

## Фуллерены $C_{24}$ в модели Хаббарда

Э.Д. Изергин, Г.И. Миронов

*Марийский педагогический институт, г. Йошкар-Ола, 424002, Россия*  
E-mail: eduard\_izergin@mail.ru

Статья поступила в редакцию 24 октября 2006 г., после переработки 27 февраля 2007 г.

В модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций исследована квантовая система, состоящая из 24 атомов (фуллерен  $C_{24}$ ). В рамках данной модели вычислены антикоммутирующие функции Грина, корреляционные функции, энергетический спектр, энергия основного состояния для фуллерена  $C_{24}$  и для иона фуллерена  $C_{24}^+$ . Проведен анализ результатов и сравнение  $C_{24}$  со структурными составляющими фуллерена. Для сравнения результатов с экспериментальными данными рассчитаны ширина запрещенной энергетической зоны и энергия ионизации, являющиеся фундаментальными характеристиками наносистем.

В моделі Хаббарда в наближенні статичних флуктуацій досліджено квантову систему, що складається з 24 атомів (фулерен  $C_{24}$ ). В рамках даної моделі обчислено антикомутаторні функції Гріна, кореляційні функції, енергетичний спектр, енергія основного стану для фулерена  $C_{24}$  та для іона фулерена  $C_{24}^+$ . Проведено аналіз результатів і порівняння  $C_{24}$  з структурними складовими фулерена. Для порівняння результатів з експериментальними даними розраховано ширину забороненої енергетичної зони та енергію іонізації, що є фундаментальними характеристиками наносистем.

PACS: 71.10.Au Теория ферми-жидкости и другие феноменологические модели;  
71.10.Hf Основные состояния нефермиевской жидкости, электронные фазовые диаграммы и фазовые переходы в модельных системах.

Ключевые слова: модель Хаббарда, фуллерен, энергия ионизации, функции Грина, энергия основного состояния, энергетический спектр.

Сегодня в мире стремительно развиваются исследования новой и необычной, так называемой аллотропной, формы углерода — фуллеренов. Фуллерены — класс углеродных молекул, содержащих более 20 атомов.

С момента открытия и до настоящего времени они продолжают привлекать к себе внимание благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам [1,2]. Анализ свойств показывает, что фуллерен  $C_{24}$  является отличным кандидатом на роль низкодизелетрического материала для интерконнекторов [3]. Фуллерены применяются также в сверхпроводящих материалах, сенсорах, солнечных батареях, логических и запоминающих элементах и т.д. Фуллерены были сначала предсказаны теоретически, потом с помощью спектрального анализа найдены в атмосферах красных углеродных звезд. После этого они были получены искусственно — с помощью дугового разряда в специальной газовой смеси. Исследование свойств углеродных наноструктур [1] представляет интерес в связи с поисками путей оптимизации их получения и возможностей применения.

До последнего времени [4–6] теоретические расчеты в области исследования наноструктур были связаны с численными расчетами (квантово-теоретические расчеты из первых принципов, метод Монте Карло, метод молекулярной динамики). Наиболее детальное теоретическое описание микроскопических свойств нанокластеров получают квантово-механическими методами. Однако специфика наносистем (широкий диапазон размеров и структур, необычная валентность, наличие сильно делокализованных электронов) приводит к тому, что в данный момент ни один из существующих квантово-механических методов не является оптимальным [7].

В работе [8,9] было разработано решение модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций с введением для ферми-операторов «представления типа представления взаимодействия». В [10,11] была решена задача о димере (системе из двух узлов кристаллической решетки, помещенной в термостат) как точно, так и в приближении статических флуктуаций. Полученные результаты показали, что антикоммутирующие

функции Грина, вычисленные как в приближении статических флуктуаций, так и точно, совпадают. Приближение статических флуктуаций довольно адекватно передает поведение системы, описываемой гамильтонианом Хаббарда в области слабых и сильных корреляций. В [9] показано, что в пределах  $U = 0$  и  $U = \infty$  энергии основного состояния одномерной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций и в случае точного решения совпадают, в области промежуточных значений  $U$  имеется хорошее согласие с точным решением. Эти результаты позволяют надеяться, что приближение статических флуктуаций можно применить и при решении «нанокластерных» задач.

В настоящей работе рассмотрена система, состоящая из 24 атомов углерода, в рамках модели Хаббарда [12] в приближении статических флуктуаций. Вычислены и исследованы одночастичные функции Грина, термодинамические средние, энергетический спектр и энергия основного состояния.

Молекула фуллерена  $C_{24}$  показана на рис. 1. Это идеальный полиэдр с точечной группой симметрии, все связи которого имеют одинаковую длину. Он состоит из шести квадратных и восьми гексагональных граней и

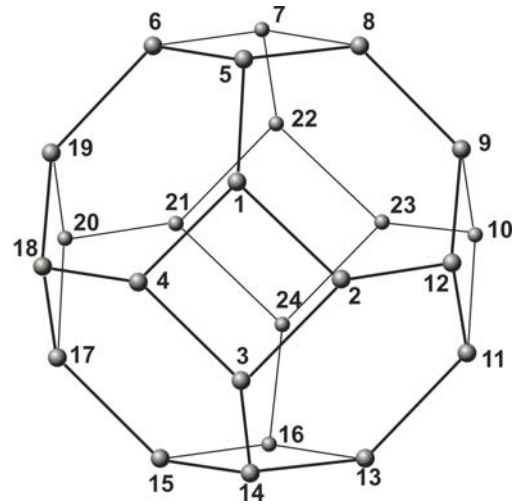


Рис. 1. Молекула фуллерена  $C_{24}$ .

является наименьшим кристаллообразующим параллелоидом, удовлетворяющим правилу изолированных квадратов. Фуллерен  $C_{24}$  обнаружен экспериментально методом высокоразрешающей электронной спектроскопии при лазерной абляции на поверхности графита [13].

Гамильтониан данной системы будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H = & \varepsilon \sum_{\sigma, i=1}^{24} n_{i\sigma} + B \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{4\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{14\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{4\sigma} + a_{18\sigma}^+ a_{4\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{5\sigma} + \\
 & + a_{6\sigma}^+ a_{5\sigma} + a_{8\sigma}^+ a_{5\sigma} + a_{7\sigma}^+ a_{6\sigma} + a_{19\sigma}^+ a_{6\sigma} + a_{8\sigma}^+ a_{7\sigma} + a_{22\sigma}^+ a_{7\sigma} + a_{9\sigma}^+ a_{8\sigma} + a_{10\sigma}^+ a_{9\sigma} + a_{12\sigma}^+ a_{9\sigma} + \\
 & + a_{11\sigma}^+ a_{10\sigma} + a_{23\sigma}^+ a_{10\sigma} + a_{12\sigma}^+ a_{11\sigma} + a_{13\sigma}^+ a_{11\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{12\sigma} + a_{14\sigma}^+ a_{13\sigma} + a_{16\sigma}^+ a_{13\sigma} + a_{15\sigma}^+ a_{14\sigma} + \\
 & + a_{16\sigma}^+ a_{15\sigma} + a_{17\sigma}^+ a_{15\sigma} + a_{24\sigma}^+ a_{16\sigma} + a_{18\sigma}^+ a_{17\sigma} + a_{20\sigma}^+ a_{17\sigma} + a_{19\sigma}^+ a_{18\sigma} + a_{20\sigma}^+ a_{19\sigma} + a_{21\sigma}^+ a_{20\sigma} + \\
 & + a_{22\sigma}^+ a_{21\sigma} + a_{24\sigma}^+ a_{21\sigma} + a_{23\sigma}^+ a_{22\sigma} + a_{24\sigma}^+ a_{23\sigma} + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_{\sigma, i=1}^{24} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}},
 \end{aligned}$$

здесь  $\varepsilon$  — собственная энергия электрона;  $B$  — интеграл переноса, описывающий перескоки электрона с атома на атом за счет тепловых флуктуаций и энергии наносистемы;  $U$  — энергия кулоновского взаимодействия электронов;  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}^-$  — оператор числа частиц,  $\bar{\sigma} = -\sigma$ ;  $a_{i\sigma}^+$ ,  $a_{i\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов на узле  $i$  с проекцией спина  $\sigma$ ; h.c. означает эрмитовое сопряжение.

Введя представление Гейзенберга для операторов рождения частиц ( $j = \overline{1, 24}$ )

$$a_{j,\sigma}^+(\tau) = e^{\hat{H}\tau} a_{\sigma}^+(0) e^{-\hat{H}\tau}, \quad (\tau = it),$$

для данной системы получим следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases}
 \frac{d}{d\tau} a_{1\uparrow}^+(\tau) = \varepsilon a_{1\uparrow}^+(\tau) + B a_{2\uparrow}^+(\tau) + B a_{4\uparrow}^+(\tau) + B a_{5\uparrow}^+(\tau) + U n_{1\downarrow} a_{1\uparrow}^+(\tau), \\
 \frac{d}{d\tau} a_{2\uparrow}^+(\tau) = \varepsilon a_{2\uparrow}^+(\tau) + B a_{1\uparrow}^+(\tau) + B a_{3\uparrow}^+(\tau) + B a_{12\uparrow}^+(\tau) + U n_{2\downarrow} a_{2\uparrow}^+(\tau), \\
 \dots \\
 \frac{d}{d\tau} a_{24\uparrow}^+(\tau) = \varepsilon a_{24\uparrow}^+(\tau) + B a_{21\uparrow}^+(\tau) + B a_{23\uparrow}^+(\tau) + B a_{16\uparrow}^+(\tau) + U n_{24\downarrow} a_{24\uparrow}^+(\tau).
 \end{cases}$$

Решив полученную систему дифференциальных уравнений в приближении статических флуктуаций по методике, изложенной в [14,15], можно получить выражение для фурье-образа антикоммутирующей функции Грина. При решении системы нас интересует случай, когда на один узел модели фуллерена в среднем приходится один электрон (24 электрона приходится на 24

узла наносистемы), этому случаю удовлетворяет условие  $\varepsilon = -U/2$ , с учетом которого получим следующее выражение для фурье-образа антикоммутирующей функции Грина:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{i\uparrow}^+ | a_{i\uparrow} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1/8}{E + \frac{U}{2} - a} + \frac{1/8}{E - \frac{U}{2} - a} + \frac{1/8}{E + \frac{U}{2} + a} + \frac{1/8}{E - \frac{U}{2} + a} + \right. \\ + \frac{1/8}{E + \frac{U}{2} - b} + \frac{1/8}{E - \frac{U}{2} - b} + \frac{1/8}{E + \frac{U}{2} + b} + \frac{1/8}{E - \frac{U}{2} + b} + \frac{1/12}{E + \frac{U}{2} - \sqrt{3}|B|} + \frac{1/12}{E - \frac{U}{2} - \sqrt{3}|B|} + \\ + \frac{1/12}{E + \frac{U}{2} + \sqrt{3}|B|} + \frac{1/12}{E - \frac{U}{2} + \sqrt{3}|B|} + \frac{1/8}{E + \frac{U}{2} - |B|} + \frac{1/8}{E - \frac{U}{2} - |B|} + \frac{1/8}{E + \frac{U}{2} + |B|} + \frac{1/8}{E - \frac{U}{2} + |B|} + \\ \left. + \frac{1/24}{E + \frac{U}{2} - 3|B|} + \frac{1/24}{E - \frac{U}{2} - 3|B|} + \frac{1/24}{E + \frac{U}{2} + 3|B|} + \frac{1/24}{E - \frac{U}{2} + 3|B|} \right\}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $a = B(1 + \sqrt{2})$ ,  $b = B(1 - \sqrt{2})$ . Полюса функции Грина (1) определяют энергетический спектр наносистемы, числители характеризуют энергетические «емкости» — показывают вероятность нахождения электрона на соответствующем уровне энергии. Воспользовавшись флуктуационно-диссипационной теоремой [16], из (1) можно получить термодинамические средние. Вычисление всех корреляционных функций, описывающих поведение наносистемы, позволяет определить энергию основного состояния данной системы, среднее значение которой (при

температуре  $T \rightarrow 0$  мы получим энергию основного состояния), приходящейся на один узел, будет выражаться следующим образом [17]:

$$E_0 = 4B \langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle + 2B \langle a_{1\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle + U \langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle. \quad (2)$$

Корреляционные функции  $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$  ( $i \neq j$ ) описывают перескоки электрона с узла  $j$  на узел  $i$ . Корреляционные функции, входящие в выражение (2) энергии основного состояния, имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle = \frac{1}{32} \left\{ (2 + \sqrt{2}) \left[ f^+ \left( -\frac{U}{2} + a \right) - f^+ \left( -\frac{U}{2} - a \right) \right] + (2 - \sqrt{2}) \left[ f^+ \left( -\frac{U}{2} + b \right) - f^+ \left( -\frac{U}{2} - b \right) \right] \right\} + \\ + \frac{|B|}{24B} \left\{ \sqrt{3} \left[ f^+ \left( -\frac{U}{2} + \sqrt{3}|B| \right) - f^+ \left( -\frac{U}{2} - \sqrt{3}|B| \right) \right] + f^+ \left( -\frac{U}{2} + 3|B| \right) - f^+ \left( -\frac{U}{2} - 3|B| \right) \right\}, \\ \langle a_{1\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle = \frac{\sqrt{2}}{16} \left\{ f^+ \left( -\frac{U}{2} + a \right) - f^+ \left( -\frac{U}{2} - a \right) + f^+ \left( -\frac{U}{2} - b \right) - f^+ \left( -\frac{U}{2} + b \right) \right\} + \\ + \frac{|B|}{24B} \left\{ 3 \left[ f^+ \left( -\frac{U}{2} + |B| \right) - f^+ \left( -\frac{U}{2} - |B| \right) \right] + f^+ \left( -\frac{U}{2} + 3|B| \right) - f^+ \left( -\frac{U}{2} - 3|B| \right) \right\}. \\ \langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle = \langle n_{1\uparrow} \rangle \langle n_{1\downarrow} \rangle - \frac{1}{4} F^2, \\ F = \frac{1}{4} \left\{ f^+ \left( -\frac{U}{2} + a \right) - f^+ \left( \frac{U}{2} + a \right) + f^+ \left( -\frac{U}{2} + b \right) - f^+ \left( \frac{U}{2} + b \right) + f^+ \left( -\frac{U}{2} + |B| \right) - f^+ \left( \frac{U}{2} + |B| \right) \right\} + \\ + \frac{1}{12} \left\{ 2 \left[ f^+ \left( -\frac{U}{2} + \sqrt{3}|B| \right) - f^+ \left( \frac{U}{2} + \sqrt{3}|B| \right) \right] + f^+ \left( -\frac{U}{2} + 3|B| \right) - f^+ \left( \frac{U}{2} + 3|B| \right) \right\}. \end{aligned}$$

Корреляционная функция  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  описывает вероятность нахождения на одном узле системы двух электронов с разными проекциями спинов одновременно.

На рис. 2 приведена зависимость энергии основного состояния для систем  $C_{24}$  и структурных составляющих фуллерена (правильного шестиугольника и квадрата) от отношения величины кулоновского потенциала к интегралу переноса  $U/B$ . Анализ рисунка показывает, что при слабых и промежуточных корреляциях система  $C_{24}$  энергетически выгоднее по сравнению с изолированными гексагоном и квадратом. Энергетическая выгодность системы определяется интенсивностью перехода электронов с узла на узел. Интенсивность перехода электрона описывается корреляционной функцией, например,  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ . На рис. 3 приведены зависимости этих функций от отношения  $U/B$ . Видно, что при слабых корреляциях переходы электронов от узла к узлу в случае фуллерена происходят интенсивнее, что, по-видимому, и приводит к тому, что энергия основного состояния фуллерена оказывается ниже энергий основного состояния изолированных структурных элементов рассматриваемого фуллерена. Надо отметить, что интенсивность перехода по шестигранным составляющим фуллерена ( $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle$ ) выше по сравнению с квадратным ( $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ ). Переходы по шестигранным составляющим фуллерена выше даже в рассмотрении с отдельным гексагоном, что увеличивает степень делокализации электронов в случае фуллерена.

Представляет интерес сравнение графиков 1 и 2 в случае фуллерена  $C_{24}$  на рис. 3. В области слабых корреляций переход электронов по сторонам квадрата ( $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ ) оказывается «замороженным» по сравнению с переходами по сторонам правильного шестиугольника — электрону вследствие большей делокализации в случае слабых корреляций в пределах гексагона энергетически выгоднее перейти на соседний узел по гексагону, чем по квадрату. В области  $U \sim B$  возможность переско-

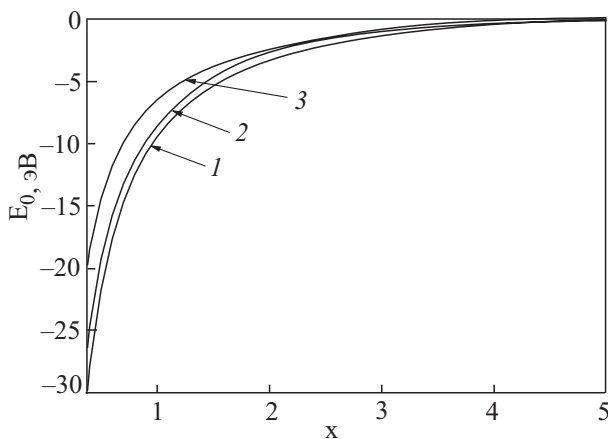


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния от отношения  $x = U/B$ : фуллерен  $C_{24}$  (1); гексагон (2); система из четырех атомов (3).

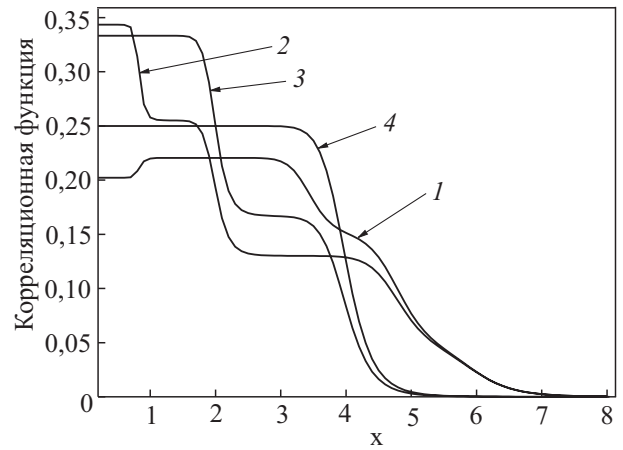


Рис. 3. Зависимость корреляционных функций от отношения  $x = U/B$  при  $\beta = 1/kT = 5$ :  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  (1) и  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle$  (2) для фуллерена  $C_{24}$ ;  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  для изолированного гексагона (3);  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  для изолированного квадрата (4).

ка электрона по сторонам гексагона резко уменьшается, что приводит к тому, что вероятность перескока на узлы квадрата возрастает. В области промежуточных корреляций возможность перескока по узлам квадрата оказывается больше по сравнению с перескоками по узлам шестиугольника. В области сильной связи рассматриваемые корреляционные функции одинаково стремятся к нулю. Следует отметить, что корреляционные функции  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  и  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle$  для фуллерена оказываются выше, чем аналогичные корреляционные функции для изолированных гексагона и квадрата, степень коллективизации электронов в случае фуллерена больше, что и определяет его механическую, физическую и химическую устойчивость.

На рис. 4 приведена зависимость корреляционных функций, описывающих распределение «двоек», т.е. вероятность обнаружения на узле двух электронов с противоположно направленными спинами. Видно, что при сильных корреляциях вероятность обнаруже-

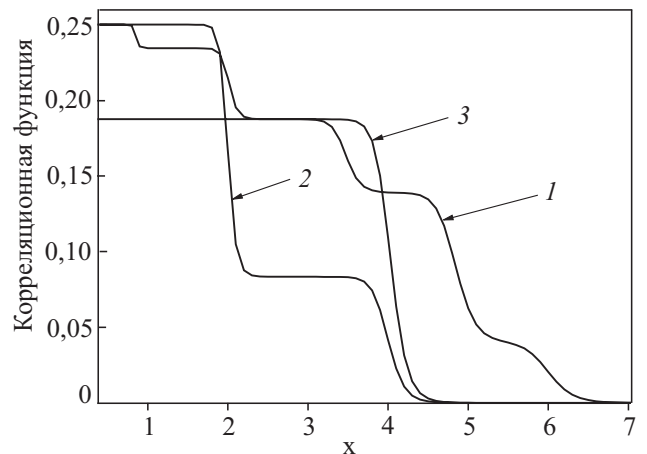


Рис. 4. Зависимость корреляционной функции  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  от отношения  $x = U/B$  при  $\beta = 1/kT = 10$ : фуллерен  $C_{24}$  (1); гексагон (2); квадрат (3).

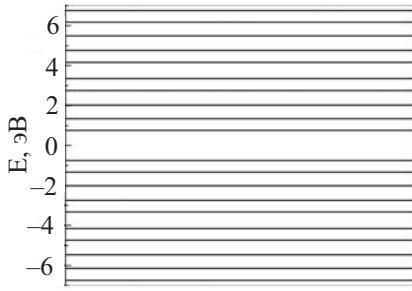


Рис. 5. Энергетический спектр фуллерена  $C_{24}^+$  при значениях параметров:  $B = 1, U = 7,5$ .

ния двоек фуллерена конечна по сравнению с изолированными квадратом и гексагоном.

Для сравнения наших результатов с экспериментальными данными вычислим ширину запрещенной энергетической зоны и энергию ионизации, являющиеся фундаментальными характеристиками наносистемы.

На рис. 5 приведен энергетический спектр модели фуллерена  $C_{24}$ . На рисунке видно, что при выбранных значениях параметров верхняя и нижняя хаббардовские подзоны отделены энергетической щелью. Величина запрещенной зоны равна 1,5 эВ, что находится в согласии с экспериментальными данными. Для фуллеренов величина запрещенной зоны лежит в интервале 1,2–1,9 эВ [18]. Отметим, что числители функции Грина (1) свидетельствуют об однократном, двукратном и трехкратном вырождениях соответствующих состояний.

На рис. 6 и 7 представлены зависимости корреляционных функций  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  и  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle$  фуллерена  $C_{24}$  для случаев, когда на 24 узла приходится 24 электрона и для случая 23 электронов (ион  $C_{24}^+$ ). Следует отметить, что в случае  $C_{24}^+$  функции лежат выше при сильных корреляциях (что говорит о более сильной степени делокализации электрона). По-видимому, узел без электрона в случае иона  $C_{24}^+$  будет увеличивать вероятность перескока электрона на этот узел, тем самым

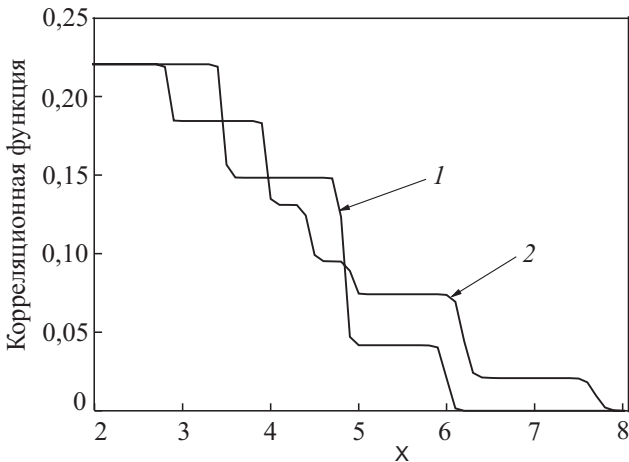


Рис. 6. Зависимость корреляционных функций  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  от отношения  $x = U/B$  при  $\beta = 1/kT = 50$  для фуллерена  $C_{24}$ : 24 электрона в системе (1); 23 электрона в системе (2).

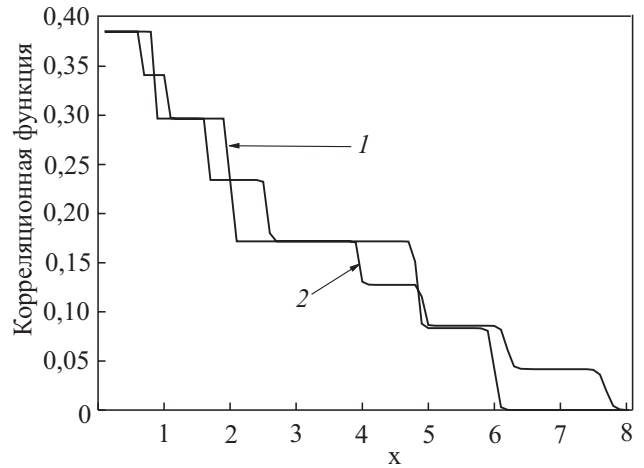


Рис. 7. Зависимость корреляционных функций  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{5\uparrow} \rangle$  от отношения  $U/B = x$  при  $\beta = 1/kT = 50$  для фуллерена  $C_{24}$ : 24 электрона в системе (1); 23 электрона в системе (2).

увеличивая степень коллективизации электрона. Большая степень коллективизации понижает энергию основного состояния, что хорошо согласуется с данными на рис. 8. Энергию ионизации определим, как разность энергий наносистем, содержащих 24 и 23 электрона. Для нашего случая ( $U/B = 7$ ) энергия ионизации равна  $(4 \pm 0,4)$  эВ.

Таким образом, приближение статических флуктуаций позволяет изучать свойства фуллерена  $C_{24}$  в модели Хаббарда. Анализ результатов показал, что фуллерен обладает большей устойчивостью по сравнению с отдельными структурными составляющими (гексагоном и квадратом). Степень делокализации электронов в случае фуллерена выше. Интерес представляет то, что при слабых корреляциях переход электронов по ребру квадрат–гексагон в фуллерене  $C_{24}$  оказывается «замороженным», тогда как в этой же области переход электронов по ребру гексагон–гексагон оказывается наиболее интенсивным. Анализ энергетического спектра показал,

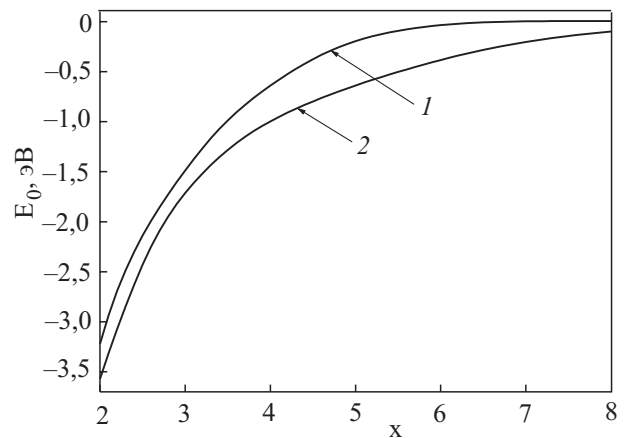


Рис. 8. Зависимость энергии основного состояния от отношения  $U/B = x$ : фуллерен  $C_{24}$  (1); ионизированный фуллерен  $C_{24}^+$  (2).

что при выбранных значениях параметров нижняя и верхняя хаббардовские подзоны отделены энергетической щелью.

Предварительные результаты были представлены на Всероссийской конференции «Структура и динамика молекулярных систем» (2006) [19].

Авторы выражают благодарность Р.Р. Нигматуллину, В.Г. Шаврову за внимание к работе, а также участникам конференции «Структура и динамика молекулярных систем» (2006) за внимание к работе и активное обсуждение ее результатов.

1. В.И. Соколов, И.В. Станкевич, *Успехи химии* **62**, 455 (1993).
2. H.Hirsch, *Chemistry of Fullerenes*, Thieme Verlag Publ. Stuttgart (1994), ch. 5.
3. В.Л. Бекенев, В.В. Покропивный, *ФТТ* **48**, 1324 (2006).
4. H. Hasegawa, *Physica A* **1**, 273 (2005).
5. H. Hasegawa, *Preprint cond-mat/0506553* (2005).
6. S.A. Cannas, A.C. Magalhaes, and F.A. Tamarit, *Phys. Rev.* **B17**, 11521 (2000).
7. С.В. Козырев, Д.В. Лещев, И.В. Шаклеина, *ФТТ* **43**, 926 (2001).
8. В.В. Лоскутов, Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин, *ФНТ* **22**, 282 (1997).
9. Г.И. Миронов, *ФТТ* **44**, 209 (2002).
10. Г.И. Миронов, в сб.: *Структура и динамика молекулярных систем*, Казань (2003), т. 10, с. 323.
11. Г.И. Миронов, в сб.: *Актуальные проблемы физики конденсированных сред*, Казань (2003), с. 235.
12. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A1365**, 238 (1963).
13. T. Oku, M. Kuno, H. Kitahara, and I. Navita. *Int. J. Inorg. Mater.* **3**, 597 (2001).
14. Г.И. Миронов, *ФТТ* **47**, 1075 (2005).

15. Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин, *Тез. докл. XXX Междунар. зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка-2004»*, Екатеринбург (2004), с. 190.
16. С.В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1975).
17. E.H. Lieb and F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
18. А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов, *УФН* **165**, 977 (1995).
19. Э.Д. Изергин, Г.И. Миронов, в сб.: *Структура и динамика молекулярных систем*, Уфа (2006), с. 104.

## Fullerene C<sub>24</sub> in terms of the Hubbard model

E.D. Izergin and G.I. Mironov

Quantum system, consisting of 24 atoms, fullerene C<sub>24</sub>, is examined in the Hubbard model. Anticommutator Green functions, correlation functions, energy spectrum, ground-state energy of fullerene C<sub>24</sub> and of an ion of fullerene C<sub>24</sub><sup>+</sup> are calculated within this model. The results were analyzed and C<sub>24</sub> was compared with its structural components. Being fundamental characteristics of nano-systems, energy gap width and ionization energy were calculated in order to compare the results with experimental data.

PACS: 71.10.Ay Fermi-liquid theory and other phenomenological models;  
71.10.Hf Non-Fermi-liquid ground states, electron phase diagrams and phase transitions in model systems.

Keywords: Hubbard model, fullerene, ionization energy, Green functions, ground-state energy, energy spectrum.