E_{11}(g_g)$
6	-1.1993	-6.1923	3	$E_6(t_{2u})$	12	4.4627	-0.5303	3	$E_{12}(t_{2u})$

**Таблица 2.** Энергетический спектр фуллера  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{5d}$ : значения энергии (eV) уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы  $D_{5d}$ , к которым они относятся

№	$\bar{e}_k$ , eV	$E_k$ , eV	$g_k$	$E(\Gamma_k)$	№	$\bar{e}_k$ , eV	$E_k$ , eV	$g_k$	$E(\Gamma_k)$
1	-4.9732	-9.9662	1	$E_1(a_{1g})$	13	0.6888	-4.3042	1	$E_{13}(a_{1g})$
2	-4.4365	-9.4295	1	$E_3(a_{2u})$	14	1.2255	-3.7675	1	$E_{15}(a_{2u})$
3	-4.4245	-9.4175	2	$E_2(e_{1u})$	15	1.2375	-3.7555	2	$E_{14}(e_{1u})$
4	-3.63	-8.623	1	$E_5(a_{1g})$	16	2.032	-2.961	1	$E_{17}(a_{1g})$
5	-3.529	-8.522	2	$E_6(e_{2g})$	17	2.133	-2.86	2	$E_{18}(e_{2g})$
6	-3.5208	-8.5138	2	$E_4(e_{1g})$	18	2.1412	-2.8518	2	$E_{16}(e_{1g})$
7	-2.8873	-7.8803	2	$E_7(e_{1u})$	19	2.7747	-2.2183	2	$E_{19}(e_{1u})$
8	-2.7743	-7.7673	2	$E_8(e_{2u})$	20	2.8877	-2.1053	2	$E_{20}(e_{2u})$
9	-1.4103	-6.4033	2	$E_9(e_{2g})$	21	4.2517	-0.7413	2	$E_{21}(e_{2g})$
10	-1.3934	-6.3864	2	$E_{10}(e_{1g})$	22	4.2686	-0.7244	2	$E_{22}(e_{1g})$
11	-1.2491	-6.2421	2	$E_{11}(e_{2u})$	23	4.4129	-0.5801	2	$E_{23}(e_{2u})$
12	-1.2031	-6.1961	1	$E_{12}(a_{2u})$	24	4.4589	-0.5341	1	$E_{24}(a_{2u})$

**Таблица 3.** Энергетический спектр фуллера  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$ : значения энергии (eV) уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы  $D_{3d}$ , к которым они относятся

№	$\bar{e}_k$ , eV	$E_k$ , eV	$g_k$	$E(\Gamma_k)$	№	$\bar{e}_k$ , eV	$E_k$ , eV	$g_k$	$E(\Gamma_k)$
1	-4.933	-9.926	1	$E_1(a_{1g})$	15	0.729	-4.264	1	$E_{15}(a_{1g})$
2	-4.4836	-9.4766	1	$E_3(a_{2u})$	16	1.1784	-3.8146	1	$E_{17}(a_{2u})$
3	-4.3508	-9.3438	2	$E_2(e_u)$	17	1.3112	-3.6818	2	$E_{16}(e_u)$
4	-3.5694	-8.5624	2	$E_5(e_g)$	18	2.0926	-2.9004	2	$E_{19}(e_g)$
5	-3.5486	-8.5416	1	$E_4(a_{1g})$	19	2.1134	-2.8796	1	$E_{18}(a_{1g})$
6	-3.4813	-8.4743	2	$E_6(e_g)$	20	2.1807	-2.8123	2	$E_{20}(e_g)$
7	-2.8734	-7.8664	1	$E_9(a_{2u})$	21	2.7886	-2.2044	1	$E_{23}(a_{2u})$
8	-2.8455	-7.8385	2	$E_8(e_u)$	22	2.8165	-2.1765	2	$E_{22}(e_u)$
9	-2.7634	-7.7564	1	$E_7(a_{1u})$	23	2.8986	-2.0944	1	$E_{21}(a_{1u})$
10	-1.4998	-6.4928	1	$E_{10}(a_{2g})$	24	4.1622	-0.8308	1	$E_{24}(a_{2g})$
11	-1.4423	-6.4353	2	$E_{12}(e_g)$	25	4.2197	-0.7733	2	$E_{26}(e_g)$
12	-1.3426	-6.3356	1	$E_{11}(a_{1g})$	26	4.3194	-0.6736	1	$E_{25}(a_{1g})$
13	-1.2967	-6.2897	2	$E_{13}(e_u)$	27	4.3653	-0.6277	2	$E_{27}(e_u)$
14	-1.2036	-6.1966	1	$E_{14}(a_{2u})$	28	4.4584	-0.5346	1	$E_{28}(a_{2u})$

**Таблица 4.** Разрешенные переходы в энергетическом спектре фуллера  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$ 

№	$\Delta E$	$\Delta E$ , eV	№	$\Delta E$	$\Delta E$ , eV	№	$\Delta E$	$\Delta E$ , eV
1	$E_9(h_g) - E_6(t_{2u})$	3.301	5	$E_7(a_g) - E_2(t_{1u})$	5.106	9	$E_{10}(g_u) - E_3(h_g)$	6.392
2	$E_{10}(g_u) - E_5(g_g)$	4.203	6	$E_{11}(g_g) - E_6(t_{2u})$	5.49	10	$E_9(h_g) - E_2(t_{1u})$	6.564
3	$E_8(t_{1u}) - E_3(h_g)$	4.76	7	$E_{12}(t_{2u}) - E_5(g_g)$	5.834	11	$E_{11}(g_g) - E_4(g_u)$	7.121
4	$E_9(h_g) - E_4(g_u)$	4.932	8	$E_8(t_{1u}) - E_1(a_g)$	6.219	12	$E_{12}(t_{2u}) - E_3(h_g)$	8.023



Таблица 5. Разрешенные переходы в энергетическом спектре фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{5d}$ 

№	$\Delta E$	$\Delta E, \text{eV}$	№	$\Delta E$	$\Delta E, \text{eV}$	№	$\Delta E$	$\Delta E, \text{eV}$
1	$E_{13}(a_{1g}) - E_{12}(a_{2u})$	1.892	20	$E_{16}(e_{1g}) - E_8(e_{2u})$	4.916	39	$E_{17}(a_{1g}) - E_3(a_{2u})$	6.468
2	$E_{15}(a_{2u}) - E_{10}(e_{1g})$	2.619	21	$E_{17}(a_{1g}) - E_7(e_{1u})$	4.919	40	$E_{17}(a_{1g}) - E_2(e_{1u})$	6.457
3	$E_{14}(e_{1u}) - E_{10}(e_{1g})$	2.631	22	$E_{18}(e_{2g}) - E_7(e_{1u})$	5.02	41	$E_{18}(e_{2g}) - E_2(e_{1u})$	6.558
4	$E_{14}(e_{1u}) - E_9(e_{2g})$	2.648	23	$E_{16}(e_{1g}) - E_7(e_{1u})$	5.029	42	$E_{16}(e_{1g}) - E_2(e_{1u})$	6.566
5	$E_{17}(a_{1g}) - E_{12}(a_{2u})$	3.235	24	$E_{13}(a_{1g}) - E_3(a_{2u})$	5.125	43	$E_{16}(e_{1g}) - E_3(a_{2u})$	6.578
6	$E_{16}(e_{1g}) - E_{12}(a_{2u})$	3.344	25	$E_{13}(a_{1g}) - E_2(e_{1u})$	5.113	44	$E_{21}(e_{2g}) - E_8(e_{2u})$	7.026
7	$E_{18}(e_{2g}) - E_{11}(e_{2u})$	3.382	26	$E_{22}(e_{1g}) - E_{12}(a_{2u})$	5.472	45	$E_{22}(e_{1g}) - E_8(e_{2u})$	7.043
8	$E_{16}(e_{1g}) - E_{11}(e_{2u})$	3.39	27	$E_{21}(e_{2g}) - E_{11}(e_{2u})$	5.501	46	$E_{21}(e_{2g}) - E_7(e_{1u})$	7.139
9	$E_{13}(a_{1g}) - E_7(e_{1u})$	3.576	28	$E_{22}(e_{1g}) - E_{11}(e_{2u})$	5.518	47	$E_{22}(e_{1g}) - E_7(e_{1u})$	7.156
10	$E_{19}(e_{1u}) - E_{10}(e_{1g})$	4.168	29	$E_{23}(e_{2u}) - E_{10}(e_{1g})$	5.806	48	$E_{19}(e_{1u}) - E_1(a_{1g})$	7.748
11	$E_{19}(e_{1u}) - E_9(e_{2g})$	4.185	30	$E_{23}(e_{2u}) - E_9(e_{2g})$	5.823	49	$E_{23}(e_{2u}) - E_4(e_{1g})$	7.934
12	$E_{20}(e_{2u}) - E_{10}(e_{1g})$	4.281	31	$E_{24}(a_{2u}) - E_{10}(e_{1g})$	5.852	50	$E_{23}(e_{2u}) - E_6(e_{2g})$	7.942
13	$E_{20}(e_{2u}) - E_9(e_{2g})$	4.298	32	$E_{15}(a_{2u}) - E_1(a_{1g})$	6.199	51	$E_{24}(a_{2u}) - E_4(e_{1g})$	7.98
14	$E_{14}(e_{1u}) - E_4(e_{1g})$	4.758	33	$E_{14}(e_{1u}) - E_1(a_{1g})$	6.211	52	$E_{24}(a_{2u}) - E_5(a_{1g})$	8.089
15	$E_{15}(a_{2u}) - E_4(e_{1g})$	4.746	34	$E_{19}(e_{1u}) - E_4(e_{1g})$	6.295	53	$E_{21}(e_{2g}) - E_2(e_{1u})$	8.676
16	$E_{14}(e_{1u}) - E_6(e_{2g})$	4.766	35	$E_{19}(e_{1u}) - E_6(e_{2g})$	6.304	54	$E_{22}(e_{1g}) - E_2(e_{1u})$	8.693
17	$E_{15}(a_{2u}) - E_5(a_{1g})$	4.856	36	$E_{19}(e_{1u}) - E_5(a_{1g})$	6.405	55	$E_{22}(e_{1g}) - E_3(a_{2u})$	8.705
18	$E_{14}(e_{1u}) - E_5(a_{1g})$	4.867	37	$E_{20}(e_{2u}) - E_4(e_{1g})$	6.408	56	$E_{24}(a_{2u}) - E_1(a_{1g})$	9.432
19	$E_{18}(e_{2g}) - E_8(e_{2u})$	4.907	38	$E_{20}(e_{2u}) - E_6(e_{2g})$	6.417			

Таблица 6. Разрешенные переходы в энергетическом спектре фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $D_{3d}$ 

№	$\Delta E$	$\Delta E, \text{eV}$	№	$\Delta E$	$\Delta E, \text{eV}$	№	$\Delta E$	$\Delta E, \text{eV}$
1	$E_{15}(a_{1g}) - E_{14}(a_{2u})$	1.933	29	$E_{20}(e_g) - E_7(a_{1u})$	4.944	57	$E_{19}(e_g) - E_2(e_u)$	6.443
2	$E_{15}(a_{1g}) - E_{13}(e_u)$	2.026	30	$E_{18}(a_{1g}) - E_8(e_u)$	4.959	58	$E_{18}(a_{1g}) - E_2(e_u)$	6.464
3	$E_{17}(a_{2u}) - E_{11}(a_{1g})$	2.521	31	$E_{19}(e_g) - E_9(a_{2u})$	4.966	59	$E_{21}(a_{1u}) - E_5(e_g)$	6.468
4	$E_{17}(a_{2u}) - E_{12}(e_g)$	2.621	32	$E_{18}(a_{1g}) - E_9(a_{2u})$	4.987	60	$E_{20}(e_g) - E_2(e_u)$	6.531
5	$E_{16}(e_u) - E_{12}(e_g)$	2.753	33	$E_{20}(e_g) - E_8(e_u)$	5.026	61	$E_{19}(e_g) - E_3(a_{2u})$	6.576
6	$E_{16}(e_u) - E_{10}(a_{2g})$	2.811	34	$E_{20}(e_g) - E_9(a_{2u})$	5.054	62	$E_{18}(a_{1g}) - E_3(a_{2u})$	6.597
7	$E_{19}(e_g) - E_{14}(a_{2u})$	3.296	35	$E_{15}(a_{1g}) - E_2(e_u)$	5.08	63	$E_{20}(e_g) - E_3(a_{2u})$	6.664
8	$E_{18}(a_{1g}) - E_{14}(a_{2u})$	3.317	36	$E_{15}(a_{1g}) - E_3(a_{2u})$	5.213	64	$E_{24}(a_{2g}) - E_7(a_{1u})$	6.926
9	$E_{20}(e_g) - E_{14}(a_{2u})$	3.384	37	$E_{26}(e_g) - E_{14}(a_{2u})$	5.423	65	$E_{26}(e_g) - E_7(a_{1u})$	6.983
10	$E_{19}(e_g) - E_{13}(e_u)$	3.389	38	$E_{24}(a_{2g}) - E_{13}(e_u)$	5.459	66	$E_{24}(a_{2g}) - E_8(e_u)$	7.008
11	$E_{18}(a_{1g}) - E_{13}(e_u)$	3.41	39	$E_{26}(e_g) - E_{13}(e_u)$	5.516	67	$E_{26}(e_g) - E_8(e_u)$	7.065
12	$E_{20}(e_g) - E_{13}(e_u)$	3.477	40	$E_{25}(a_{1g}) - E_{14}(a_{2u})$	5.523	68	$E_{26}(e_g) - E_9(a_{2u})$	7.093
13	$E_{15}(a_{1g}) - E_8(e_u)$	3.575	41	$E_{25}(a_{1g}) - E_{13}(e_u)$	5.616	69	$E_{25}(a_{1g}) - E_8(e_u)$	7.165
14	$E_{15}(a_{1g}) - E_9(a_{2u})$	3.602	42	$E_{27}(e_u) - E_{11}(a_{1g})$	5.708	70	$E_{25}(a_{1g}) - E_9(a_{2u})$	7.193
15	$E_{23}(a_{2u}) - E_{11}(a_{1g})$	4.131	43	$E_{28}(a_{2u}) - E_{11}(a_{1g})$	5.801	71	$E_{23}(a_{2u}) - E_1(a_{1g})$	7.722
16	$E_{22}(e_u) - E_{11}(a_{1g})$	4.159	44	$E_{27}(e_u) - E_{12}(e_g)$	5.808	72	$E_{27}(e_u) - E_6(e_g)$	7.847
17	$E_{23}(a_{2u}) - E_{12}(e_g)$	4.231	45	$E_{27}(e_u) - E_{10}(a_{2g})$	5.865	73	$E_{27}(e_u) - E_4(a_{1g})$	7.914
18	$E_{22}(e_u) - E_{12}(e_g)$	4.259	46	$E_{16}(e_u) - E_5(e_g)$	5.881	74	$E_{27}(e_u) - E_5(e_g)$	7.935
19	$E_{22}(e_u) - E_{10}(a_{2g})$	4.316	47	$E_{28}(a_{2u}) - E_{12}(e_g)$	5.901	75	$E_{28}(a_{2u}) - E_6(e_g)$	7.94
20	$E_{21}(a_{1u}) - E_{12}(e_g)$	4.341	48	$E_{17}(a_{2u}) - E_1(a_{1g})$	6.111	76	$E_{28}(a_{2u}) - E_4(a_{1g})$	8.007
21	$E_{21}(a_{1u}) - E_{10}(a_{2g})$	4.398	49	$E_{16}(e_u) - E_1(a_{1g})$	6.244	77	$E_{28}(a_{2u}) - E_5(e_g)$	8.028
22	$E_{17}(a_{2u}) - E_6(e_g)$	4.66	50	$E_{23}(a_{2u}) - E_6(e_g)$	6.27	78	$E_{24}(a_{2g}) - E_2(e_u)$	8.513
23	$E_{17}(a_{2u}) - E_4(a_{1g})$	4.727	51	$E_{22}(e_u) - E_6(e_g)$	6.298	79	$E_{26}(e_g) - E_2(e_u)$	8.571
24	$E_{17}(a_{2u}) - E_5(e_g)$	4.748	52	$E_{23}(a_{2u}) - E_4(a_{1g})$	6.337	80	$E_{25}(a_{1g}) - E_2(e_u)$	8.67
25	$E_{16}(e_u) - E_6(e_g)$	4.793	53	$E_{23}(a_{2u}) - E_5(e_g)$	6.358	81	$E_{26}(e_g) - E_3(a_{2u})$	8.703
26	$E_{19}(e_g) - E_7(a_{1u})$	4.856	54	$E_{22}(e_u) - E_4(a_{1g})$	6.365	82	$E_{25}(a_{1g}) - E_3(a_{2u})$	8.803
27	$E_{16}(e_u) - E_4(a_{1g})$	4.86	55	$E_{21}(a_{1u}) - E_6(e_g)$	6.38	83	$E_{28}(a_{2u}) - E_1(a_{1g})$	9.391
28	$E_{19}(e_g) - E_8(e_u)$	4.938	56	$E_{22}(e_u) - E_5(e_g)$	6.386			

переходы, которые обуславливают оптические спектры поглощения этих молекул. С помощью теории групп [27] найдем, какие переходы в фуллерене  $C_{20}$  разрешены, а какие запрещены с точки зрения симметрии.

Можно показать, что в энергетическом спектре молекулярной системы разрешены следующие переходы:

— если симметрия молекулярной системы  $I_h$

$$\begin{aligned} t_{1g} \leftrightarrow a_u, \quad t_{1g} \leftrightarrow h_u, \quad t_{1u} \leftrightarrow a_g, \quad t_{1u} \leftrightarrow t_{1g}, \quad t_{1u} \leftrightarrow h_g, \\ t_{2u} \leftrightarrow g_g, \quad t_{2u} \leftrightarrow h_g, \quad t_{2g} \leftrightarrow g_u, \quad t_{2g} \leftrightarrow h_u, \quad g_u \leftrightarrow g_g, \\ g_u \leftrightarrow h_g, \quad g_g \leftrightarrow h_u, \quad h_g \leftrightarrow h_u, \end{aligned} \quad (28)$$

— если симметрия молекулярной системы  $D_{5d}$

$$\begin{aligned} a_{1g} \leftrightarrow a_{2u}, \quad a_{2g} \leftrightarrow a_{1u}, \quad e_{1g} \leftrightarrow e_{1u}, \quad e_{2g} \leftrightarrow e_{2u}, \\ a_{1g} \leftrightarrow e_{1u}, \quad a_{2g} \leftrightarrow e_{1u}, \quad a_{1u} \leftrightarrow e_{1g}, \quad a_{2u} \leftrightarrow e_{1g}, \\ e_{1g} \leftrightarrow e_{2u}, \quad e_{1u} \leftrightarrow e_{2g}, \end{aligned} \quad (29)$$

— если симметрия молекулярной системы  $D_{3d}$

$$\begin{aligned} a_{1g} \leftrightarrow a_{2u}, \quad a_{2g} \leftrightarrow a_{1u}, \quad e_g \leftrightarrow e_u, \quad a_{1g} \leftrightarrow e_u, \\ a_{2g} \leftrightarrow e_u, \quad a_{1u} \leftrightarrow e_g, \quad a_{2u} \leftrightarrow e_g. \end{aligned} \quad (30)$$

Из функций Грина (4)–(10) для фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  и соотношений (28)–(30) следует, что у этих фуллеренов имеется 12, 56 и 83 разрешенных переходов, соответственно, которые представлены в табл. 4–6. Для фуллерена  $C_{20}$  с группой симметрии  $I_h$  разрешенные переходы приведены на рис. 2. Остальные переходы являются запрещенными. Следует сказать, что в фуллерене  $C_{20}$  атомы углерода совершают малые колебания около положения равновесия. Это приводит к тому, что происходит нарушение симметрии молекулы  $C_{20}$ . В результате этого запрещенные согласно симметрии системы оптические переходы становятся разрешенными с небольшой интенсивностью. На рис. 3 и 4 приведены разрешенные переходы из табл. 5 и табл. 6 для фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$ , которые, как следует из (28)–(30), становятся запрещенными при восстановлении у этого фуллерена симметрии  $I_h$ .

## 4. Заключение

Исследование фуллерена  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  в рамках модели Хаббарда в ПСФ показало, что энергетический спектр фуллерена  $C_{20}$  и его оптический спектр поглощения существенно зависят от симметрии этого фуллерена. Отметим также, что исследование энергетических спектров и оптических спектров поглощения фуллеренов  $C_{60}$  и  $C_{70}$ , выполненные в рамках модели Хаббарда в ПСФ в работах [19,20], показали хорошее соответствие между экспериментальными данными и теоретическими результатами. Это позволяет считать, что модель Хаббарда в ПСФ достаточно хорошо описывает электронные свойства углеродных наносистем.

## Список литературы

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. *Nature* **318**, 162 (1985).
- [2] Э.Д. Раков. Нанотрубки и фуллерены. Логос, М. (2006).
- [3] S. Iijima. *Nature* **354**, 56 (1991).
- [4] N. Tanaka, Y. Honda, M. Kawahara, H. Shinohara. *Thin Solid Films* **281**, 613 (1996).
- [5] M. Saunders, H.A. Jimenez-Vazquez, R.J. Cross, S. Mroczkowski, D.I. Freedberg, F.A.L. Anet. *Nature* **367**, 256 (1994).
- [6] C.R. Wang, T. Kai, T. Tomiyama, T. Yoshida, Y. Kobayashi, E. Nishibori, M. Takata, H. Shinohara. *Angew. Chem. Int. Ed.* **40**, 397 (2001).
- [7] H. Prinzbach, A. Weller, P. Landenberger, F. Wahl, J. Worth, L.T. Scott, M. Gelmont, D. Olevano, B.V. Issendorff. *Nature* **407**, 60 (2000).
- [8] V. Parasuk, J. Almlöf. *Chem. Phys. Lett.* **184**, 187 (1991).
- [9] G. Galli, F. Gygi, J.-C. Golaz. *Phys. Rev. B* **57**, 1860 (1998).
- [10] О.Е. Глухова, А.И. Жбанов, А.Г. Резков. *ФТТ* **47**, 376 (2005).
- [11] В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул. Феникс, Р/на Д. (1997).
- [12] А.А. Левин. Введение в квантовую химию твердого тела. Химия, М. (1974).
- [13] Р.О. Зайцев. Письма в *ЖЭТФ* **94**, 224 (2011).
- [14] Р.О. Зайцев. Письма в *ЖЭТФ* **95**, 423 (2012).
- [15] R.A. Harris, L.M. Falicov. *J. Chem. Phys.* **51**, 5034 (1969).
- [16] J. Hubbard. *Proc. Roy. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [17] Д.И. Хомский. *ФММ* **29**, 31 (1970).
- [18] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. Наука, М. (1994).
- [19] А.В. Силантьев. *ЖЭТФ* **148**, 749 (2015).
- [20] А.В. Силантьев. *Изв. вуз. Физика* **60**, 6, 50 (2017).
- [21] А.В. Силантьев. *Изв. вуз. Физика* **56**, 2, 70 (2013).
- [22] А.В. Силантьев. *Изв. вуз. Поволжский регион. Физ.-мат. науки* **2**, 164 (2015).
- [23] А.В. Силантьев. *Изв. вуз. Физика* **57**, № 11, 37 (2014).
- [24] А.В. Силантьев. *Изв. вуз. Поволжский регион. Физ.-мат. науки*, № 1, 168 (2015).
- [25] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975).
- [26] M. Bühl, A. Hirsch. *Chem. Rev.* **101**, 1153 (2001).
- [27] И.Г. Каплан. Симметрия многоэлектронных систем. Наука, М. (1969).

Редактор Т.Н. Василевская