УДК 538.22

А. В. Силантьев
A. V. Silant'ev
Марийский государственный университет, г. Йошкар-Ола
Mari State University, Yoshkar-Ola

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР В МОДЕЛИ ХАББАРДА

INVESTIGATION OF NANOSTRUCTURES IN HUBBARD MODEL

В рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций вычислены антикоммутаторные функции Грина для фуллерена C_{20}, фуллерена C_{24} и фуллерена C_{60}, а также некоторые физические характеристики фуллерена C_{60}.

Anticommutator Green functions of fullerene C20, fullerene C24, fullerene C60 and certain physical characteristics of fullerene C60 within Hubbard model are calculated by the approximation of statical fluctuations.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, наносистемы, фуллерены, фуллерен C_{20}, фуллерен C_{24}, фуллерен C_{60}.

Key words: Hubbard model, Green functions, nanosystems, fullerenes, fullerene C20, fullerene C24, fullerene C60.

В настоящее время большое число теоретических исследований посвящено изучению наноструктур [2; 7]. Наряду с такими моделями, как модель Хюккеля, для описания свойств наноструктур также используется модель Хаббарда, которая широко используется для теоретического описания сильно коррелируемых электронных систем [6].

Целью данной работы является исследование наноструктур в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций, которое было предложено в работе [3] при исследовании модели Гейзенберга, а в работах [1; 4] распространена модель Хаббарда, которая описывается гамильтонианом следующего вида:

$$H=\sum_{\sigma_1,i}\varepsilon_i n_{i\sigma_1}+\sum_{\sigma_1,i\neq j}t_{ij}c^+_{i\sigma_1}c_{j\sigma_1}+\frac{1}{2}\sum_{\sigma_1,i}U_i n_{i\sigma_1}n_{i\bar\sigma_1}\ , \qquad (1)$$

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 — собственная энергия электрона 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; $\bar\sigma=-\sigma$.

В данной работе для фуллеренов C_{20}, C_{24} и C_{60} в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций вычислим антикоммутаторные функции Грина, а также некоторые физические характеристики фуллерена C_{60}. В начале рассмотрим как для произвольной наноструктуры в приближении статических флуктуаций вычислить антикоммутаторную функцию Грина.

Запишем уравнение движения для оператора $c^+_{f\sigma}(\tau)$, заданного в представлении Гейзенберга:

$$\frac{dc^+_{f\sigma}}{d\tau}=\varepsilon_f c^+_{f\sigma}+\sum_i t_{if}c^+_{i\sigma}+U_f c^+_{f\sigma}n_{f\bar\sigma}\ , \qquad (2)$$

где $\tau=it$.

Решение уравнения (2) будем искать, используя метод статических флуктуаций [4]. Следуя этому методу, оператор числа электронов $n_{f\bar\sigma}$ на узле f со спином $\bar\sigma$ запишем в виде

$$n_{f\bar\sigma}=\langle n_{f\bar\sigma}\rangle+\Delta n_{f\bar\sigma}\ , \qquad (3)$$

где $\langle n_{f\bar\sigma}\rangle$ — среднее число электронов на узле f со спином $\bar\sigma$; $\Delta n_{f\bar\sigma}$ — оператор флуктуации числа электронов на узле f со спином $\bar\sigma$, при чем предполагается, что оператор $\Delta n_{f\bar\sigma}$ не зависит от времени.

После подстановки (3) в (2) уравнение движения для оператора $c^+_{f\sigma}(\tau)$ примет вид

$$\frac{dc^+_{f\sigma}}{d\tau}=\varepsilon'_{f\sigma}c^+_{f\sigma}+\sum_i t_{if}c^+_{i\sigma}+U_f c^+_{f\sigma}\Delta n_{f\bar\sigma}\ , \qquad (4)$$

где $\varepsilon'_{f\sigma}=\varepsilon_f+U_f\langle n_{f\bar\sigma}\rangle$.

Умножим (4) на оператор $\Delta n_{f\bar\sigma}$ и учтем, что $(\Delta n_{f\bar\sigma})^2=\alpha_{f\bar\sigma}\Delta n_{f\bar\sigma}+\beta^2_{f\bar\sigma}$, где $\alpha_{f\bar\sigma}=1-2\langle n_{f\bar\sigma}\rangle$, $\beta^2_{f\bar\sigma}=\langle n_{f\bar\sigma}\rangle\left[1-\langle n_{f\bar\sigma}\rangle\right]$. В результате получим

$$\frac{d\left(c^+_{f\sigma}\Delta n_{f\bar\sigma}\right)}{d\tau}=\left(\varepsilon'_{f\sigma}+U_f\alpha_{f\bar\sigma}\right)c^+_{f\sigma}\Delta n_{f\bar\sigma}+ +\sum_i t_{if}c^+_{i\sigma}\Delta n_{f\bar\sigma}+U_f\beta^2_{f\bar\sigma}c^+_{f\sigma}\ . \qquad (5)$$

Аналогичным образом можно получить уравнения движения и для операторов $c^+_{i\sigma}\Delta n_{f\bar\sigma}$, $c^+_{i\sigma}\Delta n_{f\bar\sigma}\Delta n_{g\bar\sigma}$, … В результате можно получить замкнутую систему равнений, решив которую можно вычислить антикоммутаторные функции Грина для каждого узла наноструктуры:

$$\left\langle\left\langle c^+_{j\sigma}\mid c_{j\sigma}\right\rangle\right\rangle=\frac{i}{2\pi}\sum_m\frac{F_{j,m}}{E-E_m+ih}\ . \qquad (6)$$

Наиболее простым вариантом метода статических флуктуаций является случай, когда оператор флуктуации числа электронов не зависит от номера узла $\Delta n_{f\bar\sigma} = \Delta n_{\bar\sigma}$. В этом случае для того, чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, достаточно записать уравнения (4) и (5) для всех узлов наноструктуры:

$$\begin{cases} \dfrac{dc^{+}_{f\sigma}}{d\tau} = \varepsilon'_{f\sigma} c^{+}_{f\sigma} + \sum_i t_{if} c^{+}_{i\sigma} + U_f c^{+}_{f\sigma}\Delta n_{\bar\sigma}, \\ \dfrac{d\left(c^{+}_{f\sigma}\Delta n_{\bar\sigma}\right)}{d\tau} = \left(\varepsilon'_{f\sigma} + U_f \alpha_{f\bar\sigma}\right) c^{+}_{f\sigma}\Delta n_{\bar\sigma} + \\ \qquad + \sum_i t_{if} c^{+}_{i\sigma}\Delta n_{\bar\sigma} + U_f \beta^2_{f\bar\sigma} c^{+}_{f\sigma}, \end{cases} \tag{7}$$

где $f = 1, \ldots, N$; N — число узлов наноструктуры.

Решив систему уравнений (7), можно получить функции Грина, которые имеют следующий вид:

$$\begin{gathered} \left\langle\left\langle c^{+}_{j\sigma} \middle| c_{j\sigma} \right\rangle\right\rangle = \frac{i}{2\pi}\cdot\sum_{m=1}^{p}\frac{F_{j,m}}{E - E_m + ih}, \\ E_k = \varepsilon + e_k,\ E_{k+p/2} = E_k + U,\ F_{j,m} = q_m\cdot Q_{j,m}, \\ Q_{j,k+p/2} = Q_{j,k},\ k = 1\ldots p/2, \\ q_m = \begin{cases} 1 - n/2,\ m = 1\ldots p/2; \\ n/2,\quad m = p/2+1\ldots p, \end{cases} \end{gathered} \tag{8}$$

где p — число энергетических состояний системы.

Зная функцию Грина, можно найти энергетический спектр наноструктуры, спектральную плотность энергетических состояний $F_{j,m}$, а также можно определить целый ряд физических величин, характеризующих физические и химические свойства наноструктуры, например, абсолютную электроотрицательность по Малликену χ_M, химический потенциал μ, энергию ионизации E_I, энергию сродства E_A, вероятность $w_{j,i}$ нахождения электрона с энергией E_i на узле j:

$$\begin{gathered} \chi_M = -\frac{1}{2}\left(E_{LUMO} + E_{HOMO}\right),\ \mu = -\chi_M, \\ E_I = -E_{HOMO} + U_1,\ E_A = -E_{LUMO} - U_1,\ w_{j,i} = \frac{Q_{j,i}}{g_i}, \end{gathered} \tag{9}$$

где g_i — степень вырождения i-го энергетического уровня, E_{LUMO} — энергия самой нижней незанятой молекулярной орбитали, а E_{HOMO} — энергия самой верхней занятой молекулярной орбитали, U_1 — энергия, на которую смещаются E_{HOMO} и E_{LUMO} при удалении и добавлении одного электрона соответственно.

Рассмотрим для примера фуллерен C_{20} и вычислим для него антикоммутаторную функцию Грина. Для этого прежде всего запишем систему уравнений (7) для всех узлов фуллерена C_{20}:

$$\begin{cases} \dfrac{dc^{+}_{1\sigma}}{d\tau} = \varepsilon'_{\sigma} c^{+}_{1\sigma} + t\cdot\left(c^{+}_{2\sigma} + c^{+}_{5\sigma} + c^{+}_{8\sigma}\right) + Uc^{+}_{1\sigma}\Delta n_{\bar\sigma}, \\ \dfrac{d\left(c^{+}_{1\sigma}\Delta n_{\bar\sigma}\right)}{d\tau} = \left(\varepsilon'_{\sigma} + U\alpha_{\bar\sigma}\right) c^{+}_{1\sigma}\Delta n_{\bar\sigma} + \\ \qquad + t\cdot\left(c^{+}_{2\sigma}\Delta n_{\bar\sigma} + c^{+}_{5\sigma}\Delta n_{\bar\sigma} + c^{+}_{8\sigma}\Delta n_{\bar\sigma}\right) + U\beta^2_{\bar\sigma} c^{+}_{1\sigma}, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \dfrac{dc^{+}_{20\sigma}}{d\tau} = \varepsilon'_{\sigma} c^{+}_{20\sigma} + t\cdot\left(c^{+}_{13\sigma} + c^{+}_{16\sigma} + c^{+}_{19\sigma}\right) + Uc^{+}_{20\sigma}\Delta n_{\bar\sigma}, \\ \dfrac{d\left(c^{+}_{20\sigma}\Delta n_{\bar\sigma}\right)}{d\tau} = \left(\varepsilon'_{\sigma} + U\alpha_{\bar\sigma}\right) c^{+}_{20\sigma}\Delta n_{\bar\sigma} + \\ \qquad + t\cdot\left(c^{+}_{13\sigma}\Delta n_{\bar\sigma} + c^{+}_{16\sigma}\Delta n_{\bar\sigma} + c^{+}_{19\sigma}\Delta n_{\bar\sigma}\right) + U\beta^2_{\bar\sigma} c^{+}_{20\sigma}, \end{cases} \tag{10}$$

где t — интеграл переноса, описывающий перескоки электрона с атома, расположенного на одном узле, на атом, расположенный на соседнем узле.

Система уравнений (10) является замкнутой и имеет точное аналитическое решение. Поскольку решение является громоздким, то мы его здесь не приводим. Зная решение системы уравнений (10), мы можем найти фурье-образ антикоммутаторных функций Грина:

$$\begin{gathered} \left\langle\left\langle c^{+}_{j\sigma} \middle| c_{j\sigma} \right\rangle\right\rangle = \frac{i}{2\pi}\cdot\sum_{m=1}^{12}\frac{F_{j,m}}{E - E_m + ih}, \\ E_k = \varepsilon + e_k,\ E_{k+6} = E_k + U,\ F_{j,m} = q_m\cdot Q_{j,m}, \\ Q_{j,k+6} = Q_{j,k},\ k = 1\ldots 6, \\ q_m = \begin{cases} 1 - n/2,\ m = 1\ldots 6, \\ n/2,\ m = 7\ldots 12, \end{cases} \end{gathered} \tag{11}$$

где

$$\begin{gathered} Q_{j,1} = \frac{1}{20},\ Q_{j,2} = Q_{j,6} = \frac{3}{20},\ Q_{j,3} = \frac{1}{4},\ Q_{j,4} = Q_{j,5} = \frac{1}{5}, \\ j = 1\ldots 20, \end{gathered} \tag{12}$$

$$e_1 = -3b,\ e_2 = -\sqrt{5}b,\ e_3 = -b,\ e_4 = 0,\ e_5 = 2b,\ e_6 = \sqrt{5}b.$$

Приведем еще результаты вычислений функций Грина для фуллерена C_{24} и фуллерена C_{60}. Фурье-образ антикоммутаторной функции Грина для фуллерена C_{24} имеет следующий вид

$$\begin{gathered} \left\langle\left\langle c^{+}_{j\sigma} \middle| c_{j\sigma} \right\rangle\right\rangle = \frac{i}{2\pi}\cdot\sum_{m=1}^{20}\frac{F_{j,m}}{E - E_m + ih}, \\ E_k = \varepsilon + e_k,\ E_{k+10} = E_k + U,\ F_{j,m} = q_m\cdot Q_{j,m}, \\ Q_{j,k+10} = Q_{j,k},\ k = 1\ldots 10, \\ q_m = \begin{cases} 1 - n/2,\ m = 1\ldots 10; \\ n/2,\quad m = 11\ldots 20, \end{cases} \end{gathered} \tag{13}$$

где

$$\begin{gathered} e_1 = -b - 2b_1,\ e_2 = -\sqrt{b^2 + b_1^2} - b_1,\ e_3 = -\sqrt{b^2 - 2bb_1 + 4b_1^2}, \\ e_4 = -b,\ e_5 = b_1 - \sqrt{b^2 + b_1^2},\ e_6 = \sqrt{b^2 + b_1^2} - b_1,\ e_7 = b, \\ e_8 = \sqrt{b^2 - 2bb_1 + 4b_1^2},\ e_9 = b_1 + \sqrt{b^2 + b_1^2},\ e_{10} = b + 2b_1, \\ Q_{j,1} = Q_{j,10} = 1/24, \\ Q_{j,2} = Q_{j,4} = Q_{j,5} = Q_{j,6} = Q_{j,7} = Q_{j,9} = 1/8, \\ Q_{j,3} = Q_{j,8} = 1/12, \end{gathered} \tag{14}$$

где $b=-t$, $b_1=-t_1$, t — интеграл переноса между атомами углерода на границе гексагон-гексагон, а t_1 — интеграл переноса между атомами углерода на границе гексагон-квадрат. Из (14) следует, что $e_3=e_4$, $e_7=e_8$ при $b_1=b/2$. Это приводит к вырождению соответствующих энергетических уровней.

Фурье-образ антикоммутаторной функции Грина для фуллерена C_{60} имеет следующий вид

$$\left\langle\left\langle c^{+}_{j\sigma}\,\middle|\,c_{j\sigma}\right\rangle\right\rangle=\frac{i}{2\pi}\cdot\sum_{m=1}^{32}\frac{F_{j,m}}{E-E_m+ih},$$

$$E_k=\varepsilon+e_k,\; E_{k+16}=E_k+U,\; F_{j,m}=q_m\cdot Q_{j,m},\tag{15}$$

$$Q_{j,k+16}=Q_{j,k},\; k=1...16,\; q_m=\begin{cases}1-n/2, & m=1...16;\\ n/2, & m=17...32,\end{cases}$$

где $e_1=-2b-b_1$,

$$e_2=-\frac{3b+b\sqrt5+\sqrt{30b^2-8bb_1+16(b_1)^2+8bb_1\sqrt5-10b^2\sqrt5}}{4},$$

$$e_3=\frac{-b-b_1+2\left[10b^2-4bb_1+4(b_1)^2\right]^{1/2}\cos\left((\varphi+2\pi)/3\right)}{3},$$

$$e_4=\frac{-3b+b\sqrt5-\sqrt{30b^2-8bb_1+16(b_1)^2-8bb_1\sqrt5+10b^2\sqrt5}}{4},$$

$$e_5=\frac{b-\sqrt{b^2+4(b+b_1)^2}}{2},\quad e_6=\frac{b-\sqrt{5b^2+4(b_1)^2}}{2},$$

$$e_7=\frac{b-\sqrt{5b^2+4(b_1)^2-4bb_1}}{2},$$

$$e_8=\frac{-3b-b\sqrt5+\sqrt{30b^2-8bb_1+16(b_1)^2+8bb_1\sqrt5-10b^2\sqrt5}}{4},$$

$$e_9=\left(b\left(1-\sqrt5\right)+2b_1\right)/2,$$

$$e_{10}=\frac{-b-b_1+2\left[10b^2-4bb_1+4(b_1)^2\right]^{1/2}\cos(\varphi/3)}{3},$$

$$e_{11}=\frac{-3b+b\sqrt5+\sqrt{30b^2-8bb_1+16(b_1)^2-8bb_1\sqrt5+10b^2\sqrt5}}{4},$$

$$e_{12}=\frac{b+\sqrt{5b^2+4(b_1)^2-4bb_1}}{2},\quad e_{13}=\frac{b+\sqrt{5b^2+4(b_1)^2}}{2},$$

$$e_{14}=\frac{b+\sqrt{b^2+4(b+b_1)^2}}{2},\quad e_{15}=\frac{b\left(1+\sqrt5\right)+2b_1}{2},$$

$$e_{16}=\frac{-b-b_1+2\left[10b^2-4bb_1+4(b_1)^2\right]^{1/2}\cos\left((\varphi-2\pi)/3\right)}{3},\tag{16}$$

$$\varphi=\arccos\frac{\sqrt2\cdot\left(25b^3+12b^2b_1-24(b_1)^2b+16(b_1)^3\right)}{8\left(5b^2-2bb_1+2(b_1)^2\right)^{3/2}},$$

$$Q_{j,1}=1/60,\; Q_{j,5}=Q_{j,6}=Q_{j,13}=Q_{j,14}=1/15,$$

$$Q_{j,2}=Q_{j,4}=Q_{j,8}=Q_{j,9}=Q_{j,11}=Q_{j,15}=1/20,$$

$$Q_{j,3}=Q_{j,7}=Q_{j,10}=Q_{j,12}=Q_{j,16}=1/12,$$

где $b=-t$, $b_1=-t_1$, t — интеграл переноса между атомами углерода на границе гексагон-пентагон, а t_1 — интеграл переноса между атомами углерода на границе гексагон-гексагон. Из (16) следует, что $e_4=e_5$ при $b=b_1\sqrt5/3$, а также $e_{16}=e_6$ при $b_1=b$. Это приводит к вырождению соответствующих энергетических уровней. Отметим также, что при $b_1=b$ e_3, e_{10} можно записать в следующем виде:

$$e_3=-\left(1+\sqrt{13}\right)b/2,\; e_{10}=\left(-1+\sqrt{13}\right)b/2,\tag{17}$$

Из спектральных весов энергетических состояний фуллерена C_{20}, фуллерена C_{24} и фуллерена C_{60} следует, что степень вырождения каждого энергетического уровня этих систем следующий:

$$g_1=g_7=1,\; g_2=g_6=g_8=g_{12}=3,\; g_3=g_9=5,\; g_4=g_5=g_{10}=g_{11}=4;\tag{18}$$

$$g_1=g_{10}=g_{11}=g_{20}=1,\; g_3=g_8=g_{13}=g_{18}=2,\; g_2=g_4=g_5=g_6=g_7=g_9=g_{12}=g_{14}=g_{15}=g_{16}=g_{17}=g_{19}=3;\tag{19}$$

$$\begin{aligned}&g_1=g_{17}=1,\; g_2=g_4=g_8=g_9=g_{11}=g_{15}=g_{18}=g_{20}=g_{24}=g_{25}=g_{27}=g_{31}=3,\\&g_3=g_7=g_{10}=g_{12}=g_{16}=g_{19}=g_{23}=g_{26}=g_{28}=g_{32}=5,\\&g_5=g_6=g_{13}=g_{14}=g_{21}=g_{22}=g_{29}=g_{30}=4.\end{aligned}\tag{20}$$

Из (18–20) следует, что у фуллерена C_{24} энергетический уровень E_5, а у фуллерена C_{60} энергетический уровень E_7 полностью заняты, в то время у фуллерена C_{20} на энергетическом уровне E_4 находится два электрона. Поскольку этот энергетический уровень четырехкратно вырожден, то по правилу Хунда эти два электрона располагаются по одному на двух из четырех орбиталей, а оставшиеся две орбитали являются пустыми.

Подставляя спектральные веса и степени вырождения в (9), получим вероятность нахождения на j-м узле электрона, находящегося на энергетическом уровне E_i, для фуллерена C_{20}, фуллерена C_{24} и фуллерена C_{60} $w_{j,i}=1/20$, $w_{j,i}=1/24$, $w_{j,i}=1/60$. Таким образом, вероятность нахождения электрона с энергией E_i на каждом узле этих структур одинакова. Это можно объяснить тем, что в данных системах все узлы эквивалентны.

Зная функцию Грина для фуллерен C_{60}, вычислим некоторые его физические параметры. При построении энергетических состояний для фуллерена C_{60} воспользуемся методом, предложенным в [4]. Согласно этому методу нижнюю хаббардовской подзону будут составлять энергетические состояния, которые соответствуют связывающим орбиталям с энергиями E_1–E_7 и E_{16}, а верхнюю хаббардовскую подзону будут составлять энергетические состояния, которые соответствуют разрыхляющим орбиталям с энергиями E_{24}–E_{31}. Данные энергетические состояния можно классифицировать в соответствии с представлениями группы I_h, как это сделано в [7]: $E_1(a_g)$, $E_2(t_{1u})$, $E_3(h_g)$, $E_4(t_{2u})$, $E_5(g_u)$, $E_{16}(h_g)$, $E_6(g_g)$, $E_7(h_u)$, $E_{24}(t_{1u})$, $E_{25}(t_{1g})$, $E_{26}(h_g)$, $E_{27}(t_{2u})$, $E_{28}(h_u)$, $E_{29}(g_g)$, $E_{30}(g_u)$, $E_{31}(t_g)$. Из энергетического спектра фуллерена C_{60} следует, что энергии E_{HOMO} и E_{LUMO} будут определяться следующими соотношениями:

$$E_{HOMO} = \varepsilon + \frac{b - \sqrt{5b^2 + 4(b_1)^2 - 4bb_1}}{2},$$

$$E_{LUMO} = \varepsilon + U + \qquad (21)$$

$$+ \frac{-3b - b\sqrt{5} + \sqrt{30b^2 - 8bb_1 + 16(b_1)^2 + 8bb_1\sqrt{5} - 10b^2\sqrt{5}}}{4}.$$

Для того чтобы получить численные значения параметров, которые характеризуют энергетический спектр фуллерена C_{60} воспользуемся экспериментальными данными, полученными при исследовании этой молекулы. Согласно экспериментальным данным для фуллерена C_{60} $E_I = 7{,}6$ эВ, $E_A = 2{,}65$ эВ [5]. Кроме того, экспериментальные исследования показывают, что в оптическом спектре поглощения фуллерена C_{60} наблюдаются три главные полосы поглощения с энергиями $E_1' = 3{,}78$ эВ, $E_2' = 4{,}84$ эВ и $E_3' = 5{,}88$ эВ [9]. В описанной выше модели фуллерена C_{60} три главные полосы поглощения можно интерпретировать следующим образом. Полосы, которые соответствуют энергиям E_1', E_2' и E_3' формируется переходами между молекулярными орбиталями с энергиями $E_6 \to E_8$, $E_7 \to E_{10}$ и $E_6 \to E_{11}$ соответственно. Данные переходы являются разрешенными. Тогда, зная экспериментальные значения энергий E_1', E_2', E_3' E_I, E_A, можно найти численные значения U, b, b_1, ε и U_1:

$$U = 1{,}072 \text{ эВ}, \quad b = 1{,}838 \text{ эВ}, \quad b_1 = 2{,}222 \text{ эВ},$$
$$\varepsilon = -5{,}308 \text{ эВ}, \quad U_1 = 0{,}969 \text{ эВ}. \qquad (22)$$

Из (9), (21) и (22) следует, что для фуллерена C_{60}:

$$\chi_M \approx 5{,}125 \text{ эВ}; \quad \mu \approx -5{,}125 \text{ эВ}. \qquad (23)$$

Из (22) следует, что интегралы переноса имеют тот же порядок, что и энергия кулоновского отталкивания. Поэтому фуллерен C_{60} можно отнести к сильно коррелируемым системам.

Зная энергетический спектр фуллерена C_{60} найдем ширину верхней Δ_u и нижней Δ_d зон Хаббарда, а также ширину запрещенной зоны Δ:

$$\Delta_d = \frac{5b + 2b_1 - \sqrt{5b^2 + 4(b_1)^2 - 4bb_1}}{2},$$

$$\Delta_u = \frac{b + \sqrt{5b^2 + 4(b_1)^2}}{2} +$$

$$+ \frac{3b + b\sqrt{5} - \sqrt{30b^2 - 8bb_1 + 16(b_1)^2 + 8bb_1\sqrt{5} - 10b^2\sqrt{5}}}{4}, \qquad (24)$$

$$\Delta = \frac{-3b - b\sqrt{5} + \sqrt{30b^2 - 8bb_1 + 16(b_1)^2 + 8bb_1\sqrt{5} - 10b^2\sqrt{5}}}{4} -$$

$$- \frac{b - \sqrt{5b^2 + 4(b_1)^2 - 4bb_1}}{2} + U.$$

Из (24) видно, что у фуллерена C_{60}, ширина верхней зоны не равна ширине нижней зоны. Вычисления, проведенные для ряда нанотрубок, содержащих только одни гексагоны, показали, что в этих наноструктурах ширина обоих зон Хаббарда одинакова. Поэтому можно предположить, что различие в ширине подзон Хаббарда в фуллерене C_{60} связано с присутствием пентагонов.

Таким образом, предложенный в работе метод вычисления антикоммутаторных функций Грина и корреляционных функций позволяет определять энергетический спектр наноструктур в рамках модели Хаббарда, а также вычислять целый ряд физических характеристик этих систем.

Литература

1. *Лоскутов В. В., Миронов Г. И., Нигматуллин Р. Р.* Приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда // ФНТ. — 1996. — Т. 22. — С. 282–286.
2. *Мурзашев А. И.* Исследование углеродных наносистем в модели Хаббарда // ЖЭТФ. — 2009. — Т. 135. — С. 122–133.
3. *Нигматуллин Р. Р., Тобоев В. А.* Корреляционные функции для анизотропной модели Гейзенберга в нулевом магнитном поле // ТМФ. — 1986. — Т. 68. — С. 88–97.
4. *Силантьев А. В.* Применение метода статических флуктуаций к модели Хаббарда // Известия вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. — 2011. — Т. 19. — С. 151–163.
5. *Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C.* Science of fullerenes and carbon nanotubes. — San Diego: Academic Press, 1996. — 965 p.
6. *Gebhard F.* The Mott Metal-Insulator Transition. — Berlin: Springer, 1997. — 379 p.
7. *Haddon R. C., Brus L. E., Raghavachari K.* Electronic structure and bonding in icosahedral C_{60} // Chemical Physics Letters. — 1986. — V. 125. — P. 459–464.
8. *Hubbard J.* Electron correlations in narrow energy bands // Proceedings of the Royal Society A. — 1963. — V. 276. — P. 238–257.
9. *Leach S., Vervolet M., Despres A., Bréheret E., Hare J. P., Dennis T. J., Kroto H. W., Taylor R., Walton D. R. M.* Electronic spectra and transitions of the fullerene C_{60} // Chemical Physics. — 1992. — V. 160. — P. 451–466.