

17,09

Энергетический спектр и спектр оптического поглощения фуллерена C₂₆ в модели Хаббарда

© А.В. Силантьев

Марийский государственный университет,
Йошкар-Ола, Россия

E-mail: kvvant@rambler.ru

Поступила в Редакцию 1 июня 2021 г.

В окончательной редакции 1 июня 2021 г.

Принята к публикации 7 июля 2021 г.

В рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций получены в аналитическом виде антикоммутирующие функции Грина и энергетические спектры фуллерена C₂₆ и эндо-эдрального фуллерена U@C₂₆ с группой симметрии D_{3h}. Используя методы теории групп проведена классификация энергетических состояний, а также определены разрешенные переходы в энергетических спектрах молекул C₂₆ и U@C₂₆ с группой симметрии D_{3h}.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, наносистемы, фуллерен C₂₆.

DOI: 10.21883/FTT.2021.11.51602.183

1. Введение

Интенсивное исследование углеродных кластеров началось в 1985 г. после открытия фуллерена C₆₀ [1] привело к открытию целого ряда фуллеренов C_n и эндоэдральных фуллеренов A@C_n, как с $n < 60$, так и $n > 60$. Фуллерены C_n с $n < 60$ относятся к так называемому классу малых фуллеренов. В настоящее время большое число исследований посвящено изучению свойств малых фуллеренов: C₂₀ [2,3], C₂₄ [4,5], C₂₈ [6,7], C₃₆ [8,9]. Одним из малых фуллеренов является фуллерен C₂₆, существование которого экспериментально было подтверждено в ряде работ [10,11]. Исследованию физических и химических свойств фуллерена C₂₆ посвящено довольно много работ [12–15].

Фуллерен C₂₆ состоит из 12 пентагонов и 3 гексагонов, как показано на рис. 1, и обладает группой симметрии D_{3h}. Из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 1, видно, что этот фуллерен содержит пять неэквивалентных связей и четыре группы неэквивалентных атомов углерода: G₁ = {1, 4, 9, 15, 21, 25}, G₂ = {2, 3, 5, 6, 8, 10, 14, 16, 20, 22, 24, 26}, G₃ = {7, 11, 13, 17, 19, 23}, G₄ = {12, 18}. К множеству G₁ принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения одного гексагона и двух пентагонов, общая граница которых связывает два гексагона. К множеству G₂ принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения одного гексагона и двух пентагонов, общая граница которых связывает гексагон и пентагон. К множеству G₃ принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения трех пентагонов, общая граница которых связывает пентагон и гексагон. К множеству G₄ принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения трех пентагонов, общая граница которых связывает два пентагона.

Для описания электронных свойств углеродных наносистем широко используется модель Хаббарда [16].

В рамках этой модели были изучены электронные и оптические свойства, как фуллеренов [17–22], так и нанотрубок [23]. Так, например, в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций были получены энергетические спектры и спектры оптического поглощения фуллерена C₆₀ [17], фуллерена C₇₀ [18], фуллерена C₃₆ с группой симметрии D_{6h} [19], фуллерена C₂₈ с группой симметрии T_d [20], фуллерена C₂₄ с группами симметрии O_h, D₆ и D_{6d} [21] и фуллерена C₂₀ с группами симметрии I_h, D_{5d} и D_{3d} [22]. Полученные в работах [17,18] результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Целью настоящей работы является исследование энергетического спектра фуллерена C₂₆ с группой симметрии D_{3h} в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

2. Энергетический спектр фуллерена C₂₆

Для описания π-электронной системы фуллерена C₂₆ 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 $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}$ — 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 i -ом узле; $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 1, видно, что фуллерен C₂₆ имеет пять типов неэквивалентных

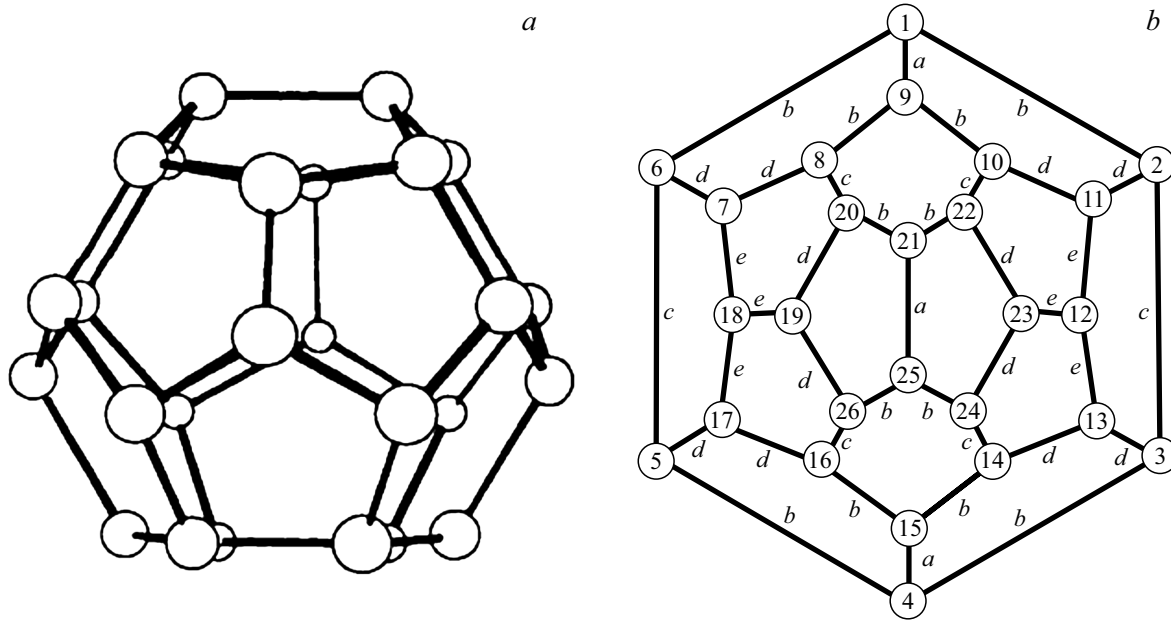


Рис. 1. Фуллерен C_{26} с группой симметрии D_{3h} и его диаграмма Шлегеля с указанием положения атомов углерода и связей между атомами углерода.

связей. Поэтому в рамках модели Хаббарда этим связям соответствует пять интегралов переноса

$$\begin{aligned}
 t_{1,9} &= t_{4,15} = t_{21,25} = t_a, \\
 t_{1,2} &= t_{1,6} = t_{3,4} = t_{4,5} = t_{8,9} = t_{9,10} = t_{14,15} = t_{15,16} \\
 &= t_{20,21} = t_{21,22} = t_{24,25} = t_{25,26} = t_b, \\
 t_{2,3} &= t_{5,6} = t_{8,20} = t_{10,22} = t_{14,24} = t_{16,26} = t_c, \\
 t_{2,11} &= t_{3,13} = t_{5,17} = t_{6,7} = t_{7,8} = t_{10,11} = t_{13,14} = t_{16,17} \\
 &= t_{19,20} = t_{19,26} = t_{22,23} = t_{23,24} = t_d, \\
 t_{7,18} &= t_{11,12} = t_{12,13} = t_{12,23} = t_{17,18} = t_{18,19} = t_e. \quad (2)
 \end{aligned}$$

Используя гамильтониан (1), соотношения (2), а также диаграмму Шлегеля, изображенную на рис. 1, запишем уравнения движения для всех операторов рождения $c_{f\sigma}^+(\tau)$, заданных в представлении Гейзенберга

$$\begin{cases}
 \frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon_\sigma c_{1\sigma}^+ + t_b(c_{2\sigma}^+ + c_{6\sigma}^+) + t_a c_{9\sigma}^+ + U c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}}, \\
 \frac{d(c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon_\sigma + U) c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}} + t_b(c_{2\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}} + c_{6\sigma}^+ n_{6\bar{\sigma}}) \\
 \quad + t_a c_{9\sigma}^+ n_{9\bar{\sigma}}, \\
 \dots \\
 \frac{dc_{26\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon_\sigma c_{26\sigma}^+ + t_b c_{25\sigma}^+ + t_c c_{16\sigma}^+ + t_d c_{19\sigma}^+ + U c_{26\sigma}^+ n_{26\bar{\sigma}}, \\
 \frac{d(c_{26\sigma}^+ n_{26\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon_\sigma + U) c_{26\sigma}^+ n_{26\bar{\sigma}} + t_b c_{25\sigma}^+ n_{25\bar{\sigma}} \\
 \quad + t_c c_{16\sigma}^+ n_{16\bar{\sigma}} + t_d c_{19\sigma}^+.
 \end{cases} \quad (3)$$

Система уравнений (3) является замкнутой системой. Используя решение данной системы уравнений можно вычислить Фурье-образы антикоммутирующих функций Грина для всех узлов фуллерена C_{26} :

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ / c_{j\sigma} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \sum_{m=1}^{36} \frac{F_{j,m}}{E - E_m + i\hbar},$$

$$\begin{aligned}
 E_k &= \varepsilon + e_k, \quad E_{k+18} = E_k + U, \quad F_{j,m} = q_m Q_{j,m}, \\
 Q_{j,k+18} &= Q_{j,k}, \quad k = 1 \dots 18, \quad (4) \\
 q_m &= \begin{cases} 1 - \frac{n}{2}, & m = 1 \dots 18 \\ \frac{n}{2}, & m = 19 \dots 36 \end{cases}
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 Q_{x,1} &= Q_{x,4} = Q_{x,5} = Q_{x,6} = Q_{x,7} = Q_{x,8} = Q_{x,9} = Q_{p,1} \\
 &= Q_{p,2} = Q_{p,3} = Q_{s,1} = Q_{s,2} = Q_{s,3} = Q_{s,4} = Q_{s,5} \\
 &= Q_{s,6} = Q_{s,14} = Q_{s,15} = Q_{s,16} = Q_{s,17} = Q_{s,18} = 0; \\
 Q_{x,2} &= \frac{\sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2} + t_c - t_a}{12\sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2}}, \\
 Q_{x,3} &= \frac{\sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2} - t_c + t_a}{12\sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2}}, \\
 Q_{x,k} &= \frac{1}{6} \frac{e_k^3 - e_k^2 t_c - e_k(2t_d^2 + 3t_e^2) + 3t_c t_e^2}{4e_k^3 - 3e_k^2(t_a + t_c) + 2(t_c t_a - 3t_e^2 - 2t_b^2 - 2t_d^2)e_k + 3t_e^2(t_a + t_c) + 2t_d^2 t_a}, \\
 & \quad k = 10, 11, 12, 13;
 \end{aligned}$$

$$Q_{x,k} = \frac{2}{3} \frac{e_k^4 - e_k^2(2t_d^2 + 2t_b^2 + t_c^2) + e_k t_c t_d^2 + 2t_d^2 t_b^2}{5e_k^4 - 3e_k^2(2t_d^2 + t_c^2 + t_a^2 + 4t_b^2) + 2t_c t_d^2 e_k + t_c^2 t_a^2 + 4t_b^2 t_d^2 + 2t_a^2 t_d^2 + 2t_b^2 t_a t_c + 4t_b^4},$$

$$k = 14, 15, 16, 17, 18;$$

$$Q_{y,1} = \frac{1}{12},$$

$$Q_{y,2} = \frac{\sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2} - t_c + t_a}{24\sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2}},$$

$$Q_{y,3} = \frac{\sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2} + t_c - t_a}{24\sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2}},$$

$$Q_{y,k} = \frac{1}{3} \frac{e_k^2 - t_d^2}{3e_k^2 - t_c^2 - 2t_d^2}, \quad k = 4, 5, 6,$$

$$Q_{y,k} = \frac{1}{12} \frac{e_k^2 - 3t_e^2}{3e_k^2 - 2t_c e_k - 3t_e^2 - 2t_d^2}, \quad k = 7, 8, 9,$$

$$Q_{y,k} = \frac{1}{12} \frac{(e_k^2 - 3t_e^2)(e_k - t_a)}{4e_k^3 - 3e_k^2(t_a + t_c) + 2(t_c t_a - 3t_e^2 - 2t_b^2 - 2t_d^2)e_k + 3t_e^2(t_a + t_c) + 2t_d^2 t_a},$$

$$k = 10, 11, 12, 13;$$

$$Q_{y,k} = \frac{2}{3} \frac{e_k^4 - e_k^2(2t_b^2 + t_a^2 + t_d^2) + t_d^2 t_a^2}{5e_k^4 - 3e_k^2(2t_d^2 + t_c^2 + t_a^2 + 4t_b^2) + 2t_c t_d^2 e_k + t_c^2 t_a^2 + 4t_b^2 t_d^2 + 2t_a^2 t_d^2 + 2t_b^2 t_a t_c + 4t_b^4},$$

$$k = 14, 15, 16, 17, 18;$$

$$Q_{p,k} = \frac{1}{3} \frac{e_k^2 - t_c^2}{3e_k^2 - t_c^2 - 2t_d^2}, \quad k = 4, 5, 6,$$

$$Q_{p,k} = \frac{1}{6} \frac{e_k(e_k - t_c)}{3e_k^2 - 2t_c e_k - 3t_e^2 - 2t_d^2}, \quad k = 7, 8, 9,$$

$$Q_{p,k} = \frac{1}{6} \frac{e_k(e_k^2 - (t_a + t_c)e_k + t_a t_c - 2t_b^2)}{4e_k^3 - 3e_k^2(t_a + t_c) + 2(t_c t_a - 3t_e^2 - 2t_b^2 - 2t_d^2)e_k + 3t_e^2(t_a + t_c) + 2t_d^2 t_a},$$

$$k = 10, 11, 12, 13;$$

$$Q_{p,k} = \frac{1}{3} \frac{e_k^4 - e_k^2(4t_b^2 + t_a^2 + t_c^2) + t_c^2 t_a^2 + 4t_b^4 - 2t_b^2 t_a t_c}{5e_k^4 - 3e_k^2(2t_d^2 + t_c^2 + t_a^2 + 4t_b^2) + 2t_c t_d^2 e_k + t_c^2 t_a^2 + 4t_b^2 t_d^2 + 2t_a^2 t_d^2 + 2t_b^2 t_a t_c + 4t_b^4},$$

$$k = 14, 15, 16, 17, 18;$$

$$Q_{s,k} = \frac{1}{2} \frac{e_k^2 - e_k t_c - 2t_d^2}{3e_k^2 - 2t_c e_k - 3t_e^2 - 2t_d^2}, \quad k = 7, 8, 9,$$

$$Q_{s,k} = \frac{1}{2} \frac{e_k^3 - e_k^2(t_a + t_c) + e_k(t_a t_c - 2t_b^2 - 2t_d^2) + 2t_a t_d^2}{4e_k^3 - 3e_k^2(t_a + t_c) + 2(t_c t_a - 3t_e^2 - 2t_b^2 - 2t_d^2)e_k + 3t_e^2(t_a + t_c) + 2t_d^2 t_a},$$

$$k = 10, 11, 12, 13;$$

$$x \in G_1, \quad y \in G_2, \quad p \in G_3, \quad s \in G_4,$$

$$e_1 = t_c,$$

$$e_2 = -\frac{t_a + t_c}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2},$$

$$e_3 = -\frac{t_a + t_c}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(t_a - t_c)^2 + 8t_b^2},$$

$$e_4 = \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{t_c^2 + 2t_d^2} \sin\left(\frac{\pi}{6} + \frac{\varphi_3}{3}\right),$$

$$e_5 = \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{t_c^2 + 2t_d^2} \cos\left(\frac{\varphi_3 + \pi}{3}\right),$$

$$e_6 = -\frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{t_c^2 + 2t_d^2} \cos\left(\frac{\varphi_3}{3}\right),$$

$$e_7 = \frac{t_c}{3} + \frac{2}{3} \sqrt{t_c^2 + 6t_d^2 + 9t_e^2} \cos\left(\frac{\varphi_2}{3}\right),$$

$$e_8 = \frac{t_c}{3} - \frac{2}{3} \sqrt{t_c^2 + 6t_d^2 + 9t_e^2} \cos\left(\frac{\varphi_2 + \pi}{3}\right),$$

$$e_9 = \frac{t_c}{3} - \frac{2}{3} \sqrt{t_c^2 + 6t_d^2 + 9t_e^2} \cos\left(\frac{\pi}{6} + \frac{\varphi_2}{3}\right),$$

$$e_{10} = \frac{1}{4} \left(t_c + t_a + 2\sqrt{A} + \sqrt{8A + \frac{(t_c + t_a)((t_c - t_a)^2 + 8t_b^2 - 12t_e^2) + 8t_d^2(t_c - t_a) - 12z}{\sqrt{A}}} \right),$$

$$e_{11} = \frac{1}{4} \left(t_c + t_a + 2\sqrt{A} - \sqrt{8A + \frac{(t_c + t_a)((t_c - t_a)^2 + 8t_b^2 - 12t_e^2) + 8t_d^2(t_c - t_a) - 12z}{\sqrt{A}}} \right),$$

$$e_{12} = \frac{1}{4} \left(t_c + t_a - 2\sqrt{A} + \sqrt{8A - \frac{(t_c + t_a)((t_c - t_a)^2 + 8t_b^2 - 12t_e^2) + 8t_d^2(t_c - t_a) - 12z}{\sqrt{A}}} \right),$$

$$e_{13} = \frac{1}{4} \left(t_c + t_a - 2\sqrt{A} - \sqrt{8A - \frac{(t_c + t_a)((t_c - t_a)^2 + 8t_b^2 - 12t_e^2) + 8t_d^2(t_c - t_a) - 12z}{\sqrt{A}}} \right),$$

$$e_{14} = x_1,$$

$$e_{15} = x_2,$$

$$e_{16} = x_3,$$

$$e_{17} = x_4,$$

$$e_{18} = x_5,$$

$$A = \frac{t_a^2}{4} - \frac{t_a t_c}{6} + \frac{t_c^2}{4} + \frac{4t_d^2}{3} + \frac{4t_b^2}{3} + 2t_e^2 + z,$$

$$z = \frac{2}{3} \left[4(t_d^2 + t_b^2 + 3t_e^2)(t_d^2 + t_b^2 - t_c t_a) + t_a(6t_d^2(t_c + t_a) + t_a t_c^2) + 3t_e^2(24t_b^2 + 2t_c t_a + 3t_e^2 + 3(t_c - t_a)^2) \right]^{1/2} \cos\left(\frac{\pi}{3} - \frac{\varphi_1}{3}\right),$$

$$\begin{aligned} \varphi_1 = \arccos \left\{ \frac{1}{2} \left[(2(2t_d^2 + 2t_b^2 - t_c t_a + 3t_e^2)^2 \right. \right. \\ + 27((t_c + t_a)^2 + 8t_c t_a - 16t_b^2)t_e^2 + 18(t_c + t_a)t_d^2 t_a) \\ \times (2t_d^2 + 2t_b^2 - t_c t_a + 3t_e^2) - 27(3(t_c + t_a)t_e^2 + 2t_d^2 t_a)^2 \\ + 81t_e^2(t_c t_a - 2t_b^2)(t_c + t_a)^2 \left. \right] [6t_a(t_c + t_a)t_d^2 \\ + (2t_d^2 + 2t_b^2 - t_c t_a + 3t_e^2)^2 \\ + 9t_e^2(8t_b^2 + (t_c - t_a)^2)]^{(-3/2)} \right\}, \\ \varphi_2 = \arccos \left(\frac{t_c(t_c^2 + 9t_d^2 - 27t_e^2)}{(t_c^2 + 6t_d^2 + 9t_e^2)^{3/2}} \right), \\ \varphi_3 = \arccos \left(\frac{3^{3/2}t_d^2 t_c}{2(t_c^2 + 2t_d^2)^{3/2}} \right), \end{aligned}$$

где x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 являются корнями следующего уравнения

$$\begin{aligned} x^5 - (t_a^2 + 4t_b^2 + t_c^2 + 2t_d^2)x^3 + t_d^2 t_c x^2 + (4t_d^2 t_b^2 + 4t_b^4 \\ + t_a^2 t_c^2 + 2t_a^2 t_d^2 + 2t_b^2 t_c t_a)x - 4t_d^2 t_b^2 t_a - t_a^2 t_d^2 t_c = 0. \quad (6) \end{aligned}$$

Величины E_m , которые входят в соотношение (4), являются полюсами Фурье-образа антикоммутирующей функции Грина, которые, как известно [24], соответствуют энергетическим состояниям квантовой системы. Следовательно, величины E_m , которые входят в функцию Грина (4), определяют энергетический спектр фуллерена C_{26} с группой симметрии D_{3h} .

Энергетические состояния фуллерена C_{26} с группой симметрии D_{3h} можно классифицировать согласно неприводимым представлениям группы D_{3h} , которая, как известно [25], имеет четыре одномерных неприводимых представлений a'_1, a''_1, a'_2, a''_2 и два двумерных неприводимых представлений e', e'' . Можно показать, что энергетические состояния фуллерена C_{26} , определяемые полюсами функции Грина (4), связаны с неприводимыми представлениями группы D_{3h} следующим образом:

$$\begin{aligned} E_1(a''_1), E_2(a'_2), E_3(a'_2), E_4(e''), E_5(e''), E_6(e''), E_7(a''_2), \\ E_8(a''_2), E_9(a''_2), E_{10}(a'_1), E_{11}(a'_1), E_{12}(a'_1), E_{13}(a'_1), \\ E_{14}(e'), E_{15}(e'), E_{16}(e'), E_{17}(e'), E_{18}(e'), E_{19}(a''_1), \\ E_{20}(a'_2), E_{21}(a'_2), E_{22}(e''), E_{23}(e''), E_{24}(e''), E_{25}(a''_2), \\ E_{26}(a''_2), E_{27}(a''_2), E_{28}(a'_1), E_{29}(a'_1), E_{30}(a'_1), E_{31}(a'_1), \\ E_{32}(e'), E_{33}(e'), E_{34}(e'), E_{35}(e'), E_{36}(e'). \end{aligned}$$

Как известно, энергетические уровни квантовой системы кроме значения энергии, также характеризуются степенью вырождения, которую можно найти с помощью следующего соотношения [17,18]:

$$g_i = \sum_{j=1}^N Q_{j,i}, \quad (7)$$

где N — число узлов в наносистеме.

Для того чтобы получить численные значения для степеней вырождения энергетических уровней фуллерена C_{26} подставим в формулу (7) величины $Q_{j,i}$, которые входят в функцию Грина (4):

$$\begin{aligned} g_1 = g_2 = g_3 = g_7 = g_8 = g_9 = g_{10} = g_{11} \\ = g_{12} = g_{13} = g_{19} = g_{20} = g_{21} = g_{25} = g_{26} \\ = g_{27} = g_{28} = g_{29} = g_{30} = g_{31} = 1, \\ g_4 = g_5 = g_6 = g_{14} = g_{15} = g_{16} = g_{17} = g_{18} = g_{22} \\ = g_{23} = g_{24} = g_{32} = g_{33} = g_{34} = g_{35} = g_{36} = 2. \quad (8) \end{aligned}$$

Таким образом, величины E_m , которые входят в функцию Грина (4), и величины g_m из (8) описывают энергетический спектр фуллерена C_{26} с группой симметрии D_{3h} в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Из этих соотношений следует, что энергетический спектр фуллерена C_{26} с группой симметрии D_{3h} состоит из 36 энергетических состояний, из которых 20 энергетических состояний не вырождены, а 16 энергетических состояний являются двукратно вырожденными.

3. Обсуждение результатов

Исследования, выполненные в работе [15], показали, что расстояния между атомами углерода в фуллерене C_{26} с группой симметрии D_{3h} имеют следующие значения:

$$\begin{aligned} x_a = 1.540 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.428 \text{ \AA}, \quad x_c = 1.450 \text{ \AA}, \\ x_d = 1.473 \text{ \AA}, \quad x_e = 1.410 \text{ \AA}. \quad (9) \end{aligned}$$

Для того чтобы получить численные значения для энергетического спектра фуллерена C_{26} , необходимо найти численные значения для интегралов переноса, которые соответствуют этому фуллерену. Для этого воспользуемся следующим соотношением [18,21]:

$$t_s = -8.17065 \exp(-1.69521x_s). \quad (10)$$

Подставляя (9) в соотношение (10) мы получим численные значения для интегралов переноса для фуллерена C_{26} с группой симметрии D_{3h} :

$$\begin{aligned} t_a = -0.60045 \text{ eV}, \quad t_b = -0.72600 \text{ eV}, \quad t_c = -0.69942 \text{ eV}, \\ t_d = -0.67268 \text{ eV}, \quad t_e = -0.74849 \text{ eV}. \quad (11) \end{aligned}$$

Как видно из функции Грина (4) соотношение, описывающее энергетический спектр фуллерена C_{26} , можно записать в следующем виде:

$$E_k = \varepsilon + \frac{U}{2} + \bar{\varepsilon}_k, \quad (12)$$

Таблица 1. Энергетический спектр фуллерена C₂₆ с группой симметрии D_{3h}: значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы D_{3h}, к которым они относятся

№	e _j , eV	E _j , eV	g _j	E(Γ _j)	№	e _j , eV	E _j , eV	g _j	E(Γ _j)
1	-4.930	-9.923	1	E ₁₃ (a' ₁)	19	0.732	-4.261	1	E ₃₁ (a' ₁)
2	-4.612	-9.605	1	E ₉ (a'' ₂)	20	1.050	-3.943	1	E ₂₇ (a'' ₂)
3	-4.479	-9.472	2	E ₁₈ (e')	21	1.183	-3.810	2	E ₃₆ (e')
4	-3.906	-8.899	1	E ₁₂ (a' ₁)	22	1.756	-3.237	1	E ₃₀ (a' ₁)
6	-3.876	-8.869	2	E ₆ (e'')	23	1.786	-3.207	2	E ₂₄ (e'')
5	-3.752	-8.745	2	E ₁₇ (e')	24	1.910	-3.083	2	E ₃₅ (e')
8	-3.266	-8.259	1	E ₈ (a'' ₂)	25	2.396	-2.597	1	E ₂₆ (a'' ₂)
7	-3.209	-8.202	1	E ₃ (a' ₂)	26	2.453	-2.540	1	E ₂₁ (a' ₂)
9	-3.071	-8.064	2	E ₁₆ (e')	27	2.591	-2.402	2	E ₃₄ (e')
10	-3.067	-8.060	2	E ₅ (e'')	28	2.595	-2.398	2	E ₂₃ (e'')
11	-2.531	-7.524	1	E ₁₁ (a' ₁)	29	3.131	-1.862	1	E ₂₉ (a' ₁)
12	-2.132	-7.125	1	E ₁ (a'' ₁)	30	3.530	-1.463	1	E ₁₉ (a'' ₁)
13	-1.712	-6.705	2	E ₁₄ (e')	31	3.950	-1.043	2	E ₃₂ (e')
14	-1.550	-6.543	2	E ₄ (e'')	32	4.112	-0.881	2	E ₂₂ (e'')
16	-1.314	-6.307	1	E ₇ (a'' ₂)	33	4.348	-0.645	1	E ₂₅ (a'' ₂)
15	-1.257	-6.250	1	E ₁₀ (a' ₁)	34	4.405	-0.588	1	E ₂₈ (a' ₁)
17	-1.153	-6.146	1	E ₂ (a' ₂)	35	4.509	-0.484	1	E ₂₀ (a' ₂)
18	-1.142	-6.135	2	E ₁₅ (e')	36	4.520	-0.473	2	E ₃₃ (e')

Таблица 2. Энергетический спектр эндофуллерена U@C₂₆ с группой симметрии D_{3h}: значения энергии уровней, кратность их вырождения и неприводимые представления группы D_{3h}, к которым они относятся

№	e _j , eV	E _j , eV	g _j	E(Γ _j)	№	e _j , eV	E _j , eV	g _j	E(Γ _j)
1	-4.803	-9.796	1	E ₁₃ (a' ₁)	19	0.859	-4.134	1	E ₃₁ (a' ₁)
2	-4.518	-9.511	1	E ₉ (a'' ₂)	20	1.144	-3.849	1	E ₂₇ (a'' ₂)
3	-4.370	-9.363	2	E ₁₈ (e')	21	1.292	-3.701	2	E ₃₆ (e')
4	-3.867	-8.860	1	E ₁₂ (a' ₁)	22	1.795	-3.198	1	E ₃₀ (a' ₁)
6	-3.808	-8.801	2	E ₆ (e'')	23	1.854	-3.139	2	E ₂₄ (e'')
5	-3.676	-8.669	2	E ₁₇ (e')	24	1.986	-3.007	2	E ₃₅ (e')
8	-3.250	-8.243	1	E ₈ (a'' ₂)	25	2.412	-2.581	1	E ₂₆ (a'' ₂)
7	-3.138	-8.131	1	E ₃ (a' ₂)	26	2.524	-2.469	1	E ₂₁ (a' ₂)
9	-3.073	-8.066	2	E ₁₆ (e')	27	2.589	-2.404	2	E ₃₄ (e')
10	-3.052	-8.045	2	E ₅ (e'')	28	2.610	-2.383	2	E ₂₃ (e'')
11	-2.585	-7.578	1	E ₁₁ (a' ₁)	29	3.077	-1.916	1	E ₂₉ (a' ₁)
12	-2.173	-7.166	1	E ₁ (a'' ₁)	30	3.489	-1.504	1	E ₁₉ (a'' ₁)
13	-1.774	-6.767	2	E ₁₄ (e')	31	3.888	-1.105	2	E ₃₂ (e')
14	-1.632	-6.625	2	E ₄ (e'')	32	4.030	-0.963	2	E ₂₂ (e'')
16	-1.383	-6.376	1	E ₇ (a'' ₂)	33	4.279	-0.714	1	E ₂₅ (a'' ₂)
15	-1.336	-6.329	1	E ₁₀ (a' ₁)	34	4.326	-0.667	1	E ₂₈ (a' ₁)
17	-1.262	-6.255	2	E ₁₅ (e')	35	4.400	-0.593	2	E ₃₃ (e')
18	-1.257	-6.250	1	E ₂ (a' ₂)	36	4.405	-0.588	1	E ₂₀ (a' ₂)

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

$$\bar{\epsilon}_k = \begin{cases} e_k - \frac{U}{2}, & k = 1 \dots 18, \\ e_{k-18} + \frac{U}{2}, & k = 19 \dots 36. \end{cases} \quad (13)$$

Используя соотношения (13), (5) и (11), а также $U = 5.662 \text{ eV}$ [17] получим численные значения для величин $\bar{\epsilon}_k$, которые приведены в табл. 1. Подставляя $\bar{\epsilon}_k$ из табл. 1, а также $\epsilon = -7.824 \text{ eV}$, $U = 5.662 \text{ eV}$ [17]

в соотношение (12) получим энергетический спектр фуллерена C₂₆ с группой симметрии D_{3h}. Результаты вычислений приведены в табл. 1, а также на рис. 2. Как видно из соотношений (12), (13) и рис. 2, энергетические состояния фуллерена C₂₆ образуют две подзоны Хаббарда. Энергетические состояния, образующие нижнюю подзону Хаббарда, сосредоточены вблизи энергии ϵ , а энергетические состояния, образующие верхнюю подзону Хаббарда, сосредоточены вблизи энергии $\epsilon + U$.

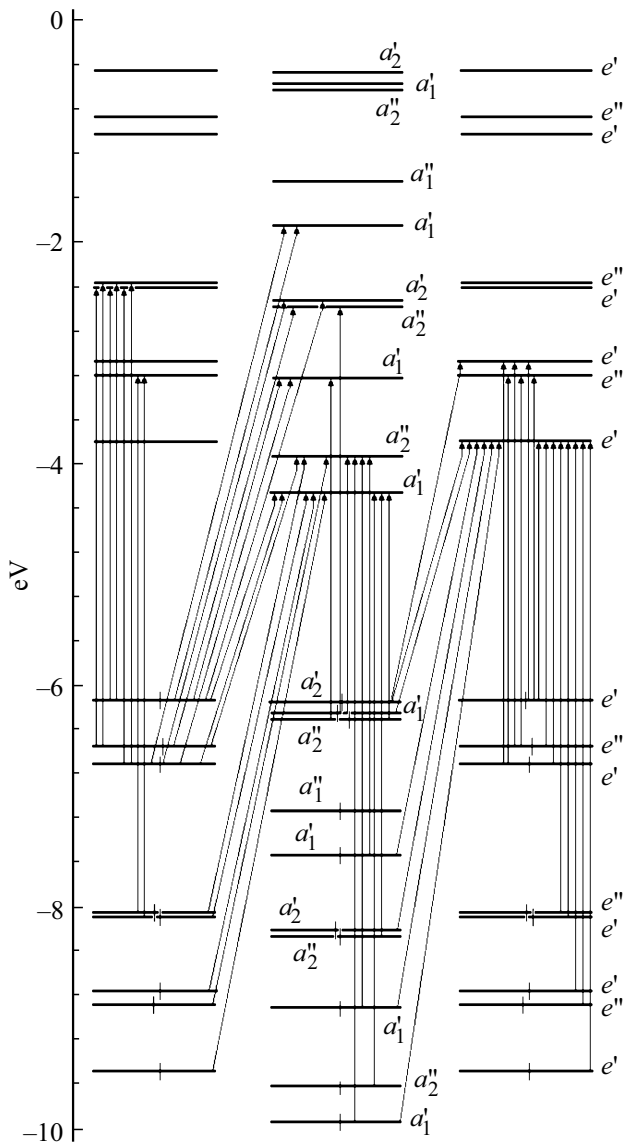


Рис. 2. Энергетический спектр фуллера C_{26} с группой симметрии D_{3h} .

Рассмотрим теперь эндоэдральный фуллерен $U@C_{26}$. Проведенные исследования показали [15], что эндоэдральный фуллерен $U@C_{26}$ обладает группой симметрии D_{3h} , а расстояния между атомами углерода в этой молекуле имеют следующие значения:

$$x_a = 1.531 \text{ \AA}, \quad x_b = 1.480 \text{ \AA}, \quad x_c = 1.486 \text{ \AA},$$

$$x_d = 1.514 \text{ \AA}, \quad x_e = 1.433 \text{ \AA}. \quad (14)$$

Теперь для того чтобы получить численные значения для интегралов переноса у молекулы $U@C_{26}$ подставим (14) в соотношение (10):

$$t_a = -0.60968 \text{ eV}, \quad t_b = -0.66474 \text{ eV}, \quad t_c = -0.65801 \text{ eV},$$

$$t_d = -0.62751 \text{ eV}, \quad t_e = -0.71987 \text{ eV}. \quad (15)$$

Подставляя численные значения для ϵ , U и интегралов переноса (15) в соотношения (5), (13) и (12) получим для молекулы $U@C_{26}$ численные значения для величин $\bar{\epsilon}_k$ и E_k , которые приведены в табл. 2. Из рис. 2, рис. 3, табл. 1 и табл. 2 видно, что энергетические спектры молекул C_{26} и $U@C_{26}$ отличаются друг от друга относительным расположением энергетических состояний $E_2(a_2')$, $E_{15}(e')$ и $E_{20}(a_2'')$, $E_{33}(e')$. Считается, что при внедрении атома металла внутрь фуллера не происходит существенного изменения его энергетических уровней. При этом в первом приближении считается, что при внедрении атома металла валентные электроны этого атома переходят на остов фуллера [26]. При образовании эндоэдрального фуллера $U@C_{26}$, четыре валентных электрона атома Урана переходят в оболочку фуллера C_{26} и, как видно из рис. 3, занимают уровни $E_{31}(a_1')$, $E_{27}(a_2'')$ и $E_{36}(e')$.

Одной из важнейших характеристик квантовой системы является ее спектр оптического поглощения. Найдем переходы, которые обуславливают оптические спектры фуллера C_{26} и эндоэдрального фуллера $U@C_{26}$ с группой симметрии D_{3h} . Для этого воспользуемся энергетическими спектрами этих молекул, и используя

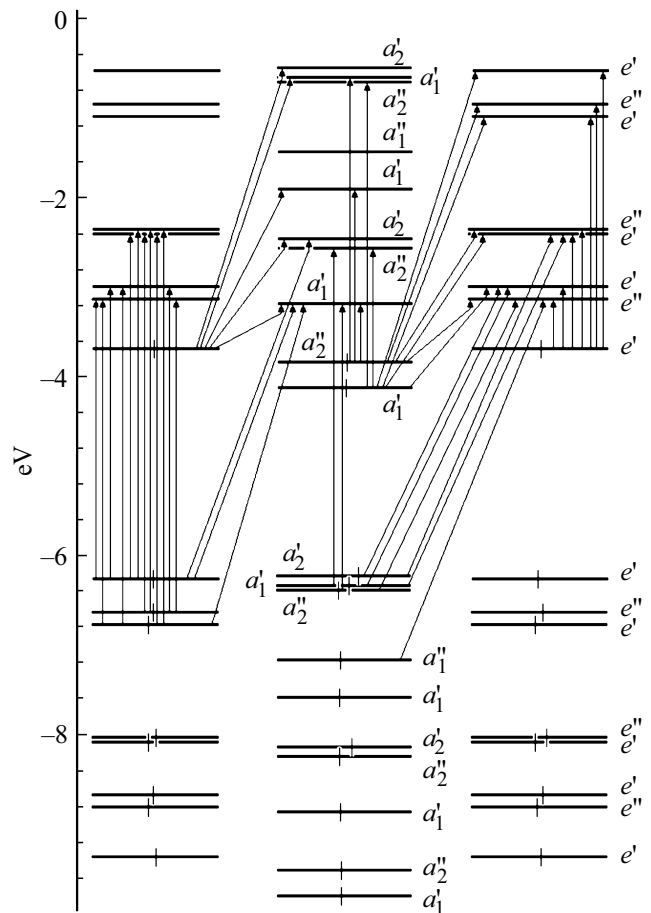


Рис. 3. Энергетический спектр эндофуллера $U@C_{26}$ с группой симметрии D_{3h} .

Таблица 3. Разрешенные переходы в энергетическом спектре фуллерена C₂₆

№	ΔE	ΔE, eV	№	ΔE	ΔE, eV	№	ΔE	ΔE, eV	№	ΔE	ΔE, eV
1	E ₃₁ – E ₁₅	1.874	45	E ₃₆ – E ₃	4.392	89	E ₃₅ – E ₁₇	5.662	133	E ₃₂ – E ₅	7.018
2	E ₃₁ – E ₇	2.046	46	E ₃₅ – E ₁₁	4.441	90	E ₃₂ – E ₁₄	5.662	134	E ₃₂ – E ₁₆	7.021
3	E ₂₇ – E ₁₀	2.307	47	E ₂₉ – E ₇	4.446	91	E ₂₃ – E ₅	5.662	135	E ₃₃ – E ₁₁	7.051
4	E ₃₆ – E ₁₅	2.325	48	E ₃₁ – E ₁₇	4.483	92	E ₃₆ – E ₁₈	5.662	136	E ₃₄ – E ₁₈	7.071
5	E ₃₆ – E ₂	2.336	49	E ₂₁ – E ₁	4.585	93	E ₂₃ – E ₁₆	5.665	137	E ₂₃ – E ₁₈	7.074
6	E ₂₄ – E ₄	3.336	50	E ₁₉ – E ₂	4.684	94	E ₃₃ – E ₂	5.673	138	E ₃₂ – E ₃	7.159
7	E ₃₆ – E ₁₀	2.440	51	E ₂₃ – E ₁	4.726	95	E ₂₈ – E ₇	5.719	139	E ₂₂ – E ₅	7.180
8	E ₃₁ – E ₁₄	2.443	52	E ₃₀ – E ₁₆	4.827	96	E ₃₃ – E ₁₀	5.777	140	E ₂₂ – E ₁₆	7.183
9	E ₂₇ – E ₄	2.600	53	E ₂₉ – E ₁₄	4.843	97	E ₃₅ – E ₆	5.786	141	E ₂₃ – E ₉	7.206
10	E ₃₆ – E ₄	2.733	54	E ₂₄ – E ₅	4.854	98	E ₃₄ – E ₃	5.800	142	E ₂₆ – E ₁₃	7.326
11	E ₃₆ – E ₁₄	2.895	55	E ₂₄ – E ₁₆	4.857	99	E ₃₅ – E ₁₂	5.816	143	E ₂₂ – E ₈	7.378
12	E ₃₀ – E ₁₅	2.899	56	E ₂₇ – E ₆	4.926	100	E ₂₂ – E ₁₄	5.824	144	E ₁₉ – E ₆	7.406
13	E ₂₄ – E ₁₅	2.929	57	E ₂₆ – E ₁₁	4.927	101	E ₂₃ – E ₈	5.861	145	E ₂₅ – E ₅	7.415
14	E ₃₅ – E ₁₅	3.052	58	E ₃₆ – E ₁₇	4.935	102	E ₂₅ – E ₄	5.898	146	E ₂₈ – E ₁₆	7.475
15	E ₃₅ – E ₂	3.064	59	E ₂₇ – E ₁₂	4.956	103	E ₂₇ – E ₁₃	5.981	147	E ₃₄ – E ₁₃	7.522
16	E ₃₀ – E ₇	3.071	60	E ₃₅ – E ₅	4.978	104	E ₃₃ – E ₄	6.070	148	E ₂₀ – E ₁₆	7.579
17	E ₂₄ – E ₇	3.101	61	E ₃₅ – E ₁₆	4.981	105	E ₃₆ – E ₁₃	6.113	149	E ₃₃ – E ₅	7.587
18	E ₃₅ – E ₁₀	3.167	62	E ₃₀ – E ₈	5.023	106	E ₂₈ – E ₁₄	6.117	150	E ₃₃ – E ₁₆	7.590
19	E ₃₅ – E ₄	3.460	63	E ₂₄ – E ₈	5.053	107	E ₂₉ – E ₁₆	6.202	151	E ₂₉ – E ₁₈	7.610
20	E ₃₀ – E ₁₄	3.468	64	E ₃₆ – E ₆	5.059	108	E ₂₁ – E ₁₇	6.205	152	E ₂₈ – E ₈	7.671
21	E ₂₄ – E ₁₄	3.498	65	E ₁₉ – E ₄	5.080	109	E ₂₀ – E ₁₄	6.221	153	E ₃₂ – E ₁₇	7.702
22	E ₂₇ – E ₁₁	3.581	66	E ₃₆ – E ₁₂	5.089	110	E ₃₃ – E ₁₄	6.232	154	E ₃₃ – E ₃	7.729
23	E ₂₁ – E ₁₅	3.595	67	E ₃₂ – E ₁₅	5.092	111	E ₃₀ – E ₁₈	6.235	155	E ₂₉ – E ₉	7.743
24	E ₃₅ – E ₁₄	3.622	68	E ₃₂ – E ₂	5.103	112	E ₂₂ – E ₁	6.244	156	E ₃₂ – E ₆	7.826
25	E ₂₆ – E ₁₀	3.653	69	E ₃₅ – E ₃	5.119	113	E ₂₄ – E ₁₈	6.265	157	E ₃₂ – E ₁₂	7.856
26	E ₃₆ – E ₁₁	3.714	70	E ₃₄ – E ₁₁	5.122	114	E ₂₆ – E ₆	6.271	158	E ₂₂ – E ₁₇	7.864
27	E ₃₄ – E ₁₅	3.734	71	E ₃₂ – E ₁₀	5.207	115	E ₂₆ – E ₁₂	6.301	159	E ₂₂ – E ₆	7.988
28	E ₂₃ – E ₁₅	3.737	72	E ₃₁ – E ₁₈	5.211	116	E ₃₄ – E ₁₇	6.343	160	E ₂₈ – E ₁₇	8.157
29	E ₃₄ – E ₂	3.745	73	E ₂₂ – E ₁₅	5.254	117	E ₂₃ – E ₁₇	6.346	161	E ₂₅ – E ₆	8.223
30	E ₃₄ – E ₁₀	3.849	74	E ₃₁ – E ₉	5.343	118	E ₃₀ – E ₉	6.368	162	E ₂₅ – E ₁₂	8.253
31	E ₃₁ – E ₁₆	3.802	75	E ₂₂ – E ₇	5.426	119	E ₃₅ – E ₁₈	6.389	163	E ₂₀ – E ₁₇	8.260
32	E ₂₃ – E ₇	3.909	76	E ₂₆ – E ₅	5.463	120	E ₂₉ – E ₈	6.397	164	E ₃₃ – E ₁₇	8.272
33	E ₂₄ – E ₁	3.918	77	E ₃₂ – E ₄	5.500	121	E ₂₄ – E ₉	6.398	165	E ₃₃ – E ₆	8.395
34	E ₂₆ – E ₄	3.946	78	E ₃₀ – E ₁₇	5.508	122	E ₃₄ – E ₆	6.467	166	E ₃₃ – E ₁₂	8.425
35	E ₃₁ – E ₈	3.998	79	E ₂₁ – E ₁₆	5.524	123	E ₂₃ – E ₆	6.470	167	E ₃₂ – E ₁₈	8.429
36	E ₂₇ – E ₅	4.118	80	E ₂₄ – E ₁₇	5.538	124	E ₃₂ – E ₁₁	6.481	168	E ₂₂ – E ₁₈	8.591
37	E ₃₄ – E ₄	4.141	81	E ₂₈ – E ₁₅	5.547	125	E ₃₄ – E ₁₂	6.497	169	E ₂₂ – E ₉	8.724
38	E ₂₃ – E ₄	4.144	82	E ₂₅ – E ₁₀	5.605	126	E ₂₀ – E ₁	6.540	170	E ₃₂ – E ₁₃	8.881
39	E ₂₁ – E ₁₄	4.165	83	E ₂₀ – E ₁₅	5.651	127	E ₁₉ – E ₅	6.598	171	E ₂₈ – E ₁₈	8.884
40	E ₃₆ – E ₅	4.250	84	E ₃₄ – E ₅	5.659	128	E ₁₉ – E ₃	6.739	172	E ₂₀ – E ₁₈	8.988
41	E ₃₆ – E ₁₆	4.253	85	E ₂₄ – E ₆	5.662	129	E ₃₅ – E ₁₃	6.841	173	E ₃₃ – E ₁₈	8.999
42	E ₂₉ – E ₁₅	4.273	86	E ₃₄ – E ₁₆	5.662	130	E ₂₅ – E ₁₁	6.878	174	E ₂₈ – E ₉	9.017
43	E ₃₄ – E ₁₄	4.303	87	E ₂₂ – E ₄	5.662	131	E ₂₉ – E ₁₇	6.883	175	E ₂₅ – E ₁₃	9.278
44	E ₂₃ – E ₁₄	4.306	88	E ₃₃ – E ₁₅	5.662	132	E ₂₁ – E ₁₈	6.932	176	E ₃₃ – E ₁₃	9.450

теорию групп [27] найдем, какие переходы с точки зрения симметрии у молекул C₂₆ и U@C₂₆ разрешены, а какие запрещены. Можно показать, что в энергетическом спектре молекулы с группой симметрии D_{3h} разрешены следующие переходы:

$$\begin{aligned}
 & a'_1 \leftrightarrow e', \quad a'_2 \leftrightarrow e', \quad e' \leftrightarrow e', \\
 & a''_1 \leftrightarrow e'', \quad a''_2 \leftrightarrow e'', \quad e'' \leftrightarrow e'', \\
 & a'_1 \leftrightarrow a''_2, \quad a'_2 \leftrightarrow a''_1, \quad e' \leftrightarrow e''. \quad (16)
 \end{aligned}$$

Из функции Грина (4), рис. 2, рис. 3 и правил отбора (16) следует, что у фуллерена C₂₆ имеется 176 разрешенных переходов, а у эндоэдрального фуллерена U@C₂₆ имеется 171 разрешенных переходов, которые представлены в табл. 3 и табл. 4. Остальные переходы являются запрещенными. Разное количество разрешенных переходов у C₂₆ и U@C₂₆ связано с тем, что, как видно из рис. 2 и рис. 3, при внедрении атома урана в фуллерен C₂₆ четыре валентных электрона переходят с атома урана на фуллерен C₂₆ и заполняют

Таблица 4. Разрешенные переходы в энергетическом спектре эндофуллерепа $U@C_{26}$

№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$	№	ΔE	$\Delta E, eV$
1	$E_{30} - E_{36}$	0.503	44	$E_{24} - E_1$	4.027	87	$E_{22} - E_4$	5.662	130	$E_{34} - E_{18}$	6.960
2	$E_{24} - E_{36}$	0.562	45	$E_{26} - E_4$	4.045	88	$E_{32} - E_{14}$	5.662	131	$E_{23} - E_{18}$	6.980
3	$E_{30} - E_{27}$	0.651	46	$E_{34} - E_4$	4.222	89	$E_{33} - E_{15}$	5.662	132	$E_{33} - E_{11}$	6.985
4	$E_{35} - E_{36}$	0.695	47	$E_{23} - E_4$	4.242	90	$E_{24} - E_6$	5.662	133	$E_{32} - E_3$	7.025
5	$E_{24} - E_{27}$	0.709	48	$E_{21} - E_{14}$	4.299	91	$E_{20} - E_{15}$	5.667	134	$E_{22} - E_5$	7.082
6	$E_{35} - E_{31}$	1.128	49	$E_{29} - E_{15}$	4.339	92	$E_{23} - E_{16}$	5.682	135	$E_{22} - E_{16}$	7.102
7	$E_{21} - E_{36}$	1.233	50	$E_{34} - E_{14}$	4.364	93	$E_{28} - E_7$	5.709	136	$E_{23} - E_9$	7.128
8	$E_{34} - E_{36}$	1.298	51	$E_{23} - E_{14}$	4.384	94	$E_{34} - E_3$	5.727	137	$E_{26} - E_{13}$	7.215
9	$E_{23} - E_{36}$	1.318	52	$E_{29} - E_7$	4.460	95	$E_{33} - E_{10}$	5.736	138	$E_{22} - E_8$	7.279
10	$E_{23} - E_{27}$	1.466	53	$E_{35} - E_{11}$	4.572	96	$E_{35} - E_6$	5.795	139	$E_{19} - E_6$	7.297
11	$E_{26} - E_{31}$	1.553	54	$E_{21} - E_1$	4.697	97	$E_{22} - E_{14}$	5.804	140	$E_{25} - E_5$	7.331
12	$E_{34} - E_{31}$	1.730	55	$E_{19} - E_2$	4.746	98	$E_{35} - E_{12}$	5.853	141	$E_{34} - E_{13}$	7.392
13	$E_{29} - E_{36}$	1.785	56	$E_{23} - E_1$	4.783	99	$E_{25} - E_4$	5.911	142	$E_{28} - E_{16}$	7.398
14	$E_{29} - E_{27}$	1.933	57	$E_{29} - E_{14}$	4.851	100	$E_{33} - E_4$	6.032	143	$E_{29} - E_{18}$	7.447
15	$E_{32} - E_{36}$	2.596	58	$E_{30} - E_{16}$	4.868	101	$E_{28} - E_{14}$	6.100	144	$E_{33} - E_5$	7.452
16	$E_{22} - E_{36}$	2.738	59	$E_{24} - E_5$	4.906	102	$E_{29} - E_{16}$	6.149	145	$E_{33} - E_{16}$	7.473
17	$E_{22} - E_{27}$	2.886	60	$E_{24} - E_{16}$	4.926	103	$E_{30} - E_{18}$	6.165	146	$E_{20} - E_{16}$	7.478
18	$E_{32} - E_{31}$	3.029	61	$E_{26} - E_{11}$	4.997	104	$E_{20} - E_{14}$	6.180	147	$E_{33} - E_3$	7.538
19	$E_{28} - E_{36}$	3.034	62	$E_{35} - E_5$	5.039	105	$E_{33} - E_{14}$	6.174	148	$E_{32} - E_{17}$	7.563
20	$E_{30} - E_{15}$	3.057	63	$E_{30} - E_8$	5.045	106	$E_{21} - E_{17}$	6.200	149	$E_{28} - E_8$	7.576
21	$E_{33} - E_{36}$	3.108	64	$E_{35} - E_{16}$	5.059	107	$E_{22} - E_1$	6.203	150	$E_{29} - E_9$	7.595
22	$E_{20} - E_{36}$	3.114	65	$E_{24} - E_8$	5.103	108	$E_{26} - E_6$	6.221	151	$E_{32} - E_6$	7.696
23	$E_{24} - E_{15}$	3.116	66	$E_{19} - E_4$	5.121	109	$E_{24} - E_{18}$	6.224	152	$E_{22} - E_{17}$	7.705
24	$E_{30} - E_7$	3.178	67	$E_{35} - E_3$	5.124	110	$E_{34} - E_{17}$	6.265	153	$E_{32} - E_{12}$	7.755
25	$E_{28} - E_{27}$	3.182	68	$E_{32} - E_2$	5.144	111	$E_{26} - E_{12}$	6.279	154	$E_{22} - E_6$	7.838
26	$E_{24} - E_7$	3.237	69	$E_{32} - E_{15}$	5.150	112	$E_{23} - E_{17}$	6.285	155	$E_{28} - E_{17}$	8.00
27	$E_{35} - E_2$	3.243	70	$E_{34} - E_{11}$	5.175	113	$E_{30} - E_9$	6.313	156	$E_{33} - E_{17}$	8.076
28	$E_{35} - E_{15}$	3.248	71	$E_{32} - E_4$	5.520	114	$E_{29} - E_8$	6.327	157	$E_{20} - E_{17}$	8.081
29	$E_{35} - E_{10}$	3.323	72	$E_{32} - E_{10}$	5.224	115	$E_{35} - E_{18}$	6.357	158	$E_{25} - E_6$	8.087
30	$E_{25} - E_{31}$	3.420	73	$E_{22} - E_{15}$	5.292	116	$E_{24} - E_9$	6.371	159	$E_{25} - E_{12}$	8.146
31	$E_{24} - E_4$	3.486	74	$E_{22} - E_7$	5.413	117	$E_{34} - E_6$	6.398	160	$E_{33} - E_6$	8.208
32	$E_{33} - E_{31}$	3.541	75	$E_{26} - E_5$	5.464	118	$E_{23} - E_6$	6.418	161	$E_{32} - E_{18}$	8.258
33	$E_{30} - E_{14}$	3.569	76	$E_{30} - E_{17}$	5.471	119	$E_{34} - E_{12}$	6.456	162	$E_{33} - E_{12}$	8.267
34	$E_{35} - E_4$	3.619	77	$E_{24} - E_{17}$	5.529	120	$E_{32} - E_{11}$	6.473	163	$E_{22} - E_{18}$	8.400
35	$E_{24} - E_{14}$	3.628	78	$E_{28} - E_{15}$	5.588	121	$E_{19} - E_5$	6.541	164	$E_{22} - E_9$	8.548
36	$E_{26} - E_{10}$	3.748	79	$E_{21} - E_{16}$	5.597	122	$E_{20} - E_1$	6.578	165	$E_{32} - E_{13}$	8.691
37	$E_{35} - E_{14}$	3.761	80	$E_{23} - E_8$	5.860	123	$E_{19} - E_3$	6.627	166	$E_{28} - E_{18}$	8.696
38	$E_{21} - E_{15}$	3.786	81	$E_{25} - E_{10}$	5.615	124	$E_{29} - E_{17}$	6.752	167	$E_{33} - E_{18}$	8.770
39	$E_{34} - E_2$	3.846	82	$E_{34} - E_5$	5.642	125	$E_{35} - E_{13}$	6.790	168	$E_{20} - E_{18}$	8.776
40	$E_{34} - E_{15}$	3.851	83	$E_{33} - E_2$	5.657	126	$E_{25} - E_{11}$	6.864	169	$E_{28} - E_9$	8.844
41	$E_{23} - E_{15}$	3.872	84	$E_{34} - E_{16}$	5.662	127	$E_{21} - E_{18}$	6.895	170	$E_{33} - E_{13}$	9.203
42	$E_{34} - E_{10}$	3.926	85	$E_{35} - E_{17}$	5.662	128	$E_{32} - E_5$	6.940	171	$E_{25} - E_{13}$	9.082
43	$E_{23} - E_7$	3.993	86	$E_{23} - E_5$	5.662	129	$E_{32} - E_{16}$	6.960			

четыре нижних свободных энергетических состояний в верхней подзоне Хаббарда. В результате заполнения четырех энергетических состояний в верхней подзоне Хаббарда двадцать девять разрешенных переходов из нижней подзоны Хаббарда в верхнюю подзону Хаббарда, имеющих в фуллерепа C_{26} , исчезает, но при этом в эндоэдральном фуллерепа $U@C_{26}$ появляется двадцать четыре новых разрешенных переходов в верхней подзоне Хаббарда, отсутствующие в молекуле C_{26} . Таким образом, в формировании оптического спектра фуллерепа

C_{26} участвуют разрешенные переходы из нижней подзоны Хаббарда в верхнюю подзону Хаббарда, а в формировании оптического спектра эндоэдрального фуллерепа $U@C_{26}$ участвуют, как разрешенные переходы из нижней подзоны Хаббарда в верхнюю подзону Хаббарда, так и разрешенные переходы в пределах верхней подзоны Хаббарда. Как видно из табл. 4 разрешенные переходы у эндоэдрального фуллерепа $U@C_{26}$ в пределах верхней подзоны Хаббарда формируют главным образом оптический спектр в инфракрасной и видимой

областях спектра, а разрешенные переходы из нижней подзоны Хаббарда в верхнюю подзону Хаббарда, как и у фуллерена C_{26} , формируют главным образом оптический спектр в ультрафиолетовой области спектра.

4. Заключение

Исследование фуллерена C_{26} с группой симметрии D_{3h} в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций показало, что в этой молекуле нижняя подзона Хаббарда полностью занята, в то время как верхняя подзона Хаббарда свободна. Исследование эндоэдрального фуллерена $U@C_{26}$, который, как и фуллерена C_{26} обладает группой симметрии D_{3h} , показало, что в этой молекуле нижняя подзона Хаббарда полностью занята, а в верхней подзоне Хаббарда находится четыре электрона. Кроме того, данные исследования показали, что в формировании оптических спектров поглощения молекул C_{26} и $U@C_{26}$ участвуют 176 и 171 разрешенных переходов соответственно. Отметим также, что исследования оптических свойств фуллеренов C_{60} и C_{70} , выполненные в рамках модели Хаббарда в работах [17,18], показали хорошее соответствие между экспериментальными данными и теоретическими результатами. Это позволяет считать, что модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций достаточно хорошо описывает электронные свойства углеродных наносистем.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. *Nature* **318**, 162 (1985).
- [2] K.P. Katin, M.M. Maslov. *Physica E* **96**, 6 (2018).
- [3] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ* **61**, 793 (2019).
- [4] H.S. Wu, J.F. Jia. *Chinese J. Struct. Chem.* **23**, 580 (2004).
- [5] V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov. *J. Phys. Conf. Ser.* **447**, 012018 (2018).
- [6] Ke Xu, Tie Yang, Yu Feng, Xin Ruan, Zhenyan Liu, Guijie Liang, Xiaotian Wang. *Nanomaterials* **9**, 1068 (2019).
- [7] А.Н. Еняшин, В.В. Ивановская, Ю.Н. Макурин, А.Л. Ивановский. *ФТТ* **46**, 1522 (2004).
- [8] K.S. Grishakov, K.P. Katin, M.M. Maslov. *Diamond Rel. Mater.* **84**, 112 (2018).
- [9] R. Guajardo-Maturana, P.L. Rodrigues-Kessler, A. Munoz-Castro. *Int. J. Quantum Chem.* e26437 (2020).
- [10] R.P. Hallett, K.G. McKay, S.P. Balm, A.W. Allaf, H.W. Kroto, A.J. Stace. *Z. Phys. D* **34**, 65 (1995).
- [11] Z.X. Wang, W.M. Wang, F.Y. Zhu, X.P. Li, M.L. Ruan, H. Chen, R.B. Huang, L.S. Zheng. *High Energy Phys. Nucl. Phys.* **25**, 69 (2001).
- [12] R.C. Kent, M.D. Towler, R.J. Needs, G. Rajagopal. *Phys. Rev. B* **62**, 15394 (2000).
- [13] M. Maruyama, S. Okada. *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 043708 (2013).
- [14] B. Hong, Y. Chang, A.F. Jalbout, Z. Su, R. Wang. *Mol. Phys.* **105**, 95 (2007).
- [15] D. Manna, T.K. Ghanty. *J. Phys. Chem. C* **116**, 25630 (2012).
- [16] J. Hubbard. *Proc. Roy. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [17] А.В. Силантьев. *ЖЭТФ* **148**, 749 (2015).
- [18] А.В. Силантьев. *Изв. вуз. Физика.* **60**, 6, 50 (2017).
- [19] А.В. Силантьев. *Изв. вуз. Физика.* **62**, 6, 3 (2019).
- [20] А.В. Силантьев. *ФТТ* **62**, 11, 1960 (2020).
- [21] А.В. Силантьев. *ФТТ* **62**, 3, 473 (2020).
- [22] А.В. Силантьев. *ФТТ* **61**, 2, 395 (2019).
- [23] Г.С. Иванченко, Н.Г. Лебедев. *ФТТ* **49**, 183 (2007).
- [24] С.В. Тябликов. *Методы квантовой теории магнетизма.* Наука, М. (1975).
- [25] И.Г. Каплан. *Симметрия многоэлектронных систем.* Наука, М. (1969).
- [26] А.В. Елецкий. *УФН* **170**, 2, 113 (2000).
- [27] Е.П. Вигнер. *Теория групп и ее приложения к квантовой механической теории спектров.* ИЛ, М. (1961).

Редактор Т.Н. Василевская