

原子、分子物理的若干前沿领域和近期发展的建议

国家自然科学基金委员会原子、分子物理学科发展研究组

(国家自然科学基金委员会,北京 100031)

本文扼要地评述了近年来原子、分子物理学的若干活跃的前沿领域:原子、分子高激发态结构,原子、分子碰撞及其反应动力学,原子、分子与辐射相互作用以及原子、分子簇等,并提出了近期我国原子、分子物理学发展的建议。

原子、分子物理学是研究原子、分子结构、运动规律、相互作用以及周围环境对其影响的科学。它包括原子、分子结构,原子、分子与辐射相互作用,原子、分子碰撞及势能函数等。原子、分子是物质结构的第一个微观层次,是通向下两个微观层次——原子核和粒子的大门。原子、分子过程广泛地存在于各种微观、宏观和宇观过程之中,从凝聚态和等离子体的特性到各种复杂的化学和生命过程,还有各种天体和星云的演变,都与原子、分子过程及其特性息息相关。原子、分子物理不仅为邻近的学科提供基础理论、实验方法和基本数据,而且在能源、材料、环境和国防事业中都已发挥了重要作用。无数事例表明,原子、分子物理在推动科学技术发展和社会进步中具有重要作用。众所周知,近代物理的标志是量子理论的建立,而量子理论的实验基础是原子光谱和各类碰撞研究。诺贝尔奖金物理学奖从1901年至1989年共颁发83次,其中有19次授予在原子、分子物理方面做出贡献的科学家。

本文扼要地介绍原子、分子物理的若干前沿,并就近期发展我国原子、分子物理提出若干建议。

一、原子、分子物理研究的若干前沿领域

1. 原子、分子结构研究

原子、分子结构是原子、分子物理学研究的基本问题。原子、分子物理研究经历了本世纪物理

20年代以量子力学建立为主要标志的高峰时期,又于60年代再度兴起。原子、分子结构的研究过去曾经是并且现在仍然是原子、分子物理研究的主要内容之一,所不同的是研究的内容和重点不同。当前原子、分子结构研究的重点是原子、分子的高激发态结构及其它新颖体系。

原子激发态结构的研究始终是原子物理学的一个主要研究内容。70年代中期以来,由于航天、激光、受控核聚变、同位素分离和其它高技术领域的需要,也由于激光光谱技术、碰撞和电子能谱技术、测量技术、计算方法和技术的进展,原子激发态结构研究已广泛开展。目前对原子激发态结构的研究的集中点已由低激发态转入高激发态,由外层电子激发转入内层电子激发,由中性原子转入离化态原子,由简单原子转入复杂原子。

原子的高激发态结构一般由无数个里德伯态,无数个自电离态和其相应的连续态组成。原子的高里德伯态是一种弱束缚系统。它具有比较简单的结构,与辐射的相互作用强,碰撞截面大,对外场异常敏感。对里德伯原子的研究工作曾开创了原子高激发态的研究领域,并提供了大量的原子结构数据。目前,对原子里德伯态结构的研究工作仍然十分活跃,并正在更高的激发态($n \sim 300$)、高角动量态(包括圆态)、重原子(特别是稀土元素)里德伯态等方面取得新的进展。

原子的自电离态作为一种新颖的原子状态而具有研究意义,并且由于和天体物理、受控核

聚变等研究工作密切相关,以及可能实现新型真空紫外受激辐射和可能为激光分离同位素提供有效的途径而受到重视。近年来实现的高激发双里德伯态——行星原子引起了人们的注意,它为控制和研究电子相关现象提供了有效的方法,对研究三体量子体系的动力学问题有重要作用。对双激发态的研究,已导致引进相关量子数对原子的激发态进行新的分类和描述新的光谱规律。

负离子代表另一种弱束缚系统。近年来,利用电子束技术和高分辨光谱技术,对负离子的总能量、激发态寿命、亚稳态、解离反应、电子亲和力等进行了较多的研究,成为原子结构研究中较为活跃的领域之一。

高离化态离子出现在高温等离子系统中。与高离化态有关的数据包括能级、与光子(或电子)的碰撞激发(或离化)、双电子复合截面等,是X激光、激光聚变、磁约束聚变研究中不可缺少的基本数据。这方面的数据目前尚属空白,主要靠理论计算,极需实验数据。

利用带电粒子加速器、束箔光谱、强激光高温等离子体等,已经得出高离化态的结构、寿命、辐射、衰变过程,以及内层和外层空位双阱势、双电子复合等大量信息和数据。除加速器外,目前认为最理想的设备是电子束离子阱(EBIT),它剥离电子可达70个,离子约束时间长达数小时,更高的目标是把铀原子的92个电子全剥光,获得裸核。

分子的激发态结构研究是近年来国际上极为活跃的领域。分子与原子的基本不同处在于分子是一个多核的量子力学体系,根据Born-Oppenheimer近似,可以认为电子是在核的框架所形成的势场内运动。因此,分子结构研究的首要问题是确定核的几何构型,而激发态的构型又不同于基态。处理分子结构问题有两个基本理论,即价键理论和分子轨道理论,前者可以较好地解释分子的几何结构和化学反应性能,后者可以定量计算分子的光谱和激发态能级结构等。实验上常常运用可见和紫外光谱区的分子光谱来研究分子的电子激发态的能级结

构,不过对分子光谱谱线的标识比较困难。近几年来,由于高分辨激光光谱、超音速射流、基质隔离等技术的应用,对于一些包含几个至几十个原子的小分子的光谱已经积累了丰富的数据,标识了一部分分子光谱谱线。对大分子激发态的了解还处于空白状态。

此外,长程分子(Long-Range molecules)、开壳分子(open-core molecules)以及负分子离子等的研究也都是前沿课题。

2. 原子、分子碰撞及其反应动力学研究

原子、分子与各种粒子(光子、正负电子和离子)碰撞在原子、分子物理研究中占有十分重要的地位。据统计,目前国际上发表的原子、分子碰撞论文约占原子、分子物理论文总数的五分之三。它之所以引起人们广泛的注意,是因为这些碰撞过程不仅与原子结构、分子结构及其状态密切相关,而且还普遍地存在于天体、星际空间、地球的大气、等离子体以及化学反应过程中。因此,原子、分子碰撞过程的深入研究,不仅为原子、分子物理的基本规律提供了丰富而深刻的认识,而且大大地推动了天体物理、大气物理、等离子体物理、化学反应动力学,乃至固体物理和材料科学的发展。

正因为如此,本世纪60年代以来,原子、分子碰撞研究进入了一个崭新的时代。国际上在这一领域从事研究的人员和发表的论文,分别增长了20倍和10倍,反映这一领域研究成就的三个有代表性的系列国际会议,即电子、原子碰撞国际会议(ICPEAC)、原子物理国际会议(ICAP)和固体中原子碰撞国际会议(ICACS),持续不断,且规模日益扩大。

原子、分子碰撞按参与碰撞的粒子分类包括:光子与原子、分子碰撞,电子(正电子)与原子、分子碰撞,离子之间的碰撞以及离子与固体中的原子碰撞。在这些碰撞研究中,发展最早的是电子与原子、分子碰撞;离子-原子和原子-分子碰撞是研究最广泛的,目前占多数,但是近年呈缓慢下降趋势;固体中的原子碰撞是引起人们十分关注的课题。

电子与原子、分子碰撞研究,迄今已有60

余年的历史。目前许多人对电子与分子碰撞很感兴趣,因为电子与分子碰撞涉及到多电子、多中心问题。碰撞除了引起电子激发外,由于分子中振动和转动能级间隔很小,所以很容易发生振动激发和转动激发。

近 20 年来,离子与原子碰撞、原子与原子碰撞的研究工作已经广泛地开展。由于激光及测量技术的进步,利用加速器产生的原子、分子(离子)束进行原子、分子碰撞实验,出现了蓬勃发展的势头。特别是,可以利用这些束“制备”特定状态的粒子,即碰撞前后原子、分子的量子态可以完全确定,并做到人为控制和选择,进行“完全”碰撞实验。目前,这类实验已能做到确定部分量子态。随着实验技术的进步,“完全”碰撞实验将成为可能。

研究碰撞过程的动力学亦是当今原子、分子物理的热门课题。利用原子束、分子束、激光束三束互相交叉进行实验,研究激发态离子与分子反应性碰撞过程,将能得到碰撞过程动力学的详细信息。这类研究将揭示分子反应动力学的本质与核心。

粒子与处在环境中的原子,特别是固体中的原子碰撞,是近年来得到人们关注的课题。其研究内容涉及粒子与固体中原子相互作用的各个方面:沟道和沟道辐射,能量损失,电荷交换,原子的二次电子和光子发射,离子束混合,分子、离子崩裂和透射,离子和表面、界面相互作用,离子引起的溅射和辐射损伤,解吸附等。

3. 原子、分子与辐射的相互作用研究

原子、分子与辐射的相互作用是近年来原子、分子物理最活跃的分支之一。特别是利用激光的高强度和单色性,可以高精度地测定原子、分子的各种数据,研究特殊条件下的原子、分子的特性,控制原子、分子的运动等。

光电离可以直接地进行,或者也可以通过自电离态进行。原子、分子的电离阈从几个至十几个电子伏特,相当于真空紫外区(波长短于 200 nm)一个光子的能量,因而各种短波长辐射(如太阳光的短波部分, X 和 γ 射线,同步辐射以及等离子体辐射)都可以使原子、分子电

离,这是单光子电离过程。当光强极强时,如在强激光脉冲情况下,原子、分子可以同时吸收多个光子而总能量超过其阈值,也可使其电离,这称为多光子电离(MPI)。在多光子电离过程中,包括有中间共振能级,其电离截面可增大几个量级,产生共振增强多光子电离(REMPI)。由于多光子过程遵循的选择定则与单光子过程不同,因而前者可以达到对单光子电离为禁戒的态。多光子过程的另一优点是通过光的偏振效应可直接识别与跃迁有关的分子态对称性。REMPI 在物理和化学领域中有广泛应用。它可以研究分子激发态,离子和自由基的反应动力学,分子间与分子内能能量转移。激光分离同位素是解决能源问题有希望的途径。

光裂解是原子、分子与辐射的相互作用的另一个重要问题。光裂解有二类,即分子吸收可见或紫外光后可达到上排斥电子态而直接解离,或通过预离解态解离,这是经典的光化学裂解。另一类是通过红外多光子吸收、泛频吸收或受激发射泵浦等使分子达到高振动激发态,分子内能转移到某一链,使其断裂。分子光解研究具有重要的应用,如用于解决地球高层大气臭氧层破坏的问题,利用水光解制氢储存太阳能,以及光解制造高功率化学激光器等。

激光对原子和分子的作用,一方面可引起原子、分子内部能级与状态的变化,另一方面可引起整体速度、动量、动能的变化,从而产生加热、冷却、偏转、准直、聚焦等效应,称为激光操纵。上述诸效应的研究中激光冷却的研究发展最快,目前冷却温度已降到 $5 \mu\text{K}$ 。原子(或离子)的冷却与囚禁,可对单原子的基本特征与过程进行崭新的研究,可对其它条件下难以长期存在的体系(如反粒子、反质子、高离化态原子等)进行研究,可测量亚稳态的寿命等。

4. 原子、分子簇的研究

原子簇是少数(几个至几百个)原子或分子的聚合物。它们广泛地存在于化学和物理过程中。原子簇的性质介于单个原子、分子与凝聚态物质之间,它是介于气态和固态之间的物质结构形态,有人称之为“物质第五态”。研究原

子簇的形成、结构及其性质,有可能在原子、分子物理学与凝聚态物理学之间架起一座桥梁。

原子簇的研究,国际上始于60年代,70年代已有少量研究结果发表,80年代出现了较大规模的实验与理论研究,但是迄今簇仍是当前悬而未决的问题。

由于原子簇具有与单个原子、分子和凝聚态都不相同的奇异性质,所以目前的理论和实验研究大体上从两个不同方向展开:(1)从原子向固体方向,研究当原子簇的原子(分子)数目增加到什么程度时,原子(分子)的单个特性出现突变;(2)从固体(超细微粒)向原子方向,研究当超细微粒的尺寸小到什么程度时,固体的整体性质出现突变。可以预料,随着这些问题研究的不断深入,从原子、分子水平上设计和发展新的特殊性能材料将成为可能。

原子簇的研究进展很迅速。目前,从原子、分子的二聚物的大量研究工作中已得到许多光谱学信息;用双光子电离技术对三聚物的电子吸收光谱也进行了研究;对较重的原子簇研究,主要限于它们的光离势方面的工作。在从固体到原子方向研究原子簇方面,主要的工作都是围绕探索固体的物理性质和化学性质随原子簇大小的变化规律进行的。

原子、分子簇的研究还有待于深入。目前,对于 $n > 3$ 的气体原子簇的结构研究还远远不够;关于金属原子簇还所知甚少,实验研究的某些结果还比较分散,数据相差甚大,理论模型大都停留在唯象描述阶段,适用范围过窄。

二、对我国原子、分子物理研究 近期发展的建议

1. 现状

我国原子、分子物理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的贡献。近十年来,在此领域又有明显的发展。据1988年调查,目前国内约有50多个单位从事该项研究,有高级职称的研究人员200余人,研究课题100多项。1986—1989年国家自然科

学基金委员会资助37项,重大项目二项,总经费达371.8万元。根据1986—1989年《中国物理文摘》报道,在这期间原子、分子物理研究论文共581篇,占物理论文总数的3.1%。研究设备以激光光谱实验装置为主,还有可用于原子、分子物理研究的小加速器、离子阱、交叉束装置等。此外,同步辐射和重离子加速器的建成将为原子、分子物理研究提供有效的新手段。

从研究内容看,原子、分子结构以及电子与原子、分子散射理论有较久的历史。原子频标研究曾为国民经济和国防建设作过贡献。在目前,研究原子、分子激发态较多。多通道量子亏损理论研究曾在国防上获奖。高离化态,内壳层电子激发态,激光光谱,原子、分子在强磁场或强激光场中的行为,离子与原子、分子碰撞,离子与固体中原子碰撞,原子簇,以及星际的原子、分子问题等的研究,都已开展,并取得了不少成果。建立原子、分子数据库的工作也已经起步。1982年,已正式成立了原子、分子物理专业委员会(属中国物理学会领导),以更好地推动该项工作的进一步发展。

2. 方向和目标

根据原子、分子物理发展趋势,结合我国实际情况,我国原子、分子物理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、原子簇、固体中原子碰撞等国际前沿领域作出有特色和创新的研究工作。同时,要根据我国国民经济和国防建设的高技术需要,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,使原子、分子物理本身也得到相应的发展。为了我国高技术的发展,要采取切实步骤,近期内在我国建立原子、分子数据库是十分必要的。通过上述工作,为今后我国原子、分子物理研究更大的发展打下坚实的基础。

3. 前沿课题

经过全国原子、分子物理会议反复研究,大家一致认为下列几项为当前的前沿课题:

(1) 原子、分子高激发态、高离化态和其他

新颖体系的研究;

(2) 原子、分子的特殊环境效应研究;

(3) 光电离、光裂解和内壳层激发和电离研究;

(4) 原子簇研究;

(5) 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;

(6) 固体中的原子、分子碰撞研究;

(7) 原子、离子的激光操纵和新的精确谱方法研究;

(8) 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。

4. 措施和建议

在制定和实施其他与原子、分子物理有密切关系的学科规划或高技术计划时,要吸收原子、分子物理学家参加。

要增加对原子、分子物理学科的投资。除了从基础科研经费中拨款要保持稳定和适当增长外,更重要的是有关主管部门要从国家高技术计划和国防科研经费中大幅度地增加对基础研究的投资。原子、分子物理学家要面向高技术计划和能源、材料、环境等方面的攻关计划,开展应用科学中的原子、分子物理基础研究,以自己的优良“服务”去争取更多的经费。

要改进原子、分子物理研究的布局。本着目标有限、规模适度、人员精干的原则,选定若干条件较好的单位给与重点支持,采用开放、流动、联合、竞争的办法,逐步形成国内甚至国际上的原子、分子物理研究中心。对原来布局不

太合理的实验室,要注意发挥所在单位专长,逐步形成自己的研究特色,力求避免低水平的重复。对于新的布点要认真组织评审。

要选好突破口,既要考虑学科自身发展的需要,跟踪世界科学的发展趋势,又要适应我国经济发展的需要,符合当前我国经济实力和人才分布等实际情况,解决当前迫切需要解决的重大科学技术问题,组织理论、实验和工程技术等各类人员协同作战。在理论、实验和开发应用协调发展的前提下,当前要特别重视建设原子、分子物理的实验基础,发展与原子、分子物理相关的基础技术,如激光束、原子束、分子束、离子束、超高真空、谱仪和快速多道分析器等。

要注意研究队伍的合理结构。高、中、初级,理论与实验技术等各类人员要保持合理的配比,既要物色、培养基础好、学术思想活跃的学术带头人,也要特别注意建立强有力的技术队伍。当前要特别注意让优秀青年进入研究领域,造就一批优秀的新一代科学技术专家。

要积极开展国际合作与交流。原子、分子物理学的基础研究比较容易与国外建立合作关系,而且原子、分子物理研究往往有明确的应用背景,因此通过合作可以摸清国外一些与高技术领域有关的发展动向。国防合作与交流要围绕重大项目和重点实验室来开展。

最后,建议采取切实步骤,在我国建立原子、分子数据库。这对于我国高技术 and 国防科技的发展是十分有意义的。

1991 年第 5 期《物理》内容预告

知识和进展

声学 & 海洋开发(汪德昭);

非线性声学概述(钱祖文);

自然现象中的噪声(Bruce J. West);

第二代光纤通信的重要材料 KTP 晶体(黄朝恩);

铜氧化物超导体的电子结构(沈电洪);

正电子显微镜(郁伟中);

物理学和经济建设

光电子学与光电子产业专题系列介绍:用于 X 射线光学的多层膜(曹健林);

平板显示及其应用专题系列介绍:等离子体显示(彭国贤);

减压充氮直拉硅单晶技术(李立本等);

压电超声马达简介(周铁英);

物理学史和物理学家

我的 50 年(橘本初次郎);

气体常数的新进展(郭奕玲);

增强物理教学的历史感,用物理学史料进行方法论教育(申先甲);

前沿和动态

原子力显微镜(刘维编译);

部分物理学国家重点实验室和部门开放实验室简介(III)(国家自然科学基金委员会数理科学部)。