

C₆₀分子的旋转速度对对碰结果的影响

方云团¹ 李延龄² 罗成林²

(1. 镇江船艇学院物理教研室, 镇江 212001)

(2. 南京师范大学物理科学与技术学院, 南京 210097)

[摘要] 运用紧束缚分子动力学模拟的方法研究了两个 C₆₀分子的旋转对碰, 与无旋转情况下对碰的结果比较表明, 旋转这一因素对碰撞结果起着重要的作用。

[关键词] 紧束缚原子势模型, 旋转, 对碰

[中图分类号] O561.5; [文献标识码] A; [文章编号] 1001-4616(2001)01-0065-04

0 引言

在核物理和基本粒子研究中, 人们从碰撞和散射过程获取了大量微观结构信息. 为了对数量大但仍属有限自由度系统的动力学行为作进一步的理解, 发展了许多描述该碰撞过程的唯象模型. 近年来, 对金属团簇-团簇碰撞的研究, 发现其反应道十分类似于重粒子碰撞, 存在所谓“完全聚合”、“准弹性散射”和“深度非弹性散射”等过程. 当然, 实验上研究这些问题并非易事, 因为获取载能大团簇及强度较高的金属均有困难. 因此, 实验上选择 C₆₀⁺和 C₆₀碰撞最为合适^[1].

为具体观察碰撞微观过程, 已有人用分子动力学模拟了两个 C₆₀分子间的碰撞^[2,3]. 在模拟过程中, 尽管他们采用的原子势模型各不相同, 但基本上都是给两个 C₆₀分子不同的入射动能, 观察它们在正碰和斜碰两种情况下分子的变化过程和原子的运动轨迹, 从而得到碰撞过程的微观图像. 然而从上述模拟过程中不难看出, C₆₀分子都是在完全平动的情况下发生碰撞的. 但在实验过程中, 处在一定温度下的 C₆₀分子总处于随机的热运动状态中, 其中包括它自身的旋转运动. 这样, 给予一定入射动能的 C₆₀分子除了平动速度外还会存在旋转速度, 可以推测 C₆₀分子的旋转速度会对碰撞结果产生重大影响. 本文正是从这一角度出发, 考虑两个 C₆₀分子的旋转对碰, 以比较在有无旋转速度的情况下两种碰撞结果.

1 原理

分子动力学方法是利用牛顿运动方程来模拟材料内原子的运动, 模拟过程的关键是选择合适的原子间势能公式. 通常用的有 *ab initio* 密度泛函技术、简单经验势方法和紧束缚近似方法. 我们采用的是可适用于碳的紧束缚势模型^[4], 其紧束缚哈密顿量为:

$$H(\{r_i\}) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_n^{\text{occupied}} \phi_n |H_{\text{TB}}(\{r_i\})| \phi_n + E_{\text{rep}}(\{r_i\}),$$

收稿日期 2000-03-20

基金项目 江苏省光电技术重点实验室开放基金资助项目(1610803001)

作者简介 方云团, 1965—, 镇江船艇学院讲师, 主要从事材料模型模拟的教学与研究.

万方数据

其中 $\{r_i\}$ 表示原子的位置 ($i = 1, 2, 3, \dots, N$), p_i 表示原子 i 的动量, 第一项为原子的动能, 第二项为通过紧束缚哈密顿量 $H_{\text{TB}}(\{r_i\})$ 的计算而得出的电子的键能, 第三项为短程的排斥能,

$$E_{\text{rep}} = \sum_i \sum_j \phi(r_{ij}),$$

其中 $\phi(r_{ij})$ 是在原子 i 和 j 间的对势, ϕ 是四阶多项式,

$$\phi(x) = \sum_{i=0}^4 c_i x^i,$$

上述所有的参数取值于参考文献 [4].

运用这一模型我们模拟研究了在室温 300 K 下两个 C_{60} 分子的对碰与旋转对碰.

2 结果

在只有平动的情况下, 两个 C_{60} 分子以 120 eV 的能量在竖直方向对碰过程如图 1 所示. 两个球分子在相互靠近时, 由于存在相反方向的原子间排斥作用, 在相互靠近的部分先发生了变形, 并形成连键, 而其余部分还保持原状. 随着碰撞程度的进一步加深, 连键越来越多. 最后两个 C_{60} 分子笼状结构逐渐发生离解. 离解的主要原因是两个 C_{60} 分子的质心动能大部分转化为它们的内能, 太大的内能使它们不能保持原来稳定的结构.

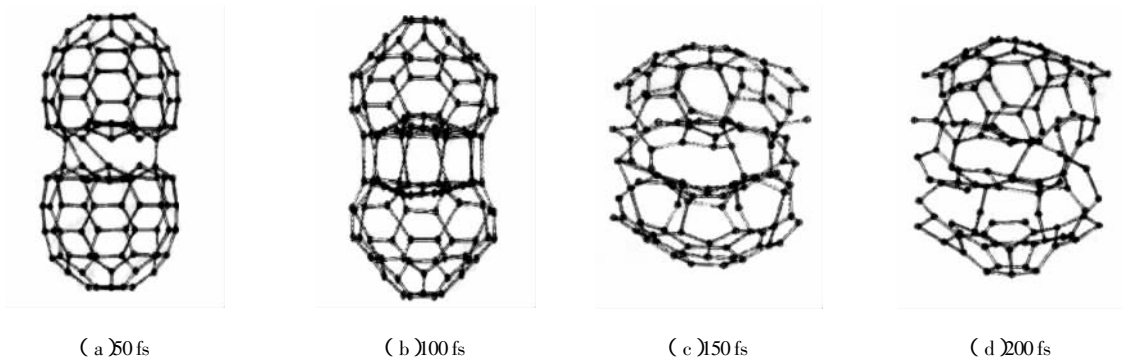


图1 入射动能为 120 eV 的两个 C_{60} 分子不同时刻的对碰情况

现在我们改变一下碰撞方式. 我们让两个 C_{60} 分子以 120 eV 的质心动能沿水平方向对碰, 但在它们相向运动的过程中各自加上角速度为 0.012 rad/fs 的顺时针旋转速度. 图 2 描绘了碰撞过程中原子的运动轨迹. 50 fs 时在它们靠近后由于挤压作用, 也同时发生了变形, 但不同于图 1 的是, 两个球分子的质心已不在同一水平线上, 而在竖直方向产生相对位移. 这是因为, 当两个球面上的原子靠近后, 由于具有相反方向的运动趋势, 它们之间产生了一种类似于摩擦力的切向相互作用力. 球面相互作用力产生的结果使两个 C_{60} 分子在竖直方向产生了相对运动. 再加上它的原来水平方向运动的惯性, 结果两个 C_{60} 分子的质心围绕它们的中心发生转动 (图 2). 我们还注意到, 尽管在碰撞过程中两个 C_{60} 分子的总动能大于图 1, 但碰撞后 C_{60} 分子结构的破坏程度显然没有图 1 的严重. 直到 300 fs 时, 它们还基本保持着笼状结构, 没有离散. 分析其原因, 关键是由于旋转速度产生的切向作用力使两个 C_{60} 分子在竖直方向发生相对运动, 错开一定距离, 从而大大缓解它们之间水平方向的冲击力. 更有趣的是由于碰撞产生的连键形式. 在碰撞后最初的一段时间内, 两个 C_{60} 分子间相互靠近的原子发生强烈的相互作用而形成了两对共价键. 随着两个 C_{60} 分子质心距离的增大, 这两对共价键附近的原子构形也随之发生变化, 靠左边的共价键已被拉长为由几个原子形成的线状链结构, 此时两个 C_{60} 分子相对的部分就像

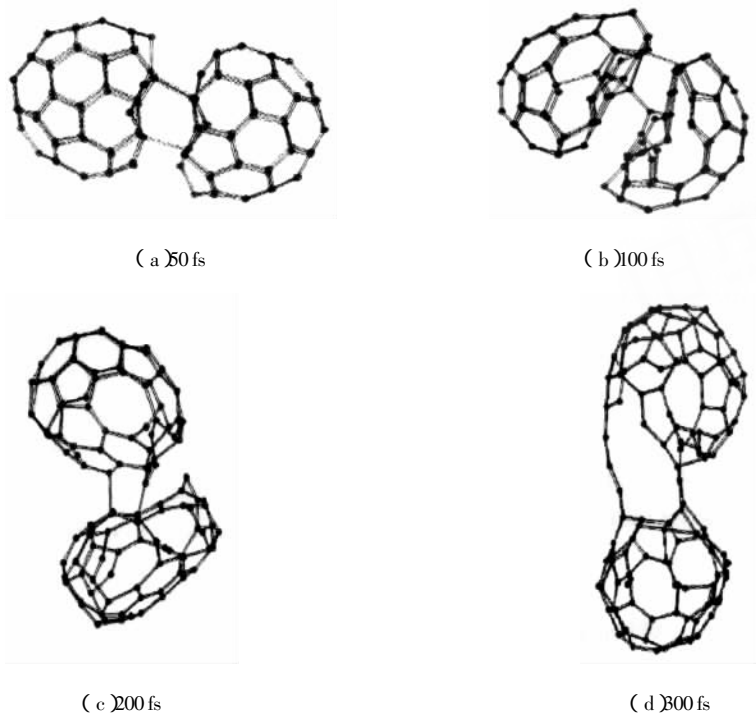


图 2 两个 C_{60} 分子不同时刻的旋转对碰情况

一对张开的嘴巴。

3 结果分析

在 $C_{60}^+ + C_{60}$ 碰撞的实验过程中, C_{60}^+ 和 C_{60} 除具有一定的平动动能外, 它们还处在随机的热运动状态中, 这其中就包括它自身的旋转运动. 因此两个 C_{60} 分子碰撞的情况是比较复杂的, 具有一定的随机性. 它包括无旋转的对碰, 无旋转的斜碰, 旋转方向相同的对碰或斜碰, 旋转方向相反的对碰或斜碰. 前两者的碰撞已有人作过多方面的研究^[1 2 3 5], 这里不再赘述. 旋转方向相反的对碰或斜碰, 若旋转速度相同或接近, 由于相碰的球面上原子没有相对运动趋势, 故可推断旋转速对碰撞结果没有多大影响. 本文研究了 C_{60} 分子在旋转方向相同的情况下的对撞, 与图 1 无旋转情况下的对撞进行比较, 可以看出旋转速度对碰撞结果的影响是明显的. 可以推断, 即使给 C_{60}^+ 相同的入射动能, 由于 C_{60}^+ 与 C_{60} 碰撞前的相对运动状态不同, 碰撞结果将会有很大的不同. 因此决定碰撞结果的因素是非常复杂的, 不可能仅由入射动能来决定.

总之, 两个 C_{60} 分子之间的碰撞在不同条件下结果是不同的, 碰撞后产物的形状、稳定性和运动模式依赖于碰撞能量和碰撞前的相对状态. 这些问题在 C_{60} 分子与半导体表面的碰撞中也同样存在. 我们的模拟结果对分析 $C_{60}^+ + C_{60}$ 碰撞以及 C_{60} 分子与半导体表面的碰撞的实验过程和实验结果具有一定的参考价值.

[参考文献]

- [1] Frank Rohmund , Eleanor E B Camphell , Olaf Knospe , *et al.* Collision Energy Dependence of Molecular Fusion and Fragmentation in $C_{60}^+ + C_{60}$ Collision[J]. Phys Rev Lett ,1996 ,76 :3289—3292.
- [2] Long Xiping , Richard L Graham , Chengteh Lee , *et al.* $C_{60} + C_{60}^+$ Collisions : Semiempirical Molecular Dynamics Simulations[J]. J Chem Phys ,1994 ,100 :7223—7228.
- [3] Zhang B L , Wang C Z , Chen C T , *et al.* Tight-Binding Molecular-Dynamics Simulations of Buckyball Collisions[J]. J Phys Chem ,1993 ,97 :3134—3138.
- [4] Xu C H , Wang C Z , Chen C T , *et al.* A Transferable Tight-Binding Potential for Carbon[J]. J Phys : Condens Matter ,1994 ,6 :6047—6054.
- [5] Campbell E E B , Schyja V , Ehlich R , *et al.* Observation of Molecular Fusion and Deep Inelastic Scattering in $C_{60}^+ + C_{60}$ Collisions[J]. Phys Rev Lett ,1993 ,70 :263—266.

Molecular Dynamics Simulations of C_{60} Collisions with Rotation Velocity

Fang Yuntuan¹ , Li Yanling² , Luo Chenglin²

(1. Zhenjiang Watercraft College of the PLA , Zhenjiang 212001 , PRC)

(2. College of Physical Science and Technology , Nanjing Normal University , Nanjing 210097 , PRC)

Abstract : The simulations on $C_{60} + C_{60}$ collisions using the tight-binding molecular-dynamics methods is carried out , in which C_{60} molecule is given a rotation velocity. The results show that the rotation plays an important role in the collisions.

Key words : tight-binding MD ; rotation ; collision

[责任编辑 : 丁蓉]