

## SPEKTREN REGULÄRER BEWERTETER VOLLSTÄNDIGER GRAPHEN

N. Tyutyulkov, O. E. Polansky

(Akademie der Wissenschaften, Sofia und Max-Planck-Institut, Mülheim)

Die Spektren folgender 4-Typen kantenbewerteter vollständiger Graphen  $G_O(N)=[U,K]$  wurden untersucht:  $|U|=N=4n+2$ ,  $k_w=2n+1$ ;  $|U|=4n$ ,  $k_w=2n$ ;  $|U|=4n+1$ ,  $k_w=2n$ ;  $|U|=4n+3$ ,  $k_w=2n+1$  ( $k_w$ -stellt die Zahl unterschiedlicher Kantenwerte bei  $D_{Nh}$ -Symmetrie).

Wenn jeder Kante  $o-v$ , die 2 Knotenpunkte verbindet, das Matrixelement  $\beta_{ov} = \langle \varphi_o | \hat{H}^{eff}(1) | \varphi_v \rangle$  zugeordnet ist, folgt für die Eigenwerte  $e_k$  (einfachheitshalber nur für  $N=4n+2$  angegeben):

$$e_k = \alpha_o + 2 \sqrt{\frac{2n}{1}} \beta_{ov} \cdot \cos v w_k + \beta_{o, 2n+1} \cdot \cos(k\pi), \quad w_k = \frac{2k\pi}{N}$$

Im Fall:  $n \rightarrow \infty$  sind die  $\beta_{ov}$  die Fourier-Transformierten der  $e(k)$ :

$$\beta_{ov} = \hat{F} \{ e(k) \} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e(k) \cdot \cos v w_k \cdot dk$$

Die Energien der Grenzorbitale

$$e_o = 2 \sqrt{\frac{2n}{1}} \beta_{ov} + \beta_{2n+1}$$

$$e_n = 2 \sum_1^n m \beta_{o, 2m} \cdot \cos(m\pi) + \beta_{2n+1} \cdot \cos(n\pi)$$

und auch die spezifische  $\pi$ -Elektronenenergie ( $\bar{\epsilon} = E_\pi/N$ )

$$\bar{\epsilon} = 2 \sqrt{\frac{2n}{1}} \beta_{ov} p_{ov} + 2 \beta_{o, 2n+1} \cdot \cos(n\pi)$$

sind von der Art des effektiven Eielektronenoperators  $H^{eff}(1)$  und von der Abstandsfunktion  $\beta_{ov} = \beta_{ov}(R_{ov})$  abhängig. Wird  $\beta_{ov} = \beta_{o1} \cdot \exp(-pR_{ov}^2)$  vorausgesetzt, folgt in HMO Näherung:

$$e_k = \frac{N}{\pi} \beta_{o1} \cdot \exp(-p/2) \cdot I_k(p/2)$$

( $I_k$  sind die Modifizierten Bessel Funktionen) und  $\bar{\epsilon} < \frac{4}{\pi} \cdot \beta_{o1}$ .

Das Energiespektrum ist qualitativ unterschiedlich bei den verschiedenen Näherungen (HMO-, RHF-, UHF-). Im Spektrum der Einteilchenanregungen existiert Energiegap  $\Delta E_m \neq 0$  nur dann, wenn die Korrelationseffekte mittels der UHF-Methode berücksichtigt werden.