

关于团簇研究之我见

Views on the Research of Clusters

王震遐

(中国科学院上海原子核研究所, 教授 上海 201800)

面对一种重要的物理学定律的形成,或者是一个新学科的提出,首先从认识论高度来思量一下,颇有必要。此举不但可以衡量其重要性,认识其在探索自然过程中的地位及作用,同时也有利于有关研究方法学的建立。

团簇(Cluster)意指由有限原子(或分子)组成的小团粒。在国内有人把它叫“原子团簇”,另有人则译为“原子集团”。眼下的研究已经表明,此类小团粒体系具有既不同于原子、分子,也不同于凝聚态物质的性质。而对于给定的团簇,其具体物性要随所包含原子数的不同而变化。鉴于人们已意识到对这种物质进行研究的重要理论意义和广泛诱人的技术应用前景,因而甚至有人把团簇称为物质存在的第五种状态。

首先,我认为应当把对团簇研究的重要性,放到人类对物质世界的认识链中加以考察。

应先宏观,再微观,然后才专注地进入团簇领域。这一顺序的排列,既取决于技术的发展,也符合认识的发展规律。实际上,宏观物质世界在人类生活中最为现实,与社会的关系也最为紧密,故在文明到来之前,人类对众多宏观物质已有深切的观察。因此,从劳动者、有识之士到物理学家,自觉或不自觉地首先对这一领域进行思考和探索是很自然的。经过跨世纪的努力甚至付出血的代价之后,陆续诞生了以伽利略、哥白尼和牛顿学说为代表的宏观物理学。随着研究的深入和发展,具有还原论色彩的“这些东西是由什么组成”的问题,自然而然地提了出来,并激励着众多的物理学家为之而上下求索。于是提出了“原子论”,认识由此进入微观世界。接着就出现了以爱因斯坦、玻尔、薛定谔和狄拉克理论为框架的微观物理学。就此,宏观研究和微观研究分为两路大军,且声势浩大,硕果累累。从熙熙攘攘的原子(乃至更基本的粒子)到硬梆梆的物质世界,对它们井然有序的运动,微观物理学和宏观物理学大多给出了满意的解答。这两方面的成果,反映了人类认识物质世界的重大突破,相信不

管哪一位科学史家,当他触及到这个辉煌的时代时,都会热血沸腾,激动不已的。

就人类对物质结构的认识而言,原子、分子科学和凝聚态科学代表着微观和宏观两大研究领域。到目前为止,科学家们虽然在各自的领域都建立了几乎是十分完美的理论体系,但这些领域之中的一些主要概念彼此并不协调,甚至还处于某种矛盾、冲突之中。这意味着一个严重问题的存在:凝聚态物质是由原子(分子)组成的,微观物理学和宏观物理学在理论上的冲突理应协调和统一,否则这种物质结构的原子论就是不可理解的了。实际上,科学家们只要回头审视一下,就可以发现还存在着一个“被遗忘的地带”,这就是团簇领域。这儿景象万千,一片烂漫,而且有由原子、分子通向凝聚态物质的“桥梁”。

事实上,在还原论——一种可以追溯到古希腊的“物质由原子组成”的伟大思想——指导下,物理学已经取得了令人目不暇接、令人信服的成就。物理学家试图据此把物质还原为最终的构件——轻子(电子、中微子等)、夸克和信使粒子(光子、胶子以及引力和弱力的相应粒子),并由此去窥视那些控制着物质结构的基本规律,进而解释宇宙存在的基本特点。但是还原论始终不能解释那些明显具有整体性特征的现象,例如不能用夸克来解释活细胞……直至无生命的龙卷风。这一切说明,这些现象不从整体论出发来认识可能是不行的。另一方面,还原论者也不能忽视,物质结构存在着足够多的层次,且每个相邻的层次彼此紧密相连,形成一条长链。如果中间缺少某一环节(或一个层次),那就连不成链,认识可能就在此处出现“破缺”。换言之,欲解释物质整体的宏观物性,必须从微观的“最终构件”起,一个层次一个层次地顺序推论过来,超越层次是不行的。凝聚态物质(层次)的物性不能直接用原子、分子的性质来解释,只能用团簇的性质加以阐明,就是一个明显的例证。可以说,团簇不但是一个过渡区,还可能是物质结构的一个层次。不了解

这个层次,就不可能对物质结构达到全面认识。

团簇物理作为一个介于宏观物理和微观物理之间的过渡区,其研究方法一定会受到两方面的共同影响。宏观物理学家多从整体角度认识物质,因而所使用的方法主要侧重对物质整体特性的测量;微观物理学家习惯于沿用研究原子、分子运动及相互作用的方法来分析团簇粒子。采用后一种动力学方法,不仅可以研究团簇的结构,同时还可以获得用前一种“静态”研究方法所得不到的有关碰撞、反应和相互作用过程的知识。显然当上述两个领域的科学家共同注意到团簇领域时,各自带有职业性特点的两种研究方法在团簇体系的测量中也表现出来了。这种现象貌似矛盾,但实有必要,更是一种团簇研究的重要特色。

最后再谈一谈团簇科学和介观(Mesosopic)科学问题。笔者认为,这两个领域客观上都涵盖了从原子、分子向凝聚物质的过渡区。实际上这两种提法分别是由从微观立场看和从宏观立场看这个过渡区的科学家各自给出的,前者叫它作团簇,后者则称之为“介观”体系。前者把这种“过渡体系”看成

是由原子、分子构成的团粒,强调了原子(或分子)数变化对团簇物性变化的作用。后者则把“过渡体系”看成是大块物质的碎块,或者说强调的是足够小的“物质”,而不关心构成这种碎片的原子、分子数,特别不一个一个地计较原子(分子)数的变化。团簇和介观领域可能在狭义的定义方面存在区别,但这种差别完全是由于出发点不同(微观和宏观)引起的。广义而言,二者实在是属于同一过渡领域,实际上不存在根本差异。

万物皆由原子(或分子)构成,由原子或分子累加成一种具有一定总体特性的物质,看来必然存在某种特定的过渡区域,这种过渡就在团簇(或介观)的特性变化中体现出来。由此可见,与其说宏观物性由原子(分子)决定,不如说宏观物性决定于如何过渡。原子累加可以过渡为哈密瓜,但也可以过渡成波斯猫,关键主要在于如何过渡!显然,对过渡区团簇的研究,有可能引导人们进入解决“宇宙万物为什么是如今这个样子”问题的途径。

(责任编辑 蔡德诚)

(上接第8页) 系功能的理论基础,也是分子器件设计思想的依据。

超分子科学的发展还有待实验技术和表征手段的进展。最近发展的远红外振动转动调制光谱是一个很好的仪器,已可描绘出氢键势能图。STM/AFM 技术的发展使人们可以看到纳米尺寸的原子或团簇微区形貌,但尚不足以反映微区结构变化和能量转换。近场显微镜取得纳米尺度的分子光谱信息有了很大进展,飞秒光谱跟踪超快速过程也十分重要。只有把理论与实验密切结合起来,对信息传输过程的研究才能取得突破性进展。

五、结 语

超分子体系的研究,实质上已超出化学的范畴,与生物、物理、光电子学相互渗透,相互促进,形成了超分子科学。超分子科学已成为生命科学、材料科学、信息科学以及环境科学的结合部。多学科交叉、渗透的区域,必然是新思路、新概念与高新技术的源头,必然是21世纪科学发展的前沿与突破口。为此,美国、欧共体、日本等发达国家相继组织了大

型研究项目,有很高的资金投入。90年代初,欧共体实施了“超分子科学与技术”的发展计划,组织了法、德、英、荷、意等国的47个研究集体,第一个三年计划投资额近2000万欧洲货币单位。欧洲学者认为超分子科学是跨世纪的综合性研究项目,正全心全意从不同学科领域交叉研究中获得发展动力。他们关注着生物技术、分子器件、超级信息存储材料等高新技术领域的进步。在日本仅新技术事业集团就资助超分子科学的6个项目,每个项目10亿日元,并与法国有合作研究计划。美国政府为加速超分子科学的基础研究,已计划招聘一批有天赋的欧洲中青年科学家赴美国工作。

超分子科学的高速发展引起了我国科学家的关注,已有相当队伍投入到这个领域并取得创新性成果。1994年5月29~31日第17次香山科学会议专题讨论了“超分子体系”,多学科专家通过交流与“碰撞”,引出了许多新思想与新概念,激发了专家学者们的兴趣。超分子科学是一门新型交叉学科,毫无疑义将是21世纪新概念、高新技术的一个重要源头,我国理应急起直追。

(责任编辑 蔡德诚)