

# 自然科学学科发展战略研究报告之二:原子分子物理学

## Strategic Research on Natural Science Disciplines: Atomic and Molecular physics

国家自然科学基金委员会

**编者按** 国家自然科学基金委员会为正确使用自然科学基金提供依据,近年来邀请有关科学家、情报专家、科技管理专家组成了50多个学科发展战略研究组,对各学科的发展战略提出了研究报告。这些研究报告,对引导我国科技事业的顺利发展有着重要意义;特别是对一个时期内自然科学基金的资助重点领域和方向将起一定的指导作用,对国内的学科建设、学术规划、科技人员培养也将起引导和咨询作用。为此,商得自然科学基金委员会同意,本刊将陆续刊登各学科战略研究报告的主要论点。一方面分析介绍各学科国内外发展现状和趋势,以及我国的优势、劣势、制约因素等情况,另一方面供申请自然科学基金资助者参考。

### 一、战略地位

原子分子物理学研究原子分子的结构、性质、相互作用和运动规律,阐明物理学基本定律,提供各种各样的原子分子信息和数据。

原子分子物理学起源于19世纪对太阳光谱和气体放电的研究,它经历了本世纪20年代第一次发展高峰时期以后,已成为一门独立的物理学分支学科。那时人们带着在宏观世界建立的、认为是十分完美的经典物理学开始闯进原子分子微观世界,面对许多无法理解的新现象产生了极大的困惑,经典物理学面临严重危机。在大量实验研究的启示下,人们终于摆脱了经典力学“山穷水尽”的困境,建立起量子力学“又一村”。这是物理学上划时代的突破,它为许多现代科技领域的发展铺平了道路。所以说原子分子物理学是揭开微观世界奥秘的先驱,是现代科学技术的奠基石。

40~50年代发展了射频微波段的波谱学,使原子分子的测量精度提高百万倍以上,为创立和检验量子电动力学、相对论和各种基本对称性提供实验基础,开辟了精密测量和量子计量的新时代。

从70年代到现在,原子分子物理学进入了又

一个高峰时期,其特点是领域空前广泛,数据空前精确,发展空前迅速。它的出现不仅是学科本身发展的深入和延伸,也不仅是计算机、激光、束技术和检测技术的发展提供了必要条件,更重要的是当今全世界范围内愈演愈烈的发展高新技术的竞争,各国都围绕着能源、材料、环境和安全等问题分别制定了星球大战计划、尤里卡计划等等,我国也相应制定了863计划。这些计划迫切需要大量的原子分子物理学方法和数据,极大地推动了原子分子物理学的发展。反之,原子分子物理学在这场生命攸关的新高技术竞争中将不断作出重大贡献。

回顾历史,许多事例都说明原子分子物理学在推动科技进步和社会进步中的重大作用。诺贝尔物理奖从1901~1989年共颁奖83次,其中有16次[从1902年的塞曼(Zeeman)到1989年的冉赛(Ramsey)、泡利(Pauli)和德赫梅尔特(Dehmelt)]授予原子分子物理学方面的研究工作,这是原子分子物理学巨大贡献得到公认的最好证明。

原子分子物理学是建立和检验基本物理定律的元勋。氢原子光谱研究是量子力学的奠基石之一;兰姆移位和电子异常磁矩测量是量子电动力学最早和最精确的检验;精确对比分别置于火箭

和地面上的两台原子频标测得重力红移,证实了广义相对论;测量单原子级联荧光偏振关联证明了贝耳(Bell)不等式,回答了量子力学是完全的理论表述这一长期争论的问题。还有测量正、反粒子相应物理量之比检验CPT定理;测量某些重原子的禁戒跃迁,证实原子跃迁过程同样存在宇称不守恒,再一次证明了弱电统一理论的正确性;测量中子偶极矩检验时间反演不变性等。

原子分子物理学是开拓高新技术的先驱。对气体放电和电子束的研究促进了电子学的诞生,发展了现代电子工业、无线电通讯和自动控制等,使社会生产和人们生活发生了革命性变化;对磁共振和激光器的研究促进了量子电子学的诞生,带来了精密测量和量子计量的新时代;激光器向光频段延伸产生了激光,促进了光电子学诞生,激光产业正在迅猛发展。

原子分子物理学是其他学科向微观深入发展的桥梁。它为邻近学科提供理论与实验方法和数据,促进邻近学科的发展和边缘学科的形成。原子分子物理与光物理的关系历来十分密切,原子分子与辐射的相互作用是它们共同的研究对象,人们最近将它们统称为原子分子和光物理。原子分子物理学为核物理提供高精度的核参数,核及其原子环境间的动力学相互作用是当前这两个学科共同的研究前沿。分子结构和动力学研究为化学和生物学提供坚实的物理基础和有效的实验手段,出现了量子化学、分子反应动力学、分子生物学等边缘学科。原子分子团簇是当前原子分子物理和凝聚态物理共同的研究前沿,它的发展将促使在原子分子水平上设计和发展新材料,不断开创新局面。

原子分子物理学是培养优秀人才的摇篮,是许多涉及原子分子层次的学科的基础,这些学科都需要有原子分子物理学专门知识的人才。原子分子物理学研究设备条件相对地说大多是小型的和分散的,学生有更多的机会参加前沿研究,在导师指导下独立完成课题,除了本专业外,还得到机械、真空、电子学、激光、计算机等多方面的训练。因此,原子分子物理学研究培养出具有多方面技能、独立工作能力和适应性强的、可以在许多学科领域工作的文(理论)武(实验)全才。

原子分子物理学是国家和人类安全的卫士。原子钟是现代导航、通讯、全球定位和发射同步系统的核心;高功率激光器应用于新型对抗系统和定向能武器,而发展和使用这些系统都离不开原子分子物理学基础;在航天领域,运动物体的加热与探测和背景辐射研究离不开许许多多原子分子的激发、电离、离解、反应、辐射等问题;要改善环境,解决人们普遍担心的臭氧层破坏、大气污染、

电离辐射对生物的杀伤等都要原子分子数据和理论。为了解决能源危机,不论是激光等惯性约束聚变、磁约束聚变、磁流体发电,还是提高燃烧效率研究,也都离不开原子分子物理学理论和数据。磁共振成像应用于生物学和医学,为保证人们健康作出越来越大的贡献。

所以说,原子分子物理学是一门基础性强、渗透面广、应用范围宽的正在蓬勃发展的物理学分支学科,在促进科技进步和经济发展、加强国防、改善环境和保障人们健康等方面占有不可忽视的重要地位。

## 二、发展趋势

当前原子分子物理学正处在新的发展高峰时期,在原子分子结构、碰撞动力学以及辐射相互作用和检验物理学各种基本定律等方面不断取得令人瞩目的重大进展。

物理学有许多分支学科,彼此很不相同,但是有一个共同的中心,即研究自然界的基本定律,在这方面原子物理学的贡献是最突出的。所谓基础原子物理学,是通过原子来研究空间和时间的基本性质,检验自然界的基本相互作用和对称性,发展新的精密测量技术。先举两个例子说明这类实验的精度;利用囚禁技术测量电子磁矩精度达 $10^{-12}$ 量级,相当于测量地球直径的误差不到一根头发丝;原子钟的稳定度已达 $10^{-14}$ 量级,相当于300万年不差一秒。当前主要的研究热点有:中性原子囚禁;利用囚禁技术测量电子磁矩精度;研究粒子与反粒子的对称性检验CPT定理;获得更精确的电子与质子的质量比;高精度地比较核质量,提供测量中微子质量的新方法;囚禁冷却至mK的粒子,研究如玻色凝聚等新物态;利用波谱学中的隔离场方法更精确地测量中子磁矩,检验时间反演对称性;继续研究原子中的弱电相互作用,检验弱电统一理论;研究高离化态和奇异原子,进一步检验量子电动力学和相对论性多体效应等等。

当前原子物理学研究,除了上述基本检验外,还有多电子原子研究和原子瞬态研究两个方面。前者包括阐明多电子原子中电子运动的关联,获得多体系统的物理学理解和定量描述,并用这些概念去解释分子或其他更复杂系统中的原子动力学行为;后者包括中间态和非稳定态物理性质的描述,原子碰撞中的能量、角动量和粒子的交换,理解高度关联的中间态的作用。当前主要的研究热点有:原子高里德伯态,已获得主量子数达300的高里德伯态(它比通常原子要大10万倍,相当于将一粒芝麻放大到一个运动场那样大),还有高角动量态和圆态,这些都是崭新的原子样品;行星原

### 三、战略目标和措施

子为研究电子关联和多体量子体系动力学提供有效方法;里德伯原子在强电磁场中的行为提供研究动力学对称性的机会;里德伯原子碰撞提供研究通常散射不可能达到的低能电子散射的机会。内壳层电子激发为研究关联效应、检验相对论和量子电动力学提供机会。自电离、负离子、双电子复合和缔合电离等提供研究电子连续态结构的机会。碰撞过程中的近似守恒律、态-态完全碰撞和超慢碰撞等研究。高离化态,现在有可能产生类氢的铀离子,为聚变和短波激光研究提供方法和数据;等电子系列为了解核电荷对相对论和量子电动力学效应的影响提供唯一的机会;还有瞬时超重原子、电子-正电子成对产生、激态原子的形状等研究。多光子过程为研究关联电子动力学开辟新途径。离子和原子的冷却和囚禁成功开辟了精密测量和基本检验的新局面。激光场中的碰撞可产生新的跃迁,提供控制化学反应产物的途径。强激光与原子相互作用可导致离子实和外层电子的耦合激发,提供研究离子实的集体运动与外电子、强光场的耦合和相互作用的机会,还可以产生高离化态和高次谐波。

分子物理学的复兴表现在许多方面,归纳起来主要是两类问题:一类问题是简单分子的光谱和结构,人们希望了解,随着原子数的增加分子的电子特性是如何变化的,靠弱的范德瓦耳斯键结合在一起的分子几何构型是由什么因素决定的,分子里德伯态的结构如何反映分子离子实内的相互作用等等;另一类问题是分子中的电子和核在彼此的场中的动力学行为。传统的分子结构概念受到挑战,现在认为结构与动力学是不可分割的,它们有内在的统一性。下面举几个研究热点:自由基和亚稳分子等短寿命高活性样品的研究,加深了对化学反应动力学的理解,提供了控制化学反应过程的新方法。原子分子团簇研究可揭示从单个原子到凝聚态的演变规律,为催化和材料设计提供依据。研究小分子体系从低激发态的极有规律的内部运动到高激发态出现能量的随机分布(混沌)的转变,是选态化学的重大进展。还有利用单色激光研究分子激发、电离和态-态反应动力学过程;利用短脉冲激光研究分子内能转移;利用紫外及软X射线研究实激发的分子中的动力学过程;激光裂解(半碰撞)研究碰撞动力学和自由基演变等。

上述情况充分说明当前原子分子物理研究领域广泛、数据精确、发展迅速。这些问题不仅有重大的科学价值,有很强的应用背景,而且可以说是高技术发展的基础。高技术的新概念新构思,相当程度上依赖于原子分子物理学创新性的发展,因此美、欧等先进国家对此十分重视。

我国原子分子物理学研究有较长久的历史,老一辈原子分子物理学家曾作出过重大贡献。近十年来又有明显的发展。据1988年调查,目前包括国家重点实验室和部门开放实验室在内共有50多个单位,高级研究技术人员200余人从事原子分子物理学研究,在研课题100多个。1986~1989年国家基金委员会资助的面上项目共37项,总经费121.8万元,平均每项3.29万元,重大项目2项,总经费250万元。1986~1989年《中国物理文摘》报道的原子分子物理学研究论文共581篇,占物理学论文总数的3.1%。研究设备以计算机和激光光谱实验装置为主,还有离子阱、交叉束装置和低能加速器等。同步辐射和重离子加速器的建成为原子分子物理学研究提供了有效的新手段。从研究内容上看,电子与原子分子散射理论和磁共振研究等有较久的历史,原子频标研究曾为国民经济和国防建设作出过贡献。目前原子分子激发态研究较多,多通道量子亏损理论研究曾在国际上获奖。高离化态、内壳层电子激发态、原子分子在强电、磁场或强激光场中的行为、离子与原子分子碰撞、原子分子与固体表面碰撞、核磁共振成像、原子分子团簇,以及聚变等离子体、航天工程和星际的原子分子问题等研究都已开展,建立原子分子数据库的工作已经起步。1988年12月第四届全国原子分子物理学术会议35岁以下的年青人占代表总数的40%,说明青年科技人员正在成长。

我国原子分子物理学研究与国际上和国内其他物理学分支学科比较仍然是薄弱的领域,远远不能适应我国科技发展和国民经济、国防建设发展的需要。由于缺乏统一的规划和有效的调控措施,目前还存在零星、分散、重复和布局不合理的状况,实验研究尤为薄弱,交叉学科和为高技术服务的原子分子物理学基础研究未得到应有的重视。经费不足是很明显的:我国基金委员会每年投入原子分子物理学面上项目的经费只有美国国家基金会的1/150,法国国家科研中心的1/76。我国每项平均经费3.29万元,只有美国的1/10。我国原子分子物理学面上项目只占物理学面上项目经费的5.65%,而美国是9.31%,法国是10.1%。我国研究经费主要靠基金委员会,而美国还有一半来自国防部、能源部等单位。科技力量不足也是明显的:我国约200人,美国有3000人;我国每年培养博士生5人,美国(包括光物理)有140人。假若考虑到我国科技人员精力还不能集中,这个差距就更大。

因此,对我国中、近期原子分子物理学研究,我们提出:

### 1. 方向和目标

根据原子分子物理学发展趋势,结合我国实际情况,我国原子分子物理学基础研究应选择有限目标,争取在原子分子高激发态、高离化态、碰撞动力学、原子分子团簇等国际前沿领域做出特色和创新的科研工作。同时要瞄准我国国民经济和国防建设的高技术计划,有选择地结合国内急需的X激光、核聚变、高速飞行器等开展原子分子物理学理论和实验研究,提供数据和方法,为我国高技术发展作出贡献,原子分子物理学本身也得到相应的发展。通过上述工作,为今后我国原子分子物理学研究更大的发展打下坚实的基础。

### 2. 前沿课题

原子分子高激发态、高离化态和其他新体系的研究;

原子分子的特殊环境效应研究;

光电离、光裂解和内壳层激发与电离研究;

原子分子团簇研究;

原子分子与其它粒子的碰撞过程与退激过程以及态-态反应动力学研究;

固体中的原子分子碰撞研究;

原子、离子的激光操纵和新的精确谱方法研究;

有关基础原子物理的新思想、新方法、新技术和新设备的研究。

### 3. 定向课题

新型激光器和激光同位素分离的原子分子物理学基础研究;

核反应过程的急需的原子分子参数测试和理论计算方法研究;

运动目标和环境辐射特性研究中的急需的原子分子参数测试和理论计算方法研究;

核聚变和磁流体发电中的原子分子物理学基础研究;

导航、通讯和环境监测所需要的原子分子结构和精确谱研究;

成膜过程、材料表面改性和新材料设计所需要的原子分子结构及动力学过程研究;

高分辨磁共振和高分辨激光光谱技术及其应用研究。

### 4. 战略措施

**协调规划。** 建议国家科委组织全国原子分子物理学专家组,专门制定“八五”期间全国原子分子物理学发展规划。在制定和实施其他与原子分子物理学有关的学科规划、高技术计划或攻关计划时要吸收原子分子物理学家参加。国家基金委员会、中国科学院、国家教委和国防科工委等部

门要在全统一规划的指导下发挥各自优势,协同配合,制定各自的规划,力求在有限的人、财、物投入条件下获得最佳效果。

**增加投资。** 除了随着基础科研经费的增长同步增长外,要适当增加对原子分子物理学研究的相对比重,特别是高技术计划和国防科研经费中应大幅度增加对原子分子物理学的投资。

**合理布局。** 本着目标有限、规模适度、人员精干的原则,选择若干条件较好的单位予以重点支持,采用开放、流动、联合、竞争的办法,逐步形成原子分子物理学研究中心。对新的布点要认真评审论证。

**选好突破口。** 既要跟踪国际上本学科的发展趋势,又要满足我国国民经济和国防建设的迫切需要,充分有效地利用可能的人力和财力,选择若干重点,安排重大项目 and 重点项目,引导面上项目,组织有关单位和各类人员协同作战。鼓励利用同步辐射和重离子加速器进行原子分子物理学研究。

**培养人才。** 这是发展科技事业的关键。研究队伍要保持合理的结构和比例。当前要特别注意技术队伍建设和对青年人的培养,适当增加原子分子物理学位点。

**国际合作与交流。** 这是学习先进科学技术的渠道,也是显示自己、参与世界性竞争的舞台。一定要保证渠道畅通,给予必要的外汇支持,优先考虑重大项目和重点实验室的需要。

为了我国高技术的发展,采取切实步骤,近期在我国建立原子分子数据库是十分必要的。

### 5. 基金委员会对原子分子物理学发展的设想

在“八五”期间再选择支持二三个学术思想新颖、对原子分子基础实验有较大推动作用的项目,并争取与国家重点实验室及部门开放实验室建设密切配合。

对面上项目根据本报告提出的前沿和定向课题进行导向,适当增加经费比例,例如由当前占物理学面上经费的5.65%提高到10%左右。

加强与物理学会原子分子物理学专业委员会的联系。

侧重支持原子分子物理学新现象的探索和基本规律的验证。

加强对原子分子物理学与其他学科交叉课题的择优资助。

全国从事原子分子物理学研究的科技人员团结起来,协同配合、努力拼搏,争取为本学科的进步、国民经济的发展和国家安全作出更大的贡献。

(责任编辑 刘先曙)