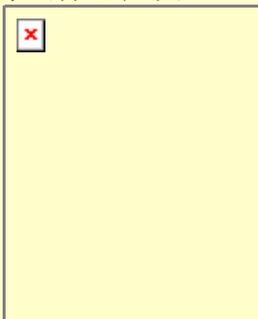


## 本期封面



2006年1

栏目:

DOI:

论文题目: C60、C180、C60@C180富勒烯分子的压缩力学特性与电子结构

作者姓名: 沈海军, 穆先才

工作单位: 南京航空航天大学航空宇航学院, 南京210016

通信作者: 沈海军

通信作者Email: [Shj@nuaa.edu.cn](mailto:Shj@nuaa.edu.cn)

文章摘要: 采用分子动力学方法模拟了C60、C180、C60@C180富勒烯分子的压缩过程, 用PM3半经验量子力学方法计算了压缩C60、C180、C60@C180分子的电子结构, 讨论了C60、C180、C60@C180分子压缩力学特性的差异, 以及电子结构在压缩过程中的变化. 结果表明, 由于分子几何构形上的差异, C60分子的承载与吸收能量能力显著高于C180和C60@C180分子, 而C60@C180分子略高于C180分子; C60分子具有最高的化学稳定性, 而C60@C180分子的稳定性最低; C60和C60@C180分子的压缩变形越大, 越容易失去电子, 稳定性越低; C180分子在加载点处发生压缩“塌陷”时, 化学活性明显增加.

关键词: 材料科学基础学科; 分子动力学; 量子力学

分类号:

关闭