

电子边界是决定分子间作用特性的重要条件 ——跨学科研究设想

On the Effects of Boundary Conditions of Electrons, Suggestions to
Multidisciplinary Research

程开甲

(中国科学院,学部委员 北京 100011)

程淑玉

(西北核技术研究所,副研究员 西安 710000)

一、物理学研究现状和前景

在此短文中,笔者将简略介绍近年来自己针对21世纪材料科学和技术发展提出的一些看法,特别是涉及物理学第一原理及与其相关的实际应用问题。

对于物理学发展的现状和前景,已有许多物理学家进行过分析和研究。佩尔斯(Peieris)就曾作过透彻的论述。他指出,物理学研究“已到尽头,又还没有到尽头”。一方面,由于基本粒子、高能物理等方面对更基本原理探索所要求的研究条件已大大超出了人类现有能力,可以说目前人类在物理领域的研究已到尽头;但另一方面,现有的物理基本原理原则上完全可以解决低能范围的诸多问题,但是如何利用这些基本原理来解决实际问题,却是永无止境、而又亟待突破的,因此也可以说物理学研究还未到尽头。

今天的物理学研究对象和目标与本世纪上叶的情况已完全不同。除了基本粒子和宇宙学,基本原理早已被研究清楚,成为完整体系,没有可能增加更多的基本原理。目前,想投入更多的力量来研究,突破物理学基本原理方面更新更高的发现是不现实的。只有当人类发展到极富有、聪明,有极高的探索奥秘的能力时方可实现。当前最紧迫、最重要的应该是开展迅速而实际见效的技术研究,积累充足的财富,从而在能源和资源日趋匮乏的形势下,增强人类的生存能力,同时为更高层次的探索创造条件。这就要求我们正确、有效地利用已有的科学原理来迅速衔接大量的技术研究,造福于人类。实

现这一目标是艰难而紧迫的,不认真努力,人类也许难逃恐龙灭绝的同样厄运!

有些物理学研究者,特别是理论物理的一些同行们,喜欢且惯于寻找第一原理,重用演绎法而不重视归纳法。但是实际问题都十分复杂,除了极少数特殊例子,几乎不可能由第一原理直接求解,事实是往往只能依据经验总结,采用归纳法来解决。因此,如果解决具体问题时只停留在探索第一原理,侧重基本原理,而不对求解的目标进行具体分析,就会导致将原理本身作为研究对象,违背问题的逻辑性,从而使第一原理失去其指导意义,而问题又长期得不到解决。

究竟如何开展当今的研究?特别是要搞清选择哪些目标?笔者认为,应首先选择在实际中可能有高效益而又有大量经验规律可循的问题和方面,并找出它们之间的联系。第一原理固然十分重要,但不能埋头于原理上过细的无穷尽的设想,而应该从实践中找出方向性的应用规律,从而推动第一原理的具体应用研究。这是开展技术研究的一条好途径。换言之,要将演绎法和归纳法结合起来,探讨如何将原理应用于广泛深奥的未知领域。在此过程中,为了迅速找到原理用于实际的途径,应先探测问题答案的正确性,要强调其精确性,要在无限的事实中找到有限的应用。

作为一个例子,本文就材料学科的特定领域提出一些看法,寻求一种较为实际的研究方法。

二、原子界面上电子结构与材料性能的关系

本文以材料学科为例,从实际问题出发,应用

第一原理,按照综合成系统的理论体系进行材料特性研究(包括固体材料和生物),从而给出可行性方法。

1. 原子间边界条件的重要作用

笔者认为,正确掌握原子和分子的边界条件并付诸应用是一个极为关键的认识思路,值得进行认真的讨论和阐述。

当原子和分子集合系统的总能量极小时,系统是稳定的。当系统发展到最终态时其能量极小,发展过程中系统能量发生变化,达到或趋于能量极小。这个问题实际上是变分边值问题。系统的稳定性问题是由边界条件决定的,特定的边界条件决定一组完整的特征解——量子力学的本征解。当确定了材料的组份后,就要确定边界条件与由此所产生的特定的反应渠道。能够正确掌握和应用不同的边界条件就有能力决定生成的特定产品,无论是无机材料,还是有机材料(包括生物),都是如此。量子力学采用了实空间或倒格空间的边界条件,在固体或大分子的实空间中,反应都是由电子越过原子边界的运动实现的,而在倒格空间中,则是通过载流子在近满或近空的布里渊区中的跃迁实现的。

2. 原子间面上电子结构的作用

(1)实空间情况 根据第一原理,笔者不久前提出了一个考虑边界条件的改进的 TFD 原子统计模型。指出,在金属中,原子界面上的电子可以流动,按照量子力学波函数连续的要求,界面上的电子密度必须连续,这是界面必须满足的重要条件。利用这一条件和模型,可以计算多元合金的状态方程和生成能,可以说明许多复合材料的生成机制。例如,已经计算了多种二元和三元合金的状态方程和生成能,解释了镍作为制取人造金刚石的触媒剂、铁表面镀铬之前先镀一层铜以及加工退火铋系超导体包银鞘中界面的择优取向的原因。笔者认为,表面电子密度相等是重要的边界条件,在种种反应过程中,由于表面电子重新分布产生了应力应变,能量达到新的平衡,从而降低能级,这是固体材料遵循的法则。

笔者认为,与固体物理学中这种情况相同,表面结构和边界条件决定了纳米材料、有机物或生物细胞中大分子的特性,尤其是表面电子密度对有机体细胞的运动和取向选择起着特殊的作用。

(2)动量空间情况 笔者还提出了双带理论。认为,布里渊区边界附近基本空的或满的角区中的少子是重要的边界条件。电子的晶格能和交换能决

定了相变发生的可能性;边界附近电子的交换能决定了电子相变和固体的性质,例如超导电性和耿(Gunn)效应,特别是在有机体中的弱铁磁性、佩尔斯相变、过渡金属化合物的霍姆—饶索里相变;载流子的变换作用在低温、低能量强度条件下是显著的,是无机化合物(陶瓷、金属、绝缘体)过渡到有机物的重要特征量。

三、隧道效应—— 电子分布的重要特性

隧道效应是材料特性研究由原子分子范围到电子范围时的一个质的变化,是从量子力学原理出发研究材料特性的重要标志。

在原子分子范围讨论时,量子力学的测不准关系可以不计,因果律是成立的。当今的扫描隧道电子显微镜所观测到的原子的运动和位置是一明证。但进入原子分子中的电子范围时,许多实验证明了量子力学的测不准关系起着主导作用,电子的运动不服从因果律,对单个电子是无法跟踪的,电子的运动只能遵守统计的概率。也就是说,一旦进入原子内部,即否定了机械的决定论,而进入了偶然性的概率论,这不仅是材料科学的奥秘,也同样是生命的奥秘所在。

一般说来,隧道效应中电子较少的态能级较低,更为稳定,所有的反应过程总是要构成隧道效应或表面边界尽可能小的集团。根据量子法则,表面电子密度必须连续,在小能量范围的情况中,反应过程将隧道效应电子变为真实电子。分子的化学反应是由原子表面电子的直接输运来实现的,生物化学过程是电子越过原子和分子边界,电子流动产生等密度界面,促使原子反应择优取向。在生物学中,已经观察到某些细胞的运动总是使某些类型的细胞合为一体。这是由于分子表面电子的作用,造成了择向反应过程。可以利用分子表面电子密度相等、能量(生成能)随隧道的变化来解释反应的特性和规律。

综上所述,采用固态物理中的材料科学研究方法,根据原子和分子边界上电子密度的关系和生成能研究,对纳米材料、大分子和生物过程的研究是将第一原理和大量实际规律相结合的综合研究,它将成为探索由无机物发展到有机物,再到生命这一发展过程的重要研究方法。(责任编辑 蔡德诚)

重要更正

本刊 1993 年第 10 期第 5 页横线以下左栏第 5~6 行“尽管它平均利润率:”应为“尽管它们有时也供不应求,这类商品的价格机制与第一类不同。由于它们是人工产品,因而定价必须首先考虑成本,在成本的基础上才受供求关系的支配,其价格所围绕变动的数值是成本加平均利润率:” 特向读者和作者致歉。 编辑部