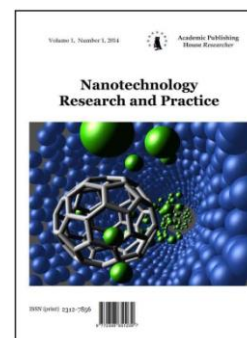


Copyright © 2014 by Academic Publishing House *Researcher*

Published in the Russian Federation  
Nanotechnology Research and Practice  
Has been issued since 2014.  
ISSN: 2312-7856  
Vol. 2, No. 2, pp. 68-72, 2014

DOI: 10.13187/ejnr.2014.2.68

[www.ejournal13.com](http://www.ejournal13.com)

UDC 535.301.2

### Electronic Structure Of $C_{76}$ Fullerite

Elena L. Busygina

Kamsky Institute of Humanities and Engineering Technology, Russian Federation  
12a, B. Sivkova str., Izhevsk, 426003  
E-mail: bel28@rambler.ru

#### Abstract

Full sets of the fundamental optical functions of the fullerite  $C_{76}$  films were determined in the 0–40 eV energy range. The calculations were performed from the experimental electron energy loss spectra. The results of calculations were compared with known theoretical dates. The dielectric function spectra were decomposed into elementary components. The main parameters of components were found (the energy values of the maxima, the relative area and half-widths of the band, and oscillator strengths).

**Keywords:** fullerite; film; electronic structure; integral specter; decomposition.

#### Введение

В последние годы, начиная с 1985 г., появилось много публикаций, посвященных исследованию таких углеродных структур как фуллерены, причем основная масса работ посвящена двум наиболее стабильным модификациям –  $C_{60}$  и  $C_{70}$  [1–3], а высшие фуллерены рассматриваются исследователями значительно реже [4]. Более низкой симметрией по сравнению с  $C_{70}$  обладает молекула фуллерена  $C_{76}$ . Ее поверхность состоит из 12 пятиугольников и 28 шестиугольников. Размеры молекулы  $C_{76}$  вдоль направлений ее осей симметрии составляют 0.879, 0.764 и 0.668 нм [5]. При комнатной температуре молекулы  $C_{76}$  образуют гранецентрированную кубическую решетку с постоянной решетки, равной  $1.53 \pm 0.01$  нм [6]. Электронная структура и фундаментальные оптические функции определяют физические свойства, а, следовательно, и принципиальные возможности прикладного применения конденсированного вещества. Поэтому принципиально важной задачей является нахождение полного комплекса оптических функций в наиболее широком энергетическом интервале на основе измеренных экспериментальных спектров.

Для пленок фуллерита  $C_{76}$  известны две работы, где приводятся экспериментальные кривые функции объемных потерь энергии электронов  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  в интервалах 0–35 [6] и 0–40 эВ [7]. Причем оба спектра дают интегральную кривую как сумму всех переходов. Из-за сильного перекрытия многие из них могут структурно не наблюдаться. Поэтому другой фундаментальной задачей спектроскопии является установление наиболее полного набора оптических переходов и их параметров: энергии максимума  $E$ , полуширины  $H$ , вероятности перехода  $f$ , относительной площади полос  $S/S_{\text{макс}}$ .

### Результаты расчетов

В работе рассчитаны полные комплексы фундаментальных оптических функций поликристаллических пленок  $C_{76}$ , интегральные спектры диэлектрической проницаемости разложены на элементарные компоненты, для каждой из которых определены основные параметры ( $E$ ,  $H$ ,  $f$ ,  $S/S_{\text{макс}}$ ). Расчеты выполнены по известным методикам [8, 9] на основе двух имеющихся экспериментальных спектров объемных характеристических потерь энергии электронов [6, 7]. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися теоретическими данными [10, 11]. В работе представлены только результаты разложений интегральных спектров  $\varepsilon_2$  и  $\varepsilon_1$  на отдельные вклады.

Для решения задачи разложения интегральных спектров  $\varepsilon_2$  в работе был применен ранее многократно апробированный метод объединенных диаграмм Арганда [12–16], который позволяет без подгоночных параметров однозначно разложить кривую  $\varepsilon_2$  на минимальный набор лоренцевских осцилляторов, а также определить их основные параметры. Результаты разложения полученных в работе спектров  $\varepsilon_2$  пленок  $C_{76}$  представлены в *таблице 1*.

Всего в интервале 0–40 эВ выявлено 15 полос вместо двух максимумов и трех ступеней интегральных кривых. Поскольку интегральные кривые мнимой части диэлектрической проницаемости двух пленок отличаются друг от друга и по расположению, и по интенсивности основных особенностей, то соответствующие различия наблюдаются также в количестве и расположении выделенных нами осцилляторов, причем положения максимумов определены с высокой точностью:  $\pm 0.01$  для самых интенсивных и  $\pm(0.01-0.04)$  эВ для остальных полос. Следует подчеркнуть, что в общепринятом приближении представления интегральной диэлектрической проницаемости как суммы вкладов отдельных лоренцевских осцилляторов метод диаграмм Арганда позволяет однозначно разложить интегральные спектры на минимальный набор полос, что обусловлено необходимостью одновременного учета спектров  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ . При этом в каждой полученной полосе могут быть суммированы близкие по энергии переходы различной природы, что позволяет произвести дальнейшее разложение выделенных полос на компоненты.

Таблица 1.

В таблице приведены энергии максимумов  $E$ , эВ, силы осцилляторов  $f$ , полуширины  $H$ , эВ и относительные площади  $S/S_{\text{макс}}$  полос спектров  $\varepsilon_2$  пленок фуллерита  $C_{76}$ , рассчитанные на основе экспериментальных спектров  $-\text{Im}\varepsilon^{-1}$  работ [6] (1), [7] (2)

№	$E$		$f$		$H$		$S/S_{\text{макс}}$	
	1	2	1	2	1	2	1	2
1	2.11	-	1.57	-	0.71	-	0.08	-
2	2.77	2.88	1.29	0.74	0.79	0.51	0.19	0.04
3	3.30	-	0.20	-	0.58	-	0.05	-
4	4.23	4.35	1.75	2.82	1.85	2.18	0.85	1.00
5	5.08	5.24	0.31	0.42	0.97	1.41	0.20	0.23
6	5.81		0.23		1.45		0.18	
7	10.37	9.92	0.67	0.23	3.04	1.54	0.56	0.15
8		11.52		0.13		1.48		0.10
9	12.65	12.80	0.36	0.79	2.31	3.71	0.39	0.70
10	15.19	15.36	0.77	0.56	4.67	3.84	1.00	0.67
11	17.73	18.88	0.13	0.42	2.64	5.48	0.20	0.62
12	20.47		0.23		3.96		0.38	
13	23.77	22.08	0.24	0.14	6.60	3.84	0.41	0.21
14		26.24		0.07		3.84		0.10
15	30.38	30.08	0.15	0.09	9.24	6.40	0.24	0.13

### Заключение

Теоретическое обсуждение конкретной природы установленных в работе групп переходов и их параметров для фуллерита  $C_{76}$  в области энергии 0–40 эВ затруднено из-за отсутствия соответствующих зонных расчетов электронной структуры молекул и кристаллов  $C_{76}$ . Но по аналогии с фуллеритами  $C_{60}$  и  $C_{70}$  заранее принимается, что для фуллерита  $C_{76}$ , по крайней мере, интенсивные полосы обусловлены экситонами малого радиуса типа френкелевских, обычно характерными для молекулярных кристаллов [9, 17]. Кроме того, необходимо подчеркнуть, что из-за более низкой симметрии молекулы  $C_{76}$  происходит расщепление вырожденных в  $C_{60}$  и  $C_{70}$  занятых и свободных молекулярных термов, которое усугубляется различными возмущениями, имеющими место в реальных кристаллах. Поэтому зоны  $C_{76}$  могут иметь весьма сложное тонкое строение. Для детального количественного анализа установленных в работе переходов фуллерита  $C_{76}$  и их параметров необходимы соответствующие теоретические расчеты. С другой стороны, использование установленной в работе новой информации о наиболее полном наборе компонент переходов и их параметрах ( $E$ ,  $f$ ,  $H$ ,  $S/S_{\text{макс}}$ ) поможет разработать необходимые модели электронной структуры фуллерита  $C_{76}$  в широкой области энергии собственного поглощения (0–40 эВ).

### Благодарности

Автор выражает благодарность Соболеву В.В. и Калугину А.И. за помощь в получении и обсуждении результатов.

### Примечания:

1. Kataura H., Endo Y., Achiba Y., Kikuchi K., Hanyu T., Yamaguchi Sh. // Dielectric Constants of  $C_{60}$  and  $C_{70}$  Thin Films. Japanese Journal of Applied Physics. 1995. V. 34. № 10B. P. L1467–L1484.
2. Iwasa Y., Yasuda T., Naito Y., Koda T. // Optical Reflection Spectra of Fullerite Single Crystals. Activity Report of Synchrotron Radiation Laboratory. The Institute for Solid State Physics. Tokyo. 1992. P. 32–33.
3. Gensterblum G. // Electronic structure and elementary excitations of  $C_{60}$  fullerene end fullerite. Journal of Electron Spectroscopy and Related Fenomena. 1996. V. 81. P. 89–223.
4. Kikuchi K., Nakahara N., Wakabayashi T., Honda M., Matsumiya H., Moriwaki T., Suzuki S., Shiromaru H., Saito K., Yamauchi K., Ikemoto I., Achiba Y. // Isolation and identification of fullerene family:  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{82}$ ,  $C_{84}$ ,  $C_{90}$  and  $C_{96}$ . Chemical Physics Letters. 1992. V. 188. № 3, 4. P. 177–180.
5. Елецкий А.В., Смирнов В.М. // Фуллерены и структуры углерода. Успехи физических наук. 1995. Т. 165. № 9. С. 977–1009.
6. Armbruster G.F., Romberg H.A., Schweiss P., Adelman P., Knupfer M., Fink J., Michel R.H., Rockenberger J., Hennrich F., Schreiber H., Kappes M.M. // Cristal and electronic structure of solid  $C_{76}$ . Zeitschrift für Physik B – Condensed Matter. 1994. V. 95. P. 469–474
7. Kusuo R., Terauchi M., Tanaka M., Saito Y., Achiba Y. // Electron-energy-loss spectroscopy study of  $C_{76}$ . Physical Review B. 1995. V. 51. № 16. P. 11018–11021.
8. Бусыгина Е.Л. Моделирование оптических свойств и электронной структуры фуллерита  $C_{60}$ . Ижевск: НОУ КИТ, 2010.
9. Соболев В.В., Немошкаленко В.В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура полупроводников. Киев: Наукова думка, 1988.
10. Harigaya K., Abe S. // Optical absorption spectra and geometric effects in higher fullerenes. Journal of Physics: Condensed Matter. 1996. V. 8. P. 8057–8066.
11. Saito S., Sawada S.I., Hamada N., Oshiyama A. // Electronic and geometric structures of fullerenes. Materials Science and Engineering. 1993. V. B19. P. 105–110.
12. Соболев В.В., Бусыгина Е.Л. // Электронная структура фуллерита  $C_{60}$ . Физика твердого тела. 1999. Т. 41. № 6. С. 1124–1125.
13. Соболев В.В., Бусыгина Е.Л. // Электронная структура пленок  $C_{60}$ . Журн. прикладной спектроскопии. 1999. Т. 66. № 2. С. 227–232.
14. Соболев В.В., Бусыгина Е.Л. // Оптические постоянные монокристалла фуллерита. Оптика и спектроскопия. 1999. Т. 86. № 3. С. 464–467.

15. Соболев В.В., Бусыгина Е.Л. // Электронная структура пленок C<sub>60</sub>. Физика и техника полупроводников. 1999. Т. 33. № 1. С. 31–35.
16. Бусыгина Е.Л. // Оптические функции монокристалла и пленок фуллерита C<sub>70</sub>. Новый университет. Серия «Технические науки». 2011. № 2. С. 8–17.
17. Jiang X., Gan Z. // Theory of the excitonic effect in solid C<sub>60</sub>. Physical Review B. 1995. V. 52. № 19. P. 14254–14262.

### References:

1. Kataura H., Endo Y., Achiba Y., Kikuchi K., Hanyu T., Yamaguchi Sh. // Dielectric Constants of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> Thin Films. Japanese Journal of Applied Physics. 1995. V. 34. № 10B. P. L1467–L1484.
2. Iwasa Y., Yasuda T., Naito Y., Koda T. // Optical Reflection Spectra of Fullerite Single Crystals. Activity Report of Synchrotron Radiation Laboratory. The Institute for Solid State Physics. Tokyo. 1992. P. 32–33.
3. Gensterblum G. // Electronic structure and elementary excitations of C<sub>60</sub> fullerene end fullerite. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 1996. V. 81. P. 89–223.
4. Kikuchi K., Nakahara N., Wakabayashi T., Honda M., Matsumiya H., Moriwaki T., Suzuki S., Shiromaru H., Saito K., Yamauchi K., Ikemoto I., Achiba Y. // Isolation and identification of fullerene family: C<sub>76</sub>, C<sub>78</sub>, C<sub>82</sub>, C<sub>84</sub>, C<sub>90</sub> and C<sub>96</sub>. Chemical Physics Letters. 1992. V. 188. № 3, 4. P. 177–180.
5. Eletsii A.V., Smirnov V.M. // Fullereny i struktury ugleroda. Uspekhi fizicheskikh nauk. 1995. T. 165. № 9. С. 977–1009.
6. Armbruster G.F., Romberg H.A., Schweiss P., Adelman P., Knupfer M., Fink J., Michel R.H., Rockenberger J., Hennrich F., Schreiber H., Kappes M.M. // Crystal and electronic structure of solid C<sub>76</sub>. Zeitschrift für Physik B – Condensed Matter. 1994. V. 95. P. 469–474
7. Kusuo R., Terauchi M., Tanaka M., Saito Y., Achiba Y. // Electron-energy-loss spectroscopy study of C<sub>76</sub>. Physical Review B. 1995. V. 51. № 16. P. 11018–11021.
8. Busygina E.L. Modelirovanie opticheskikh svoystv i elektronnoi struktury fullerita S<sub>60</sub>. Izhevsk: NOU KIT, 2010.
9. Sobolev V.V., Nemoshkalenko V.V. Metody vychislitel'noi fiziki v teorii tverdogo tela. Elektronnaya struktura poluprovodnikov. Kiev: Naukova dumka, 1988.
10. Harigaya K., Abe S. // Optical absorption spectra and geometric effects in higher fullerenes. Journal of Physics: Condensed Matter. 1996. V. 8. P. 8057–8066.
11. Saito S., Sawada S.I., Hamada N., Oshiyama A. // Electronic and geometric structures of fullerenes. Materials Science and Engineering. 1993. V. B19. P. 105–110.
12. Sobolev V.V., Busygina E.L. // Elektronnaya struktura fullerita S<sub>60</sub>. Fizika tverdogo tela. 1999. T. 41. № 6. S. 1124–1125.
13. Sobolev V.V., Busygina E.L. // Elektronnaya struktura plenok S<sub>60</sub>. Zhurn. prikladnoi spektroskopii. 1999. T. 66. № 2. S. 227–232.
14. Sobolev V.V., Busygina E.L. // Opticheskie postoyannye monokristalla fullerita. Optika i spektroskopiya. 1999. T. 86. № 3. S. 464–467.
15. Sobolev V.V., Busygina E.L. // Elektronnaya struktura plenok S<sub>60</sub>. Fizika i tekhnika poluprovodnikov. 1999. T. 33. № 1. S. 31–35.
16. Busygina E.L. // Opticheskie funktsii monokristalla i plenok fullerita S<sub>70</sub>. Novyi universitet. Seriya «Tekhnicheskie nauki». 2011. № 2. С. 8–17.
17. Jiang X., Gan Z. // Theory of the excitonic effect in solid C<sub>60</sub>. Physical Review B. 1995. V. 52. № 19. P. 14254–14262.

УДК 535.301.2

## Электронная структура фуллерита $C_{76}$

Елена Леонидовна Бусыгина

Камский институт гуманитарных и инженерных технологий, Российская Федерация  
426003, Ижевск, ул. В. Сивкова, д. 12а  
E-mail: bel28@rambler.ru

**Аннотация.** Рассчитаны полные комплексы фундаментальных оптических функций поликристаллических пленок фуллерита  $C_{76}$  в области энергий 0–40 эВ на основе известных спектров объемных характеристических потерь энергии электронов. Результаты расчетов сопоставлены с известными теоретическими данными. Интегральные спектры диэлектрической проницаемости разложены на элементарные компоненты. Определены основные параметры каждой компоненты (энергия максимума, относительная площадь и полуширина полосы, сила осциллятора).

**Ключевые слова:** фуллерит; пленка; электронная структура; интегральный спектр; разложение.