

C₆₀ 分子振动谱计算中群论方法的应用*

华保盈 江少林

(北京工业大学应用物理系, 100022)

【摘要】 将群论原理用于 C₆₀ 分子振动谱的计算, 彻底解决了动力学矩阵的降阶问题, 并提出了一种非线性拟合的有效方法。

【关键词】 C₆₀, 振动谱, 群论

【中图分类号】 O482.1

0 引言

自从 1985 年 Kroto 等人发现了 C₆₀ 分子并首先提出封闭笼状结构的设想以来^[1], 该材料受到了化学家和物理学家的广泛注意. 1990 年 Kratchmer 等人用电弧法合成了足以进行各种实验研究的 C₆₀ 样品^[2]. 从此, 对这一具有特殊结构和特殊性能的材料的研究工作就深入地开展起来.

C₆₀ 分子及由 C₆₀ 分子构成的晶体的振动谱是这些研究中一个重要的方面. 早在 1988 年, 当时还没有可能对 C₆₀ 分子的振动谱进行实验研究时, Negri 等人已对 C₆₀ 分子的振动谱进行了理论计算^[3]. 1990 年以后, 许多人用红外吸收谱及拉曼谱对 C₆₀ 分子 46 个振动频率中的 14 个频率进行了准确的测定^[4], 之后, 对于不具有红外活性及拉曼活性的振动频率, 用中子非弹性散射技术^[5], 高分辨率电子能量损失谱^[6], 以及对二级拉曼散射和二级红外吸收的观察^[7, 8], 也进行了初步的测定.

与上述实验工作相平行的, 是用各种方法对 C₆₀ 分子的振动谱进行理论计算. 其中力常数模型的方法是主要的计算方法之一^[3, 9-11]. 在 Jiang 等人的工作中, 只考虑了最近邻相互作用并引进了 4 个待调整的力常数. Jishi 等人则不仅考虑了最近邻相互作用, 还考虑了第二近邻的相互作用, 从而引进多达 8 个待调整的力常数. Feldman 等人虽然也只考虑了最近邻相互作用, 但却包含了多项三体及四体相互作用, 从而引进了 7 个待调整的独立参数. 他们的计算结果与实验值偏离 3% 左右.

我们的目的是要对各种可能的力模型进行详细的计算与比较. 就 C₆₀ 振动谱中群论方法的应用进行充分的阐述, 这种方法大大减少了计算工作量.

用力常数模型进行 C₆₀ 振动谱计算的一项主要工作是处理含有多个参数的 180 × 180 动力学矩阵的问题, 即要调整参数使矩阵的本征值与某些实验上准确测到的振动频率有最佳的拟合, 进而算出全部振动频率. 但这种计算的工作量很大.

收稿日期: 1994-03-27.

*北京工业大学科研基金资助项目.

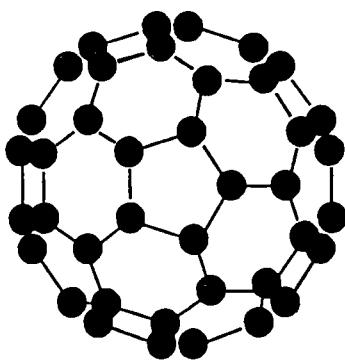
群论提供了把 180×180 动力学矩阵分块对角化的标准方法, 即用投影算符及正交化手续求出 180 维空间中的对称化基矢, 再用这组对称化基矢对动力矩阵进行相似变换, 就可以把 180×180 的矩阵分块对角化. 在 C_{60} 情形, 分块对角化后的各个分块矩阵最高为 8 价. 然而, 这种投影算符方法计算起来也十分冗长.

Feldman^[10] 等人用群论方法来简化动力学矩阵, 他们得到的分块矩阵最高为 40 阶, 然后再采用非线性最小二乘法进行拟合. 这种拟合的计算工作量仍然很大.

这里介绍一种把 C_{60} 分子振动的动力学矩阵彻底地分块对角化的简便方法, 同时提出一种建立在微扰论基础上的非线性拟合方法.

1 C_{60} 分子的结构与对称性

C_{60} 分子的结构如附图所示. 它是由 12 个正五边形和 20 个六边形组成的 32 面体, 任一碳原子都处在两个六边形和一个五边形的会聚处, 所有碳原子都在等价的位置. C_{60} 所属的点群是 I_h 群, 有 6 根五度轴、10 根三度轴和 15 根二度轴, 还有一个反演中心, 总共有 120 个对称操作. 所以 C_{60} 分子是对称性非常高的一种分子. 根据实验测定, 作为五边形边长的 C—C 键长为 0.146 28 nm, 作为两个六边形公共边的 C=C 键的长度为 0.140 22 nm, 整个 C_{60} 分子的直径约为 0.7 nm.



附图 C_{60} 分子结构

2 C_{60} 分子简正振动模的对称分析

根据群论原理, C_{60} 分子的振动可以按不可约表示分解为

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

其中非简并的 A_g 模为全对称模, 具有拉曼光谱活性; F_{1g} 、 F_{2g} 、 F_{1u} 、 F_{2u} 都是三度简并的振动模, 其中 F_{1u} 具有红外光谱活性, 这个不可约表示可以 (x, y, z) 作为表示的基; G_g 与 G_u 都是四度简并的振动模; H_g 和 H_u 都是五度简并的振动模, 其中 H_g 具有拉曼光谱活性, 在坐标积空间中, $(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2, xy, xz, yz)$ 可以作为这个不可约表示的基. 另外还有一个 F_{1u} 平动模和一个 F_{1g} 转动模.

由 (1) 式可以看出, C_{60} 分子总共有 46 个振动频率, 其中有 10 个可以通过拉曼散射实验测出, 有 4 个可以通过红外吸收实验测出. 在最近几年中, 这 14 个频率已由不少人测定, 得到了相当一致的结果, 这些结果是确定力常数的基本依据.

3 构造 180 维空间中的对称化基矢

根据群论原理, 任意给定一组参数值之后, C_{60} 分子振动动力学矩阵对应于同一本征值的本征矢一定可以构成群 I_h 某个不可约表示的基. 因此我们任给一组参数, 用雅可比程序通过双精度运算, 求出了全部本征值与正交归一化的本征矢, 其简并情况与群论分析

结果完全一致(如附表所示).

附表 群论分析与本征值简并计算的比较

群论分析结果	计算出的本征值简并情况
F_{1u} (平动)+ F_{1g} (转动)	6个本征值为零
$2A_g + A_u$	3个本征值非简并
$3F_{1g} + 4F_{2g} + 4F_{1u} + 5F_{2u}$	16个本征值三度简并
$6G_g + 6G_u$	12个本征值四度简并
$8H_g + 7H_u$	15个本征值五度简并
共46个与振动有关的不可约表示	共46个非零的不相同的本征值

在这里用雅可比程序计算出的本征值, 凡相对偏差小于0.005%, 就认为属于同一本征值. 这样就很容易区分出46个非零的不相同的本征值和对应的46组本征矢, 这些本征矢是构造对称化基矢的基础. 现在的问题是, 如何确定各组本征矢分别属于哪一个不可约表示以及如何从这些本征矢出发来构造属于各个不可约表示的同变基矢?

显然, 从各组基矢的简并度就可以作初步的划分. 例如, 四度简并一定属于 G_g 或 G_u , 三度简并一定属于 F_{1g} , F_{2g} , F_{1u} , F_{2u} . 为了作进一步的区分, 首先以反演操作 i 所对应的180阶矩阵作用在各组本征矢中的任一个180维矢量上. 如果作用后该矢量不变, 则属于中心对称的不可约表示(即下标为 g 的表示); 如果作用后该矢量反号, 则属于中心反对称的不可约表示(即下标为 u 的表示). 这样便能确定属于 A_g , A_u , G_g , G_u , H_g , H_u 等不可约表示的各组本征矢, 同时也能确定是属于 F_{1g} , F_{2g} , 还是属于 F_{1u} , F_{2u} . 接下来是在 F_{1g} 与 F_{2g} 之间及 F_{1u} 与 F_{2u} 之间加以区分.

由 I_h 群不可约表示特征标表可知, 对应于 C_5^1 操作, F_{1g} 与 F_{1u} 的特征标为 $(1+\sqrt{5})/2$, 而 F_{2g} 与 F_{2u} 的特征标为 $(1-\sqrt{5})/2$. 因此只要用与 C_5^1 操作对应的180阶矩阵作用于一组三度简并的基矢上, 求出相应表示矩阵的特征标, 就可确定该组基矢是属于 F_{1g} 还是 F_{2g} , 是属于 F_{1u} 还是 F_{2u} .

通过上述步骤, 就完全确定了所有各组本征矢究竟属于哪些不可约表示. 以下用 $\vec{A}_{A_g}^1$, $\vec{A}_{A_u}^1$, $\vec{A}_{F_{1g}}^1(1)$, $\vec{A}_{F_{1g}}^1(2)$, $\vec{A}_{F_{1g}}^1(3)$, $\vec{A}_{F_{1u}}^1(1)$, $\vec{A}_{F_{1u}}^1(2)$, $\vec{A}_{F_{1u}}^1(3)$, \dots , $\vec{A}_{H_g}^1(1)$, $\vec{A}_{H_g}^1(2)$, $\vec{A}_{H_g}^1(3)$, $\vec{A}_{H_u}^1(4)$, $\vec{A}_{H_u}^1(5)$ 来表示174个简正振动以及3个平动和3个转动的本征矢, 其中下标表示该组本征矢所属的不可约表示, 括号中的数字表示属于同一频率的几个本征矢的编号, 上标是属于同一不可约表示的各组本征矢按本征值大小次序的编号.

以这180个本征矢为基, 对含参数的动力学矩阵进行相似变换, 就可以使该矩阵分块对角化. 这时每一个分块矩阵对应于某一不可约表示, 矩阵的阶数等于该不可约表示出现的次数与该不可约表示维数的乘积. 例如, 对于不可约表示 H_g , 可以得到一个 40×40 的含参数分块矩阵.

为了最大限度地对动力学矩阵进行降价, 还需要构造属于同一不可约表示的同变基矢. 为了后面计算的目的, 只要构造属于 A_g , F_{1u} , H_g 等不可约表示的同变基矢就够了, 因为只对这些不可约表示, 有准确的实验上测得的本征值.

由于 A_g 是一维不可约表示, 而一维不可约表示的形式是唯一的, 因此属于 A_g 的 2 个本征矢已是同变基矢. 对于 F_{1u} 、 H_g , 则计算机算出的各组本征矢一般不是同变的, 因此必须将它们改造为同变基矢. 由于已知道 (x, y, z) 可以作为 F_{1u} 这个不可约表示的基, 因此对于每组本征矢可以通过线性组合改造成新的本征矢, 使得在 I_h 点群的各个操作作用下这些新的本征矢与 (x, y, z) 有相同的变换关系. 将这些新的本征矢记作

$$\vec{A}_{F_{1u}}^j(x), \vec{A}_{F_{1u}}^j(y), \vec{A}_{F_{1u}}^j(z) \quad (j=1, 2, \dots, 5)$$

根据后面计算的需要, 只要求出 $\vec{A}_{F_{1u}}^j(z)$ 就够了. 其求法是, 令

$$\vec{A}_{F_{1u}}^j(z) = a_1^j \vec{A}_{F_{1u}}^j(1) + a_2^j \vec{A}_{F_{1u}}^j(2) + a_3^j \vec{A}_{F_{1u}}^j(3) \quad (j=1, 2, \dots, 5)$$

由于 $\vec{A}_{F_{1u}}^j(z)$ 在 $C_{3,z}^1$ 操作下保持不变, 因而通过下述方程就可求出 a_1^j 、 a_2^j 、 a_3^j :

$$C_{3,z}^1 \vec{A}_{F_{1u}}^j(z) = \vec{A}_{F_{1u}}^j(z) \quad (2)$$

其中 $C_{3,z}^1$ 是与该操作相应的 180 阶矩阵.

同样, 由于 $(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2, xy, xz, yz)$ 可以作为 H_g 不可约表示的基, 因此对于 H_g 的每组本征矢, 可以通过线性组合改造成新的本征矢, 使得在 I_h 点群的各个操作作用下, 这些新的本征矢与 $(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2, xy, xz, yz)$ 有相同的变换关系. 将这些新的本征矢记作

$$\vec{A}_{H_g}^j(2z^2 - x^2 - y^2), \vec{A}_{H_g}^j(x^2 - y^2), \vec{A}_{H_g}^j(xy), \vec{A}_{H_g}^j(xz), \vec{A}_{H_g}^j(yz) \quad (j=1, 2, \dots, 8)$$

根据后面计算的需要, 只要求出 $\vec{A}_{H_g}^j(yz)$ 就够了.

因为在 $C_{5,z}^1$ 操作下, (xz, yz) 与 (x, y) 有相同的变换关系, 即有

$$(xz)' = \cos 72^\circ (xz) + \sin 72^\circ (yz) \quad (3)$$

$$(yz)' = -\sin 72^\circ (xz) + \cos 72^\circ (yz) \quad (4)$$

因而令

$$\begin{cases} \vec{A}_{H_g}^j(xz) = a_{11}^j \vec{A}_{H_g}^j(1) + a_{12}^j \vec{A}_{H_g}^j(2) + \dots + a_{15}^j \vec{A}_{H_g}^j(5) \\ \vec{A}_{H_g}^j(yz) = a_{21}^j \vec{A}_{H_g}^j(1) + a_{22}^j \vec{A}_{H_g}^j(2) + \dots + a_{25}^j \vec{A}_{H_g}^j(5) \end{cases} \quad (j=1, 2, \dots, 8) \quad (5)$$

通过解方程

$$\begin{cases} C_{5,z}^1 \vec{A}_{H_g}^j(xz) = \cos 72^\circ \vec{A}_{H_g}^j(xz) + \sin 72^\circ \vec{A}_{H_g}^j(yz) \\ C_{5,z}^1 \vec{A}_{H_g}^j(yz) = -\sin 72^\circ \vec{A}_{H_g}^j(xz) + \cos 72^\circ \vec{A}_{H_g}^j(yz) \end{cases} \quad (j=1, 2, \dots, 8) \quad (6)$$

就可求出全部组合系数, 从而得到各组 $\vec{A}_{H_g}^j(yz)$.

至此, 已求出为后面计算所需要的全部同变基矢.

4 计算 A_g 、 F_{1u} 、 H_g 等不可约表示的最小分块矩阵

C_{60} 分子振动的动力学矩阵 F 中包含 l 个可调参数 S_1, S_2, \dots, S_l , 它总是可以写成

$$F = \sum_{k=1}^l S_k F_k \quad (7)$$

其中 F_k 是与 F 具有相同阶数和相同对称性不含参数的矩阵.

$$\text{令} \quad F_{A_i}(jj') = (\vec{A}_{A_i}^j)^+ F \vec{A}_{A_i}^{j'}$$

$$= \sum_{k=1}^l S_k (\vec{A}_{A_i}^j)^+ F_k \vec{A}_{A_i}^{j'} \quad (j, j'=1, 2) \quad (8)$$

$$F_{F_{1u}}(jj') = (A_{F_{1u}}^j(z))^+ F A_{F_{1u}}^{j'}(z) \\ = \sum_{K=1}^l S_K (A_{F_{1u}}^j(z))^+ F_K A_{F_{1u}}^{j'}(z) \quad (j, j'=1, 2, \dots, 5) \quad (9)$$

$$F_{H_g}(jj') = (A_{H_g}^j(yz))^+ F A_{H_g}^{j'}(yz) \\ = \sum_{K=1}^l S_K (A_{H_g}^j(yz))^+ F_K A_{H_g}^{j'}(yz) \quad (j, j'=1, 2, \dots, 8) \quad (10)$$

就得到了以 $F_{A_g}(jj')$ 为矩阵元的属于 A_g 这个不可约表示的最小分块矩阵, 它是一个含参数的 2×2 矩阵. 同样得到了一个属于 F_{1u} 的 5×5 最小分块矩阵和一个属于 H_g 的 8×8 最小分块矩阵.

选择合适的参数并对这 3 个 2×2 、 5×5 、 8×8 的矩阵对角化, 使算出的本征值与实验值有最佳的拟合, 然后把这些参数代入 F 矩阵中并算出全部本征值, 是经过应用上述群论方法以后所面临的任务, 可以看到它比起处理 180×180 含参数的矩阵以及 40×40 含参数的矩阵都要容易许多了. 上述群论分析的步骤都是通过计算机程序实现的.

5 最佳参数 S_1, S_2, \dots, S_l 的选择

由于上述群论方法的应用, 不仅大大降低了要处理的矩阵的阶数, 并且也为寻找最佳参数提供了新的途径.

已有属于 A_g 、 F_{1u} 、 H_g 等不可约表示的 3 个含参数的最小分块矩阵, 它们分别是 2×2 、 5×5 、 8×8 的矩阵, 是调整参数的主要依据. 另外对于其它不可约表示, 用属于相同不可约表示非同变的本征矢为基, 可以得到属于其它不可约表示的分块矩阵(但不是最小分块矩阵), 即一个 1×1 的属于 A_u 的矩阵, 一个 12×12 的属于 F_{1g} 的矩阵, 一个 12×12 的属于 F_{2g} 的矩阵, 一个 15×15 的属于 F_{2u} 的矩阵, 一个 24×24 的属于 G_g 的矩阵, 一个 24×24 的属于 G_u 的矩阵, 一个 35×35 的属于 H_u 的矩阵. 由于近年来除了具有红外活性或喇曼活性的振动频率有准确的实验值外, 通过中子非弹性散射、高分辨率能量损失谱以及二级拉曼散射和红外吸收, 属于其它不可约表示的振动频率也已得到初步确定, 有鉴于此, 采取如下 2 个步骤来进行参数 S_1, S_2, \dots, S_l 的选择.

1) 通过下列一组方程确定 S_1, S_2, \dots, S_l 的初值.

$$X(F_{A_g}) = \sum_{i=1}^2 \omega_{A_g, \text{exp}}^2(i) \quad (11)$$

$$X(F_{F_{1u}}) = \sum_{i=1}^5 \omega_{F_{1u}, \text{exp}}^2(i) \quad (\text{其中一个频率为零}) \quad (12)$$

$$X(F_{H_g}) = \sum_{i=1}^8 \omega_{H_g, \text{exp}}^2(i) \quad (13)$$

$$X(F_{A_u}) = \omega_{A_u, \text{exp}}^2 \quad (14)$$

$$X(F_{F_{1g}}) = 3 \sum_{i=1}^4 \omega_{F_{1g}, \text{exp}}^2(i) \quad (\text{其中一个频率为零}) \quad (15)$$

$$X(F_{F_{1s}}) = 3 \sum_{i=1}^4 \omega_{F_{1s}, \text{exp}}^2(i) \quad (16)$$

$$X(F_{F_{1v}}) = 3 \sum_{i=1}^5 \omega_{F_{1v}, \text{exp}}^2(i) \quad (17)$$

$$X(F_{G_s}) = 4 \sum_{i=1}^6 \omega_{G_s, \text{exp}}^2(i) \quad (18)$$

$$X(F_{G_v}) = 4 \sum_{i=1}^6 \omega_{G_v, \text{exp}}^2(i) \quad (19)$$

$$X(F_{H_s}) = 5 \sum_{i=1}^7 \omega_{H_s, \text{exp}}^2(i) \quad (20)$$

其中 X 是相应矩阵的特征标, 它是 S_1, S_2, \dots, S_l 的一个线性函数. 这里我们在符号上没有区分最小分块矩阵与非最小分块矩阵, 因为等号右边的系数就表明了差别.

通过线性最小二乘法很容易确定 S_1, S_2, \dots, S_l . 由于除 A_g, F_{1u}, H_g 以外, 其它不可约表示实验值的准确度不敢估计太高, 因此只把这组值作为初值, 记为 $S_{11}, S_{21}, \dots, S_{l1}$.

2) 下面还以矩阵 $F_{A_s}, F_{F_{1s}}, F_{H_s}$ 及实验值 $\omega_{A_s}(i), \omega_{F_{1s}}(i), \omega_{H_s}(i)$ 作为我们进一步拟合的出发点.

将 $S_{11}, S_{21}, \dots, S_{l1}$ 的值代入 A_g, F_{1u}, H_g 对应的分块矩阵, 分别记这些矩阵为 $F_{A_s, 1}, F_{F_{1s}, 1}, F_{H_s, 1}$, 则可写成如下形式:

$$\begin{cases} F_{A_s, 1} = \sum_{K=1}^l S_{K1} F_{A_s}^K \\ F_{F_{1s}, 1} = \sum_{K=1}^l S_{K1} F_{F_{1s}}^K \\ F_{H_s, 1} = \sum_{K=1}^l S_{K1} F_{H_s}^K \end{cases} \quad (21)$$

设 $F_{A_s, 1}, F_{F_{1s}, 1}, F_{H_s, 1}$ 的本征值分别为 $\omega_{A_s, 1}^2(i), \omega_{F_{1s}, 1}^2(i), \omega_{H_s, 1}^2(i)$; 相应的本征矢分别为 $A_{A_s, 1}^2(i), A_{F_{1s}, 1}^2(i), A_{H_s, 1}^2(i)$, 由于它们分别从 $2 \times 2, 5 \times 5, 8 \times 8$ 矩阵中解出, 因此分别以 2 维、5 维、8 维矢量的形式出现.

又设 $S_{10}, S_{20}, \dots, S_{l0}$ 是一组最佳参数, 相应的分块矩阵为

$$\begin{cases} F_{A_s, 0} = \sum_{K=1}^l S_{K0} F_{A_s}^K \\ F_{F_{1s}, 0} = \sum_{K=1}^l S_{K0} F_{F_{1s}}^K \\ F_{H_s, 0} = \sum_{K=1}^l S_{K0} F_{H_s}^K \end{cases} \quad (22)$$

假设这些矩阵的本征值就是 $\omega_{A_s, \text{exp}}^2(i), \omega_{F_{1s}, \text{exp}}^2(i), \omega_{H_s, \text{exp}}^2(i)$.

为了下面计算方便, 对于同一不可约表示, i 都按 ω^2 数值的大小顺序予以编号.

假定初值 $S_{11}, S_{21}, \dots, S_{l1}$ 与最佳值 $S_{10}, S_{20}, \dots, S_{l0}$ 相差不大, 于是借用一级微扰论公

式得到

$$\left\{ \begin{aligned} \omega_{A_{1g}, \text{exp}}^2(i) - \omega_{A_{1g}, 1}^2(i) &= \vec{A}_{A_{1g}, 1}^+(i) (F_{A_{1g}, 0} - F_{A_{1g}, 1}) \vec{A}_{A_{1g}, 1}(i) \\ &= \sum_{k=1}^l (S_{K0} - S_{K1}) \vec{A}_{A_{1g}, 1}^+(i) F_{A_{1g}, 1}^k \vec{A}_{A_{1g}, 1}(i) \quad (i=1, 2) \\ \omega_{F_{1u}, \text{exp}}^2(i) - \omega_{F_{1u}, 1}^2(i) &= \sum_{k=1}^l (S_{K0} - S_{K1}) \vec{A}_{F_{1u}, 1}^+(i) F_{F_{1u}, 1}^k \vec{A}_{F_{1u}, 1}(i) \quad (i=1, 2, \dots, 5) \\ \omega_{H_{1g}, \text{exp}}^2(i) - \omega_{H_{1g}, 1}^2(i) &= \sum_{k=1}^l (S_{K0} - S_{K1}) \vec{A}_{H_{1g}, 1}^+(i) F_{H_{1g}, 1}^k \vec{A}_{H_{1g}, 1}(i) \quad (i=1, 2, \dots, 8) \end{aligned} \right. \quad (23)$$

以上共得到关于 $S_{10}, S_{20}, \dots, S_{10}$ 的 15 个线性方程. 通过线性最小二乘法, 就可确定 $S_{10}, S_{20}, \dots, S_{10}$. 把这组值代入 $F_{A_{1g}, 0}, F_{F_{1u}, 0}, F_{H_{1g}, 0}$, 求出本征值. 如果这组本征值与实验值的偏差已符合要求, 则就以 $S_{10}, S_{20}, \dots, S_{10}$ 作为最后结果; 如果不符合要求, 则再以 $S_{10}, S_{20}, \dots, S_{10}$ 作为新的初值, 重复步骤 2), 直至获得满意结果为止.

6 结束语

本文充分运用群论工具, 对于 C₆₀ 分子振动谱的计算方法进行简化, 获得了最低阶的分块动力学矩阵, 并将微扰论思想引入参数的计算中, 圆满解决了非线性拟合问题. 上述方法已编成计算机程序, 用于 C₆₀ 分子各种力模型的计算.

周光文同志协助做了许多工作, 谨此致谢.

参 考 文 献

- 1 Kroto H W, Heath J R, O'Brien S C, et al. C₆₀: Buckminsterfullerene. Nature, 1985, 318 (6042): 162 ~ 163
- 2 Kratschmer W, Lamb L D, Fostiropoulos K, et al. Solid C₆₀: A new form of carbon. Nature, 1990, 347(6291): 354 ~ 358
- 3 Negri F, Orlandi G, Zerbetto F. Vibrational frequencies of C₆₀. Chem Phys Lett, 1988, 144 (1): 31 ~ 33
- 4 Bethune D S, Meyer G, Tang W C, et al. Vibrational spectra of C₆₀ fullerene. Chem Phys Lett, 1990, 174(3): 219 ~ 221
- 5 Coulombeau C, Jobic H, Bernier P et al. Neutron inelastic scattering of C₆₀. J Chem Phys, 1992, 96(1): 22 ~ 27
- 6 Lucas A, Gensterblum G, Pireaux J J, et al. Elementary excitations of C₆₀. Phys Rev, 1992, B45(2, 3): 13 694 ~ 13 702
- 7 Dong Z H, Zhou P, Holden J M, et al. Observation of higher-order Raman modes in C₆₀ films. Phys Rev, 1993, B48(4): 2 862 ~ 2 865
- 8 Wang K A, Wang Y, Zhou P et al. Observation of higher-order infrared modes in solid C₆₀ films. Phys Rev. 1993, B48(15): 11 375 ~ 11 380
- 9 Jiang Q, Xia H, Zhang A, et al. Vibrational spectrum of C₆₀. Chem Phys Lett. 1992, 192(1, 2,

3): 93 ~ 96

- 10 Feldman J L, Brouthton J Q, Boyer L L, et al. Intramolecular-force-constant model for C_{60} . *Phys Rev*, 1992, B46(19): 12731 ~ 12736
- 11 Jishi R A, Mirie R M, Dresselhaus M S. Force-constant model for the vibrational modes in C_{60} . *Phys Rev*, 1992, B45(23): 13685 ~ 13689

The Application of the Group Theory Method to the Calculation of the Vibrational Spectrum of C_{60} Molecule

Hua Baoying Jiang Shaolin

(Department of Applied Physics, Beijing Polytechnic University, 100022)

【Abstract】 Group theory principles are applied to the calculation of the vibrational spectrum of C_{60} molecule. The reduction problem of the dynamical matrix is completely solved. In addition, an effective method of the nonlinear fitting is proposed.

【Key words】 C_{60} , vibrational spectrum, group theory

北京市科技新星简介

涂承宇

1960年6月生。1988年2月毕业于海军工程学院，获硕士学位，现任无线电系讲师。硕士毕业后在海军论证研究中心工作，一直从事人工智能和决策科学方面的研究。1993年9月调入我校。

涂承宇同志具有严谨、求实、勇于开拓的科学作风。在科研工作中，取得了丰硕成果。他曾作为骨干参加了一项国家级科研课题，10项部市级课题及3项其他科研项目，并取得了多项奖励，其中一项荣获荣获学术成果一等奖。在国内外学术刊物上发表了20多篇学术论文。

1994年4月他申报的“实时决策系统的智能化与自动化”课题，是以地铁和铁路行车调度系统为第一研究实例，进行实时决策系统的智能化、自动化的基础研究，建立一个较为通用的实时决策系统框架。用这个框架可以方便地构造多种实时决策系统，并采用多层分布结构、数学运算和智能推理相结合的机制，根据实时采集的数据和系统各数据库中的记录的各种系统状态信息，实时给出唯一的优化调度方案。此项目难度较大，是一项复杂的系统工程，是当前迫切需要解决而学术界未能解决的难题，与北京地铁的发展和我国铁路系统的发展迫切需要紧密结合，因此本项目得到北京市科委科技新星计划的资助。