

*На правах рукописи*



Бусыгина Елена Леонидовна

## **Моделирование оптических свойств и электронной структуры фуллеритов**

Специальность 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Ижевск – 2005

Работа выполнена в ГОУ ВПО «Удмуртский государственный университет»

**Научный руководитель:** доктор физико-математических наук, профессор  
**Соболев Валентин Викторович**

**Официальные оппоненты:** доктор физико-математических наук  
**Вольф Георгий Валерьевич**

кандидат физико-математических наук, доцент  
**Лебедев Владимир Геннадьевич**

**Ведущая организация:** Институт прикладной механики  
УрО РАН, г. Ижевск

Защита состоится 10 июня 2005 года в 12<sup>00</sup> часов на заседании Диссертационного совета Д 212.275.03 при ГОУ ВПО «Удмуртский государственный университет» по адресу: 426034, г. Ижевск, ул. Университетская, д. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Удмуртского государственного университета.

Автореферат разослан “28” 04 2005 г.

**Ученый секретарь**  
**диссертационного совета**  
к.ф.-м.н. доцент



П.Н. Крылов

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** В настоящее время наука достигла больших успехов в области теоретических и экспериментальных исследований электронной структуры и собственных энергетических уровней в широкой области энергии фундаментального поглощения для многих твердых тел. Но проблема электронной структуры вещества чрезвычайно сложна. Поэтому, накопленный за годы исследований обширный научный материал является результатом работы нескольких больших групп научных коллективов, объединенных по роду исследований. Так, одна группа занята проблемами технологий получения вещества с заданными параметрами, другая проводит экспериментальные спектроскопические исследования, третья работает над теоретическими расчетами электронной структуры вещества. Это привело к большому разнообразию имеющихся в литературе экспериментальных и теоретических данных. В теоретических расчетах слабо учитываются опытные данные, что приводит к противоречиям порой даже в качественной трактовке природы оптических переходов, а экспериментальные сведения нередко сильно различаются как количественно, так и качественно. Это создает дополнительные трудности для интерпретации полученных результатов. Таким образом, назрела необходимость в приведении имеющихся данных для каждого исследуемого вещества к единому экспериментальному и теоретическому фундаменту, полученному на основе моделей физических процессов, происходящих в нем. Поэтому, в спектроскопии твердого тела возникло новое направление – моделирование полных комплексов оптических функций в широкой области энергии на основе отдельных экспериментальных и теоретических спектров.

Процессы взаимодействия света с веществом чрезвычайно сложны, что проявляется в большом наборе оптических функций, связанных между собой интегральными или более простыми аналитическими соотношениями. Известно, что наиболее полные и точные сведения об электронной структуре вещества заключены в комплексе из 12 фундаментальных оптических функций в широкой области энергии собственного поглощения [1]. Однако, экспериментально удается получить только одну или две из этих функций:  $R$ ,  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$ ,  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ ,  $n$  и  $k$ ,  $\mu$ , причем  $n$ ,  $k$ ,  $\mu$  измеряют лишь в области прозрачности и длинноволнового края собственного поглощения, а  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$  – в ограниченном интервале энергии 1 – 5 эВ. Поэтому, особую актуальность приобретает расчет по известным спектрам всего комплекса оптических функций.

Другой, не менее важной задачей в моделировании оптических функций твердых тел является установление наиболее полного набора оптических переходов и их параметров. Поскольку оптические функции представляют собой интегральные кривые, то есть являются результатом наложения вкладов всех переходов в электронной структуре, то возникает проблема выделения полосы каждого отдельного перехода из суммарной кривой. А значит, необходимо разложение интегральных спектров  $\epsilon_2$  на элементарные составляющие и определение их параметров.

В настоящее время большой научный интерес вызывают конденсированные системы, состоящие из замкнутых молекул типа  $C_n$  ( $C_{60}$ ,  $C_{70}$  и др.), в которых все атомы углерода находятся на сферической или сфероидальной поверхности [2]. Для обозначения класса таких молекул используется название "фуллерены". Фуллерены в конденсированном состоянии называют «фуллеридами». Этот новый класс веществ завоевал огромную популярность у исследователей в связи со своим уникальным строением и перспективой возможности получения на основе фуллерита и родственных ему материалов твердых структур не только с заранее заданными известными, но и абсолютно новыми ранее неизвестными уникальными свойствами. Разработка в 1990 году технологии получения фуллеренов в макроскопических количествах открыла широкие возможности в области исследования  $C_n$ . А после открытия в 1991 году явления сверхпроводимости при  $T \leq 33$  К поликристаллического  $C_{60}$ , легированного атомами щелочных металлов [3], изучение фуллеритов вызвало особый интерес в современной физике.

Для монокристаллов и пленок  $C_n$  известно огромное количество экспериментальных и теоретических работ. Измерения были выполнены на различных установках, различными методами. В ряде работ были рассчитаны отдельные функции из полного комплекса при помощи разных методик, каждая из которых имеет свои достоинства и недостатки. Экспериментальные и расчетные результаты разных работ детально не сопоставлялись между собой. Кроме того, сравнение малого числа оптических функций не дает полного представления о проблеме электронной структуры и свойств фуллеритов. Для объективного освещения проблемы электронной структуры необходима информация, заключенная в полных комплексах оптических функций, полученных по единой методике для максимально возможного количества достоверных оптических экспериментальных данных.

Теоретические расчеты выполнялись с помощью разных методов: линейной комбинации атомных орбиталей (LCAO), модели свободных электронов (FEM), в квазичастичном приближении и др. Тем не менее, они часто находятся в противоречии с экспериментальными данными. Между результатами расчетов разных работ также наблюдаются заметные разногласия. Кроме того, следует отметить, что расчеты зонной структуры выполнены лишь в немногих работах для кристаллов  $C_{60}$  с решеткой ГЦК типа. Для  $C_n$  чаще всего рассчитываются молекулярные уровни энергии, представленные в терминах молекулярных орбиталей, что сильно затрудняет анализ возможной природы максимумов оптических спектров. Заметим, что для более полного и точного сравнения теоретических и экспериментальных сведений необходимо теоретически рассчитать хотя бы спектр  $\epsilon_2(E)$ . Это было сделано лишь для  $C_{60}$  в двух работах [4, 5] и без учета электронно-дырочного взаимодействия (экситонов), которое играет большую роль в формировании оптических свойств фуллеритов. В ряде работ были учтены экситонные эффекты при расчете спектров поглощения для кластера  $(C_{60})_4$  [6], конденсированного  $C_{60}$  [7]. Это привело к заметному улучшению согласия с экспериментальными данными. К сожалению, для высших фуллеритов таких расчетов произведено не было.

**Цель работы.** Целью настоящей работы является моделирование оптических функций и изучение на их основе оптических свойств и электронной структуры фуллеритов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$ , а также разложение функции мнимой части диэлектрической проницаемости на отдельные вклады.

В ходе выполнения работы проводились:

1. Расчеты полных комплексов оптических функций монокристаллов и пленок пяти фуллеритов по известным спектрам: для монокристалла  $C_{60}$  на основе трех экспериментальных спектров  $R(E)$  [8, 9],  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$  [10]; для пленок  $C_{60}$  на основе экспериментальных спектров  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$  [10, 11, 12],  $n(E)$  и  $k(E)$  [13],  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  [14, 15]; для монокристалла  $C_{70}$  на основе экспериментальных спектров  $R(E)$  [9] для двух поляризаций света, для пленок  $C_{70}$  на основе экспериментальных спектров  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$  [11, 16],  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  [15]; для пленок  $C_{76}$  на основе  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  [17, 18]; пленок  $C_{78}$  на основе  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  [19] для двух изомеров с  $C_{2v}$  симметрией; пленок  $C_{84}$  на основе  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  [20, 21].
2. Разложение интегральных спектров  $\epsilon_2$  каждого полученного комплекса на лоренцевские осцилляторы.
3. Исследование оптических свойств изучаемых фуллеритов на основе экспериментальных, смоделированных нами и известных теоретических оптических функций, выявление наиболее точных из них и сравнение спектров пяти фуллеритов.
4. Сопоставление полученных данных с известными теоретическими расчетами зон и уровней энергии.

**Положения, выносимые на защиту.**

1. Усовершенствованный метод определения спектров комплексов оптических функций пяти фуллеритов.
2. Беспараметрический метод разложения диэлектрической проницаемости на компоненты и определение их основных параметров.
3. Природа установленных компонент оптических полос изученных материалов по модели междузонных переходов и метастабильных экситонов.
4. Установленные различия между оптическими спектрами пяти фуллеритов, обусловленные изменением размеров и степени симметрии молекул  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$ .

**Научная новизна.** Впервые получены спектры полных комплексов фундаментальных оптических функций монокристаллов и пленок пяти фуллеритов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$  в широкой области энергии.

На основе сопоставления спектров разных фуллеритов установлены основные закономерности оптических функций и электронной структуры в зависимости от изменения степени симметрии молекул. Наиболее интенсивные максимумы интегральных спектров в области энергии до 8 эВ обусловлены экситонами Френкеля, что подтверждается теоретическими расчетами спектров поглощения  $C_{60}$ . Установлено уменьшение оптической величины  $E_g$  с уве-

личением размера молекулы, что согласуется с результатами теоретических расчетов  $E_g$  для молекул  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$ .

Интегральные спектры  $\epsilon_2$  пяти фуллеритов впервые разложены на элементарные составляющие с помощью объединенных диаграмм Арганда. Установлено большое количество полос, не проявляющихся в интегральных кривых. Определены параметры (энергии, полуширины, высоты, площади, силы осцилляторов) каждой компоненты. На основе теоретических расчетов зон и энергетических уровней установлена возможная природа полос фуллеритов  $C_{60}$  и  $C_{70}$ .

Получена принципиально новая основа для более глубокого обсуждения оптических свойств и построения теоретических моделей фуллеритов в широкой области энергии собственного поглощения.

**Научная и практическая ценность.** В настоящей работе получена новая информация об оптических свойствах и электронной структуре кристаллов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$  в широкой области энергии фундаментального поглощения, которая позволяет существенно более полно и детально обсуждать их оптические свойства и электронное строение и проводить новые, принципиально более точные теоретические расчеты. Результаты настоящей работы могут быть использованы для создания новых материалов на основе фуллеритов и их применения в различных областях науки и промышленности.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 15 работах, приведенных в конце автореферата, доложены и обсуждены на Международных конференциях: «Оптика экситонов в конденсированных средах» (С.-Петербург, ФТИ им. А.И.Иоффе, 1997), «Оптика полупроводников» (Ульяновск, УлГУ. 1998), «Физические процессы в неупорядоченных полупроводниковых структурах» (Ульяновск, УлГУ. 1999), на XIII Уральской международной зимней школе по физике полупроводников «Электронные свойства низкоразмерных полупроводниковых и сверхпроводниковых структур» (Екатеринбург, ИФМ РАН. 1999), на III (1997), IV (1999) и V (2001) Российских университетско-академических научно-практических конференциях (Ижевск, УдГУ), на IV Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники» (Санкт-Петербург, СПбГПУ. 2004).

**Личный вклад.** Автору принадлежит выполнение расчетов, систематизация результатов моделирования. Постановка задач, обоснование способов их решений, обсуждение и анализ результатов, полученных в данной работе, выполнены совместно с Соболевым В. В., Соболевым В. Вал. Положения, выносимые на защиту, и выводы работы сформулированы автором настоящей работы.

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано 6 статей в центральных отечественных и международных журналах, 4 труда международных конференций и 5 тезисов конференций.

**Объем и структура диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Изложена на 279 страницах, содержит 175 рисунков и 54 таблицы, оглавление, список цитируемой литературы из 102 наименований и список публикаций из 15 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность темы исследований, обозначены цели и задачи работы. Выделены основные результаты, показана их научная новизна, научная и практическая ценность, приводятся основные положения, выносимые на защиту, излагается структура диссертации.

**Первая глава** посвящена обзору литературных данных. Обсуждаются основные известные экспериментальные и теоретические сведения о фуллеритах. Описаны структурные особенности молекул, приведены некоторые физико-химические свойства. Указаны исходные данные для расчетов полных комплексов, условия их измерений. Рассматриваются результаты расчетов оптических функций в других работах. Сформулированы цели и задачи работы.

Во **второй главе** рассматриваются фундаментальные оптические функции, их взаимосвязи, методы их расчетов, а также методика разложения интегральных спектров  $\varepsilon_2$  на лоренцевские компоненты.

Связь между компонентами пар функций  $R$  и  $\theta$ ,  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ ,  $k$  и  $n$  не имеет аналитического вида и определяется интегральными соотношениями Крамерса – Кронига. Коэффициент отражения  $R$  и фаза отраженной волны  $\theta$  связаны соотношениями:

$$\theta(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\ln \sqrt{R}}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega = \theta_1(\omega_0) + \theta_2(\omega_0) + \theta_3(\omega_0), \quad (1)$$

$$\ln \sqrt{R}(\omega_0) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega \theta(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega, \quad (2)$$

где

$$\theta_1(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_0^{\omega_a} \frac{\ln \sqrt{R}}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega,$$

$$\theta_2(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_{\omega_a}^{\omega_b} \frac{\ln \sqrt{R}}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega,$$

$$\theta_3(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_{\omega_b}^{\infty} \frac{\ln \sqrt{R}}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega.$$

Измеренные значения отражения находятся в интервале энергии от  $E_a = \hbar\omega_a$  до  $E_b = \hbar\omega_b$ . Расчеты оптических функций зависят от определения  $\theta_1$  и  $\theta_3$ . Для оценки вклада каждого из трех слагаемых в  $\theta(\omega_0)$  проинтегрируем (1) по частям:

$$\theta(\omega_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{d \ln |R(\omega)|}{d\omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{1}{R} \frac{dR(\omega)}{d\omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| d\omega. \quad (3)$$

Из (3) видно, что основной вклад в  $\theta(\omega_0)$  дают окрестность энергии  $\omega_0$  и форма  $R(\omega)$  в этой области. Чем дальше от  $\hbar\omega_0$  рассматриваемые энергии, тем меньше их вклад: при  $\omega \gg \omega_0$  их вклад в  $\theta(\omega_0) \rightarrow 0$ . Чем шире полоса отражения в окрестности  $\omega_0$ , тем меньше значение  $\theta(\omega_0)$ . Благодаря этим особенностям вклад неизмеренных областей оказывается существенным только в сравнительно небольших интервалах энергии вблизи  $\omega_a$  и  $\omega_b$ .

Для вычисления  $\theta_1(\omega_0)$  в области  $E < E_b$  можно принять  $R = \text{const}$  (метод Ресслера). В области энергии  $(E_a, E_b)$  дискретные данные по отражению интерполируются кубическими сплайнами, после чего  $\theta_2(\omega_0)$  вычисляется аналитически. Для расчета фазы  $\theta_3(\omega_0)$  в области  $E > E_b$  нами применен метод Филлипа – Тафта:

$R(\omega) = R(\omega_b) \left( \frac{\omega}{\omega_b} \right)^{-p}$  [1]. Таким образом, получаем:

$$\theta_1(\omega_0) = \frac{\ln R(\omega_a)}{2\pi} \ln \left| \frac{\omega_a + \omega_0}{\omega_a - \omega_0} \right|, \quad (4)$$

$$\theta_3(\omega_0) = \frac{\ln R(\omega_b)}{2\pi} \ln \left| \frac{\omega_b + \omega_0}{\omega_b - \omega_0} \right| + \frac{p}{\pi} \sum_{i=0}^{\infty} \left( \frac{\omega_0}{\omega_b} \right)^{2i+1} \frac{1}{(2i+1)^2}. \quad (5)$$

Параметр  $p$  подбирают для каждого материала индивидуально. Для этого выбираются два значения энергии в интервале  $E < E_a$ , где коэффициент отражения меняется слабо, и предполагается, что в этих точках фаза известна:  $\theta_I = \theta(\omega_1)$  и  $\theta_{II} = \theta(\omega_2)$ . Тогда можно записать систему уравнений (1), из которой легко вычислить  $p$  и  $\ln R(\omega_a)$ . Затем с помощью известных соотношений рассчитываем остальные функции полного комплекса.

Для разложения интегральных спектров  $\epsilon_2$  на лоренцевские компоненты используются зависимости  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$ , которые для отдельного осциллятора имеют вид:

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} = 1 + \frac{\epsilon_{2\max} \Gamma \omega_0 (\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2}, \quad (6)$$

$$\epsilon_2 = \frac{4\pi N e^2}{m} \frac{\omega \Gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} = \frac{\epsilon_{2\max} \Gamma^2 \omega_0 \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2}, \quad (7)$$

где  $\hbar\omega_0$  – энергия, близкая к энергии максимума полосы осциллятора,  $\Gamma$  – его полуширина,  $\epsilon_{2\max}$  – высота.

Разложение выполняется на основе объединенной диаграммы Арганда, начиная с самой интенсивной полосы, последовательно вычитая найденные компоненты из интегральной кривой. Метод позволяет без подгоночных параметров определить минимальный набор осцилляторов, составляющих спектр  $\epsilon_2(E)$ , в том числе, структурно не проявляющихся в интегральной кривой.

Главы с третьей по пятую представляют результаты моделирования и обсуждений полученных комплексов оптических функций фуллеритов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,



$C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$ . Каждая глава содержит результаты расчетов полных комплексов, их обсуждение и сравнение с известными теоретическими спектрами, результаты разложений спектров  $\epsilon_2$ . Третья и четвертая главы содержат обсуждение полученных результатов на основе теоретических расчетов электроннои структуры и молекулярных термов. В пятой главе представлено обсуждение полученных результатов на основе сравнительного анализа для всех пяти фуллеритов.

В третьей главе рассмотрены спектры десяти полных комплексов оптических функций кристалла  $C_{60}$ , смоделированные нами на основе отдельных спектров восьми экспериментальных работ: для монокристалла  $C_{60}$  на основе спектров  $R(E)$  в интервалах 1.8 – 4.8 (№ 1) [8] и 1.5 – 35 эВ (№ 2) [9],  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$  в интервале 1.5 – 5 эВ (№ 3) [10]; для пленок  $C_{60}$  на основе экспериментальных спектров  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$  в интервалах 2.5 – 5 (№ 4) [10], 1.5 – 7 (№ 5) [11], 1.9 – 6.5 (№ 6), 4 – 9.5 эВ (№ 7) [12],  $n(E)$  и  $k(E)$  в интервале 1.5 – 5.4 эВ (№ 8) [13],  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  в интервалах 0 – 35 (№ 9) [14] и 0 – 40 эВ (№ 10) [15]. Анализ полученных результатов показал, что отражение работы [8] и эллипсометрические спектры  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$  [10] сильно занижены, а кривые  $n$  и  $k$  [13] занижены в области самой длинноволновой полосы и отличаются по расположению максимумов от наших расчетных данных. Оптические функции пленок, рассчитанные на основе  $-Im\epsilon^{-1}$  [15] и  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  [11] хорошо согласуются. Наиболее точными для монокристаллов в области 1.5 – 5 эВ являются кривые  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$  [10], а в остальной области до 35 эВ – кривая  $R(E)$  [9].

Впервые интегральные спектры  $\epsilon_2(E)$  десяти комплексов функций кристалла  $C_{60}$  разложены на элементарные составляющие. Получены параметры каждой компоненты: энергия, полуширина, площадь, сила осциллятора. Всего для фуллерита  $C_{60}$  получено 4 (№ 1), 18 (№ 2), 10 (№ 3) компонент для монокристаллов, 13 (№ 4), 9 (№ 5), 19 (№ 6, 7), 5 (№ 8), 13 (№ 9), 16 (№ 10) лоренцевских осцилляторов для пленок  $C_{60}$ . Из них не проявляются в интегральных кривых 6 (№ 2), 7 (№ 3) для монокристаллов, 8 (№ 4), 5 (№ 5), 12 (№ 6, 7), 2 (№ 8), 6 (№ 9), 7 (№ 10) осцилляторов для пленок  $C_{60}$ . Различия первичных экспериментальных спектров и рассчитанных по ним других оптических функций проявились и в результатах разложений  $\epsilon_2(E)$  на компоненты по количеству, энергетическому положению, силе осцилляторов.

Оптические спектры были подробно рассмотрены на основе известных теоретических расчетов спектров поглощения, мнимой части диэлектрической проницаемости и характеристических потерь энергии электронов. Теоретические спектры  $\epsilon_2(E)$  [5] и  $\mu$  [7], рассчитанные с учетом экситонных эффектов, хорошо согласуются с экспериментальными и смоделированными нами кривыми. Это подтверждает наиболее вероятную модель экситонной природы полос переходов в твердом  $C_{60}$ .

Энергии объемных плазмонов  $\pi$  - типа находятся в интервалах  $E_1 = (6.1 - 6.6) \pm (0.3 - 1.5)$  эВ (экспериментальные данные [14, 15, 22, 23, 24]),  $E_1 = (6.35 - 6.73) \pm 0.01$  эВ (наши расчетные данные), при  $E_1 = 6.7$  эВ (теоретические данные [4]), а для плазмонов  $(\pi+\sigma)$  - типа – в интервале  $E_2 = (24.8 - 28.0) \pm$

1.5 эВ (экспериментальные данные [14, 15, 22, 24]), при  $E_2 = 27.45 \pm 0.01$  эВ (наши данные). Наши расчетные энергии максимумов полос плазмонов обоих типов определены точнее, чем по потерям, выделенным из экспериментальных кривых, но выше них на  $\sim 0.2$  эВ ( $E_1$ ) и 1.5 эВ ( $E_2$ ). Остальные максимумы функции объемных потерь энергии электронов являются продольными аналогами поперечных полос переходов других оптических функций и обусловлены экситонами Френкеля и междузонными переходами. Теоретический спектр  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  [4] получен только в области 0 – 10 эВ и заметно отличается от экспериментальных и смоделированных нами спектров по положению пиков междузонных переходов, что свидетельствует о несовершенстве теоретических результатов [4].

Впервые полученные параметры компонент тонкой структуры спектров  $\epsilon_2$  в широкой области энергии собственного поглощения дают наиболее детальную информацию об энергиях и интенсивностях более десяти основных переходов. Полученные нами методом объединенных диаграмм Арганда наборы компонент и их параметры были сравнены с известными схемами воспроизведения спектров  $\epsilon_2$  наборами лоренцевских осцилляторов. Попытки воспроизведения интегральных кривых  $\epsilon_2$  пленок  $C_{60}$  в двух работах в интервалах энергии 1.5 – 14 [12] и 2 – 6 эВ [25] при помощи 20-ти и 10-ти лоренцевских осцилляторов с использованием 60-ти [12] и 41-го [25] подгоночных параметров демонстрирует большую их неоднозначность и некорректность. Анализ особенностей разных схем моделирования интегрального спектра  $\epsilon_2$  убедительно свидетельствует в пользу беспараметрического метода диаграмм Арганда и демонстрирует ненадежность результатов двух схем воспроизведения кривых  $\epsilon_2$ .

Установленные нами компоненты переходов были сопоставлены с известными теоретическими расчетами зон и переходов в обозначениях молекулярных термов. Теоретические расчеты зон методом OLCAO [26] показали, что ширина зон обычно не превышает 0.4 эВ, зоны часто плоские и имеют высокую степень вырождения. Поэтому большинство интенсивных переходов происходит не столько в экстремумах зон, сколько на плоских параллельных участках. В реальных кристаллах вырождение зон частично снимается и зоны имеют сложное тонкое строение. Все это дает общее удовлетворительное объяснение весьма сложной структуре установленного спектра компонент переходов фуллерита  $C_{60}$ . Для детального количественного анализа установленных нами переходов фуллерита и их параметров необходимы соответствующие более совершенные теоретические расчеты. Следует отметить, что переходы до 8 эВ, а также большинство остальных максимумов интегральных спектров  $R(E)$ ,  $\epsilon_2(E)$ ,  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  и выделенные нами компоненты, вероятно, имеют экситонную природу в модели экситонов малого радиуса, как это установлено для молекулярных кристаллов. Поэтому в общем случае сосуществования метастабильных экситонов и междузонных переходов детальное и однозначное сопоставление экспериментальных спектров с теоретическими расчетами зон затруднено.

В четвертой главе рассмотрены спектры полных комплексов оптических функций кристалла  $C_{70}$ , смоделированные нами на основе отдельных спектров четырех экспериментальных работ: для монокристалла  $C_{70}$  на основе спектров  $R(E)$  в интервале 1.5 – 28 эВ (№ 1, 2) для двух поляризаций  $E \parallel c$ ,  $E \perp c$ , где  $c$  – короткая ось молекулы, [9]; для пленок  $C_{70}$  на основе спектров  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$  в интервалах 1.5 – 5.3 (№ 3) [16], 1.5 – 7 эВ (№ 4) [11],  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  в интервале 0 – 40 эВ (№ 5) [15]. Анализ установил, что отражение монокристалла  $C_{70}$  работы [9] сильно анизотропно. Кривая отражения при  $E \parallel c$  ( $E \perp c$ ) менее интенсивна, чем полученные нами спектры отражения пленок, в области энергии свыше  $\sim 2.5$  (3) эВ, а длинноволновые структуры для  $E \parallel c$ , наоборот, обладают более высокими численными значениями. Спектр  $\epsilon_2$  пленки  $C_{70}$  [16] занижен. Экспериментальная кривая  $-Im\epsilon^{-1}$  [15] имеет заниженную интенсивность и отличается по расположению максимумов и ступеней от наших расчетных данных. Наиболее качественными являются спектры отражения монокристалла  $C_{70}$  [9], среди пленок – спектры  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  работы [11]. Наличие в экспериментальных спектрах особенностей, характерных той или иной поляризации, указывает на возможную природу переходов или ориентационное упорядочение молекул  $C_{70}$  в пленках фуллерита.

Теоретический спектр поглощения  $\mu$  [27], рассчитанный с учетом кулоновского взаимодействия и решеточных флуктуаций, согласуется с нашими расчетными кривыми и указывает на возможную причину уширения пиков спектра поглощения.

Энергии объемных плазмонов  $\pi$  - типа находятся при  $E_1 = 6.6 \pm 1.5$  эВ (экспериментальные данные [15]) и в интервале  $E_1 = (4.93 - 6.27) \pm 0.01$  эВ (наши расчетные данные пяти вариантов), а для плазмонов  $(\pi+\sigma)$  - типа – при  $E_2 = 25.0 \pm 1.5$  эВ (экспериментальные данные [15]) и в интервале  $E_2 = (22.8 - 22.9) \pm 0.1$  эВ (наши данные пяти вариантов). Наши расчетные энергии максимумов полос плазмонов обоих типов определены точнее, чем по потерям, выделенным из экспериментальных кривых, но расположены ниже на  $\sim 1.0$  эВ ( $E_1$ ) и 2.2 эВ ( $E_2$ ). Остальные максимумы и ступени функции объемных потерь энергии электронов являются продольными аналогами поперечных полос переходов других оптических функций и обусловлены экситонами и междузонными переходами.

Впервые интегральные спектры  $\epsilon_2(E)$  пяти комплексов функций  $C_{70}$  разложены на элементарные составляющие. Получены параметры каждой компоненты: энергия, полуширина и площадь полосы, сила осциллятора перехода. Всего для пяти разложений  $\epsilon_2(E)$  фуллерита  $C_{70}$  получено 45 (№ 1), 23 (№ 2) для монокристалла, 12 (№ 3), 14 (№ 4), 15 (№ 5) лоренцевских осцилляторов для пленок  $C_{70}$ . Из них не проявляются в интегральных кривых 28 (№ 1), 9 (№ 2) для монокристалла, 8 (№ 3), 10 (№ 4), 7 (№ 5) осцилляторов для пленок  $C_{70}$ . Различия первичных экспериментальных спектров и рассчитанных по ним других оптических функций проявились и в результатах разложений  $\epsilon_2(E)$  на компоненты по количеству, энергетическому положению, силе осцилляторов.

Впервые полученные параметры компонент тонкой структуры спектров  $\epsilon_2$  в широкой области энергии собственного поглощения дают наиболее детальную информацию об энергиях и интенсивностях основных переходов. Полученные нами методом объединенных диаграмм Арганда наборы компонент и их параметры были сравнены с известной схемой воспроизведения спектра  $\epsilon_2$  набором лоренцевских осцилляторов в интервале энергии 1.5 – 5.3 при помощи 6-ти лоренцевских осцилляторов с использованием 18-ти подгоночных параметров [16]. Анализ особенностей разных схем моделирования интегрального спектра  $\epsilon_2$  убедительно свидетельствует в пользу беспараметрического метода диаграмм Арганда и демонстрирует ненадежность результатов схемы воспроизведения кривой  $\epsilon_2$  работы [16].

Установленные нами компоненты переходов были сопоставлены с известными теоретическими расчетами зон и переходов в обозначениях молекулярных термов. Теоретические расчеты зон, выполненные методом сильной связи [28], показали, что край поглощения для поляризации вдоль короткой оси молекулы  $C_{70}$  расположен на 0.3 эВ ниже по энергии, чем край поглощения для поляризации вдоль ее длинной оси. Вычисленная ширина запрещенной зоны имеет значение 1.7 эВ, а переходы между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости запрещены. Большинство интенсивных переходов происходит не столько между экстремумами зон, сколько на их плоских параллельных участках. В реальных кристаллах прямая щель становится частично разрешенной, вырождение зон частично снимается, и зоны имеют сложное тонкое строение. Все это дает общее удовлетворительное объяснение весьма сложной структуре полученного нами спектра компонент переходов фуллерита  $C_{70}$ . Отметим, что переходы до 7 эВ, а также большинство остальных максимумов интегральных спектров  $\epsilon_2(E)$  и выделенные нами компоненты, вероятно, имеют экситонную природу в модели экситонов малого радиуса, как это установлено для молекулярных кристаллов. Поэтому в общем случае сосуществования метастабильных экситонов и междузонных переходов детальное и однозначное сопоставление экспериментальных спектров с теоретическими расчетами зон затруднено.

В пятой главе рассмотрены полные комплексы оптических функций кристаллических пленок  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$ . Они смоделированы нами на основе экспериментальных спектров характеристических потерь энергии электронов: для  $C_{76}$  в интервалах 0 – 35 (№ 1) [17] и 0 – 40 эВ (№ 2) [18]; для  $C_{78}$  в интервале 0 – 45 эВ (№ 3, 4) для двух изомеров молекулы с симметрией  $C_{2v}$  и  $C'_{2v}$  [19], для  $C_{84}$  в интервалах 0 – 35 (№ 5) [20] и 0 – 40 эВ (№ 6) [21]. Рассчитанные полные комплексы оптических функций фуллеритов  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$  наглядно свидетельствуют о расположении их структур и их численных значениях.

Прямое сопоставление результатов расчетов двух комплексов для каждого высшего фуллерита позволило выявить наиболее достоверные оптические спектры. Определены энергии интенсивных максимумов и ступеней. Установленные заметные различия между экспериментальными спектрами функций  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$ , видимо, связаны с качеством образцов. Спектр пленки  $C_{76}$  [17] обладает

более выраженной тонкой структурой, но имеет заниженные значения в области плазменной полосы функции потерь. Спектры  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  двух пленок  $C_{78}$  работы [19] хорошо согласуются по энергетическому положению максимумов и ступеней, но кривая с  $C'_{2v}$  симметрией молекул обладает более четко выраженными основными максимумами и ступенями и более интенсивна в областях их расположения. Интенсивность спектра  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  пленки  $C_{84}$  [21] значительно выше, чем спектра  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  [20] в области основной плазменной полосы, но ниже в области длинноволновой полосы функции потерь. Оба спектра обладают более богатой тонкой структурой в областях более высокой интенсивности.

Энергии объемных плазмонов  $\pi$  - типа находятся при  $\sim 6.4$  эВ для  $C_{76}$  [17, 18],  $\sim 6.25$  эВ для  $C_{78}$  [19],  $\sim 6.2$  и  $6.1$  эВ для  $C_{84}$  [20] и [21], а для плазмонов  $(\pi+\sigma)$  - типа – при  $\sim 25.1$  и  $25.0$  эВ для  $C_{76}$  [17] и [18],  $\sim 25.3$  ( $C'_{2v}$ ) и  $25.4$  эВ ( $C_{2v}$ ) для  $C_{78}$  [19],  $\sim 24.6$  и  $25.5$  эВ для  $C_{84}$  [20] и [21]. Остальные максимумы и ступени функции объемных потерь энергии электронов являются продольными аналогами поперечных полос переходов других оптических функций и обусловлены экситонами и междузонными переходами.

Впервые интегральные спектры  $\epsilon_2(E)$  шести комплексов функций высших фуллеритов разложены на элементарные составляющие. Получены параметры каждой компоненты: энергия, полуширина и площадь полосы, сила осциллятора перехода. Всего получено 13 (№ 1), 11 (№ 2) для пленок  $C_{76}$ , 10 (№ 3), 11 (№ 4) для пленок  $C_{78}$ , 10 (№ 5), 11 (№ 6) для пленок  $C_{84}$  лоренцевских осцилляторов. Из них не проявляются в интегральных кривых 4 (№ 1), 7 (№ 2) для пленок  $C_{76}$ , 5 (№ 3), 6 (№ 4) для пленок  $C_{78}$ , 3 (№ 5), 6 (№ 6) для пленок  $C_{84}$  осцилляторов. Различия первичных экспериментальных спектров и рассчитанных по ним других оптических функций для каждого фуллерита проявились и в результатах разложений  $\epsilon_2(E)$  на компоненты по количеству, энергетическому положению, силе осцилляторов.

Впервые проведено сопоставление полученных нами обширных данных для исследуемых пяти фуллеритов. Прямое сопоставление результатов расчетов шести полных комплексов оптических функций на основе экспериментальных данных  $R(E)$  работы [9] в интервале  $1.5 - 35$  эВ для монокристалла  $C_{60}$  и  $1.5 - 28$  эВ для монокристалла  $C_{70}$  для двух поляризаций света, спектров  $-\text{Im}\epsilon^{-1}$  в интервалах  $0 - 35$  [17],  $0 - 45$  [19] и  $0 - 40$  эВ [20] соответственно для пленок  $C_{76}$ ,  $C_{78}$  и  $C_{84}$  позволило выявить основные особенности, сходства и отличия оптических спектров различных пяти фуллеритов. Для каждого фуллерита определены энергии интенсивных максимумов и ступеней. Установлены значительные различия между экспериментальными и смоделированными нами спектрами для каждой функции. Одна из главных причин этих различий, вероятно, связана с разницей в степени симметрии молекул, составляющих соответствующие фуллериты, а также с различиями в методиках измерений и качестве образцов.

Различия первичных экспериментальных спектров  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$  и  $C_{84}$  проявились в результатах разложений  $\epsilon_2(E)$  на компоненты. Основные различия наблюдаются в количестве и энергетическом положении выделенных

полос. Шесть из них присутствуют во всех пяти наборах осцилляторов. Для энергий ниже 7 эВ полосы  $C_{84}$  сдвинуты в сторону меньших, а полосы  $C_{70}$  в сторону больших энергий относительно аналогичных осцилляторов остальных фуллеритов. Для энергий больше 8 эВ в сторону меньших энергий сдвинуты осцилляторы монокристалла  $C_{60}$ , а большинство полос  $C_{76}$  сдвинуты в сторону больших энергий. При этом наиболее близки по энергии аналогичные осцилляторы пленок  $C_{76}$  и  $C_{78}$ . Для  $C_{60}$  и  $C_{70}$  установлена вероятная природа многих компонент спектров  $\epsilon_2$ . Это предоставляет возможность на качественно ином уровне более детально анализировать спектры возможных переходов и выполнять более строгие теоретические расчеты электронной структуры фуллеритов.

Установленные спектры комплексов оптических функций и параметры разложений  $\epsilon_2(E)$  на компоненты для фуллеритов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$  во всей широкой области энергии фундаментального поглощения позволяют наиболее детально и эффективно обсуждать оптические свойства и электронную структуру этих фуллеритов, оценивать корректность их оптических спектров, а также предоставляют принципиально новую основу для выполнения корректных теоретических расчетов.

### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Впервые рассчитаны спектры полных комплексов оптических функций монокристалла и пленок  $C_{60}$  на основе экспериментальных спектров  $R(E)$ ,  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$ ,  $n(E)$  и  $k(E)$ ,  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  (10 вариантов), для монокристалла и пленок  $C_{70}$  на основе экспериментальных спектров  $R(E)$  для двух поляризаций света,  $\epsilon_1(E)$  и  $\epsilon_2(E)$ ,  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  (5 вариантов) и по 2 варианта для пленок  $C_{76}$ ,  $C_{78}$  (для двух изомеров),  $C_{84}$  на основе  $-Im\epsilon^{-1}(E)$  в области энергии 1 – 40 эВ.
2. Установлены основные особенности (энергии максимумов, их интенсивности, тонкая структура полос) спектров полных комплексов оптических функций исследуемых материалов и их зависимости от количества атомов в молекуле фуллерита. Для всех спектров проявляется много полос-аналогов, причем наиболее резкими структурами характеризуются спектры монокристалла  $C_{60}$ . При энергиях до 8 эВ полосы спектров монокристалла  $C_{60}$  смещены в сторону больших, а пленки  $C_{78}$  – меньших энергий относительно полос спектров остальных фуллеритов. При энергиях больше 8 эВ различия более всего проявляются в интенсивностях максимумов спектров.
3. В результате анализа спектров полных комплексов оптических функций установлены наиболее точные экспериментальные и экспериментально-расчетные данные для каждого фуллерита.
4. Впервые спектры  $\epsilon_2$  пяти фуллеритов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{84}$  разложены на элементарные компоненты с помощью объединенных диаграмм Арганда. Получены параметры каждой компоненты: энергия и полуширина, высота, площадь и сила осциллятора. Всего установлено количество

- компонент до 19 ( $C_{60}$ ), 45 ( $C_{70}$ ), 13 ( $C_{76}$ ), 11 ( $C_{78}$ ,  $C_{84}$ ). Многие из них не проявляются в интегральных спектрах.
5. Установлено, что многие компоненты-аналоги пяти фуллеритов проявляются в спектрах с разницей в интенсивностях примерно в 2 – 6 раз. Расхождения также наблюдаются в количестве выделенных компонент в каждом спектре и в смещениях полос в сторону больших (для пленок  $C_{70}$ ) или меньших энергий (для пленок  $C_{84}$ ) в области 1 – 8 эВ, а также, наоборот, в смещениях полос в сторону меньших (для монокристалла  $C_{60}$ ) или больших энергий (для пленок  $C_{76}$ ) в области 8 – 30 эВ относительно максимумов компонент остальных фуллеритов.
  6. Ширины запрещенной зоны согласно нашим расчетным данным равны: 1.85 эВ для монокристалла  $C_{60}$ , 1.68 для  $E||c$  и 1.86 эВ для  $E \perp c$  монокристалла  $C_{70}$ , 1.32 эВ для пленок  $C_{76}$ , 0.94 эВ для изомера  $C_{78}$  с  $C'_{2v}$  симметрией, 1.07 эВ для пленок  $C_{84}$ . Установленное нами уменьшение оптической величины  $E_g$  с понижением симметрии молекул фуллеритов находится в хорошем согласии с теоретическими данными. Это происходит из-за уширения молекулярных уровней благодаря расщеплению вырожденных в  $C_{60}$  электронных состояний.
  7. Установленные компоненты полос переходов пяти фуллеритов могут быть обусловлены экситонами или междузонными переходами. Хорошее согласие теоретических расчетов параметров компонент полос переходов  $C_{60}$  с нашими данными и стабильность структуры спектров газа, жидкости и кристалла в области энергии 1 – 7 эВ свидетельствует в пользу объяснения природы этих полос по модели экситонов малого радиуса. Для многих из них на основе теоретических зон предложено упрощенное объяснение по модели междузонных переходов.
  8. Полученная обширная информация о комплексах оптических функций и параметрах компонент тонкой структуры переходов пяти фуллеритов позволяет наиболее детально и эффективно обсуждать оптические свойства и электронную структуру этих фуллеритов, оценивать правильность их оптических спектров, а также предоставляет принципиально новую основу для выполнения корректных теоретических расчетов.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Соболев В. В., Немошкаленко В. В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура полупроводников. Киев: Наукова думка. 1988. 423 с.
2. Елецкий А. В., Смирнов В. М. Фуллерены и структуры углерода // Успехи физических наук. 1995. Т. 165. N. 9. с. 977 – 1009.
3. Picket W. E. Electrons and Phonons in  $C_{60}$ -Based Materials // Sol. State Phys. 1994. V. 48. pp. 225 - 347.
4. Ching W. Y., Huang M.-Z., Xu Y.-N., Harter W. G., Chan F. T. First-Principles Calculation of Optical Properties of  $C_{60}$  in the fcc Lattice // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 67. N. 15. pp. 2045 – 2048.

5. Jiang X., Gan Z. Theory of the excitonic effect in solid  $C_{60}$  // *Phys. Rev. B*. 1995. V. 52. N. 19. pp. 14254 – 14262.
6. Abe S., Shimoi Y., Shakin V. A., Harigaya K. Excitonic Effects in the Optical Properties of Conjugated Polymers and Fullerenes // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1994. V. 256. pp. 97 – 104.
7. Tsubo T., Nasu K. Theory for Excitation Effects on Optical Absorption Spectra of  $C_{60}$  Molecule and  $C_{60}$  Crystal // *J. Phys. Soc. Japan*. 1994. V. 63. N. 6. pp. 2401 – 2409.
8. Saeta P. N., Greene B. I., Kortan A. R., Kopilov N., Thiel F. A. Optical studies of single-crystal  $C_{60}$  // *Chem. Phys. Lett.* 1992. V. 190. N. 3,4. pp. 184 – 186.
9. Iwasa Y., Yasuda T., Naito Y., Koda T. Optical Reflection Spectra of Fullerite Single Crystals // *ARSRL. Tokio. ISSP*. 1992. pp. 32 - 33.
10. Patrini M., Marabelli F., Guizzetti G., Manfredini M., Castoldi C., Milani P. Optical Characterization of Fullerite Single Crystals and Thin Films // *Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials*. 1994. V. 94 - 24. pp. 632 – 643.
11. Kataura H., Endo Y., Achiba Y., Kikuchi K., Hanyu T., Yamaguchi Sh. Dielectric Constants of  $C_{60}$  and  $C_{70}$  Thin Films // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1995. V. 34. N. 10B. pp. L1467 – L1484.
12. Kelly M. K., Etchegoin P., Fuchs D., Kratschmer W., Fostiropoulos K. Optical transitions of  $C_{60}$  films in the visible and ultraviolet from spectroscopic ellipsometry // *Phys. Rev. B*. 1992. V. 46. N. 8. pp. 4963 – 4968.
13. Ren S. L., Wang K. A., Rao A. M., McRae E., Holden J. M., Hager T., Wang K., Lee W. T., Ni H. F., Selegue J., Eklund P. C. Ellipsometric determination of the optical constants of  $C_{60}$  (Buckminsterfullerene) films // *Appl. Phys. Lett.* 1991. V. 59. N. 21. pp. 2678 – 2680.
14. Golden M. S., Knupfer M., Fink J., Armbruster J. F., Cummins T. R., Romberg H. A., Roth M., Schmidt M., Sing M., Sohmen E., Michel R., Hennrich F., Rockenberger J., Kappes M. M., Hoad D. R. C., Roberts A. J., Flavell W. R., Roper M., Surman M., Teehan D. A. Electronic structure of fullerenes from high energy spectroscopies // *Proc. Int. Workshop Fullerenes and Atomic Clusters*. St. Petersburg. 1993.
15. Sohmen E., Fink J., Kratschmer W. Electron energy-loss spectroscopy studies on  $C_{60}$  and  $C_{70}$  fullerite // *Z. Phys. B – Condensed Matter*. 1992. V. 86. pp. 87 – 92.
16. Ren S. L., Wang K. A., Zhou P., Wang K. A., Zhou P., Wang Y., Rao A. M., Meier M. S., Selegue J. P., Eklund P. C. Dielectric Function of solid  $C_{70}$  films // *Appl. Phys. Lett.* 1992. V. 61. N. 2. pp. 124 - 126.
17. 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  $C_{76}$  // *Z. Phys. B*. 1994. V. 95. pp. 469 – 474.



18. Kusuo R., Terauchi M., Tanaka M., Saito Y., Achiba Y. Electron-energy-loss spectroscopy study of  $C_{76}$  // *Phys. Rev. B*. 1995. V. 51. N. 16. pp. 11018 – 11021.
19. Knupfer M., Knauff O., Golden M. S., Fink J., Burk M., Fuchs D., Schuppler S., Michel R. H., Kappes M. M. Electronic Structure and Dielectric Function of  $C_{78}$  Isomers with  $C_{2v}$  symmetry // *Proc. 189<sup>th</sup> ECS meeting*. Los Angeles. 1996.
20. Armbruster G. F., Roth M., Romberg H. A., Sing M., Schmidt M., Schweiss P., Adelman P., Golden M. S., Fink J. Electron energy-loss and photoemission studies of solid  $C_{84}$  // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50. N. 7. pp. 4933 – 4936.
21. Kuzuo R., Terauchi M., Tanaka M., Saito Y., Shinohara H. Electron-energy-loss spectra of crystalline  $C_{84}$  // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 49. N. 7. pp. 5054 – 5057.
22. Kuzuo R., Terauchi M., Tanaka M., Saito Y., Shinohara H. High-Resolution Electron Energy-Loss Spectra of Solid  $C_{60}$  // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1991. V. 30. N. 10A. pp. L1817 – L1818.
23. М. А. Ходорковский, А. Л. Шахмин, Н. В. Леонов. Исследование покрытий  $C_{60}$  различной толщины методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии // *Физика твердого тела*. 1994. Т. 36. N. 3. с. 626 – 630.
24. Gensterblum G., Pireaux J. J., Thiry P. A., Caundano R., Vigneron J. P., Lambin Ph., Lucas A. A. High-Resolution Electron-Energy-Loss Spectroscopy of Thin Films of  $C_{60}$  on Si(100) // *Phys. Rev. Lett.* 1991. V. 67. N. 16. pp. 2171 – 2174.
25. Hora J., Panek P., Navratil K., Handlirova B., Humlicek J. Optical response of  $C_{60}$  thin films and solutions // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. N. 7. pp. 5106 – 5113.
26. Westin E., Rosen A. Analysis of the Absorption Spectra of  $C_{60}$  and  $KC_{60}$  // *Z. Phys. D. – Atoms, Molecules and Clusters*. 1993. V. 26. pp. 276 – 278.
27. Harigaya K., Abe S. Optical-absorption spectra in fullerenes  $C_{60}$  and  $C_{70}$ : Effects of Coulomb interactions, lattice fluctuations, and anisotropy // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 49. N. 23. pp. 16746 – 16752.
28. Shumway J., Satpathy S. Polarization-dependent optical properties of  $C_{70}$  // *Chem. Phys. Lett.* 1993. V. 211. N. 6. pp. 595 – 600.

### СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ

1. Соболев В. В., Бусыгина Е. Л. Электронная структура пленок  $C_{60}$  // *Журнал прикладной спектроскопии*. 1999. Т. 66. N. 2. с. 227 – 232.
2. Соболев В. В., Бусыгина Е. Л. Электронная структура пленок  $C_{60}$  // *Физика и техника полупроводников*. 1999. Т. 33. N. 1. с. 31 – 35.
3. Соболев В. В., Бусыгина Е. Л. Оптические постоянные монокристалла фуллерита // *Оптика и спектроскопия*. 1999. Т. 86. N. 3. с. 464 – 467.
4. Соболев В. В., Бусыгина Е. Л. Электронная структура фуллерита  $C_{60}$  // *Физика твердого тела*. 1999. Т. 41. N. 6. с. 1124 – 1125.

5. Соболев В. Вал., Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Электронная структура и оптические функции пленок  $C_{60}$  // Физика низкоразмерных структур. 2003. N. 11/12. с. 149 – 156. (на английском языке).
6. Соболев В. Вал., Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Тонкая структура и оптические переходы в фуллеритах  $C_{70}$  и  $C_{60}$  // Физика низкоразмерных структур. 2003. N. 11/12. с. 137 – 148. (на английском языке).
7. Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Экситоны фуллеритов // Тезисы международной конференции «Оптика экситонов в конденсированных средах». С.-Петербург, ФТИ им. А.И.Иоффе. 1997. с. 70. (на английском языке).
8. Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Оптические функции группы фуллерена // Тезисы докладов Третьей Российской университетско-академической научно-практической конференции. Ижевск, УдГУ. 1997. с. 97 – 98.
9. Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Экситоны Френкеля фуллеритов // Труды международной конференции «Оптика полупроводников». Ульяновск, УлГУ. 1998. с. 21 – 22.
10. Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Электронная структура фуллерита  $C_{60}$  // Тезисы докладов IV Российской университетско-академической научно-практической конференции. Ижевск, УдГУ. 1999. Т. 7. с. 142 – 143.
11. Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Электронная структура фуллерита  $C_{60}$  // Тезисы докладов XIII Уральской международной зимней школы по физике полупроводников «Электронные свойства низкоразмерных полупроводниковых и сверхпроводниковых структур». Екатеринбург, ИФМ РАН. 1999. с. 45 – 46.
12. Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Электронная структура фуллеритов  $C_n$  и фаз  $C_{60}$  (газ, жидкость, кристалл) // Труды международной конференции «Физические процессы в неупорядоченных полупроводниковых структурах». Ульяновск, УлГУ. 1999. с. 79.
13. Бусыгина Е. Л. Фундаментальные спектры кристаллов группы фуллеритов // Тезисы докладов V Российской университетско-академической научно-практической конференции. Ижевск, УдГУ. 2001. Т. 9. с. 79 – 80.
14. Соболев В. Вал., Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Сложная структура переходов фуллеритов  $C_{70}$  и  $C_{60}$  // Труды международной конференции «Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы». Ульяновск, УлГУ. 2004. с. 11.
15. Соболев В. Вал., Бусыгина Е. Л., Соболев В. В. Электронная структура фуллеритов  $C_{70}$  и  $C_{60}$  // Труды IV Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники». Санкт-Петербург, СПбГПУ. 2004. с. 107.

Подписано в печать 27.04.2005  
Печать ризографическая  
Отпечатано на ризографе  
ООО «Управление проектами»  
г. Ижевск, ул. Коммунаров, 200  
Тираж 100 экз.