

УДК 538.1

DOI 10.21685/2072-3040-2016-3-7

*А. В. Силантьев*

## ФУЛЛЕРЕН $C_{24}$ В РАМКАХ МОДЕЛИ ХАББАРДА

### **Аннотация.**

*Актуальность и цели.* Модель Хаббарда широко используется для теоретического описания сильно коррелируемых электронных систем. Исследование углеродных наносистем в рамках модели Хаббарда показало, что полученные в этой модели результаты согласуются с экспериментальными данными. Целью настоящей работы является получение и исследование энергетического спектра фуллерена  $C_{24}$  в модели Хаббарда.

*Материалы и методы.* Методами квантовой теории поля были вычислены функции Грина. При вычислении функций Грина был использован метод уравнений движения для операторов рождения, благодаря которому была получена система дифференциальных уравнений. Для получения замкнутой системы дифференциальных уравнений было использовано приближение среднего поля.

*Результаты.* Знание функций Грина позволило вычислить энергетический спектр фуллерена  $C_{24}$  и определить степень вырождения каждого энергетического уровня. С использованием методов теории групп была дана классификация энергетических состояний фуллерена  $C_{24}$ .

*Выводы.* Проведенные вычисления показали, что у фуллерена  $C_{24}$  существует десять энергетических состояний и десять разрешенных с точки зрения симметрии переходов между энергетическими состояниями.

**Ключевые слова:** модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, фуллерены, наносистемы.

*А. В. Silant'ev*

## $C_{24}$ FULLERENE WITHIN THE HUBBARD MODEL

### **Abstract.**

*Background.* The Hubbard model is widely used for theoretical description of strongly correlated electronic systems. Investigations of carbon nanosystems within the Hubbard model demonstrate that theoretical results agree with experimental data. The purpose of this paper is to obtain and to investigate the energy spectrum of  $C_{24}$  fullerene within the Hubbard model.

*Materials and methods.* Methods of quantum theoretical field were used to obtain the Green's functions. The Green's functions were found by the method of the motion equations for creation operators. Approximation of the mean field was used to obtain a closed system of differential equations for finding the creation operators.

*Results.* The energy spectrum and the degree of degeneracy of each energy level in  $C_{24}$  fullerene were found by the Green's functions. A classification of the energy levels in fullerene  $C_{24}$  was realized by the group theory.

*Conclusions.* This work demonstrates that  $C_{24}$  fullerene has ten energy levels and ten symmetrically enabled transitions between energy levels.

**Key words:** Hubbard model, Green's functions, energy spectrum, fullerenes, nanosystems.

### Введение

В настоящее время большое число теоретических и экспериментальных исследований посвящено изучению как физических, так и химических свойств фуллеренов [1, 2], открытие которых привело к новым направлениям в науке: нанофизике, нанохимии и др. Исследование фуллеренов показало, что они представляют собой кластеры в форме полиэдров, большинство из которых состоит из пентагонов и гексагонов. Проведенные исследования также показали, что кроме кластеров указанного выше типа, существуют также кластеры, состоящие из гексагонов и четырехугольников. Одним из таких фуллеренов является фуллерен  $C_{24}$  с группой симметрии  $O_h$ , который был открыт в 2001 г. методом высокоразрешающей электронной спектроскопии при лазерной абляции на поверхности графита [3]. Этот фуллерен представляет собой усеченный октаэдр, состоящий из шести квадратов и восьми гексагонов (рис. 1). Таким образом, в фуллерене  $C_{24}$  между атомами углерода имеется два типа связей. Исследования этого фуллерена показали, что длина связи на границе двух гексагонов составляет  $1,386 \text{ \AA}$ , а на границе гексагон-квадрат –  $1,503 \text{ \AA}$  [4]. Этот фуллерен уникален тем, что он представляет собой наименьший объемный кластер, не содержащий пентагонов и удовлетворяющий правилу изолированных квадратов, которое служит правилом стабильности [4], которое является аналогом хорошо известного эмпирического правила изолированных пентагонов [5], согласно которому кластеры, содержащие изолированные пентагоны, являются наиболее стабильными.

Как известно, углерод в фуллеренах и нанотрубках находится  $sp^2$ -гибритизированном состоянии, а электронные свойства этих структур обусловлены  $\pi$ -электронами, которые могут перескакивать с одного атома углерода на другой в пределах этих структур [1]. Исследование углеродных систем показало, что взаимодействие двух электронов, находящихся на одном атоме углерода, является довольно большим и может достигать  $\sim 10$  эВ [6]. Для описания физических свойств электронных систем с сильным кулоновским взаимодействием между электронами используется модель Хаббарда [7], гамильтониан которой имеет следующий вид:

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

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;  $\bar{\sigma} = -\sigma$ .

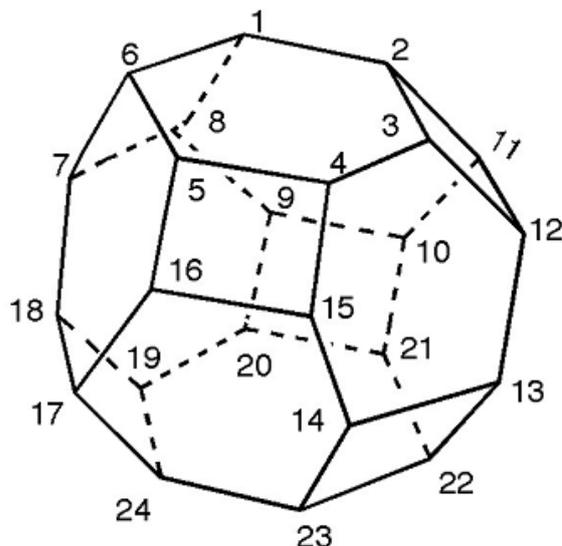


Рис. 1. Структура фуллерена  $C_{24}$  с указанием местоположения атомов углерода

Несмотря на то, что гамильтониан модели Хаббарда имеет довольно простой вид, тем не менее с математической точки зрения данная модель является довольно сложной. В настоящее время для модели Хаббарда имеется лишь несколько точных решений: точное решение в атомном пределе [8], точное решение для одномерной модели Хаббарда [9, 10], точное решение для димера [11, 12]. Большинство результатов в модели Хаббарда получено с использованием различных приближенных методов, которые основаны на разного рода расщеплениях и разложениях по теории возмущений [13]. При исследовании наносистем в рамках модели Хаббарда также используются разные приближения. Например, в работах [14–16] наносистемы исследовались в приближении среднего поля, а в работах [17–20] использовалось приближение статических флуктуаций. Исследование оптических свойств фуллерена  $C_{60}$  в пределах модели Хаббарда в приближении среднего поля, выполненное в работе [15], показало хорошее соответствие между теоретическими и экспериментальными результатами.

Целью данной работы является исследование фуллерена  $C_{24}$  с группой симметрии  $O_h$  в рамках модели Хаббарда в приближении среднего поля.

### 1. Энергетический спектр фуллерена $C_{24}$

Для описания  $\pi$ -электронной системы фуллерена  $C_{24}$  воспользуемся моделью Хаббарда, которая описывается гамильтонианом (1), и найдем энергетический спектр этой молекулы в приближении среднего поля. Для этого, как известно [14], в гамильтониане (1) необходимо сделать замену:

$$n_{i\sigma}n_{i\bar{\sigma}} \rightarrow n_{i\sigma} \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle + n_{i\bar{\sigma}} \langle n_{i\sigma} \rangle, \tag{2}$$

где  $\langle n_{i\sigma} \rangle$  – среднее число электронов со спином  $\sigma$  на узле  $i$ .

Подставляя соотношение (2) в гамильтониан (1), получим гамильтониан модели Хаббарда в приближении среднего поля:



тическим состояниям можно сопоставить орбитальные квантовые числа  $l = 0, 1, 2, \dots$ , которые соответствуют орбиталям  $s, p, d, \dots$ . Количество состояний в каждой орбитали равно  $2l + 1$ . Орбитальным квантовым числом  $l$  можно сопоставить также неприводимые представления группы  $O_3$ , которые можно разложить по неприводимым представлениям группы  $O_h$ :

$$s \rightarrow a_{1g}, \quad p \rightarrow t_{1u}, \quad d \rightarrow e_g + t_{2g}, \quad f \rightarrow t_{1u} + t_{2u} + a_{2u},$$

$$g \rightarrow e_g + t_{1g} + t_{2g} + a_{1g}, \quad h \rightarrow e_u + 2t_{1u} + t_{2u}, \quad j \rightarrow e_g + t_{1g} + 2t_{2g} + a_{1g} + a_{2g}.$$

Данное разложение как раз соответствует расщеплению энергетического спектра системы со сферической симметрией при понижении сферической симметрии системы до группы  $O_h$ , как это показано на рис. 2. Можно показать, что энергетические состояния фуллера  $C_{24}$ , определяемые полюсами функции Грина (6), связаны с неприводимыми представлениями группы  $O_h$  следующим образом:

$$\begin{aligned} E_1(a_{1g}), E_2(t_{1u}), E_3(e_g), E_4(t_{2g}), E_5(t_{2u}), \\ E_6(t_{1u}), E_7(t_{1g}), E_8(e_g), E_9(t_{2u}), E_{10}(a_{2g}). \end{aligned} \tag{8}$$

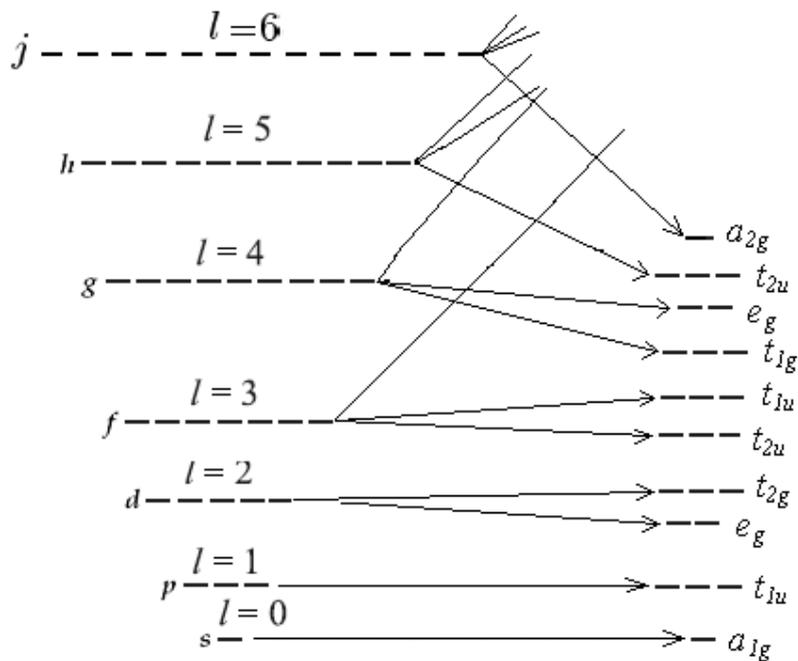


Рис. 2. Расщепление энергетического спектра системы при понижении ее симметрии от сферической до симметрии с группой  $O_h$

Чтобы найти степень вырождения каждого энергетического уровня фуллера  $C_{24}$ , воспользуемся следующим соотношением [18]:

$$g_i = \sum_{j=1}^N Q_{j,i}. \tag{9}$$

Подставляя  $Q_{j,i}$  из (7) в (9), получим

$$g_1 = g_{10} = 1, \quad g_3 = g_8 = 2, \quad g_2 = g_4 = g_5 = g_6 = g_7 = g_9 = 3. \quad (10)$$

## 2. Обсуждение результатов

Рассмотрим структуру энергетического спектра фуллерена  $C_{24}$ , изображенного на рис. 3. Как видно из соотношения (6) и рис. 3, в энергетической зоне фуллерена  $C_{24}$  имеется десять энергетических уровней, которые сосредоточены вблизи энергии

$$\epsilon' = \epsilon + U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle. \quad (11)$$

В случае, когда число  $\pi$ -электронов в фуллерене  $C_{24}$  равно числу атомов углерода,  $n = 1$ , а  $\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle = 1/2$ , где  $n$  – концентрация электронов. В этом случае, как следует из соотношения (11):

$$\epsilon' = \epsilon + \frac{U}{2}. \quad (12)$$

Как видно из соотношений (6) и (7), энергетический спектр фуллерена  $C_{24}$  зависит от трех параметров:  $\epsilon'$ ,  $b$  и  $b_1$ . Для того чтобы оценить эти параметры для фуллерена  $C_{24}$ , поступим следующим образом. Как известно, у фуллерена  $C_{60}$ , как и у фуллерена  $C_{24}$ , между атомами углерода имеется два типа связей, длина которых составляет  $1,46 \overset{\circ}{\text{Å}}$  и  $1,4 \overset{\circ}{\text{Å}}$  [1]. В работе [15] в рамках модели Хаббарда в приближении среднего поля было показано, что для фуллерен  $C_{60}$  параметры  $\epsilon'$ ,  $b$  и  $b_1$  имеют следующие значения:  $\epsilon' = -4,84 \text{ эВ}$ ,  $b = 1,49 \text{ эВ}$  и  $b_1 = 1,86 \text{ эВ}$ . Поскольку величины  $\epsilon$  и  $U$ , как следует из их определения, одинаковы как для фуллерена  $C_{60}$ , так и для фуллерена  $C_{24}$ , то, как следует из (12), величины  $\epsilon'$  для обоих фуллеренов также должны совпадать. В работе [4] было показано, что у фуллерена  $C_{24}$  длина связей между атомами углерода составляет  $1,503 \overset{\circ}{\text{Å}}$  и  $1,386 \overset{\circ}{\text{Å}}$ . Как видно из приведенных выше данных, длины связей между атомами углерода в фуллерене  $C_{60}$  и в фуллерене  $C_{24}$  отличаются незначительно. Поэтому для того чтобы найти величины  $b$  и  $b_1$  для фуллерена  $C_{24}$ , аппроксимируем зависимость величины  $b$  от длины связи линейным образом:

$$b = k \cdot x + c, \quad (13)$$

где  $x$  – длина связи;  $k$  и  $c$  – константы.

Зная значения  $b$ ,  $b_1$  и длину связей для фуллерена  $C_{60}$ , можно найти коэффициенты  $k$  и  $c$ . Подставив найденные значения коэффициентов  $k$  и  $c$  в (13), мы получим

$$b = -6,16667 \cdot x + 10,49333. \quad (14)$$

Тогда, зная длину связей у фуллерена  $C_{24}$  и используя соотношение (14), можно получить значения для  $b$  и  $b_1$ .

Таким образом, для фуллерена C<sub>24</sub>:

$$b = 1,92217 \text{ эВ}, \quad b_1 = 1,22483 \text{ эВ}, \quad \varepsilon' = -4,84 \text{ эВ}. \quad (15)$$

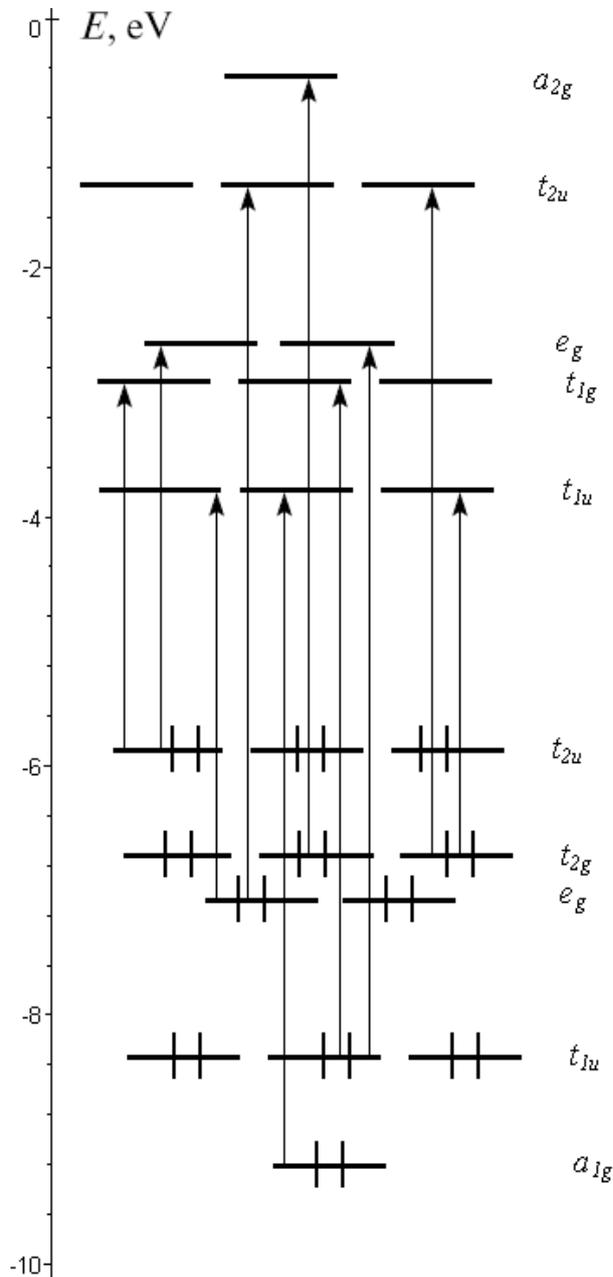


Рис. 3. Энергетический спектр фуллерена C<sub>24</sub> с указанием электронов, находящихся в основном состоянии, и с указанием переходов, формирующих спектр оптического поглощения

Эти значения были использованы при построении энергетического спектра фуллерена C<sub>24</sub>, изображенного на рис. 3. Зависимость энергетического

спектра фуллерена  $C_{24}$  от интегралов переноса представлена на рис. 4. В этом спектре можно выделить следующие особенности. При  $b = 0$  ( $b_1 = 0$ ) энергетический спектр фуллерена  $C_{24}$  переходит в энергетический спектр димера (квадрата). Это можно объяснить тем, что в этих предельных случаях фуллерен  $C_{24}$  распадается на изолированные димеры и квадраты, соответственно. Другой особенностью энергетического спектра фуллерена  $C_{24}$  является то, что при  $b_1 = b/2$  происходит случайное вырождение энергетических уровней  $E_3$  и  $E_4$ , а также энергетических уровней  $E_7$  и  $E_8$ .

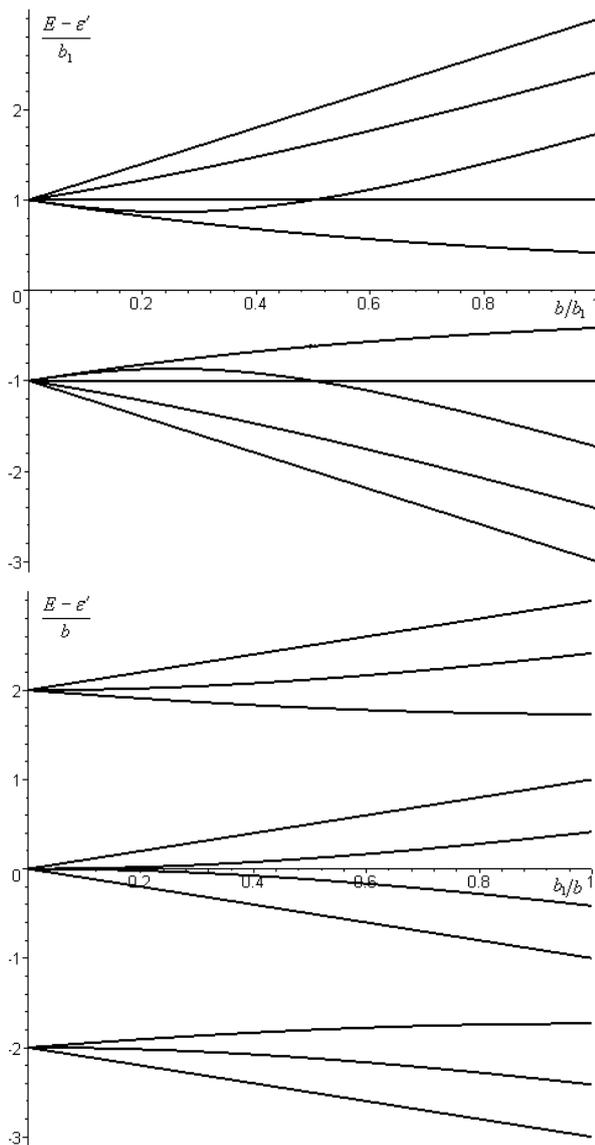


Рис. 4. Энергетический спектр фуллерена  $C_{24}$  для различных значений  $b$  и  $b_1$

Из энергетического спектра фуллерена  $C_{24}$  следует, что энергия верхнего заполненного энергетического уровня  $E_{HOMO}$  и энергия нижнего вакант-

ного энергетического уровня  $E_{LUMO}$  будут определяться следующими соотношениями:

$$E_{HOMO} = \epsilon' + b_1 - \sqrt{b^2 + b_1^2}, \quad E_{LUMO} = \epsilon' + \sqrt{b^2 + b_1^2} - b_1. \quad (16)$$

Используя теорию групп и полученный выше энергетический спектр фуллерена  $C_{24}$ , можно найти переходы, которые обуславливают оптический спектр этого фуллерена. Для этого прежде всего найдем с помощью теории групп [21], какие переходы в фуллерене  $C_{24}$  разрешены, а какие запрещены с точки зрения симметрии. Можно показать, что в энергетическом спектре молекулярной системы с группой симметрии  $O_h$  разрешены переходы только между состояниями:

$$\begin{aligned} t_{1g} &\leftrightarrow \{a_{1u}, e_u, t_{1u}, t_{2u}\}, & t_{2g} &\leftrightarrow \{a_{2u}, e_u, t_{1u}, t_{2u}\}, \\ t_{1u} &\leftrightarrow \{a_{1g}, e_g, t_{1g}, t_{2g}\}, & t_{2u} &\leftrightarrow \{a_{2g}, e_g, t_{1g}, t_{2g}\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Остальные переходы являются запрещенными.

Из (8) и (17) следует, что в фуллерене  $C_{24}$  с группой симметрии  $O_h$  между энергетическими состояниями разрешены только десять оптических переходов, которые представлены на рис. 3. В табл. 1 среди всех возможных переходов в энергетическом спектре фуллерена  $C_{24}$  величиной  $\delta$  отмечено, какие переходы являются разрешенными, а какие запрещенными с точки зрения симметрии. Если  $\delta = +$ , то такой переход разрешен с точки зрения симметрии, если же  $\delta = -$ , то с точки зрения симметрии данный переход запрещен. Кроме того, в табл. 1 величина  $\Delta\ell$  показывает, как изменяется орбитальное квантовое число при переходе электрона с одного энергетического уровня на другой. Как известно [21], в квантовой системе со сферической симметрией правило отбора по орбитальному квантовому числу имеет вид  $\Delta\ell = \pm 1$ . Из табл. 1 видно, что для фуллерена  $C_{24}$  данное правило отбора нарушается. Например, переход между энергетическими состояниями  $E_1$  и  $E_6$  с точки зрения симметрии является разрешенным, несмотря на то, что в данном случае  $\Delta\ell = \pm 3$ . Отметим также, что в работе [15] было показано, что правило отбора по орбитальному квантовому числу  $\Delta\ell = \pm 1$  не выполняется и для фуллерена  $C_{60}$ .

Таблица 1

Переходы в энергетическом спектре фуллерена  $C_{24}$

№	$\Delta E$	$\delta$	$\Delta\ell$	№	$\Delta E$	$\delta$	$\Delta\ell$	№	$\Delta E$	$\delta$	$\Delta\ell$
1	$E_1-E_6$	+	3	10	$E_2-E_{10}$	-	5	19	$E_4-E_9$	+	3
2	$E_1-E_7$	-	4	11	$E_3-E_6$	+	1	20	$E_4-E_{10}$	-	4
3	$E_1-E_8$	-	4	12	$E_3-E_7$	-	2	21	$E_5-E_6$	-	0
4	$E_1-E_9$	-	5	13	$E_3-E_8$	-	2	22	$E_5-E_7$	+	1
5	$E_1-E_{10}$	-	6	14	$E_3-E_9$	+	3	23	$E_5-E_8$	+	1
6	$E_2-E_6$	-	2	15	$E_3-E_{10}$	-	4	24	$E_5-E_9$	-	2
7	$E_2-E_7$	+	3	16	$E_4-E_6$	+	1	25	$E_5-E_{10}$	+	3
8	$E_2-E_8$	+	3	17	$E_4-E_7$	-	2				
9	$E_2-E_9$	-	4	18	$E_4-E_8$	-	2				

Таким образом, при нарушении сферической симметрии квантовой системы правило отбора по орбитальному квантовому числу  $\Delta\ell = \pm 1$  может нарушаться. Как видно из рис. 3 и табл. 1, в энергетическом спектре фуллерена  $C_{24}$  существует 25 переходов, из них всего разрешено с точки зрения симметрии 10 переходов. Следует сказать, что в фуллерене  $C_{24}$  атомы углерода совершают малые колебания около положения равновесия. Это приводит к тому, что происходит нарушение симметрии фуллерена  $C_{24}$ . В результате этого запрещенные согласно симметрии системы оптические переходы становятся разрешенными с небольшой интенсивностью.

Таким образом, полученные в данной работе результаты показывают, что энергетическая зона фуллерена  $C_{24}$  с симметрией  $O_h$  образуется в результате расщепления энергии атомного состояния  $\pi$ -электрона на десять энергетических уровней, между которыми при половинном заполнении энергетической зоны возможно 10 оптических переходов. Кроме того, показано, что учет взаимодействия электронов, находящихся на одном узле, приводит к сдвигу центра энергетической зоны, причем величина этого сдвига зависит как от энергии взаимодействия  $\pi$ -электронов, так и от концентрации  $\pi$ -электронов в фуллерене.

#### **Список литературы**

1. **Dresselhaus, M. S.** Science of fullerenes and carbon nanotubes / M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund. – San Diego : Academic Press, 1996. – P. 965.
2. **Hirsch, A.** Fullerenes: Chemistry and Reactions / A. Hirsch, M. Brettreich. – Weinheim : Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005. – P. 423.
3. **Oku, T.** Formation, atomic structures and properties of boron nitride and carbon nanocage fullerene materials / T. Oku, M. Kuno, H. Kitahara, I. Navita // International Journal of Inorganic Materials. – 2001. – Vol. 3. – P. 597–612.
4. **Покропивный, В. В.** Новые наноформы углерода и нитрида бора / В. В. Покропивный, А. Л. Ивановский // Успехи химии. – 2008. – Т. 77, № 10. – С. 899–937.
5. **Kroto, H. W.** The stability of the fullerenes  $C_n$ , with  $n = 24, 28, 32, 36, 50, 60$  and  $70$  / H. W. Kroto // Nature. – 1987. – Vol. 329. – P. 529–531.
6. **Левин, А. А.** Введение в квантовую химию твердого тела / А. А. Левин. – М. : Химия, 1974. – С. 476.
7. **Hubbard, J.** Electron correlations in narrow energy bands / J. Hubbard // Proceedings of the Royal Society A. – 1963. – Vol. 276. – P. 238–257.
8. **Кузьмин, Е. В.** Физика магнитоупорядоченных веществ / Е. В. Кузьмин, Г. А. Петраковский, Э. А. Завадский. – Новосибирск : Наука, 1976. – С. 288.
9. **Lieb, E. H.** Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension / E. H. Lieb, F. Y. Wu // Phys. Rev. – 1968. – Vol. 20, № 25. – P. 1445–1448.
10. **Takahashi, M.** One-dimensional Hubbard model at finite temperature / M. Takahashi // Prog. Theor. Phys. – 1971. – Vol. 47, № 1. – P. 69–82.
11. **Силантьев, А. В.** Димер в расширенной модели Хаббарда / А. В. Силантьев // Известия вузов. Физика. – 2014. – Т. 57, № 11. – С. 37–45.
12. **Силантьев, А. В.** Димер в модели Хаббарда / А. В. Силантьев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 168–182.
13. **Исюмов, Ю. А.** Магнетизм коллективизированных электронов / Ю. А. Исюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин. – М. : Наука, 1994. – С. 366.

14. **Силантьев, А. В.** Исследование наносистем в модели Хаббарда в приближении среднего поля / А. В. Силантьев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2016. – № 1 (37). – 101–112.
15. **Силантьев, А. В.** Энергетический спектр и оптические свойства фуллерена  $C_{60}$  в модели Хаббарда / А. В. Силантьев // Физика металлов и металловедение. – 2016. – Т. 117, № 10.
16. **Иванченко, Г. С.** Проводимость двухслойных углеродных нанотрубок в рамках модели Хаббарда / Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49. – С. 183–189.
17. **Силантьев, А. В.** Исследование наноструктур в модели Хаббарда / А. В. Силантьев // Вестник Марийского государственного университета. – 2012. – № 8. – С. 18–21.
18. **Силантьев, А. В.** Исследование наносистем в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций / А. В. Силантьев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 2 (34). – С. 164–175.
19. **Силантьев, А. В.** Влияние деформации на энергетический спектр фуллерена  $C_{20}$  / А. В. Силантьев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2013. – № 1 (25). – С. 135–143.
20. **Силантьев, А. В.** Димер в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций / А. В. Силантьев // Вестник Марийского государственного университета. – 2012. – № 8. – С. 22–25.
21. **Хамермеш, М.** Теория групп и ее применение к физическим проблемам / М. Хамермеш. – М. : Мир, 1966. – С. 587.

### References

1. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C. *Science of fullerenes and carbon nanotubes*. San Diego: Academic Press, 1996, p. 965.
2. Hirsch A., Brettreich M. *Fullerenes: Chemistry and Reactions*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005, p. 423.
3. Oku T., Kuno M., Kitahara H., Navita I. *International Journal of Inorganic Materials*. 2001, vol. 3, pp. 597–612.
4. Pokropivnyy V. V., Ivanovskiy A. L. *Uspekhi khimii* [Advances of chemistry]. 2008, vol. 77, no. 10, pp. 899–937.
5. Kroto H. W. *Nature*. 1987, vol. 329, pp. 529–531.
6. Levin A. A. *Vvedenie v kvantovuyu khimiyu tverdogo tela* [Introduction into quantum solid state chemistry]. Moscow: Khimiya, 1974, p. 476.
7. Hubbard J. *Proceedings of the Royal Society A*. 1963, vol. 276, pp. 238–257.
8. Kuz'min E. V., Petrakovskiy G. A., Zavadskiy E. A. *Fizika magnitoporyadochennykh veshchestv* [Physics of magnetically ordered materials]. Novosibirsk: Nauka, 1976, p. 288.
9. Lieb E. H., Wu F. Y. *Phys. Rev.* 1968, vol. 20, no. 25, pp. 1445–1448.
10. Takahashi M. *Prog. Theor. Phys.* 1971, vol. 47, no. 1, pp. 69–82.
11. Silant'ev A. V. *Izvestiya vuzov. Fizika* [University proceedings. Physics]. 2014, vol. 57, no. 11, pp. 37–45.
12. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2015, no. 1 (33), pp. 168–182.
13. Izyumov Yu. A., Katsnel'son M. I., Skryabin Yu. N. *Magnetizm kolektivizirovannykh elektronov* [Magnetism of collective electrons]. Moscow: Nauka, 1994, p. 366.
14. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2016, no. 1 (37), 101–112.

15. Silant'ev A. V. *Fizika metallov i metallovedenie* [Physics of metals and physical metallurgy]. 2016, vol. 117, no. 10.
16. Ivanchenko G. S., Lebedev N. G. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2007, vol. 49, pp. 183–189.
17. Silant'ev A. V. *Vestnik Mariyskogo gosudarstvennogo universiteta* [Bulletin of Mari State University]. 2012, no. 8, pp. 18–21.
18. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2015, no. 2 (34), pp. 164–175.
19. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2013, no. 1 (25), pp. 135–143.
20. Silant'ev A. V. *Vestnik Mariyskogo gosudarstvennogo universiteta* [Bulletin of Mari State University]. 2012, no. 8, pp. 22–25.
21. Khamermesh M. *Teoriya grupp i ee primeneniye k fizicheskim problemam* [Group theory and its application to physical problems]. Moscow: Mir, 1966, p. 587.

---

**Силантьев Анатолий Владимирович**  
старший преподаватель, кафедра физики  
и методики преподавания физики,  
Марийский государственный  
университет (Россия,  
г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1)

**Silant'ev Anatoliy Vladimirovich**  
Senior lecturer, sub-department of physics  
and physics teaching technique, Mari  
State University (1 Lenina square,  
Yoshkar-Ola, Russia)

E-mail: kvvant@rambler.ru

---

УДК 538.1

**Силантьев, А. В.**

**Фуллерен  $C_{24}$  в рамках модели Хаббарда / А. В. Силантьев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2016. – № 3 (39). – С. 103–114. DOI 10.21685/2072-3040-2016-3-7**