

快速 C_{60} 离子团在固体中的库仑爆炸过程 II* 分子动力学模拟

邱华檀 王友年

(大连理工大学物理系, 三束材料改性国家重点实验室, 大连 116023)

(1999 年 12 月 7 日收到)

研究了快速 C_{60} 离子团与固体材料的相互作用过程. 借助于线性介电响应理论及等离子-极点近似介电函数, 推导出作用在团簇中单个离子上的动力学相互作用力, 并建立了一套描述离子团中单个离子运动的方程组. 通过数值求解运动方程组, 可以发现, 对于高速 C_{60} 离子团在固体中穿行时, 由于动力学相互作用力的影响, 使得库仑爆炸图形呈现出很强的非球对称性, 即离子团中的导航离子群爆炸得较快, 而尾随离子群则保持相对地稳定.

关键词: 离子团, 库仑爆炸, 动力学相互作用

PACC: 6180M, 3480B

1 引 言

在文献 [1] 中, 我们研究了 C_{60} 离子团在固体中穿行时的库仑爆炸过程, 发现了自能中的尾效应可以降低库仑爆炸的速度, 甚至可以对离子团的结构起稳定和压缩作用. 但是在该文中, 我们假定了离子团中离子之间的位置矢量的取向是随机分布的, 并采用了一种球壳层模型来描述 C_{60} 离子团的结构, 完全忽略了离子团在库仑爆炸过程中其结构变化的各向异性. 仅当离子团的入射速度较低时或它在固体中穿行的时间较短时, 这种球壳层模型假设才近似成立.

实际上, 当一载能离子团在固体中穿行时, 固体中电子气的平衡状态将要受到扰动, 要产生极化效应, 即产生极化感应电势. 这种极化效应一方面要对离子团中的内部库仑排斥势进行屏蔽, 减缓离子团库仑爆炸的速度; 另一方面, 由这种极化效应产生的动力学相互作用力在离子团的运动方向是不对称的, 这是由于离子团中单个离子产生的感应电势对在它后面运动的离子作用较强, 而对前面运动的离子作用则较弱, 即所谓的“尾效应”. 对于高速的 H_2^+ 在固体中穿行, 已经证明动力学相互作用的这种尾

效应使得氢分子中两离子之间位置矢量的取向明显地向入射速度方向倾斜^[2-6]. 因此完全有理由相信, 对于在固体中高速运动的 C_{60} 离子团, 尽管其初始结构具有球对称性, 但动力学相互作用力中的尾效应将使其结构呈现出明显地空间非球对称性.

本文将对 C_{60} 离子团在固体中穿行时的库仑爆炸过程和能量损失进行较为系统的理论研究. 首先我们采用线性介电理论和等离子-极点近似介电函数确定出离子团中离子之间的动力学相互作用力. 其次, 采用分子动力学方法模拟 C_{60} 离子团的库仑爆炸过程, 研究尾效应对其结构变化的影响. 为了讨论方便, 本文采用原子单位 (au), 即 $m_e = \hbar = e = 1$.

2 动力学相互作用力

将固体中的电子成分看成一密度为 n_0 的电子气, 考虑一快速 C_{60} 离子团以速度 v_0 沿 z 方向入射于固体表面. 由于该离子团中每个离子的质量 M 、核电荷数 Z_1 及核外束缚电子的分布完全等价, 因此在 t 时刻该离子团中任意一个离子的电荷空间分布为

$$\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}_j, t) = Z_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t) - \rho_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t) \quad (j = 1, 2, \dots, 60), \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 19975008), 教育部优秀年轻教师研究基金(批准号: 98-9)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 97014124)资助的课题.

其中 $\mathbf{R}_j = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t$ 是团簇中第 j 个离子的位置矢量, \mathbf{v}_j 表示第 j 个离子的速度, $\rho_n(\mathbf{R}_j)$ 是每个离子上的束缚电荷分布. 束缚电荷分布的形式已在文献 [1] 中给出.

借助于线性介电响应理论及采用柱坐标系, 该离子团中第 j 个离子在固体中产生的动力学势为^[7]

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t) = & \frac{1}{\pi v_j} \int_0^\infty \kappa J_0(\tilde{\rho}_j \kappa) d\kappa \\ & \cdot \int_{-\infty}^\infty \frac{\rho_0^2(k) d\omega}{k^2 \epsilon(k, \omega)} \exp(i\omega \tilde{z}_j / v_j), \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $\tilde{\rho}_j = \sqrt{(x - x_j)^2 + (y - y_j)^2}$, $\tilde{z}_j = z - z_j - v_j t$, $\epsilon(k, \omega)$ 为固体的介电函数, 它依赖于频率 ω 及波数 $k = (\kappa^2 + \omega^2 / v_j^2)^{1/2}$, $\rho_0(k)$ 为单个离子电荷分布的 Fourier 变换 $J_0(\tilde{\rho}_j \kappa)$ 是零阶 Bessel 函数. 由于离子团在穿行过程中, 其速度 v 相对于初始速度 v_0

变化很小, 故我们在给出方程 (2) 时已假定它的速度方向仍沿 z 轴方向. 这样借助于这种动力学势, C_{60} 离子团中任意两个离子之间的动力学相互作用力为

$$\begin{aligned} F_{\text{int}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) = & - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_{jl}} \int d\mathbf{r} \rho_{\text{ext}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t) \\ & \cdot \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l - \mathbf{v}_l t), \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $j, l = 1, 2, \dots, 60$, $\mathbf{R}_{jl} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l$ 是离子团中第 j 个离子与第 l 个离子的相对位置矢量. 对于快速离子团, 团中第 j 个离子的速度 v_j 与第 l 个离子的速度 v_l 相差不是太大, 所以在如下计算两离子之间的动力学相互作用力时, 我们认为两离子的速度近似地相等.

这样根据以上方程并利用等离子-极点近似 (PLA) 介电函数^[1] 经过一系列的繁杂推导, 可以把动力学相互作用力写成如下形式:

$$\begin{aligned} F_{\text{int}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) = & F_{\text{C}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) + F_{\text{d}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) \\ & + F_{\text{w}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j), \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $F_{\text{C}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j)$ 是内部相互作用库仑力,

$$F_{\text{C}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) = \frac{(Z_1 q)^2}{R_{jl}^3} \mathbf{R}_{jl} + \frac{Z_1^2 (1 - q^2)}{R_{jl}^3} (1 + R_{jl} / \Lambda) e^{-R_{jl} / \Lambda} \mathbf{R}_{jl} - \frac{Z_1^2 (1 - q)^2}{2 \Lambda^2 R_{jl}} e^{-R_{jl} / \Lambda} \mathbf{R}_{jl}, \quad (5)$$

很明显, 当交换两离子的位置时, 这种力是反对称的, 且当 $\Lambda \rightarrow 0$ (即没有束缚电子存在) 时, 它可以变为裸库仑相互作用力 $F_{\text{C}}(\mathbf{R}_{jl}) = \frac{Z_1^2}{R_{jl}^3} \mathbf{R}_{jl}$. 在方程 (4) 中, $F_{\text{d}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j)$ 是动力学相互作用力的屏蔽部分, 它的三个分量分别为

$$\begin{aligned} F_{\text{dx}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) = & -2 \frac{x_{jl}}{\rho_{jl}} \frac{(Z_1 q)^2 \omega_p^2}{v_j^2} \int_0^\infty \tau J_1(\sqrt{2} \tau \rho_{jl}) \frac{\exp(-\sqrt{2} \tau |z_{jl}|)}{2\tau^2 + \omega_p^2 / v_j^2} d\tau; \\ F_{\text{dy}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) = & -2 \frac{y_{jl}}{\rho_{jl}} \frac{(Z_1 q)^2 \omega_p^2}{v_j^2} \int_0^\infty \tau J_1(\sqrt{2} \tau \rho_{jl}) \frac{\exp(-\sqrt{2} \tau |z_{jl}|)}{2\tau^2 + \omega_p^2 / v_j^2} d\tau; \\ F_{\text{dz}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) = & -2 \frac{(Z_1 q)^2 \omega_p^2}{v_j^2} \frac{z_{jl}}{|z_{jl}|} \int_0^\infty \tau J_0(\sqrt{2} \tau \rho_{jl}) \frac{\exp(-\sqrt{2} \tau |z_{jl}|)}{2\tau^2 + \omega_p^2 / v_j^2} d\tau, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $J_1(\sqrt{2} \tau \rho_{jl})$ 是一阶 Bessel 函数, $\rho_{jl} = \sqrt{(x_j - x_l)^2 + (y_j - y_l)^2}$. 显然可见, $F_{\text{d}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j)$ 也是一种反对称的相互作用力. 最后, 在方程 (4) 中, $F_{\text{w}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j)$ 是尾力, 来自于电子气中的单粒子激发和集体激发, 它的三个分量分别为

$$\begin{aligned} F_{\text{wx}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) = & 2 \frac{x_{jl}}{\rho_{jl}} \omega_p^2 \int_0^{\tau_c} \tau^2 J_1(\sqrt{2} \tau \rho_{jl}) \frac{\rho_0^2(\sqrt{2} \tau^2 + \xi_{\pm}^2)}{\delta^2 \xi_{\pm} (\tau^2 + \xi_{\pm}^2)} \sin(\sqrt{2} \xi_{\pm} z_{jl}) d\tau \\ & - \frac{x_{jl} Z_1^2 \omega_p^2}{\rho_{jl}} \int_{\tau_c}^\infty \tau^2 J_1(\sqrt{2} \tau \rho_{jl}) \frac{N_1}{\eta_+ \eta_- (\eta_+^2 + \eta_-^2) D} \exp(-\sqrt{2} \eta_- |z_{jl}|) d\tau, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} F_{\text{wy}}(\mathbf{R}_{jl}, \mathbf{v}_j) = & 2 \frac{y_{jl}}{\rho_{jl}} \omega_p^2 \int_0^{\tau_c} \tau^2 J_1(\sqrt{2} \tau \rho_{jl}) \frac{\rho_0^2(\sqrt{2} \tau^2 + \xi_{\pm}^2)}{\delta^2 \xi_{\pm} (\tau^2 + \xi_{\pm}^2)} \sin(\sqrt{2} \xi_{\pm} z_{jl}) d\tau \\ & - \frac{y_{jl} Z_1^2 \omega_p^2}{\rho_{jl}} \int_{\tau_c}^\infty \tau^2 J_1(\sqrt{2} \tau \rho_{jl}) \frac{N_1}{\eta_+ \eta_- (\eta_+^2 + \eta_-^2) D} \exp(-\sqrt{2} \eta_- |z_{jl}|) d\tau, \end{aligned} \quad (8)$$

$$F_{wz}(\mathbf{R}_{jl}, v_l) = -2\omega_p^2 \int_0^{\tau_c} \tau J_0(\sqrt{2}\tau\rho_{jl}) \frac{\rho_{\pm}^2(\sqrt{2}\tau^2 + \xi_{\pm}^2)}{\delta^2(\tau^2 + \xi_{\pm}^2)} \cos(\sqrt{2}\xi_{\pm} z_{jl}) d\tau - Z_1^2 \omega_p^2 \frac{z_{jl}}{|z_{jl}|} \int_{\tau_c}^{\infty} \tau J_0(\sqrt{2}\tau\rho_{jl}) \frac{\eta_- N_1 + \eta_+ N_2}{\eta_+ \eta_- (\eta_+^2 + \eta_-^2) D} \exp(-\sqrt{2}\eta_- |z_{jl}|) d\tau, \quad (9)$$

其中

$$\begin{aligned} \xi_{\pm} &= (\alpha^2 \pm \delta^2)^{1/2}, \alpha^2 = v_j^2 - \beta^2 - \tau^2, \delta^2 = \sqrt{2}v_j(\tau^2 - \tau_c^2)^{1/2}, \\ \eta_{\pm} &= [(\tau^4 + 2\beta^2\tau^2 + \omega_p^2)^{1/2} \pm \alpha^2]^{1/2} / \sqrt{2}, \\ D &= (\tau^2 + \eta_+^2 - \eta_-^2)^2 + 4\eta_+^2 \eta_-^2, W = 2\Lambda^2(\eta_+^2 - \eta_-^2 + \tau^2), \\ \rho_{0r} &= \frac{(W + q)(W + 1) + 16\eta_+^2 \eta_-^2 \Lambda^4}{(W + 1)^2 + 16\eta_+^2 \eta_-^2 \Lambda^4}, \rho_{0i} = \frac{4\eta_+ \eta_- \Lambda^2(1 - q)}{(W + 1)^2 + 16\eta_+^2 \eta_-^2 \Lambda^4}, \\ W_1 &= (\rho_{0r}^2 - \rho_{0i}^2)\eta_+(\tau^2 + \eta_+^2 - 3\eta_-^2) + 2\rho_{0r}\rho_{0i}\eta_-(\tau^2 + 3\eta_+^2 - \eta_-^2), \\ W_2 &= (\rho_{0r}^2 - \rho_{0i}^2)\eta_-(\tau^2 + 3\eta_+^2 - \eta_-^2) - 2\rho_{0r}\rho_{0i}\eta_+(\tau^2 + \eta_+^2 - 3\eta_-^2), \\ C &= \cos(\sqrt{2}\eta_+ |z_{jl}|), S = \sin(\sqrt{2}\eta_+ |z_{jl}|), N_1 = W_1 C + W_2 S, N_2 = W_1 S - W_2 C. \end{aligned}$$

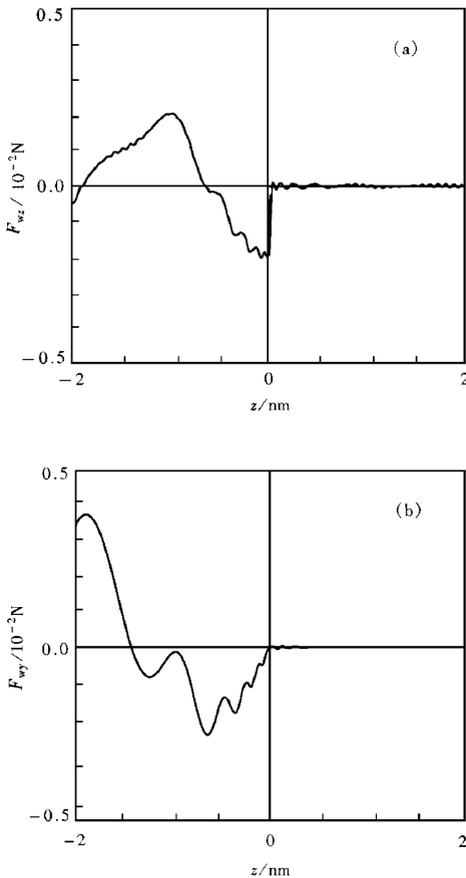


图1 C_{60} 离子团中任意两个离子间的动力学相互作用尾力的两个分量 F_{wz} 和分量 F_{wy} 随相对位置 z 的变化

在(7)–(9)式中,变量 ξ_+ 和 ξ_- 分别对应 $z_{jl} \geq 0$ 和 $z_{jl} < 0$ 的情况,积分限为 $\tau_c = [(\tau_j^2 - \beta^2)^2 - \omega_p^2]^{1/2} \cdot (\sqrt{2}v_j)^{-1}$.

根据上述方程,图1(a),图1(b)显示了初始速度为 $v_0 = 4v_B$ 的 C_{60} 离子团在 Al 靶中穿行时团中任意两个离子的相互作用尾力随相对位置矢量 z_{jl} 分量的变化.显然,尾力随两离子之间的相对位置的变化呈现出明显的振荡性,且具有很强的非对称性,即离子团中的导航离子群($z_j \geq 0$)受到的尾力较弱,而尾随离子群($z_j < 0$)则受到的尾力较强.可以预料,尾力的这种非对称性分布将对 C_{60} 离子团的库仑爆炸图形的空间演化产生明显的影响.

3 库仑爆炸

当 C_{60} 离子团快速穿行于固体中时,团中每个离子都将受到阻止力和动力学相互作用力的共同作用.在三维空间坐标系中,单个离子的运动方程为

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{R}_j}{dt} = \mathbf{v}_j \\ m_j \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = \mathbf{F}_s(\mathbf{v}_j) + \sum_{l \neq j}^{60} \mathbf{F}_{int}(\mathbf{R}_{jl}, v_{jl}) \end{cases} \quad (j = 1, 2, \dots, 60), \quad (10)$$

其中 $m_j = m_C$ 为碳原子的质量,动力学相互作用力 $\mathbf{F}_{int}(\mathbf{R}_{jl}, v_{jl})$ 由(4)–(9)式给出.在方程(10)中, $\mathbf{F}_s(\mathbf{v}_j)$ 是阻止力,它可以由单个离子产生的动力学势式给出

$$\mathbf{F}(\mathbf{v}_j) = - \int d\rho \rho_{ext}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t) \frac{\partial \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t)}{\partial \mathbf{r}}. \quad (11)$$

根据(2)式和 PLA 介电函数,不难得到

$$F_{sx}(\mathbf{v}_j) = 0, F_{sy}(\mathbf{v}_j) = 0,$$

$$F_{sz}(v_j) = -\frac{\omega_p^2}{v_j^2} \int_{k_1}^{k_2} \frac{\rho_0^2(k)}{k} dk, \quad (12)$$

其中 k_1 和 k_2 分别是方程 $k^2 v_j^2 = k^4/4 + \beta^2 k^2 + \omega_p^2$ 的两个正实根. 可见阻止力仅依赖于入射速度, 且只有在入射速度方向上的分量不为零.

由于 C_{60} 离子团的初始结构是一个熟知的足球状的球壳层结构^[8,9], 很容易确定出离子团中每一个离子的初始位置 $r_j(0)$, 而每个离子的初始速度为 $v_j(0) = v_0$. 这样通过数值求解非线性的多体运动方程组(10), 即可以得每一个离子在任意时刻的位置矢量 $r_j(t)$ 和速度矢量 $v_j(t)$, 从而确定出 C_{60} 离子团在库仑爆炸时其结构的演化过程. 通常称这种研究多体运动的方法为分子动力学(MD)模拟. 为了便于比较, 我们在图 2 给出了 C_{60} 离子团的初始结构. 图 3 和图 4 分别显示了初始射速度为 $2v_B$ 和

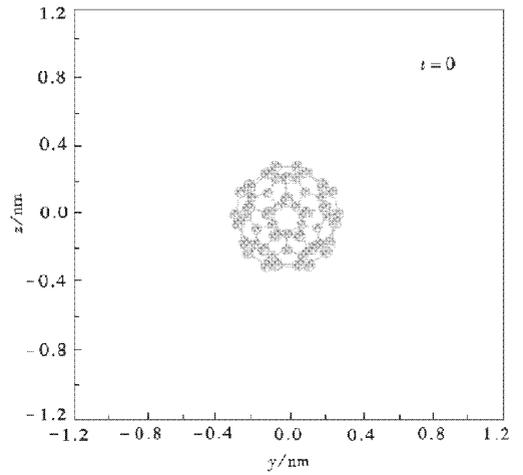


图 2 C_{60} 离子团的初始结构 $t=0$

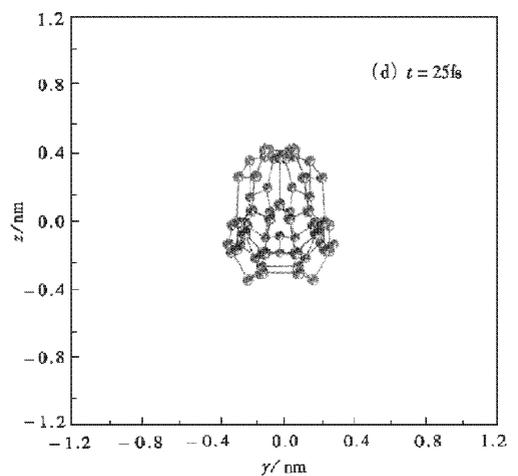
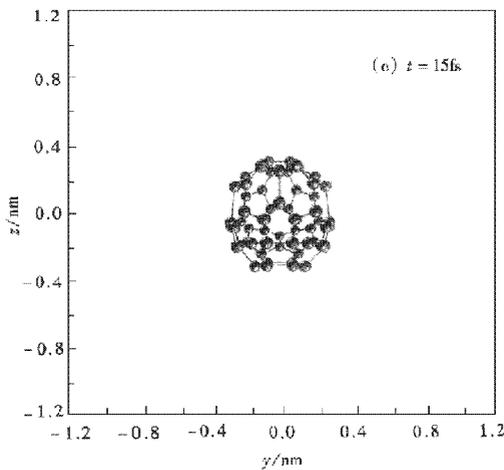
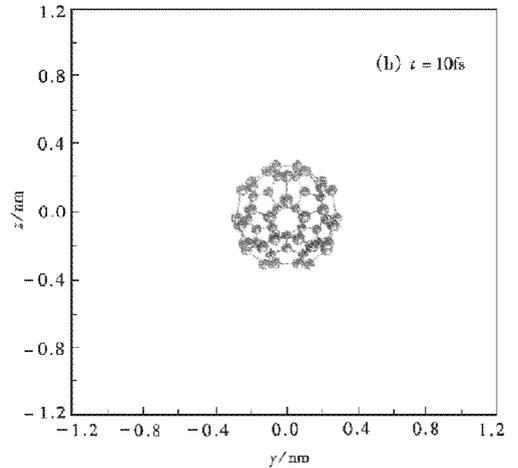
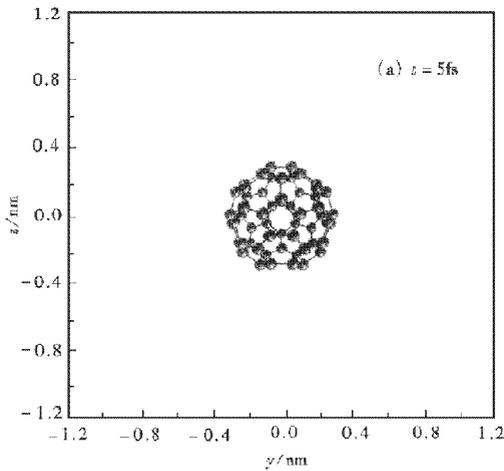


图 3 入射速度 $v_0 = 2v_B$ 的 C_{60} 离子团在 Al 膜中穿行时其结构随穿行时间 t 的演化

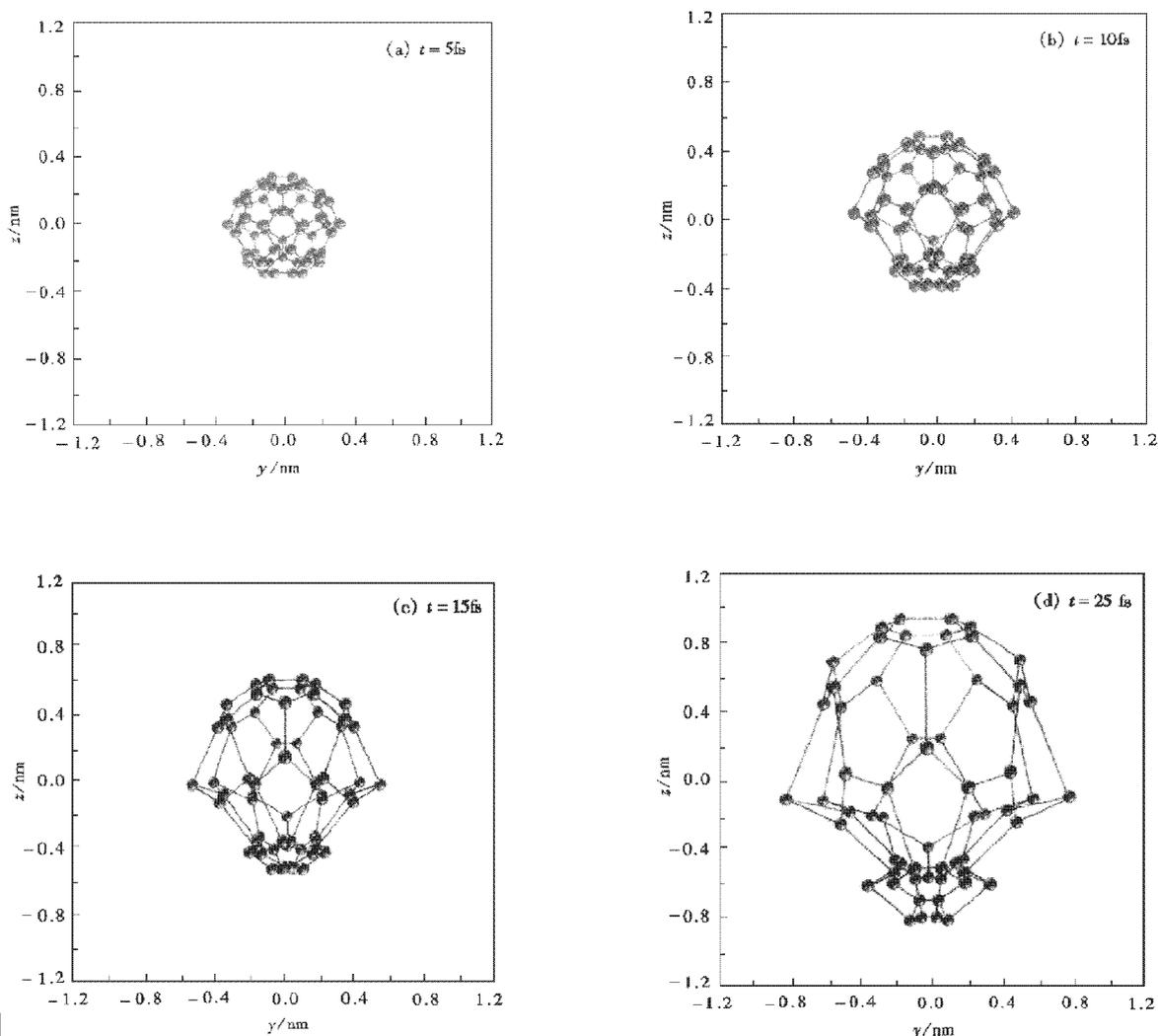


图 4 入射速度 $v_0 = 4v_B$ 的 C_{60} 离子团在 Al 膜中穿行时其结构随穿行时间 t 的演化

$4v_B$ 的 C_{60} 离子团在 Al 靶中穿行时库仑爆炸图形的演化过程. 可以看出, 若入射速度不是太高, 即 $v_0 = 2v_B$, C_{60} 离子团在固体中穿行时基本仍保持其初始的球形结构, 见图 3(a)—图 3(c); 仅当穿行时间较长时, 其结构才显示出非对称性, 见图 3(d). 而对于高速运动的 C_{60} 离子团, 即 $v_0 = 4v_B$, 若穿行的时间很短, 其结构基本上仍保持为球对称性, 见图 4(a); 但当对于较长的穿行时间, 离子团的结构呈现出明显的非球对称性, 见图 4(b)—图 4(d). 这时离子团中导航离子群随着穿行时间的增加而逐渐炸开, 而尾随离子群则保持相对稳定的状态. 以上结果表明, 仅当离子团的入射速度较低时或它在固体中穿行的时间较短时, 球壳层模型假设^[1,10-12]才近似成立.

实际上, 在库仑爆炸过程中 C_{60} 离子团结构的这种非球对称性的变化是与动力学相互作用力中的

尾部部分紧密相关的. 由方程(10)可以看出, 影响离子团中单个离子运动状态的力是阻止力和动力学相互作用力. 阻止力 F_s 仅依赖于单个离子的运动速度与离子之间的位置矢量无关, 因此它不会对离子之间的相对位置变化产生影响. 对于动力学相互作用力 F_{int} , 它由三部分组成, 即内部库仑力 F_C 、屏蔽库仑力 F_d 及尾力 F_w , 见方程(4), 其中前两部分相互作用力是反对称性的作用力, 它只能引起 C_{60} 离子团结构的球对称性变化, 而对于尾力, 它是一个非对称性的相互作用力. C_{60} 离子团结构的非球对称性变化是由它引起的. 若离子团的入射速度不是太高, 穿行时间不是太长, 这时尾力较弱, 因此 C_{60} 离子团基本呈现出球对称性的结构; 而对于较大的入射速度和较长的穿行时间, 这时尾力较强, 因此 C_{60} 离子团的结构呈现出明显的非球对称性. 由此我们可以

得出这样的结论,入射速度和穿行时间是决定 C_{60} 离子团在固体中库仑爆炸图形演化的两个最关键的物理量。

这里顺便指出,尽管 Nardi 和 Zinamor^[10]也曾采用分子动力学模拟了 C_{60} 离子团在固体中的库仑爆炸过程,但他们采用的是一种排斥性 Yukawa 形式的相互作用势来描述离子团中离子之间的相互作用,没有考虑动力学相互作用的尾效应,因此他们的模拟结果给不出 C_{60} 离子团在库仑爆炸过程中非球对称性结构的变化。

4 阻止本领

在前面的讨论中我们已经看到, C_{60} 离子团中每个离子的运动状态是相互干扰的,即第 j 个离子产生的动力学势将会影响到第 l 个离子的运动状态。因此,可以期望这样一个运动状态相互关联的离子团在固体中穿行时,其能量损失将明显地不同于相对应的 60 个独立运动离子的能量损失之和。借助于前面给出的动力学势,则 C_{60} 离子团在固体中穿行时在单位路径上的能量损失(即阻止本领)可以表示为

$$S_{\text{cluster}} = \sum_{j=1}^{60} \sum_{l=1}^{60} \frac{\mathbf{V}_j}{v_j} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_{jl}} \cdot \int d\mathbf{r} \rho_{\text{ext}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t) \mathcal{Q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l - \mathbf{v}_l t). \quad (13)$$

利用上节给出的阻止力 F_s 和尾力 F_w 的表示式,则离子团的阻止本领可以写成如下两部分:

$$S_{\text{cluster}} = S_0 + S_v, \quad (14)$$

其中 S_0 是 60 个独立运动的 C 离子的能量损失之和,

$$S_0 = - \sum_{j=1}^{60} F_{sz}(v_j), \quad (15)$$

而 S_v 则是与离子之间的关联运动有关的能量损失部分,通常称为“vicinage”阻止本领,它的表示式为

$$S_v = - \sum_{j=1}^{60} \sum_{l \neq j}^{60} F_{wz}(\mathbf{R}_{jl}, v_j), \quad (16)$$

由于动力学相互作用力中的内部库仑力 F_C 及屏蔽库仑力 F_d 在交换两离子的位置矢量时是反对称的,因此它们对能量损失没有贡献。

为了研究离子的关联运动对 C_{60} 离子团能量损失的影响,我们引入能量损失比率

$$R = 1 + S_v/S_0. \quad (17)$$

图 5 显示了入射速度分别为 $v_0 = 2v_B$ 和 $v_0 = 4v_B$ 的 C_{60} 离子团在 Al 靶中穿行时的能量损失率 R 随穿行时间的变化关系。可以看出,穿行时间越短或入射速度越高,则离子团中的关联效应越强。原则上,当穿行时间为非常长时,关联效应将消失,即能量损失比率 R 将趋于 1。

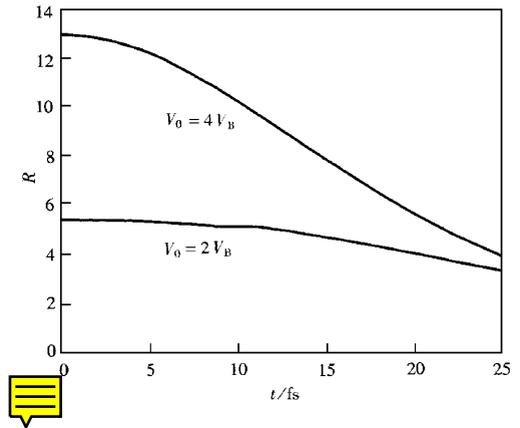


图 5 入射速度为 $v_0 = 2v_B$ 和 $4v_B$ 的 C_{60} 离子团在 Al 膜中穿行时能量损失比率 R 随穿行时间 t 的变化

5 结 论

本文首先采用线性介电响应理论及 PLA 介电函数确定出 C_{60} 离子团在固体中穿行时团中单个离子产生的动力学势 $\mathcal{Q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{v}_j t)$ 及团中任意两离子之间的动力学相互作用力 $F_{\text{int}}(\mathbf{R}_{jl}, v_j)$ 。在此基础上,我们建立了一套描述 C_{60} 离子团中单个离子运动状态的方程组,并采用 MD 模拟研究了 C_{60} 离子团在固体中穿行时的库仑爆炸过程和能量损失过程。结果表明,在入射速度较低及在固体中穿行时间较短时, C_{60} 离子团的结构较为稳定,基本上仍保持其球对称性结构。而在入射速度较高及在固体中穿行时间较长时,由于动力学力中的尾效应,使得 C_{60} 离子团的结构呈现明显的非球对称性,即在沿着入射速度方向上,离子团中的导航离子群爆炸得较开,而尾随离子群则基本维持相对稳定的状态。

尽管本文采用 MD 模拟研究了动力学相互作用中的尾效应对 C_{60} 离子团库仑爆炸过程的影响,给出的结果比球壳层模型给出的结果更接近实际情况,但仍有一些其他因素没有考虑,如靶原子核引起的多重散射效应及 vicinage 效应对离子团电荷态的

影响等. 我们将进一步地研究这些因素对离子团库仑爆炸过程的影响.

- [1] H. T. Qiu, Y. N. Wang, *Acta Physica Sinica*, **49**(2000), 1528
(in Chinese [邱华檀、王友年 物理学报, **49**(2000), 1528])
- [2] Y. N. Wang, Y. H. Song, Z. L. Miškovic, W. K. Liu, *Nucl. Instr. Meth.*, **B153**(1999), 26.
- [3] Y. N. Wang, *Acta Physica Sinica*, **48**(1999), 1118 (in Chinese)
[王友年 物理学报, **48**(1999), 1118]
- [4] M. M. Jakas, N. E. Capuj, *Phys. Rev.*, **A52**(1995), 439 ; **A54**
(1996), 5031.
- [5] M. M. Jakas, N. E. Capuj, *J. Phys.*, **C7**(1995), 4593.
- [6] N. E. Capuj, M. M. Jakas, *Nucl. Instr. Meth.*, **B115**(1996),
146.
- [7] P. M. Echenique, R. H. Ritchie, W. Brandt, *Phys. Rev.*, **B20**
(1979), 2567.
- [8] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, *Nature*,
318(1985), 162.
- [9] Y. W. Du, G. Gu, W. C. Zang, *Progress in Physics*, **15**(1995),
233 (in Chinese [都有为、顾刚、臧文成, 物理学进展, **15**
(1995), 233])
- [10] E. Nardi, Z. Zinamon, *Phys. Rev.*, **A51**(1995), R3407.
- [11] Z. L. Miškovic, W. K. Liu, Y. N. Wang, *Phys. Rev.*, **A57**
(1998), 362.
- [12] Z. L. Miškovic, W. K. Liu, Y. N. Wang, *Phys. Rev.*, **A58**
(1998), 2191.

COULOMB EXPLOSIONS FOR SWIFT C₆₀ ION-CLUSTERS PENETRATING IN SOLIDS II^{*} THE MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

QIU HUA-TAN WANG YOU-NIAN

(State Key Laboratory for Material Modification by Laser, Ion and Electron Beams,
Dalian University of Technology, Dalian 116023, China)

(Received 7 December 1999)

ABSTRACT

We study the interaction of the swift C₆₀ ion-clusters with solids. The dynamic interacting forces acting on the individual ions in the cluster are derived based on the linear-response dielectric theory with the PLA dielectric function, and a set of equations describing the motion of the individual ions is obtained. It has been shown that by solving the equations of the motion, the wake effects of the dynamic interactions result in the strong asymmetric structures of the high-velocity C₆₀ clusters, i. e., the leading ions in the cluster explode very fast, while the trailing ions in the cluster almost remain in stable states.

Keywords : ion-clusters, Coulomb explosions, dynamical interactions

PACC : 6180M, 3480B

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19975008), by the Foundation for Outstanding Young Teachers of the State Education Ministry of China (Grant No. 98-9), and by the Doctoral Program Foundation of the Institution of Higher Education of China (Grant No. 97014124).