

ИНТЕНСИВНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В МОЛЕКУЛЕ ФУЛЛЕРЕНА C₁₈₀

Г. К. Аветисян^a, А. Г. Казарян^{}, Г. Г. Матевосян^b, Г. Ф. Мкртчян*

*^a Центр физики сильных полей НИИ физики,
Ереванский государственный университет
0025, Ереван, Армения*

*^b Институт радиофизики и электроники
Национальной академии наук Республики Армения
0203, Аштарах, Армения*

Поступила в редакцию 18 августа 2023 г.,
после переработки 28 августа 2023 г.
Принята к публикации 29 августа 2023 г.

Исследована генерация высших гармоник в крупной молекуле фуллерена C₁₈₀ под действием интенсивного лазерного поля. Для моделирования молекулы C₁₈₀ и ее взаимодействия с лазерным полем использовано приближение среднего поля в рамках теории сильной связи. Подробный анализ спектра мощности излучения высших гармоник показывает, что генерации гармоник имеет многофотонный резонансный характер, что проливает свет на лежащие в их основе квантовые процессы. Изучена зависимость гармоник отсечки как от интенсивности, так и от частоты лазерного излучения, что дает важную информацию об оптимальных условиях для усиления процесса генерации высших гармоник в C₁₈₀. Показано, что в молекуле C₁₈₀ интенсивность высших гармоник гораздо больше, чем в наиболее изученном фуллерене C₆₀.

DOI: 10.31857/S0044451024010036

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из фундаментальных процессов интенсивного взаимодействия лазерного излучения с веществом является генерация высших гармоник (ГВГ) [1, 2], позволяющая получать когерентное ультрафиолетовое и рентгеновское излучение в атомных системах. ГВГ включает в себя многофотонные процессы [3], что открывает возможность экстремального временного разрешения и позволяет исследовать физические эффекты на аттосекундных временах [4, 5]. Для нелинейных оптических применений среди наноструктурных материалов представляют особый интерес аллотропы углерода [6, 7], такие как фуллерены [8]. Фуллерены представляют собой большие молекулы, образованные замыканием графитового листа, и их стабильная замкнутая топологическая структура делает их ин-

тересными для изучения. Открытие фуллерена C₆₀ [9] стимулировало исследования многих других молекул фуллеренов с различной симметрией [10–15]. С тех пор большие фуллерены стали предметом активных исследований [16–19].

Повышение эффективности ГВГ имеет решающее значение, причем эта эффективность сильно зависит от плотности излучателей и возможных каналов возбуждения. Атомные кластеры показали многообещающие результаты в плане значительного увеличения интенсивности ГВГ по сравнению с атомными системами [20–22], что привело к росту интереса по распространению процесса ГВГ на графеновые квантовые точки [23–26] и фуллерены [27, 28].

Теоретические исследования предсказывают сильную ГВГ как в молекулах [29–33], так и в твердом C₆₀ [31]. Примечательно, что увеличение числа атомов в молекулах фуллерена приводит к увеличению числа каналов возбуждения, которые могут усиливать сигнал ГВГ. Поэтому изучение процесса ГВГ в крупных фуллеренах имеет большое значение.

^{*} E-mail: amarkos@ysu.am

В данной работе мы представляем микроскопическую теорию по исследованию экстремально-нелинейного взаимодействия крупного фуллерена C_{180} с сильным когерентным электромагнитным излучением линейной поляризации. Мы изучаем общую структуру спектра ГВГ, в том числе зависимость гармоники отсечки от интенсивности/частоты лазера и ее связь с молекулярными возбуждениями. Полученные результаты проливают свет на потенциал крупных фуллеренов в процессе ГВГ и открывают новые возможности для дальнейших исследований в этой области.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 представлена базовая модель многофотонного возбуждения и ГВГ в фуллерене C_{180} . В разд. 3 и 4 приведены результаты численного исследования и выводы.

2. МОДЕЛЬ

Начнем с описания модели и теоретического подхода. Предполагается, что фуллерен C_{180} взаимодействует с лазерным импульсом среднего инфракрасного или видимого диапазонов излучения, который когерентно возбуждает электронную подсистему. Схематическая структура C_{180} представлена на рис. 1. Молекула C_{180} инвариантна при инверсии относительно центра масс и имеет икосаэдрическую симметрию точечной группы (I_h). Мы предполагаем, что молекула C_{180} нейтральна, и будем рассматривать ее в рамках теории сильной связи. Электрон-электронное взаимодействие (ЭЭВ) описывается в расширенном приближении Хаббарда [32, 34, 35]. Следовательно, полный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} V_{ij} n_i n_j \quad (2)$$

— свободный гамильтониан. Здесь $c_{i\sigma}^\dagger$ — оператор рождения электрона со спиновой поляризацией $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ в узле i ($\bar{\sigma}$ противоположна по поляризации спина к $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$) и индексы $\langle i, j \rangle$ пробегает все первые ближайшие соседние узлы с интегралом перескока t_{ij} между ближайшими соседними атомами в позициях $\mathbf{r}_i$ и $\mathbf{r}_j$ [29, 32]:

$$t_{ij} = t_0 + \alpha (d_0 - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|),$$

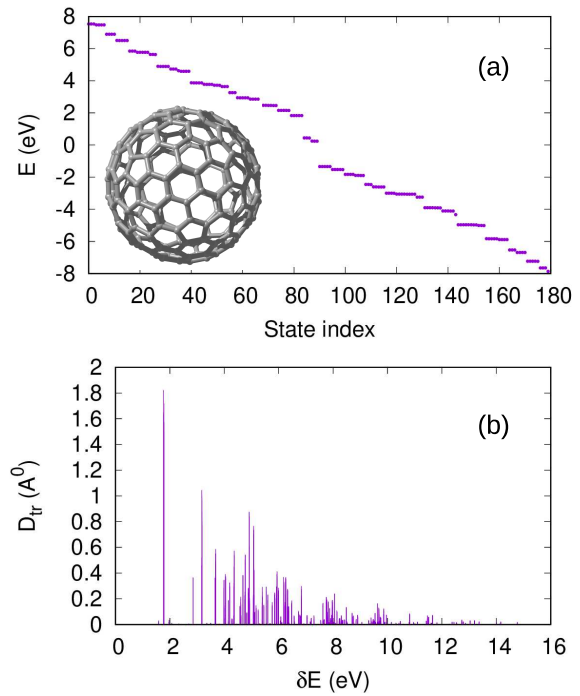


Рис. 1. *a* — Собственные энергии молекулы фуллерена C_{180} и *b* — модуль матричных элементов дипольного момента при межзонных переходах. На вставке приведена схематическая структура C_{180}

где $d_0 = 1.54 \text{ \AA}$, $t_0 = 2.17 \text{ эВ}$, а постоянная связи электрона с решеткой равна $\alpha = 3.5 \text{ эВ/\AA}$. Начальные состояния для C_{180} генерируются с помощью программы «Фуллерен» с использованием алгоритма граней-спирали [36].

Исходная структура дополнительно оптимизируется силовым полем, специально разработанным для фуллеренов [37]. Второе и третье слагаемые в выражении (2) описывают гамильтониан ЭЭВ с узловой U и межузловой $V_{ij} = 0.5U d_{min}/d_{ij}$ кулоновскими энергиями отталкивания, где d_{min} — минимальное расстояние до ближайшего соседа, соседа, а d_{ij} — расстояние между парами ближайших соседей. Взаимодействие излучения с веществом описывается в калибровке длины

$$\hat{H}_{int} = e \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E}(t) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (3)$$

где $\mathbf{E}(t) = f(t) E_0 \hat{\mathbf{e}} \cos \omega t$ — напряженность электрического поля с амплитудой E_0 , частотой ω , единичным вектором поляризации $\hat{\mathbf{e}}$ и временной огибающей импульса $f(t) = \sin^2(\pi t/T)$. Длительность импульса T принята равной 10 периодам волны: $T = 20\pi/\omega$. Из уравнения Гейзенберга в прибли-

жении Хартри–Фока для одночастичной матрицы плотности

$$\rho_{ij}^{(\sigma)} = \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$$

можно получить эволюционные уравнения [32]

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{ij}^{(\sigma)}}{\partial t} = & \sum_k \left(\tau_{kj\sigma} \rho_{ik}^{(\sigma)} - \tau_{ik\sigma} \rho_{kj}^{(\sigma)} \right) + \\ & + (V_{i\sigma} - V_{j\sigma}) \rho_{ij}^{(\sigma)} + \\ & + e\mathbf{E}(t) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho_{ij}^{(\sigma)} - i\hbar\gamma \left(\rho_{ij}^{(\sigma)} - \rho_{0ij}^{(\sigma)} \right), \quad (4) \end{aligned}$$

где $V_{i\sigma}$ и $\tau_{ij\sigma}$ определяются через матрицу плотности $\rho_{ij}^{(\sigma)}$ и ее начальное значение:

$$\begin{aligned} V_{i\sigma} = & \sum_{j\alpha} V_{ij} \left(\rho_{jj}^{(\alpha)} - \rho_{0jj}^{(\alpha)} \right) + U \left(\rho_{ii}^{(\sigma)} - \rho_{0ii}^{(\sigma)} \right), \\ \tau_{ij\sigma} = & t_{ij} + V_{ij} \left(\rho_{ji}^{(\sigma)} - \rho_{0ji}^{(\sigma)} \right). \end{aligned}$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Сначала рассмотрим собственные энергии и возможные оптические переходы системы до взаимодействия с сильным лазерным импульсом. Результаты получены путем численной диагонализации гамильтониана в рамках теории сильной связи. С помощью полученных функций собственных состояний $\psi_\mu(i)$ вычисляются матричные элементы дипольного момента перехода

$$\mathbf{d}_{\mu'\mu} = e \sum_i \psi_{\mu'}^*(i) \mathbf{r}_i \psi_\mu(i).$$

Собственные энергии и модули матричных элементов дипольного момента при межзонных переходах показаны на рис. 1. Видно, что икосаэдрическая симметрия молекулы C_{180} приводит к сильно вырожденным состояниям с многочисленными дипольно-разрешенными каналами возбуждения. Оптическая щель в молекуле C_{180} составляет примерно 1.8 эВ, что заметно меньше, чем в C_{60} (2.74 эВ). Примечательно, что дипольный момент перехода имеет пики в диапазоне 1.8–15 эВ, что указывает на наличие эффективного многофотонного возбуждения и последующих высокоэнергетических однофотонных переходов. Эти факторы играют важную роль в формировании спектра ГВГ, что мы и рассмотрим далее.

Для изучения процесса ГВГ в молекуле фуллерена C_{180} мы вычисляем спектр высших гармоник

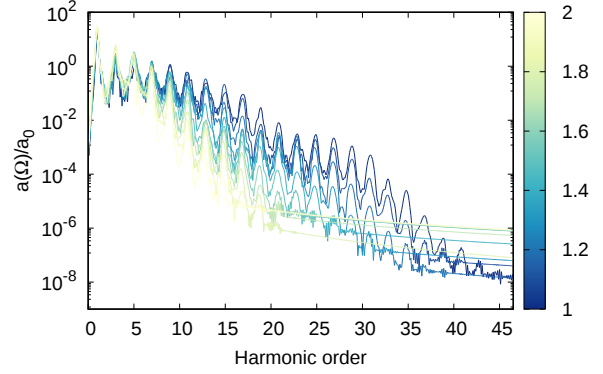


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимость спектров ГВГ от номера гармоники представлена для C_{180} с использованием нормированного преобразования Фурье дипольного ускорения, $a(\Omega)/a_0$, построенного в логарифмическом масштабе. Интенсивность волны равна 10 ТВт/см². Цветная полоса показывает частоту волны накачки в единицах $\text{эВ}/\hbar$

с помощью преобразования Фурье дипольного ускорения

$$\mathbf{a}(t) = d^2 \mathbf{d}(t) / dt^2, \quad (5)$$

где дипольный момент определяется как

$$\mathbf{d}(t) = e \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i \rho_{ii}^{(\sigma)}(t). \quad (6)$$

Тогда

$$\mathbf{a}(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{a}(t) e^{i\Omega t} W(t) dt,$$

$W(t)$ — «оконная» функция для подавления небольших колебаний [38] и уменьшения фона (уровня шума) гармонического сигнала. В качестве оконной функции возьмем огибающую импульса $f(t)$. Для получения усредненной картины, не зависящей от ориентации молекулы относительно поляризации лазера, в качестве единичного вектора поляризации волны берется $\hat{\mathbf{e}} = (1/\sqrt{3})\{1, 1, 1\}$. Спектры рассчитаны для умеренной энергии кулоновского отталкивания $U = 2$ эВ. Скорость релаксации принята равной $\hbar\gamma = 0.1$ эВ. Для удобства нормируем дипольное ускорение на множитель $a_0 = e\bar{\omega}^2 \bar{d}$, где $\bar{\omega} = 1$ эВ/ $\hbar$ и $\bar{d} = 1$ Å. Мощность, излучаемая на данной частоте, пропорциональна $|\mathbf{a}(\Omega)|^2$. Интегрирование по времени уравнения (4) выполняется с помощью алгоритма Рунге–Кутты 4-го порядка.

Изучим зависимость ГВГ от частоты волны накачки в диапазоне $\hbar\omega = 1 - 2$ эВ. На рис. 2 приведена зависимость спектров ГВГ. Вследствие инверсионной симметрии генерируются только нечетные

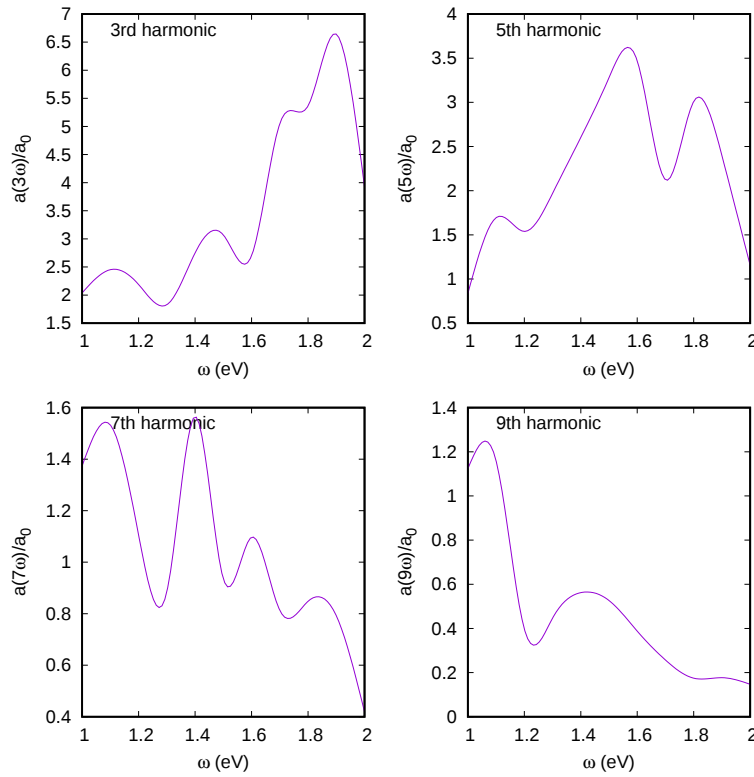


Рис. 3. Зависимости интенсивности излучения 3-й, 5-й, 7-й и 9-й гармоник от частоты волны накачки для данных рис. 2

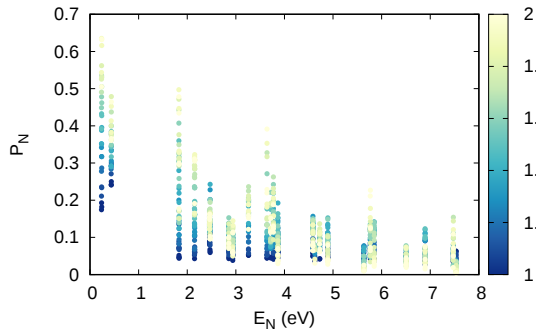


Рис. 4. (В цвете онлайн) Остаточная населенность энергетических уровней зоны проводимости для данных рис. 2

гармоники. Примечательно, что в области отсечки высших гармоник появляется отличительная черта, свидетельствующая о постепенном уменьшении интенсивности ГВГ с ростом частоты волнового поля ω . Интересно отметить, что гармонику отсечки можно аппроксимировать соотношением $N_{cut} \propto \omega^{-3/2}$. Сравнивая это с ГВГ в атомах через свободный континуум, где $N_{cut} \propto \omega^{-3}$ [2], получаем, что для C_{180} энергия ($\hbar\omega N_{cut} \propto \omega^{-1/2}$) гармоники отсечки уменьшается и убывает медленнее по сравнению с ГВГ в

атоме по мере увеличения энергии фотона волны накачки.

Наоборот, для низших гармоник мы наблюдаем немонотонное изменение по частоте. Такое поведение можно объяснить многофотонными резонансными переходами между валентной зоной и зоной проводимости. Эта резонансная природа ГВГ дополнительно поясняется на рис. 3, где изображены зависимости интенсивности излучения 3-й, 5-й, 7-й и 9-й гармоник от частоты волны накачки. Очевидно, что эти гармоники демонстрируют резонансное поведение. Анализируя рис. 1 б, мы видим, что дипольные моменты перехода для межзонных переходов имеют пики около этих резонансных частот, дополнительно обеспечивая многофотонные резонансные переходы. Например, самый высокий пик для 3-й гармоники приходится на 1.9 эВ, а на рис. 1 б, видим, что дипольный момент перехода через каналы многократного возбуждения имеет локальный пик при $3\omega \simeq 5.7$ эВ/ $\hbar$.

Резонансное поведение дополнительно подтверждается остаточной заселенностью энергетических уровней зоны проводимости, как показано на рис. 4. На рисунке приведена населенность энергетических уровней зоны проводимости, которая после взаимо-

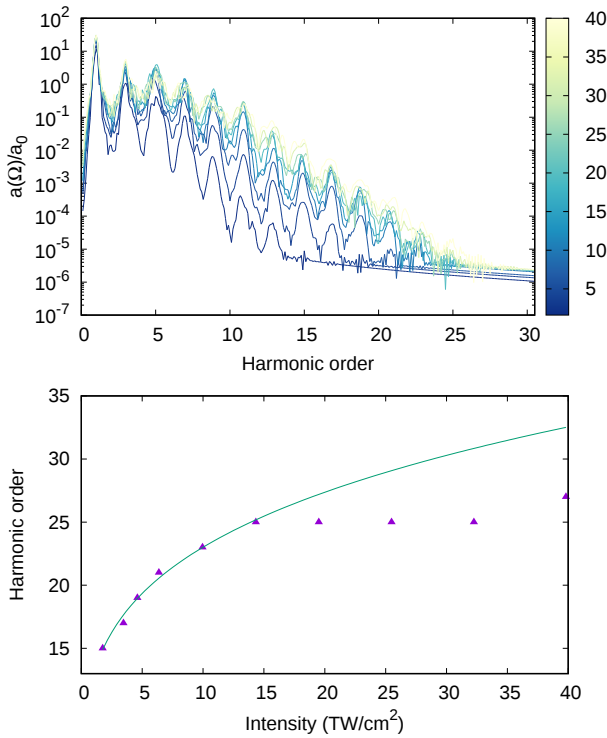


Рис. 5. (В цвете онлайн) Верхняя панель — зависимости спектров ГВГ от номера гармоники для C_{180} в логарифмическом масштабе через преобразование Фурье дипольного ускорения, $a(\Omega)/a_0$. Частота волны накачки равна $\omega = 1.5$ эВ/ $\hbar$ (длина волны 827 нм). Цветная полоса показывает интенсивность волны накачки в единицах ТВТ/см^2 . Нижняя панель — зависимость гармоник отсечки от интенсивности волны вместе с аппроксимационной функцией (сплошная линия)

действия значительно увеличивается. Это наблюдение еще раз подтверждает важность многофотонных резонансных переходов в процессе ГВГ крупного фуллерена C_{180} в интенсивных лазерных полях ближнего инфракрасного диапазона.

Далее мы исследуем зависимость частоты отсечки от интенсивности волны накачки, анализируя спектры ГВГ для разных интенсивностей. На рис. 5 представлены зависимости спектров ГВГ от номера гармоники. Наблюдается значительная нелинейная зависимость гармоник среднего плато от номера гармоники. В отличие от ГВГ в атомах [2], где энергия отсечки пропорциональна интенсивности волнового поля, в рассматриваемом случае энергия отсечки стремится к насыщению в сильных лазерных полях. Такая тенденция становится очевидной при рассмотрении нижней панели рис. 5, на которой изображена связь между гармониками отсечки и интенсивностью волны I . Приведена также подго-

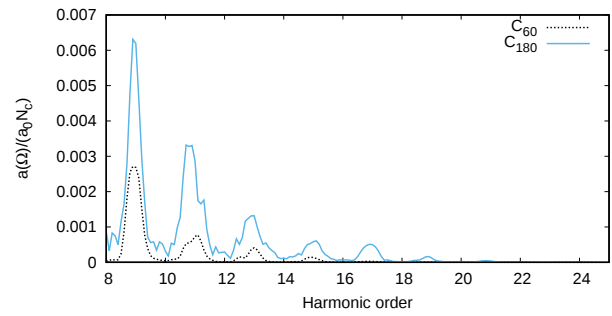


Рис. 6. Сравнение сигналов ГВГ, нормированных на число частиц, для C_{180} и C_{60} . Частота волны накачки равна $\omega = 1.5$ эВ/ $\hbar$ (длина волны 827 нм), интенсивность волны 10 ТВТ/см^2

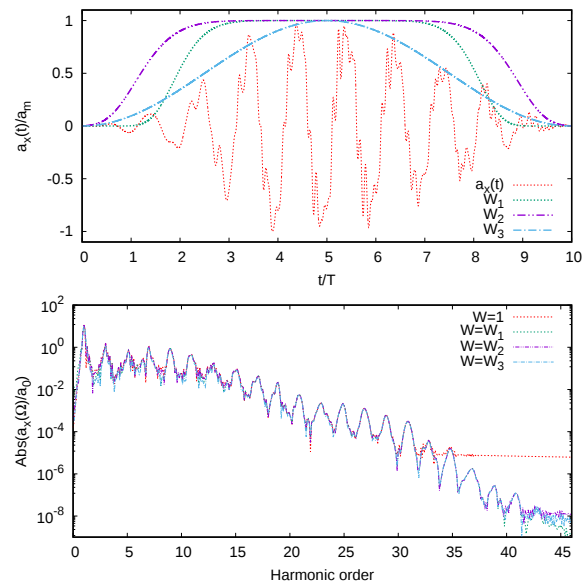


Рис. 7. (В цвете онлайн) На верхней панели изображена зависимость x -компоненты дипольного ускорения от времени вместе с оконными функциями. Интенсивность волны 10 ТВТ/см^2 , частота 1 эВ (длина волны 1240 нм). На нижней панели показан спектр ГВГ, рассчитанный с использованием оконных функций, соответствующих дипольному ускорению на верхней панели

точная функция вида $I^{1/4}$. В диапазоне интенсивностей до 15 ТВТ/см^2 наблюдается хорошее соответствие между данными численного расчета и подгоночной функцией, что свидетельствует о достаточно хорошей аппроксимации. Тем не менее примечательно, что за пределами этой интенсивности становится очевидным явление насыщения.

Еще одним примечательным аспектом сигналов ГВГ в молекулах фуллеренов является их зависимость от размера молекулы. Чтобы изучить это, на

рис. 6 мы сравнили интенсивности ГВГ, приходящиеся на одну частицу, для C_{180} и C_{60} . Наблюдается значительное увеличение сигнала ГВГ для C_{180} . Такая тенденция также наблюдалась для графеновых квантовых точек в предыдущих исследованиях [23]. Это усиление можно объяснить плотностью состояний, косвенно отображенной на рис. 1 через дипольные моменты перехода. Из рис. 1 становится очевидным, что C_{180} обладает значительно большим количеством каналов перехода, чем C_{60} , что способствует усилению отклика ГВГ.

Далее нам хотелось бы прояснить процедурные аспекты процесса преобразования Фурье. Примененный подход включает численное решение уравнения (1), при котором функция $\mathbf{a}(t)$ рассматривается через равные промежутки времени во временной области $[0, T]$. До взаимодействия величина $\mathbf{a}(t)$ равна нулю, а после взаимодействия любой остаток $\mathbf{a}(t)$, возникающий в результате сохраняющихся заселенностей уровней, пренебрежимо мал. Учитывая, что здесь сигнал принимает форму непрерывной функции с ограниченной полосой пропускания, мы прибегаем к аппроксимации непрерывного преобразования Фурье дискретным аналогом, проводимым во временной области $[0, T]$, где возникает индуцированная полем ГВГ. Примечательно, что на временных границах развития генерации возникают незначительные колебания, способствующие повышению шуму внутри гармонического сигнала. Это, в свою очередь, размывает гармонические сигналы ближе к концу спектра. Наиболее интенсивная ГВГ возникает при пиковых амплитудах лазерного поля. Это приводит к необходимости введения оконной функции для подавления этих незначительных колебаний. Важно было уточнить, что применение этой оконной функции не меняет скорость генерации гармоник в оставшейся части спектра, что подтверждают наши расчеты. Чтобы проиллюстрировать эту концепцию, мы выбрали показательный спектр на рис. 2, в частности тот, который имеет самую высокую отсечку гармоники. Компонента дипольного ускорения $a_x(t)$ изображена на рис. 7. Она масштабирована относительно ее максимального значения и сопоставлена с соответствующими оконными функциями. Мы используем три оконные функции:

две гипергауссовы оконные функции

$$W_{1,2}(t) = \exp \left\{ - \left(\frac{t - T/2}{\tau_{1,2}} \right)^8 \right\}$$

с разными параметрами $\tau_1 = 13$ фс, $\tau_2 = 16$ фс,

и оконную функцию огибающей импульса

$$W_3 = \sin^2 \left(\frac{t}{\tau_3} \right)$$

с $\tau_3 = 13$ фс.

На нижней панели рис. 7 мы приводим спектр генерации высших гармоник для этих оконных функций, противопоставляя им прямое преобразование Фурье. Примечательно, что отсутствие оконной функции ограничивает спектр гармоник 35-м порядком, что сопровождается значительным фоном. Однако включение оконных функций эффективно устраняет преобладающий фон, обеспечивая появление отчетливых пиков, соответствующих высшим гармоникам. Из этой иллюстрации видно, что частота гармоник практически не зависит от особенностей оконных функций. Следовательно, любая из упомянутых функций может быть использована аналогичным образом. В исследуемом случае мы выбрали функцию W_3 .

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы провели всестороннее исследование экстремального нелинейного оптического отклика больших молекул фуллерена, уделив особое внимание молекуле C_{180} , которая обладает икосаэдрической точечной групповой симметрией, обычно встречающейся в таких системах. В нашем исследовании использовался квантовый расчет спектров ГВГ с использованием подхода усредненного поля, учитывающего многочастичное кулоновское взаимодействие. Путем решения эволюционных уравнений для одночастичной матрицы плотности мы выявили резонансные эффекты в спектрах ГВГ и наблюдали заметное увеличение выхода ГВГ в C_{180} по сравнению с C_{60} . В отличие от ГВГ на атомах, где энергия отсечки прямо пропорциональна интенсивности волны накачки, в C_{180} для лазерных импульсов среднего инфракрасного или видимого диапазона излучения света энергия отсечки достигает насыщения для лазерных полей высокой интенсивности, постепенно уменьшаясь как функция частоты волны накачки. Такое поведение подчеркивает уникальный отклик больших молекул фуллерена на интенсивные лазерные поля, что может открыть новые возможности для экстремальных нелинейных оптических приложений.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Комитета науки Республики Армения в рамках проекта 20TTWS-1C010.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. B. Corkum, Phys. Rev. Lett. **71**, 1994 (1993).
2. M. Lewenstein, P. Balcou, M. Y. Ivanov et al., Phys. Rev. A **49**, 2117 (1994).
3. H. K. Avetissian, *Relativistic Nonlinear Electrodynamics: The QED Vacuum and Matter in Super-Strong Radiation Fields*, Springer, New York (2015).
4. P. B. Corkum and F. Krausz, Nature Phys. **3**, 381 (2007).
5. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
6. E. H. Falcao and F. Wudl, J. Chem. Technol. Biotechnol. **82**, 524 (2007).
7. S. K. Tiwari, V. Kumar, A. Huczko, et al., Critical Rev. Sol. State and Mater. Sci. **41**, 257 (2016).
8. R. E. Smalley, Rev. Mod. Phys. **69**, 723 (1997).
9. H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien et al., Nature **318**, 162 (1985).
10. H. Kroto and K. McKay, Nature **331**, 328 (1988).
11. D. York, J. P. Lu, and W. Yang, Phys. Rev. B **49**, 8526 (1994).
12. G. E. Scuseria, Chem. Phys. Lett. **243**, 193 (1995).
13. G. E. Scuseria, Science **271**, 942 (1996).
14. S. Itoh, P. Ordejon, D. A. Drabold, and R. M. Martin, Phys. Rev. B **53**, 2132 (1996).
15. C. H. Xu and G. E. Scuseria, Chem. Phys. Lett. **262**, 219 (1996).
16. P. W. Dunk, N. K. Kaiser, C. L. Hendrickson et al., Nature Commun. **3**, 855 (2012).
17. J. W. Martin, G. J. McIntosh, R. Aru et al., Carbon **125**, 132 (2017).
18. S. Wang, Q. Chang, G. Zhang et al., Front. Chem. **8**, 607712 (2020).
19. E. Ghavanloo, H. Rai-Tabar, A. Kausar et al., Phys. Rep. **996**, 1 (2023).
20. T. D. Donnelly, T. Ditmire, K. Neuman et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 2472 (1996).
21. C. Vozzi, M. Nisoli, J. Caumes et al., Appl. Phys. Lett. **86** (2005).
22. O. Smirnova, Y. Mairesse, S. Patchkovski et al., Nature **460**, 972 (2009).
23. Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян, К. А. Сагсян, Х. В. Седракан, ЖЭТФ **161**, 155 (2022) [B. Avchyan, A. Ghazaryan, K. Sargsyan, and K. V. Sedrakian, JETP **134**, 125 (2022)].
24. B. R. Avchyan, A. G. Ghazaryan, S. S. Israelyan, and K. V. Sedrakian, J. Nanophot. **16**, 036001 (2022).
25. Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян, К. А. Сагсян, Х. В. Седракан, Письма в ЖЭТФ **116**, 426 (2022) [B. Avchyan, A. Ghazaryan, K. Sargsyan, and K. V. Sedrakian, JETP Lett. **116**, 428 (2022)].
26. S. Gnawali, R. Ghimire, K. R. Maga et al., Phys. Rev. B **106**, 075149 (2022).
27. R. Ganeev, L. E. Bom, J. Abdul-Hadi et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 013903 (2009).
28. R. Ganeev, L. E. Bom, M. Wong et al., Phys. Rev. A **80**, 043808 (2009).
29. G. P. Zhang, Phys. Rev. Lett. **95**, 047401 (2005).
30. G. P. Zhang and T. F. George, Phys. Rev. A **74**, 023811 (2006).
31. G. P. Zhang and Y. H. Bai, Phys. Rev. B **101**, 081412(R) (2020).
32. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and G. F. Mkrtchian, Phys. Rev. B **104**, 125436 (2021).
33. H. K. Avetissian, S. Sukiasyan, H. H. Matevosyan, and G. F. Mkrtchian, Results Phys. **53**, 106951 (2003), <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2023.106951>, arXiv:2304.04208 (2023).
34. R. L. Martin and J. P. Ritchie, Phys. Rev. B **48**, 4845 (1993).
35. G. Zhang, Phys. Rev. B **56**, 9189 (1997).
36. P. W. Fowler and D. E. Manolopoulos, *An Atlas of Fullerenes*, Courier Corporation, New York (2007).
37. P. Schwerdtfeger, L. Wirz, and J. Avery, J. Comput. Chem. **34**, 1508 (2013).
38. G. P. Zhang, M. S. Si, M. Murakami et al., Nature Commun. **9**, 3031 (2018).