

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.22

DOI: 10.17223/00213411/62/6/3

А.В. СИЛАНТЬЕВ

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И СПЕКТР ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ
ФУЛЛЕРЕНА C_{36} В МОДЕЛИ ХАББАРДА

В рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций получены в аналитическом виде антикоммутаторные функции Грина и энергетические спектры фуллерена C_{36} и эндоэдрального фуллерена $La@C_{36}$ с группами симметрии D_{6h} . С использованием методов теории групп проведена классификация энергетических состояний, а также определены разрешенные переходы в энергетических спектрах молекул C_{36} и $La@C_{36}$.

Ключевые слова: сильно коррелированная система, модель Хаббарда, функция Грина, фуллерен, энергетический спектр.

Введение

После открытия в 1985 г. фуллерена C_{60} [1] начался интенсивный поиск углеродных фуллеренов C_n как с $n > 60$, так и с $n < 60$. Исследования углеродных фуллеренов C_n с $n \geq 60$ показали, что они обладают изомерами, структура которых содержит изолированные пентагоны. Согласно эмпирическому правилу, которое получило название «Правило изолированных пентагонов» [2], фуллерены, содержащие изолированные пентагоны, являются наиболее стабильными.

Особенностью малых фуллеренов ($n < 60$) является то, что они не имеют изомеров с изолированными пентагонами. Одним из малых фуллеренов является фуллерен C_{36} , обнаруженный в 1998 г. [3]. Проведенные в работе [3] исследования показали, что этот фуллерен обладает группой симметрии D_{6h} . Еще раньше (в 1994 г.) был обнаружен эндоэдральный фуллерен $La@C_{36}$ [4]. В работе [5] было показано, что в молекуле $La@C_{36}$ фуллерен C_{36} также обладает группой симметрии D_{6h} . Исследованию физических и химических свойств фуллерена C_{36} посвящено довольно много работ [6, 7].

Фуллерен C_{36} с группой симметрии D_{6h} состоит из 12 пентагонов и 8 гексагонов (рис. 1). Отметим, что из 36 атомов углерода можно построить 17 изомеров фуллерена C_{36} [8]. Из диаграммы Шлегеля, изображенной на рис. 1, видно, что у фуллерена C_{36} с группой симметрии D_{6h} имеется четыре неэквивалентные связи и три группы неэквивалентных атомов углерода: $G_1 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 31, 32, 33, 34, 35, 36\}$, $G_2 = \{7, 9, 11, 13, 15, 17, 20, 22, 24, 26, 28, 30\}$, $G_3 = \{8, 10, 12, 14, 16, 18, 19, 21, 23, 25, 27, 29\}$.

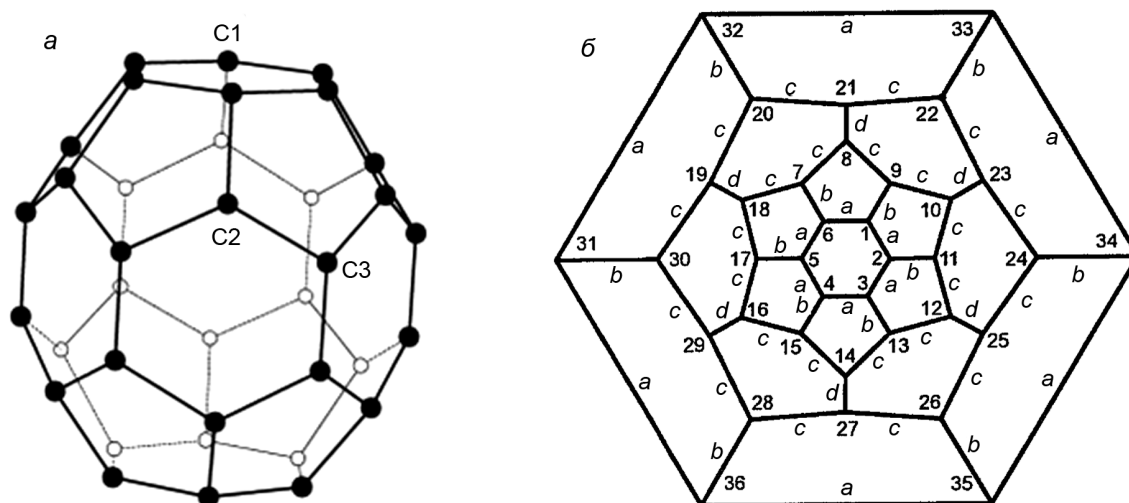


Рис. 1. Фуллерен C_{36} с группой симметрии D_{6h} (а) и его диаграмма Шлегеля с указанием положения атомов углерода и связей между атомами углерода (б)

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>