

文章编号: 1007-4708(2008)02-0150-06

用于 C₆₀ 纳米分子振动分析的碳-碳键合单元及坐标变换

曾攀*, 杨学贵, 杜婧

(清华大学 机械工程系 先进成形制造教育部重点实验室, 北京 100084)

摘要: C₆₀ 是一种纳米分子, 具有许多非常重要的物理化学性质, 采用 Raman 光谱可以测得它的分子振动特征, 正是这种振动特征可以明显地表征出它的分子结构和原子键合关系。本文基于分子力学的基本分析原理, 给出一种用于描述碳-碳共价键在小位移情形下力能关系的计算单元, 称为碳-碳键合单元, 重点讨论该单元在实际建模过程中的坐标变换问题, 将所建立的碳-碳键合单元用于 C₆₀ 纳米分子的振动分析, 分别给出了 C₆₀ 纳米分子的 Ag(1)、Ag(2)、Hg(1) 三个特征振型和频率, 并与群论的分析结果、Raman 光谱实验结果进行比较, 证明了所提出分析方法的正确性和实用性。

关键词: 碳-碳键合单元; C₆₀; 分子振动; 坐标变换
中图分类号: TU313.3; O328 **文献标识码:** A

1 引言

C₆₀ 是由 60 个碳原子组成的球形分子, 又称巴基球、足球烯、足球碳簇, 也称为富勒烯。晶形碳中的碳原子之间是碳-碳共价键进行结合的^[1], 它是自然界中已知的最强的化学键之一。近年来, 关于 C₆₀ 和碳纳米管的力学性能研究已引起了众多学者的兴趣, 相关的力学建模和分析方法也有多种多样^[2], 主要有基于势函数的分子动力学方法 (MD)^[2,3]、基于结合键变形能分析的分子力学方法 (MM)^[4]、基于连续介质力学的等效方法^[5], 还有一些新出现的多尺度耦合方法等^[6,7]。

分子力学方法 MM (Molecular Mechanics) 是根据 Born-Oppenheimer 假设, 将原子之间相互作用的能量仅考虑为两个原子核之间位置的函数, 考虑其中的主要相互作用, 可以将键能表示为^[4,8]

$$U_{\text{total}} = U_x + U_{\phi} + U_{\theta} \quad (1)$$

式中 U_x 为沿键轴的伸缩能, U_{ϕ} 为平面上的旋转能, U_{θ} 为平面上的旋转能。本文基于分子力学的基本分析原理, 给出一种比较简洁的分析方法, 即在式(1)的基础上构建一种用于描述碳-碳共价键力能关系的计算单元, 称为碳-碳键合单元, 并将其应用于 C₆₀ 纳米分子的振动分析。

2 碳-碳键合单元的构建

由分子力学中的基本假设, 根据式(1), 在原子的平衡位置附近, 可以将由于力的作用所产生的键能表示为位移的二次函数关系^[6,15], 即

$$U_{\text{total}} = \frac{1}{2} k_x x^2 + \frac{1}{2} k_{\phi} \phi^2 + \frac{1}{2} k_{\theta} \theta^2 \quad (2)$$

式中 k_x 为对应于沿键轴伸缩的力常数, x 为共价键沿键轴的伸缩位移, k_{ϕ} 为对应于在键合平面上的旋转的力常数, ϕ 为在平面上的共价键旋转的角度, k_{θ} 为对应于在键合平面上旋转的力常数, θ 为在平面上的共价键旋转的角度。对应于位移 x , ϕ 和 θ , 在共价键中产生的内力为

$$\left. \begin{aligned} I_x &= \frac{\partial U_{\text{total}}}{\partial x} = k_x x \\ M_{\phi} &= \frac{\partial U_{\text{total}}}{\partial \phi} = k_{\phi} \phi \\ M_{\theta} &= \frac{\partial U_{\text{total}}}{\partial \theta} = k_{\theta} \theta \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

实际碳-碳共价键的受力状况应是以上几种情况的集成。一个碳-碳键合单元的原子坐标和位移自由度如图 1 所示, 其中原子 C_i 的位移为 (u_{xi}, u_{yi}, u_{zi}) , 所受的力为 (P_{xi}, P_{yi}, P_{zi}) ; 原子 C_j 的位移为 (u_{xj}, u_{yj}, u_{zj}) , 所受的力为 (P_{xj}, P_{yj}, P_{zj}) , 键长为 a_{c-c} 。

在平衡位置附近, 可以将平面、平面内的转角用相应平面的节点位移和碳-碳键长 a_{c-c} 的形

收稿日期: 2005-09-23; 修改稿收到日期: 2006-01-16
基金项目: 国家自然科学基金(10172054)资助项目。
作者简介: 曾攀* (1963-), 男, 博士, 教授, 博士生导师
(E-mail: zengp@mail.tsinghua.edu.cn)

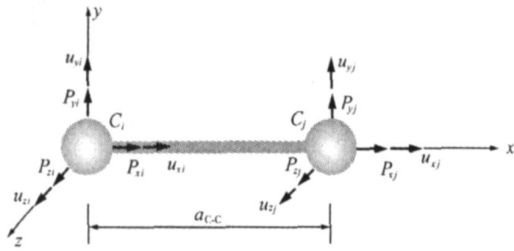


图 1 碳 - 碳键合单元
Fig. 1 A C-C bonding element

式。基于图 1 所定义的坐标自由度和平衡关系 (3), 可以将碳 - 碳键的伸缩平衡关系、在平面内的旋转平衡关系、在平面内的旋转平衡关系集成为以下的整体平衡关系:

$$\begin{bmatrix} k_x & 0 & 0 & -k_x & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k}{2a_{C-C}} & 0 & 0 & -\frac{k}{2a_{C-C}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{k}{2a_{C-C}} & 0 & 0 & -\frac{k}{2a_{C-C}} \\ -k_x & 0 & 0 & k_x & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{k}{2a_{C-C}} & 0 & 0 & \frac{k}{2a_{C-C}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{k}{2a_{C-C}} & 0 & 0 & \frac{k}{2a_{C-C}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{xi} \\ u_{yi} \\ u_{zi} \\ u_{xj} \\ u_{yj} \\ u_{zj} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{xi} \\ P_{yi} \\ P_{zi} \\ P_{xj} \\ P_{yj} \\ P_{zj} \end{bmatrix} \quad (4)$$

写成矩阵形式:

$$K_{C-C}^e u^e = P^e \quad (5)$$

这就是所构造的碳 - 碳键合单元,其中 K_{C-C}^e 为键合单元的刚度矩阵;与常规有限元方法类似,整体坐标系中碳 - 碳键合单元的刚度矩阵将由下列变换得到:

$$\bar{K}_{C-C} = T^{eT} K_{C-C}^e T^e \quad (6)$$

式中 T^e 为单元的局部坐标与整体坐标的变换矩阵。

3 碳 - 碳键合单元的坐标变换

实际的原子键在空间中是有取向的,就碳 - 碳共价键而言,它有连接两个碳原子的键轴方向,还有形成共价键的平面,以及垂直于平面的平面,因此,必须准确地描述键轴方向、平面和平面,才能准确地进行共价键性能的分析,这就需要

进行碳 - 碳键合单元的坐标变换。可以看出:碳 - 碳键合单元属于轴类单元,而它在整体坐标系中的自转状况往往是我们比较关心的;为了在整体坐标系中描述单元的局部坐标转动,一般需要分两次进行坐标变换,第一次为针对单元轴线的坐标变换,第二次为绕单元轴线的自转变换。设整体坐标系为 (X, Y, Z) , 第一次变换时的局部坐标系为 $(x^{(1)}, y^{(1)}, z^{(1)})$ (相对于一个参考面),第二次变换时的局部坐标系为 $(x^{(2)}, y^{(2)}, z^{(2)})$,这时的自转角度为 θ , 设 $x^{(2)}$ 轴为共价键的键轴,所在的 $(x^{(2)}, y^{(2)})$ 平面为共价键的平面,所在的 $(x^{(2)}, z^{(2)})$ 平面为共价键的平面。则整体的坐标变换为

$$T = T^{(2)} T^{(1)} \quad (7)$$

式中

$$T^{(1)} = \begin{bmatrix} (1) & \\ (3 \times 3) & 0 \\ 0 & (1) \\ & (3 \times 3) \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$T^{(2)} = \begin{bmatrix} (2) & \\ (3 \times 3) & 0 \\ 0 & (2) \\ & (3 \times 3) \end{bmatrix} \quad (9)$$

$${}^{(1)} = \begin{bmatrix} \cos(x^{(1)}, X) & \cos(x^{(1)}, Y) & \cos(x^{(1)}, Z) \\ \cos(y^{(1)}, X) & \cos(y^{(1)}, Y) & \cos(y^{(1)}, Z) \\ \cos(z^{(1)}, X) & \cos(z^{(1)}, Y) & \cos(z^{(1)}, Z) \end{bmatrix} \quad (10)$$

$${}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos & -\sin \\ 0 & \sin & \cos \end{bmatrix} \quad (11)$$

两次坐标变换如图 2 所示。

设整体坐标系 (X, Y, Z) 坐标轴的基矢量 I, J, K ; 局部坐标轴 $(x^{(1)}, y^{(1)}, z^{(1)})$ 的基矢量为 $i^{(1)}, j^{(1)}, k^{(1)}$ 和 $x^{(1)}$ 轴的方向余弦取为碳 - 碳键合单元轴向 B_0 的方向余弦,即为单元局部坐标系的轴向,则 $i^{(1)}$ 矢量的三个分量为

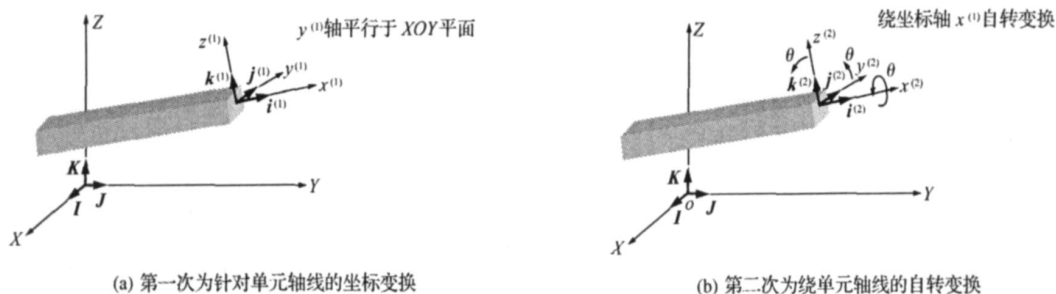
$$n_x^B = \frac{X_j - X_i}{a_{C-C}}, n_y^B = \frac{Y_j - Y_i}{a_{C-C}}, n_z^B = \frac{Z_j - Z_i}{a_{C-C}} \quad (12)$$

设 $y^{(1)}$ 轴平行于 XOY 平面,其基矢量 $j^{(1)}$ 既垂直于 $x^{(1)}$ 轴,又垂直于 Z 轴(基矢量 K),则

$$j^{(1)} = \frac{i^{(1)} \times K}{i^{(1)} \times K} = \frac{1}{d_{iK}} [(n_y^B) I + (-n_x^B) J] \quad (13)$$

式中

$$d_{iK} = \sqrt{(n_y^B)^2 + (-n_x^B)^2} \quad (14)$$



(a) 第一次为针对单元轴线的坐标变换

(b) 第二次为绕单元轴线的自转变换

图 2 两次坐标变换示意图

Fig. 2 Sketch of coordinate conversion

局部坐标系 $(x^{(1)}, y^{(1)}, z^{(1)})$ 坐标轴的基矢量 $k^{(1)}$ 与 $i^{(1)}, j^{(1)}$ 垂直, 则

$$k^{(1)} = i^{(1)} \times j^{(1)} \quad (15)$$

在得到第一次变换后的坐标轴 $(x^{(1)}, y^{(1)}, z^{(1)})$ 的基矢量后, 即 $i^{(1)}, j^{(1)}$ 和 $k^{(1)}$, 就可以根据式 (10) 计算矩阵 $^{(1)}$ 。

4 针对 C₆₀ 纳米分子的碳-碳键合单元的坐标变换

4.1 基本变换式

设 C₆₀ 分子的整体坐标系为 (X, Y, Z) , 碳-碳键合单元的局部坐标系为 (x, y, z) , 如图 3 所示, C₆₀ 球面的方程为

$$X^2 + Y^2 + Z^2 = R^2 \quad (16)$$

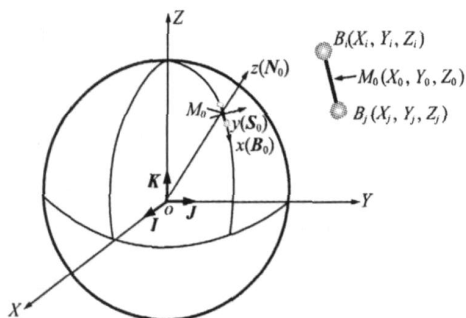


图 3 C₆₀ 中的碳-碳键合单元的局部坐标表达

Fig. 3 Coordinate conversion of C-C bonding element in C₆₀

在 C₆₀ 球面上有一个键合单元, 其两个碳原子坐标为 $B_i(X_i, Y_i, Z_i)$ 和 $B_j(X_j, Y_j, Z_j)$, 单元中点坐标为 $M_0(X_0, Y_0, Z_0)$ 。在键的中点 $M_0(X_0, Y_0, Z_0)$ 上构成的局部坐标系 (x, y, z) 的基矢量为

$$x \Rightarrow B_0, \quad y \Rightarrow S_0, \quad z \Rightarrow N_0 \quad (17)$$

式中 N_0 为该点的法线, B_0 为单元局部坐标系的轴向, 根据方向余弦可以很容易得出:

$$\begin{cases} n_X^N = \frac{X_0}{R}, \quad n_Y^N = \frac{Y_0}{R}, \quad n_Z^N = \frac{Z_0}{R} \\ n_X^B = \frac{X_j - X_i}{a_{c-c}}, \quad n_Y^B = \frac{Y_j - Y_i}{a_{c-c}}, \quad n_Z^B = \frac{Z_j - Z_i}{a_{c-c}} \end{cases} \quad (18)$$

S_0 为单元的横向, 位于整体坐标系中为球表面 $M_0(X_0, Y_0, Z_0)$ 点切平面上, 同时与该点的轴向 B_0 和法向 N_0 垂直, 从而得出

$$S_0 = -B_0 \times N_0 \quad (19)$$

整体坐标系 (x, y, z) 坐标轴的基矢量为 I, J 和 K , 碳-碳键合单元的局部坐标系 (x, y, z) 坐标轴的基矢量为 B_0, S_0 和 N_0 , 两个坐标系之间的变换写成矩阵形式为

$$\begin{matrix} X \\ Y \\ Z \end{matrix} = \begin{matrix} R \\ (3 \times 3) \end{matrix} \begin{matrix} x \\ y \\ z \end{matrix} + \begin{matrix} M_0 \\ (3 \times 1) \end{matrix} \quad (20)$$

式中 $\begin{matrix} X \\ Y \\ Z \end{matrix} = [X \ Y \ Z]^T, \begin{matrix} x \\ y \\ z \end{matrix} = [x \ y \ z]^T, M_0 = [X_0 \ Y_0 \ Z_0]^T$ 为局部坐标系 (x, y, z) 的原点坐标, $\begin{matrix} R \\ (3 \times 3) \end{matrix}$ 变换矩阵为

$$\begin{matrix} R \\ (3 \times 3) \end{matrix} = \begin{bmatrix} n_X^B & n_X^S & n_X^N \\ n_Y^B & n_Y^S & n_Y^N \\ n_Z^B & n_Z^S & n_Z^N \end{bmatrix} \quad (21)$$

4.2 $(Z_j + Z_i) = 0$ 下碳-碳键合单元的坐标变换和定位

设在局部坐标系 (x, y, z) 中的 $x = 0$ 平面上有一个单位圆, 其上的一点 B 的坐标满足关系:

$$x_B = 0, \quad y_B^2 + z_B^2 = 1 \quad (22)$$

转换到整体坐标系 (X, Y, Z) 中, 其坐标为 $(X_B, Y_B$ 和 $Z_B)$, 有关系:

$$\begin{matrix} X_B \\ Y_B \\ Z_B \end{matrix} = \begin{matrix} R \\ (3 \times 3) \end{matrix} \begin{matrix} x_B \\ y_B \\ z_B \end{matrix} + \begin{matrix} M_0 \\ (3 \times 1) \end{matrix} \quad (23)$$

根据前面所述两步变换法, 令整体坐标系中的 $B(X_B, Y_B, Z_B)$ 点的坐标 $Z_B = Z_0$, 即 M_0 与 B 点的连线平行于整体坐标系的 XOY 平面如图 4 所示, 则有

$$Z_B = n_Z^S y_B + n_Z^N z_B + Z_0 = Z_0 \quad (24)$$

进一步有

$$\begin{aligned} \text{tg} &= \frac{-Z_B}{y_B} = \frac{n_Z^S}{n_Z^N} = \frac{n_Y^B n_X^N - n_X^B n_Y^N}{n_Z^N} = \\ &= \frac{2(X_i Y_j - X_j Y_i)}{a_{c-c}(Z_j + Z_i)} \end{aligned} \quad (25)$$

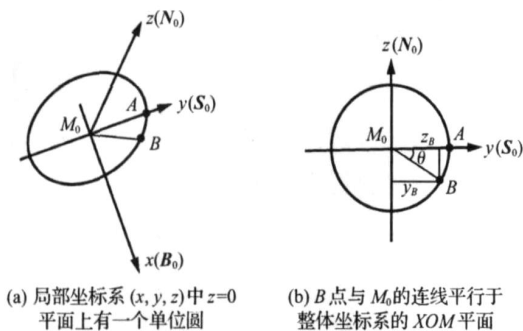


图 4 局部坐标系中的单位圆和特征点
Fig. 4 Characteristic point and circle of local coordinate

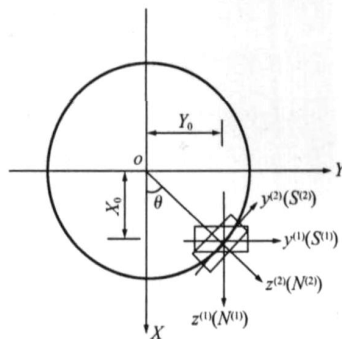


图 5 $Z_j = -Z_i = 0$ 且单元轴线平行于 Z 轴情形的坐标变换
Fig. 5 Coordinate conversion when $Z_j = -Z_i = 0$ and element axis parallel to Z -axis

当 $(Z_j + Z_i) = 0$ 时,即键合单元中点位于 XOY 平面上时出现奇异,需要进行单独的处理。

(1) $Z_j = Z_i = 0$ 时,碳-碳键合单元位于整体坐标系中的 XOY 平面,其坐标变换只需要第一次坐标变换 $T^{(1)}$,而不需要绕单元轴线的自转变换,取 $\alpha = 0$,则 $T^{(2)}$ 为单位矩阵。

(2) $Z_j = -Z_i = 0$ 且单元轴线不平行于 Z 轴的情形;先进行第一次坐标变换,然后,在第二次绕单元轴线的自转变换中,此时, $\alpha = \pi/2$ 。

(3) $Z_j = -Z_i = 0$ 且单元轴线平行于 Z 轴的情形;由于此时碳-碳键合单元的轴线已平行于 Z 轴,当绕局部坐标系 x 轴进行旋转时,其 y 轴始终都在 XOY 平面上。因此,第一次变换时,局部坐标系中的 y 轴平行于整体坐标系中的 XOY 平面的设定将不能唯一确定后面的旋转变换,需要重新定义。可以将第一次变换中,局部坐标系 (x, y, z) 中的 y 轴取为与整体坐标系的 Y 轴平行,然后就可以进行唯一的旋转如图 5 所示。这时的旋转角度为

$$\tan \theta = -\frac{Y_0}{X_0} \quad (26)$$

有了以上的碳-碳键合单元的坐标变换公式,就可以针对实际的 C₆₀ 分子进行所有碳-碳共价键的建模,并分析其各种力学性能。

5 C₆₀ 纳米分子的振动模态计算

Raman 光谱是研究碳材料的重要方法,是表征 C₆₀ 及其化合物分子结构的有力手段^[1,9],它可以测得纳米分子的自然振动频率,许多学者都对 C₆₀ 的 Raman 光谱进行实际观测^[9-11],并发现其中有三个明显的特征峰,其中一组被认为最好的数据^[11] 见表 1。在光谱分析中,一般都采用波数来表

达频率,即 cm^{-1} ;换算关系为: $f = c \cdot \tilde{\nu}$,其中, f 为频率 (Hz), $\tilde{\nu}$ 为波数 (cm^{-1}), c 为光速 (3×10^{10} cm/s)。

表 1 C₆₀ 纳米分子的三个特征峰的频率^[11]
Tab. 1 Frequencies of three characteristic modes of C₆₀ nano molecule

模态	波数 (cm^{-1})	频率 (Hz)
A _g (1)	497	1.491e + 13
A _g (2)	1470	4.41e + 13
H _g (1)	273	8.19e + 12

从理论上对纳米分子进行振动模态的分析,一般都采用非常复杂的群论方法^[12,13]。C₆₀ 分子振动模态按 I_h 点群的不可约表示进行对称性分类,其特征标为

$$2A_g + 3F_{1g} + 4F_{2g} + 6G_g + 8H_g + A_u + 4F_{1u} + 5F_{2u} + 6G_u + 7H_u \quad (37)$$

通过群论分析和 Raman 光谱实验可知,在两个 Raman 活性的 A_g 模中,其中一个为径向位移的呼吸模 (breathing mode) A_g(1),其频率为 497 cm^{-1} ,另一个为切向位移的五边形收缩模 (pentagonal pinch mode),A_g(2) 其频率为 1470 cm^{-1} ,8 个 Raman 活性的五重简并 H_g 模的第一个频率为 273 cm^{-1} 。

分子在原平衡位置附近进行微小的振动,完全可以采用式 (2) 所描述的能量表达式,因此也可以采用本文的碳-碳键合单元对 C₆₀ 分子进行振动模态的分析。通过考察三个力常数与 C₆₀ 三个特征峰分子振动频率的关系,用三个特征峰分子振动频率的实验值反推得到了 C₆₀ 分子的碳-碳键合单元的三个力常数: $k_x = 560.17 \text{ nN/nm}$, $k_y = 2.621 \text{ nN} \cdot \text{m}$, $k_z = 1.815 \text{ nN} \cdot \text{nm}$ 。

表 2 C_{60} 纳米分子振动频率的结果及比较 (单位: cm^{-1})

Tab.2 Computational results and comparisons of mode frequencies of C_{60} nano molecule (unit: cm^{-1})

C_{60} 纳米分子的振型	$A_g(1)$	$A_g(2)$	$H_g(1)$
简并阶次	1	1	5
Raman 实验结果 ^[11]	497	1470	273
群论分析的结果 ^[12]	510	1830	274
等效梁单元的计算结果	438.64	1575.13	169.90
	(1 阶简并)	(1 阶简并)	(4 阶简并)
碳-碳键合单元的计算结果	490.996	1575.10719	229.83116
	(1 阶简并)	(1 阶简并)	(5 阶简并)

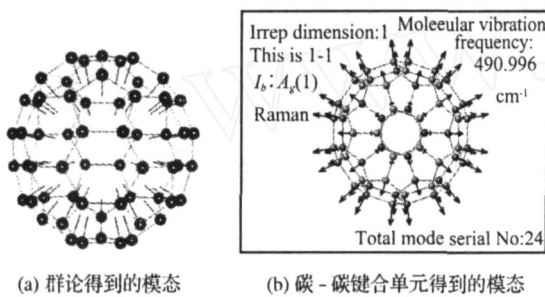


图 6 C_{60} 分子的振动模式 $A_g(1)$
Fig.6 $A_g(1)$ mode of C_{60} molecule

我们用碳-碳键合单元计算 C_{60} 的分子振动模式,并将该结果与群论的结果进行了比较^[1,9]。从结果可以看出,通过碳-碳键合单元的 C_{60} 分子振动模型可以完全计算出 C_{60} 的 46 种振型模式,其振动方式与群论分析结果完全一致,得到的三个特征峰的振动频率数值也接近实验值。图 6 给出了 $A_g(1)$ 振型模式的比较,其他特征振型比较结果与此相似。表 2 给出了三个特征振型的频率值比较。

有学者采用等效梁单元或等效连续体的方法来对碳-碳共价键进行建模和分析^[14,15],并应用于碳纳米管的静力分析中。实际上梁单元两端转动自由度的影响不可忽略。采用梁单元对 C_{60} 的分子振动进行分析,无论怎样调整梁单元的刚度值,都无法计算出与群论分析相对应的简并模式,说明碳-碳共价键的力能关系是不能用梁单元来进行描述的,而碳-碳键合单元恰恰反映了碳-碳键微观作用的本质规律。

与群论分析方法相比较,基于分子力学的碳-碳键合单元建模过程非常简单,可得到正确的纳米分子振动模式,具有很大的优势。

6 结 论

本文基于分子力学的分析原理,分析了碳-碳共价键的力学表达,包括沿键轴的伸缩、在平面和平面内的旋转势能,构建了完整的碳-碳键合单元,系统研究了碳-碳键合单元的坐标变换问题,涉及针对单元轴线的坐标变换和绕单元轴线的自转变换,完整给出了求解自转角度的表达式;应用所构建的碳-碳键合单元模型,完整分析了 C_{60} 的 Raman 光谱中的三个特征峰: $A_g(1)$, $A_g(2)$ 和 $H_g(1)$, 计算得到的振型与群论的计算结果完全一致。同时还基于实验结果得到了碳-碳键合单元的三个力常数: $k_x = 560.17 \text{ nN/nm}$, $k_y = 2.621 \text{ nN} \cdot \text{nm}$, $k_z = 1.815 \text{ nN} \cdot \text{nm}$ 。这三个基于实验数据得到的力常数将对分子力学分析具有重要的参考价值。研究表明碳-碳键合单元在 C_{60} 纳米分子的振动分析中具有建模方法简单和效率高的优势。

参考文献(References):

- [1] KORUGA D, HAMEROFF S, et al. *Fullerene C₆₀* [M]. Amsterdam: North-Holland, 1993.
- [2] QIAN D, WAGNER G J, LIU W K, et al. Mechanics of carbon nanotubes [J]. *Applied Mechanics Reviews*, 2002, 55(6): 495-532.
- [3] GUO W, GUO Y, WANG L. Molecular dynamics and quantum mechanics investigation on mechanic-electric behaviors of nanotubes [J]. *Int J of Nonlinear Science and Num. Simulation*, 2002, (3): 469-472.
- [4] CHANG T, GAO H. Size-dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2003, 51: 1059-1074.
- [5] LI C, GUO W L. Continuum mechanics simulation of post-buckling of single-walled nanotubes [J]. *Int J of Nonlinear Sci and Num Simulation*, 2003, (4): 387-393.
- [6] LIU B, HUANG Y, JIANG H, et al. The atomic-scale finite element method [J]. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 2004, (193): 1849-1864.
- [7] BEL YTSCHKO T, XIAO S P. Coupling methods for continuum model with molecular model [J]. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2003, 1(1): 115-126.
- [8] STEPHEN L M, BARRY D O, WILLIAM A G.

- DREIDING: a generic force field for molecular simulations[J]. *J Phy Chem*, 1990, **94**:8897-8909.
- [9] ADAMS GB, PAGEJ B, SANKEY O F, et al. First-principle quantum-molecular-dynamics study of the vibrations of icosahedral C_{60} [J]. *Physical Review B*, 1991, **44**(8):4052-4055.
- [10] TOLBERT S H, ALIVISATOS A P, et al. Raman studies on C_{60} at high pressures and low temperature [J]. *Chem Phys Letters*, 1992, **188**:163.
- [11] 张光寅, 蓝国祥, 王玉芳. 晶格振动光谱学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2001. (ZHANG Guang-yin, LAN Guo-xiang, WANG Yu-fang. *Lattice Vibration Spectroscopy*[M]. Beijing: Higher Education Press, 2001. (in Chinese))
- [12] WU Z C, JELSKI D A, GEORGE T F. Vibrational motions of buckminsterfullerene [J]. *Chem Phys Letters*, 1987, **137**:291.
- [13] JIANG Q, XIA H, ZHANG Z, et al. Vibrational spectrum of C_{60} [J]. *Chem Phys Letters*, 1992, **192**:93.
- [14] LI C, CHOU T W. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes[J]. *International Journal of Solids and Structure*, 2003, **40**:2487-2499.
- [15] ODEGARD G M, GATES T S, NICHOLSON. Quivalent-continuum modeling of nano-structured materials[J]. *Composites Science and Technology*, 2002, **62**:1869-1880.

A C-C bonding element and coordinate transformation for vibrational analysis of C_{60} nano-molecule

ZENG Pan*, YANG Xue-gui, DU Jing

(Department of Mechanical Engineering, Tsinghua University, Key Laboratory for Advanced Materials Processing Technology, Ministry of Education of China, Beijing 100084, China)

Abstract: C_{60} is a new nano-molecule with many important physical and chemical properties. General Raman spectrum is used to measure the vibrational properties, which can identify the structure of its molecule and the bonding relationship between atoms. Based on the principle of molecular mechanics, the paper proposes a computational element to describe the force and energy relation of a C-C covalent bond, termed Carbon-Carbon Bonding Element (CCBE). Some focuses are put on the coordinate transformation of CCBE when modeling. The vibrational modes of C_{60} nano-molecule are investigated via CCBE. The resulted modes: $A_g(1)$, $A_g(2)$, $H_g(1)$, are totally present, which are compared with those by group theory and Raman experiment. It is verified that the CCBE is an effective and practical method.

Key words: carbon-carbon bonding element; C_{60} ; molecular vibration; coordinate transformation