

17,09

## Энергетический спектр и спектр оптического поглощения экзоэдрального фуллерена $C_{70}Br_{10}$ в модели Хаббарда

© А.В. Силантьев

Марийский государственный университет,  
Йошкар-Ола, Россия

E-mail: kvvant@rambler.ru

Поступила в Редакцию 8 сентября 2022 г.

В окончательной редакции 12 сентября 2022 г.

Принята к публикации 13 сентября 2022 г.

В рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций получен энергетический спектр экзоэдрального фуллерена  $C_{70}Br_{10}$  с группой симметрии  $C_s$ . С использованием методов теории групп проведена классификация энергетических состояний, а также определены разрешенные переходы в энергетическом спектре молекулы  $C_{70}Br_{10}$ . На основе энергетического спектра молекулы  $C_{70}Br_{10}$  предложена интерпретация наблюдаемых экспериментально полос оптического поглощения экзоэдрального фуллерена  $C_{70}Br_{10}$ .

**Ключевые слова:** модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, фуллерены, наносистемы, фуллерен  $C_{70}$ , экзоэдральный фуллерен  $C_{70}Br_{10}$ .

DOI: 10.21883/FTT.2023.01.53939.470

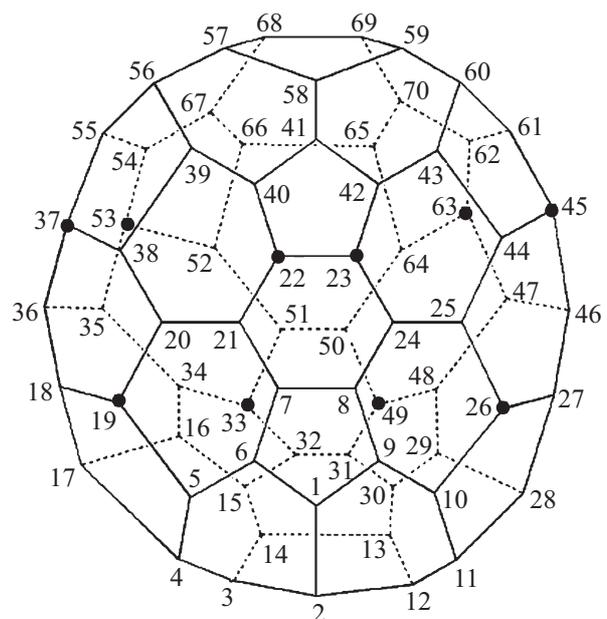
### 1. Введение

В 1985 г. одновременно с фуллереном  $C_{60}$  был открыт фуллерен  $C_{70}$  [1], структура которого исследовалась при помощи ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [2]. На ЯМР-спектре  $^{13}C$  фуллерена  $C_{70}$  было обнаружено пять пиков, в соотношении 10:20:10:20:10. Из данного спектра следовало, что фуллерен  $C_{70}$  содержит пять групп неэквивалентных друг другу атомов углерода, которые находятся в соотношении 10:20:10:20:10. Из полученных результатов был сделан вывод, что молекула фуллерена  $C_{70}$ , изображенная на рис. 1, обладает симметрией  $D_{5h}$ .

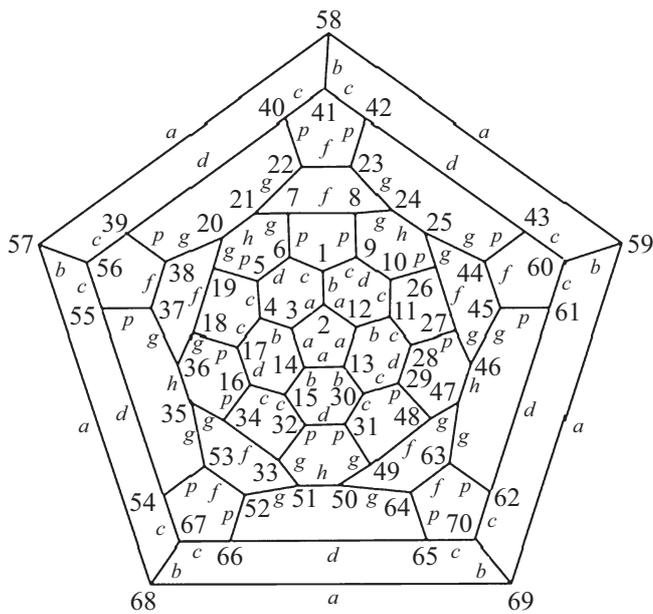
Из диаграммы Шлегеля, которая показана на рис. 2, видно, что фуллерен  $C_{70}$  с группой симметрии  $D_{5h}$  имеет восемь неэквивалентных связей, обозначенных буквами  $a, b, c, d, e, f, g, h$ ; и пять групп неэквивалентных атомов углерода:  $G_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 62, 63, 66, 67, 70\}$ ,  $G_2 = \{6, 9, 12, 15, 18, 61, 64, 65, 68, 69\}$ ,  $G_3 = \{7, 8, 10, 11, 13, 14, 16, 17, 19, 20, 43, 44, 47, 48, 51, 52, 55, 56, 59, 60\}$ ,  $G_4 = \{21, 22, 25, 26, 29, 30, 33, 34, 37, 38, 41, 42, 45, 46, 49, 50, 53, 54, 57, 58\}$ ,  $G_5 = \{23, 24, 27, 28, 31, 32, 35, 36, 39, 40\}$ .

Ко множеству  $G_1$  принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения двух гексагонов и одного пентагона, и, кроме того, каждый из них имеет двух ближайших соседей из этого же множества  $G_1$ . Ко множеству  $G_2$  принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения двух гексагонов и одного пентагона, и каждый из них не имеет ближайших соседей из этого же множества  $G_2$ . Ко множеству  $G_3$  принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения двух гексагонов и одного пентагона, и каждый из них имеет одного ближайшего соседа из этого же

множества  $G_3$ . При этом ребро, которому принадлежат оба атома, является границей между двумя гексагонами. Ко множеству  $G_4$  принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения двух гексагонов и одного пентагона, и каждый из них имеет одного ближайшего соседа из этого же множества  $G_4$ , причем ребро, которому принадлежат оба атома, является границей между гексагоном и пентагоном. Ко множеству  $G_5$  принадлежат атомы, которые находятся в вершинах сочленения трех



**Рис. 1.** Экзофуллерен  $C_{70}Br_{10}$  с группой симметрии  $C_s$  с указанием положения атомов углерода, связей между атомами углерода и пентагонов; также указаны атомы, с которыми связаны атомы брома.



**Рис. 2.** Диаграмма Шлегеля фуллера  $C_{70}$  с указанием положения атомов углерода и связей между атомами углерода.

гексагонов, и каждый из них имеет одного ближайшего соседа из этого же множества  $G_5$ .

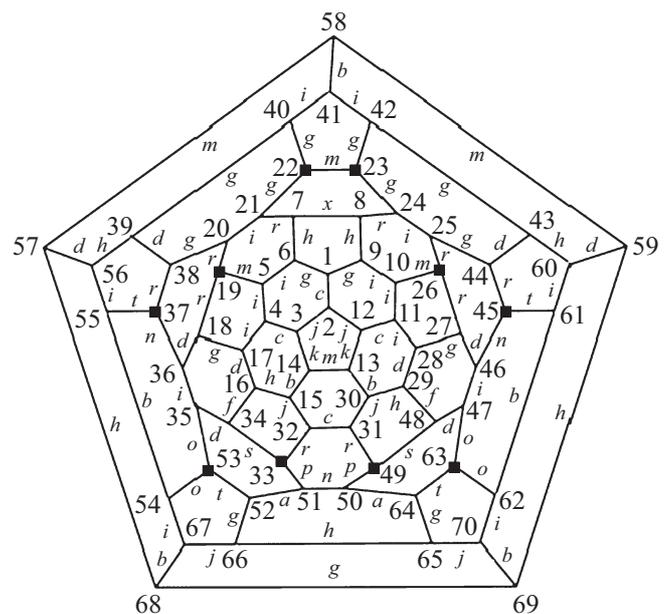
Наряду с изучением физических свойств фуллера  $C_{70}$  проводились также исследования его химических свойств; при этом было получено много различных соединений этого фуллера. Одними из первых химических соединений фуллеренов  $C_{70}$  и  $C_{60}$  были получены их галогениды [3,4]. Исследованию свойств фторидов, хлоридов и бромидов фуллера  $C_{70}$  посвящено довольно много работ [5–7]. Кроме изучения галогенидов фуллеренов  $C_{70}$  и  $C_{60}$ , довольно много работ посвящено изучению также галогенидов других фуллеренов:  $C_{50}$  [8],  $C_{90}$  [9],  $C_{96}$  [10] и др. Повышенный интерес к галогенидам фуллеренов связан с тем, что они обладают целым рядом ценных для практических целей свойств. Например,  $C_{50}Cl_{10}$  является перспективным материалом для нелинейной оптики, так как это соединение обладает довольно высокими статической поляризуемостью и второй гиперполяризуемостью [11]. Отметим также, что галогенированные фуллерены перспективны как полифункциональные присадки к нефтепродуктам, способные одновременно улучшать их антиокислительные и противозносные эксплуатационные характеристики [12]. Кроме того, галогениды фуллеренов являются важными соединениями, которые используются для получения самых разнообразных материалов [13]. Для получения новых материалов на основе галогенидов фуллеренов необходимо знание химических и физических свойств этих соединений.

Следует отметить, что наиболее просто из галогенидов фуллера  $C_{70}$  получают бромиды этого фуллера. Например, бромид  $C_{70}Br_{10}$  получают в два этапа. Вначале при взаимодействии фуллера  $C_{70}$  с жидким

бромом при комнатной температуре образуется моносольватированный бромид  $C_{70}Br_{10} \times Br_2$ . Затем при нагревании  $C_{70}Br_{10} \times Br_2$  до  $70^\circ C$  образуется бромид  $C_{70}Br_{10}$ , выход которого составляет примерно 91% [14].

Проведенные исследования [15] показали, что молекула  $C_{70}Br_{10}$  обладает симметрией  $C_s$ , причем атомы брома связаны с теми атомами углерода, которые, как видно из рис. 1, находятся в экваториальной области фуллера  $C_{70}$ . Из диаграммы Шлегеля для молекулы  $C_{70}Br_{10}$ , изображенной на рис. 3, видно, что атомы брома связаны с атомами углерода, которые принадлежат множеству  $G_4$ , причем в каждом гексагоне, который состоит из четырех атомов принадлежащих множеству  $G_4$  и двух атомов принадлежащих множеству  $G_5$ , содержится по два атома углерода связанных с атомами брома.

Для описания электронных свойств углеродных фуллеренов и нанотрубок [16–26] широко используется модель Хаббарда [27]. В рамках этой модели в приближении статических флуктуаций (ПСФ) были получены энергетические спектры и спектры оптического поглощения фуллера  $C_{20}$  с группами симметрии  $I_h$ ,  $D_{5d}$  и  $D_{3d}$  [16], фуллера  $C_{24}$  с группами симметрии  $O_h$ ,  $D_6$  и  $D_{6d}$  [17], фуллера  $C_{26}$  с группой симметрии  $D_{3h}$  [18], фуллера  $C_{28}$  с группой симметрии  $T_d$  [19], фуллера  $C_{36}$  с группой симметрии  $D_{6h}$  [20], фуллера  $C_{50}$  и экзофуллера  $C_{50}Cl_{10}$  с группой симметрии  $D_{5h}$  [21], фуллера  $C_{60}$  [22], фуллера  $C_{70}$  [23], фуллера  $C_{80}$  с группой симметрии  $I_h$  [24], а в работе [26] были исследованы электронные свойства углеродных нанотрубок. Полученные в работах [21–24] результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными.



**Рис. 3.** Диаграмма Шлегеля экзофуллера  $C_{70}Br_{10}$  с указанием положения атомов углерода, связей между атомами углерода и атомов углерода, с которыми связаны атомы брома.

Целью настоящей работы является исследование энергетического спектра экзоэдрального фуллерена  $C_{70}Br_{10}$  с группой симметрии  $C_s$  в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

## 2. Энергетический спектр экзофуллерена $C_{70}Br_{10}$

Как известно, электронные свойства углеродных наносистем зависят в основном от поведения  $\pi$ -электронов в этих системах. Для описания поведения  $\pi$ -электронов в экзофуллерене  $C_{70}Br_{10}$  воспользуемся моделью Хаббарда [27]:

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

где  $c_{i\sigma}^+, c_{i\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов со спином  $\sigma$  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, находящихся на  $i$ -м узле;  $\bar{\sigma} = -\sigma$ .

Чтобы найти численные значения для интегралов переноса, которые входят в гамильтониан модели Хаббарда (1) и соответствуют молекуле  $C_{70}Br_{10}$ , воспользуемся следующим соотношением [23,24]:

$$t_{ij} = -8.17065 \cdot \exp(-1.69521 \cdot x_{ij}), \quad (2)$$

где  $x_{ij}$  — расстояние между двумя атомами углерода, один из которых находится в узле  $i$ , а другой — в узле  $j$ .

Проведенные рентгеноструктурные исследования показали, что расстояния между атомами углерода у молекулы бромид фуллерена  $C_{70}Br_{10}$  [15] имеют следующие значения:

$$\begin{aligned} x_a &= 1.37(2) \text{ \AA}, & x_b &= 1.38(2) \text{ \AA}, & x_c &= 1.39(2) \text{ \AA}, \\ x_d &= 1.40(2) \text{ \AA}, & x_f &= 1.41(2) \text{ \AA}, & x_g &= 1.42(2) \text{ \AA}, \\ x_h &= 1.43(2) \text{ \AA}, & x_i &= 1.44(2) \text{ \AA}, & x_j &= 1.45(2) \text{ \AA}, \\ x_k &= 1.46(2) \text{ \AA}, & x_m &= 1.48(2) \text{ \AA}, & x_n &= 1.49(2) \text{ \AA}, \\ x_o &= 1.50(2) \text{ \AA}, & x_p &= 1.51(2) \text{ \AA}, & x_r &= 1.41(2) \text{ \AA}, \\ x_s &= 1.53(2) \text{ \AA}, & x_t &= 1.54(2) \text{ \AA}, & x_x &= 1.59(2) \text{ \AA}. \end{aligned} \quad (3)$$

Подставив (3) в соотношение (2), получим численные значения интегралов переноса для молекулы  $C_{70}Br_{10}$

с группой симметрии  $C_s$ :

$$\begin{aligned} t_a &= -0.82863 \text{ eV}, & t_b &= -0.81470 \text{ eV}, \\ t_c &= -0.80101 \text{ eV}, & t_d &= -0.78754 \text{ eV}, \\ t_f &= -0.77430 \text{ eV}, & t_g &= -0.76129 \text{ eV}, \\ t_h &= -0.74849 \text{ eV}, & t_i &= -0.73591 \text{ eV}, \\ t_j &= -0.72354 \text{ eV}, & t_k &= -0.71138 \text{ eV}, \\ t_m &= -0.68766 \text{ eV}, & t_n &= -0.67611 \text{ eV}, \\ t_o &= -0.66474 \text{ eV}, & t_p &= -0.65357 \text{ eV}, \\ t_r &= -0.64258 \text{ eV}, & t_s &= -0.63178 \text{ eV}, \\ t_t &= -0.62116 \text{ eV}, & t_x &= -0.57068 \text{ eV}. \end{aligned} \quad (4)$$

Чтобы найти энергетический спектр молекулы  $C_{70}Br_{10}$ , воспользуемся методом антикоммутирующих функций Грина [28]:

$$\langle\langle c_{f\sigma}^+ | c_{f\sigma} \rangle\rangle = \theta(\tau) \langle [c_{f\sigma}^+(\tau), c_{f\sigma}(0)]_+ \rangle, \quad (5)$$

где  $f = 1, \dots, N$ ;  $N$  — число узлов квантовой системы.

Как известно [28], чтобы найти энергетический спектр квантовой системы, достаточно вычислить полюса Фурье-образов антикоммутирующих функций Грина. Можно показать [22,23], что Фурье-образ антикоммутирующей функции Грина (5) в ПСФ имеет следующий вид:

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

$$E_k = \varepsilon + e_k, \quad E_{k+p/2} = E_k + U, \quad F_{j,m} = q_{m,\sigma} \cdot Q_{j,m},$$

$$Q_{j,k+p/2} = Q_{j,k}, \quad k = 1, \dots, p/2, \quad (6)$$

$$q_{m,\sigma} = \begin{cases} 1 - \frac{n}{2}, & m = 1, \dots, p/2, \\ \frac{n}{2}, & m = \frac{p}{2} + 1, \dots, p, \end{cases}$$

где  $p$  — число энергетических состояний квантовой системы,  $E_m$  — энергия  $m$ -го состояния квантовой системы,  $F_{j,m}$  — спектральная плотность  $m$ -го энергетического состояния.

Важной характеристикой энергетического спектра квантовой системы является степень вырождения его энергетических состояний, которую можно найти, зная спектральную плотность этих состояний, которая содержится в функции Грина (6) [22,23]:

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

где  $g_i$  — степень вырождения  $i$ -го энергетического уровня,  $N$  — число узлов наносистемы.

Чтобы найти антикоммутирующие функции Грина, прежде всего необходимо определить зависимость операторов рождения от времени. Для этого, используя

гамильтониан (1) и диаграмму Шлегеля, изображенную на рис. 3, как и в работах [16–24], запишем для операторов  $c_{1\sigma}^+(\tau), c_{1\sigma}^+(\tau)n_{1\bar{\sigma}}(\tau), \dots, c_{70\sigma}^+(\tau), c_{70\sigma}^+(\tau)n_{70\bar{\sigma}}(\tau)$ , заданных в представлении Гейзенберга, уравнения движения в ПСФ:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon c_{1\sigma}^+ + t_c c_{2\sigma}^+ + t_g (c_{6\sigma}^+ + c_{9\sigma}^+) + U c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}}, \\ \frac{d(c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}})}{d\tau} &= (\varepsilon + U) c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}} + t_c c_{2\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}} + t_g (c_{6\sigma}^+ n_{6\bar{\sigma}} + c_{9\sigma}^+ n_{9\bar{\sigma}}), \\ &\dots \\ \frac{dc_{70\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon c_{70\sigma}^+ + t_j c_{65\sigma}^+ + t_i c_{62\sigma}^+ + t_b c_{69\sigma}^+ + U c_{70\sigma}^+ n_{70\bar{\sigma}}, \\ \frac{d(c_{70\sigma}^+ n_{70\bar{\sigma}})}{d\tau} &= (\varepsilon + U) c_{70\sigma}^+ n_{70\bar{\sigma}} + t_j c_{65\sigma}^+ n_{65\bar{\sigma}} + t_i c_{62\sigma}^+ n_{62\bar{\sigma}} + t_b c_{69\sigma}^+ n_{69\bar{\sigma}}, \end{aligned} \right. \quad (8)$$

где  $\tau = it, t$  — время.

Прежде чем решать систему уравнений (8), необходимо еще задать численные значения параметров  $\varepsilon$  и  $U$ . В работе [22], исходя из экспериментально наблюдаемого оптического спектра поглощения фуллере-на  $C_{60}$ , в рамках модели Хаббарда в ПСФ были найдены численные значения этих параметров:  $\varepsilon = -7.824$  eV,  $U = 5.662$  eV. Отметим, что численное значение параметра  $U = 5.662$  eV согласуется с результатами работы [29], согласно которой  $U \approx 5$  eV.

Теперь, решив систему дифференциальных уравнений (8) с учетом численных значений интегралов переноса (4) и параметров  $\varepsilon = -7.824$  eV и  $U = 5.662$  eV, мы получим выражения для операторов рождения  $c_{1\sigma}^+(\tau), \dots, c_{70\sigma}^+(\tau)$ . Подставив данные решения в (5), мы получим антикоммуторные функции Грина. Затем, получив Фурье-образы от антикоммуторных функций Грина, мы получим выражения, совпадающие по виду с соотношением (6). Из полученных Фурье-образов антикоммуторных функций Грина и соотношений (6) и (7) получим численные значения для  $\bar{e}_k, E_k$  и  $g_k$ , где  $\bar{e}_k$  — значение энергии  $k$ -го уровня относительно  $\varepsilon + U/2$ , которая, как видно из соотношения (6), связана с величиной  $E_k$  следующим образом:

$$E_k = \varepsilon + \frac{U}{2} + \bar{e}_k, \quad (9)$$

где

$$\bar{e}_k = \begin{cases} e_k - \frac{U}{2}, & k = 1, \dots, p/2, \\ e_k + \frac{U}{2}, & k = \frac{p}{2} + 1, \dots, p. \end{cases} \quad (10)$$

Из соотношений (9) и (10) следует, что энергетические состояния экзофуллере-на  $C_{70}Br_{10}$  образуют две подзоны Хаббарда, причем нижнюю подзону Хаббарда образуют энергетические состояния, которые сосредоточены вблизи энергии  $\varepsilon$ , а верхнюю подзону Хаббарда

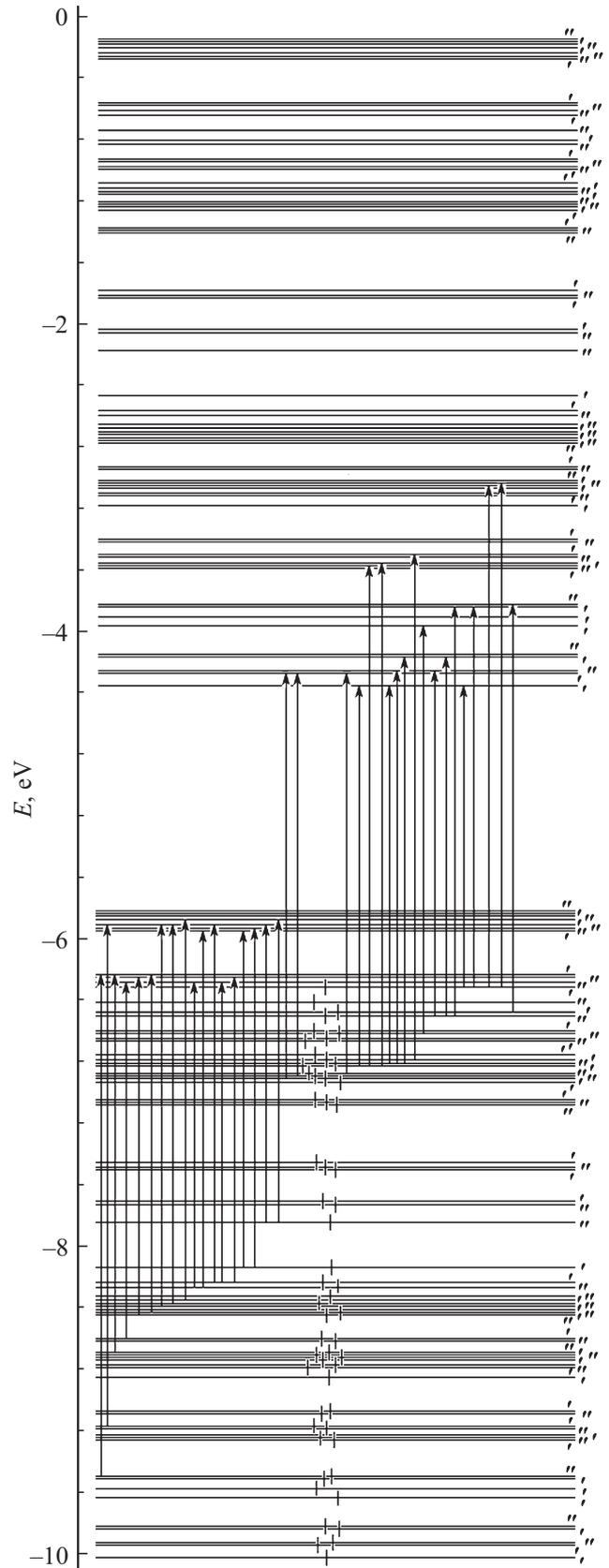


Рис. 4. Энергетический спектр молекулы  $C_{70}Br_{10}$ .

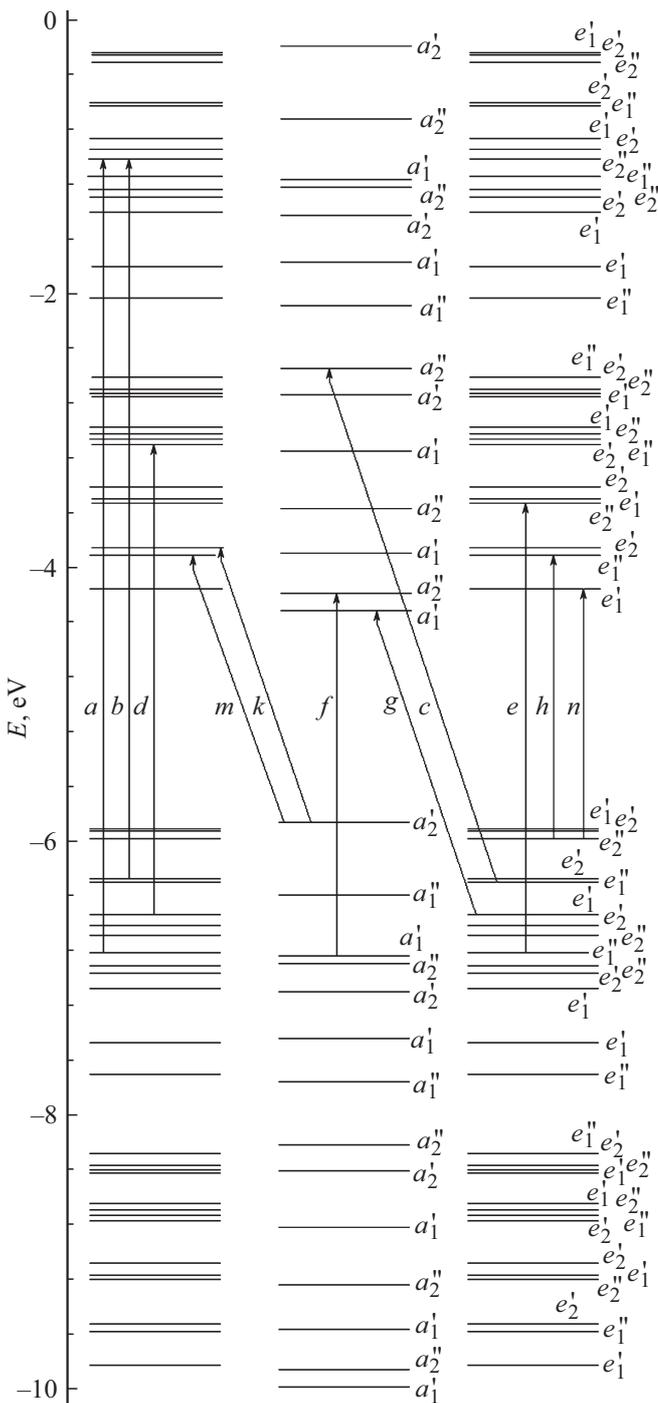


Рис. 5. Энергетический спектр фуллерена  $C_{70}$  [23].

образуют энергетические состояния, которые сосредоточены вблизи энергии  $\epsilon + U$ . Энергетические состояния, образующие энергетический спектр молекулы  $C_{70}Br_{10}$  с группой симметрии  $C_s$ , можно классифицировать по неприводимым представлениям группы  $C_s$ . Энергетический спектр молекулы  $C_{70}Br_{10}$  изображен на рис. 4, где значок ' соответствует неприводимому представлению  $a'$ , а значок '' соответствует неприводимому

представлению  $a''$ . Из рис. 4 видно, что степень вырождения всех энергетических состояний молекулы  $C_{70}Br_{10}$  равна единице. Это связано с тем, что все неприводимые представления группы  $C_s$  являются одномерными:  $a'$  и  $a''$  [30]. В работе [23] был получен энергетический спектр фуллерена  $C_{70}$  с группой симметрии  $D_{5h}$ , см. рис. 5. Энергетические состояния фуллерена  $C_{70}$  на рис. 5 классифицированы в соответствии с одномерными  $a'_1, a'_2, a''_1, a''_2$  и двумерными  $e'_1, e'_2, e''_1, e''_2$  неприводимыми представлениями группы  $D_{5h}$ . На рис. 5 для удобства изображения переходов, формирующих спектр оптического поглощения фуллерена  $C_{70}$ , двукратно вырожденным состояниям соответствуют энергетические уровни первого и третьего столбца, а невырожденным состояниям соответствуют энергетические уровни второго столбца.

Сравнивая энергетические спектры бромида фуллерена  $C_{70}Br_{10}$  с группой симметрии  $C_s$  и фуллерена  $C_{70}$  с группой симметрии  $D_{5h}$ , см. рис. 4 и 5, мы видим, что понижение симметрии, вызванное присоединением атомов брома к фуллерену  $C_{70}$ , привело к расщеплению дважды вырожденных энергетических состояний. Из рис. 4 также видно, что у экзоэдрального фуллерена  $C_{70}Br_{10}$  десять энергетических состояний в нижней подзоне Хаббарда свободны. Это связано с тем, что при образовании молекулы  $C_{70}Br_{10}$  десять валентных электронов фуллерена  $C_{70}$  пошли на образование прочных химических связей с атомами брома.

Оптический спектр поглощения является важной физической характеристикой любой молекулы. Используя полученный выше энергетический спектр экзоэдрального фуллерена  $C_{70}Br_{10}$  с группой симметрии  $C_s$ , можно найти переходы, которые формируют оптический спектр этой молекулы. С помощью теории групп [30] можно показать, что у молекулы с группой симметрии  $C_s$  в энергетическом спектре разрешены все переходы.

В работе [31] были проведены экспериментальные исследования, посвященные изучению спектра опти-

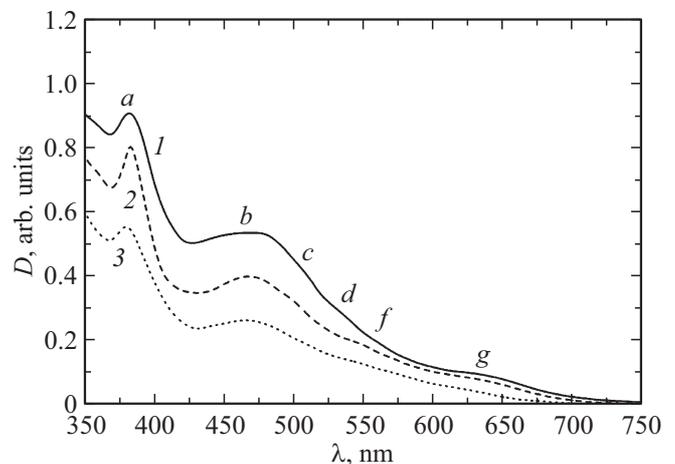


Рис. 6. Спектр поглощения  $C_{70}Br_{10}$  в бензоле (кривая 1), в 1,2-дихлорбензоле (2), в 1,2-диметилбензоле (3) [31].

**Таблица 1.** Экспериментальные и теоретические значения длин волн  $\lambda$  и энергий  $E$ , соответствующие полосам поглощения в оптическом спектре молекулы  $C_{70}Br_{10}$

Полосы поглощения	$\lambda$ , nm [31]	$E$ , eV [31]	Теор. $E$ , eV
<i>a</i>	380	3.269	3.268
<i>b</i>	470	2.643	2.643
<i>c</i>	505	2.460	2.465
<i>d</i>	535	2.322	2.326
<i>f</i>	565	2.199	2.195
<i>g</i>	635	1.956	1.958

**Таблица 2.** Переходы, формирующие полосы поглощения *a*, *b*, *c*, *d*, *f*, *g*

$\Delta E$	$\Delta E$ , eV	$\Delta E$	$\Delta E$ , eV	$\Delta E$	$\Delta E$ , eV
<b>a</b>		$E_{78}-E_{57}$	2.6499	$E_{64}-E_{33}$	2.3339
$E_{81}-E_{49}$	3.2650	$E_{72}-E_{46}$	2.6506	<b>f</b>	
$E_{82}-E_{49}$	3.2652	<b>c</b>		$E_{62}-E_{26}$	2.1935
$E_{63}-E_9$	3.2655	$E_{71}-E_{50}$	2.4540	$E_{63}-E_{27}$	2.1953
$E_{66}-E_{14}$	3.2677	$E_{66}-E_{30}$	2.4652	$E_{64}-E_{35}$	2.2054
$E_{92}-E_{60}$	3.2717	$E_{66}-E_{29}$	2.4662	$E_{65}-E_{35}$	2.2058
$E_{93}-E_{60}$	3.2730	$E_{78}-E_{60}$	2.4664	<b>g</b>	
$E_{84}-E_{51}$	3.2745	$E_{63}-E_{23}$	2.4710	$E_{66}-E_{36}$	1.9328
<b>b</b>		$E_{67}-E_{31}$	2.4719	$E_{61}-E_{34}$	1.9519
$E_{76}-E_{55}$	2.6311	$E_{71}-E_{49}$	2.4721	$E_{71}-E_{60}$	1.9579
$E_{79}-E_{58}$	2.6383	<b>d</b>		$E_{67}-E_{36}$	1.9628
$E_{73}-E_{50}$	2.6383	$E_{61}-E_{25}$	2.3164	$E_{61}-E_{33}$	1.9817
$E_{72}-E_{48}$	2.6403	$E_{73}-E_{57}$	2.3256	$E_{62}-E_{34}$	1.9839
$E_{74}-E_{50}$	2.6427	$E_{66}-E_{34}$	2.3291		
$E_{72}-E_{47}$	2.6469	$E_{74}-E_{57}$	2.3301		

ческого поглощения бромида  $C_{70}Br_{10}$  в бензоле, в 1,2-дихлорбензоле и в 1,2-диметилбензоле. Проведенные исследования показали, что в оптическом спектре поглощения бромида  $C_{70}Br_{10}$  можно выделить, как это видно из рис. 6, шесть полос поглощения: *a*, *b*, *c*, *d*, *f*, *g*, представленных в табл. 1. Зная энергетический спектр молекулы  $C_{70}Br_{10}$ , можно дать следующую интерпретацию ее экспериментально наблюдаемого спектра оптического поглощения. Полосы спектра оптического поглощения, которые соответствуют экспериментально наблюдаемым энергиям  $E_a$ ,  $E_b$ ,  $E_c$ ,  $E_d$ ,  $E_f$ ,  $E_g$ , представленным в табл. 1, можно интерпретировать как полосы, формирующиеся переходами, представленными в табл. 2. Как видно из табл. 2, энергии этих переходов близки к экспериментальным значениям [31].

### 3. Заключение

Таким образом, спектр оптического поглощения экзоэдрального фуллерена  $C_{70}Br_{10}$ , который наблюдается экспериментально, достаточно хорошо согласуется со спектром оптического поглощения этой молекулы, по-

лученным из энергетического спектра молекулы  $C_{70}Br_{10}$  в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

Отметим также, что в работах [21–24] были исследованы энергетические спектры фуллеренов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ , эндоэдральных фуллеренов  $Lu_3N@C_{80}$  и  $Y_3N@C_{80}$  и экзоэдрального фуллерена  $C_{50}Cl_{10}$ , выполненные также в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Данные исследования показали, что спектры оптического поглощения этих молекул, которые наблюдались экспериментально, также достаточно хорошо согласуются со спектрами оптического поглощения молекул  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $Y_3N@C_{80}$ ,  $Y_3N@C_{80}$  и  $C_{50}Cl_{10}$ , полученными в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. 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**, 6042, 162 (1985).
- [2] R. Tycko, R.C. Haddon, G. Dabbagh, S.H. Glarum, D.C. Douglass, A.M. Muzsice. *J. Phys. Chem.* **95**, 2, 518 (1991).
- [3] P.R. Birkett, P.B. Hitchcock, H.W. Kroto, R. Taylor, D.R.M. Walton. *Nature* **357**, 6378, 479 (1992).
- [4] A.A. Tuinman, P. Mukherjee, J.L. Adcock, R.L. Hettich, R.N. Compton. *J. Phys. Chem.* **96**, 19, 7584 (1992).
- [5] R. Taylor, A.K. Abdul-Sada, O.V. Boltalina, J.M. Street. *J. Chem. Soc.* **2**, 1013 (2000).
- [6] N.B. Tamm, V.A. Brotsman, V.Yu. Markov, S.I. Troyanov. *Inorg. Chem.* **59**, 15, 10400 (2020).
- [7] A.V. Burtsev, E. Kemnitz, S.I. Troyanov. *Crystallography Rep.* **53**, 4, 639 (2008).
- [8] S.Y. Xie, F. Guo, R.B. Huang, C.R. Wang, X. Zhang, M.L. Liu, S.L. Deng, S.L. Zheng. *Science* **304**, 5671, 699 (2004).
- [9] E. Kemnitz, S.I. Troyanov. *Angew. Chem. Int. Ed.* **48**, 14, 2584 (2009).
- [10] N.B. Tamm, R. Guan, S. Yang, S.I. Troyanov. *Eur. J. Inorg. Chem.* **42**, 21, 2092 (2020).
- [11] Y. Yang, F.H. Wang, Y.S. Zhou, L.F. Yuan, J. Yang. *Phys. Rev.* **71**, 1, 013202 (2005).
- [12] Е.В. Полункин, Т.М. Каменева, В.С. Пилявский, Р.С. Жила, О.А. Гайдай, П.А. Трошин. *Катализ и нефтехимия* **20**, 70 (2012).
- [13] P.A. Troshin, A.S. Astakhova, R.N. Lyubovskaya. *Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures* **13**, 4, 331 (2005).
- [14] К.Н. Семенов, Н.А. Чарыков, В.А. Кескинов, Д.Г. Летенко, В.А. Никитин, Е.Г. Грузинская. *Журнал общей химии* **83**, 4, 582 (2013).
- [15] S.I. Troyanov, A.A. Popov, N.I. Denisenko, O.V. Boltalina, L.N. Sidorov, E. Kemnitz. *Angew. Chem. Int. Ed.* **42**, 21, 2395 (2003).
- [16] А.В. Силантьев. *ФТТ* **61**, 2, 395 (2019).

- [17] А.В. Силантьев. ФТТ **62**, 3, 473 (2020).
- [18] А.В. Силантьев. ФТТ **63**, 11, 1951 (2021).
- [19] А.В. Силантьев. ФТТ **62**, 11, 1960 (2020).
- [20] А.В. Силантьев. Изв. вузов. Физика **62**, 6, 3 (2019).
- [21] А.В. Силантьев. ФТТ **64**, 6, 750 (2022).
- [22] А.В. Силантьев. ЖЭТФ **148**, 4, 749 (2015).
- [23] А.В. Силантьев. Изв. вузов. Физика **60**, 6, 50 (2017).
- [24] А.В. Силантьев. ФТТ **64**, 2, 279 (2022).
- [25] А.В. Силантьев, Изв. вузов. Физика **56**, 2, 70 (2013).
- [26] Г.С. Иванченко, Н.Г. Лебедев. ФТТ **49**, 1, 183 (2007).
- [27] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. London A **276**, 1365, 238 (1963).
- [28] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975). 527 с.
- [29] R.A. Harris, L.M. Falicov. J. Chem. Phys. **51**, 11, 5034 (1969).
- [30] Р. Хохштрассер. Молекулярные аспекты симметрии. Мир, М. (1968). 384 с.
- [31] K.N. Semenov, N.A. Charykov, A.S. Kritchenkov. J. Chem. Eng. Data **58**, 3, 570 (2013).

Редактор *Е.В. Толстякова*