科学通报 2020 年 第 65 卷 第 21 期：2196 ~ 2200
观 点
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

超原子物理学：原子层次上物理的新方向

王志刚

吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012
E-mail: wangzg@jlu.edu.cn

提出建设超原子物理学的观点, 是缘于原子物理学等相关学科的发展成就, 其实质是开展原子层次上人工基元的物理规律探索, 并以此构造新的物理学工具. 作为由原子构成的团簇结构, 超原子的分子轨道可展现出相近于原子电子轨道的对称性; 不仅如此, 相比于元素周期表中可谓寥寥无几的自然界元素原子, 超原子的种类浩如烟海. 这为以超原子来模拟乃至替代自然元素原子提供了重要契机, 由此可促使原子层次上从结构出发的传统研究思路向着以功能为导向的科学研究范式转变. 更为深远地, 超原子物理学研究会促进以认识自然为主要驱动的物理学向着以改造自然为主要目标的物理学前进, 从而对相关学科领域发展乃至科技进步起到促进作用.



王志刚 吉林大学教授. 长期开展超原子的结构与功能特性研究工作, 包括: 预测了一系列不同维度的超原子结构, 解决了一些超原子的对称性和电子关联理论方法争议, 发展了超原子在量子点光源和单分子识别探测等方面的功能应用, 提出了通过引入自旋极化维度等途径以实现超原子的高精度自组装新方案.

1 从原子到原子层次, 再到超原子与人工基元

一般认为, 2000 年前先驱者们(留基伯与德谟克利特等)提出“原子”是组成物质的最小单元, 是不可再分的[1]. 随着物理学的发展, 人们从宏观到微观不断把物质结构“分下去”的能力逐渐增长, 但“原子”这个概念得以保留, 并成为现代量子力学验证自身普适性最为直接的体系. 不仅如此, 更是形成了对微观体系电子结构进行量子力学求解的基本共识——原子层次[2]. 虽然原子可再分, 但是在原子层次上把原子作为组成客观世界的基本结构单元, 这一提法仍然是合适的, 这是人类探索自然里程碑式的成就[3].

超原子概念发端于原子物理学的基本认识, 并形成于分子物理学等相关科学发展进步[4~11]. 超原子作为一类复杂多原子体系结构, 它的电子可展现出类似于原子中壳层排布电子的轨道对称性(图 1). 可见, 超原子概念本身就鲜明地突出了原子层次上的电子结构特性, 这保证了超原子可以脱离传统意义上纳米材料的印象, 被纳入一般的分子研究范畴[12,13]. 因此, 超原子成为了兼具原子电子结构特性和一般分子核运动特性的集合体, 具有丰富的物理内涵[11,14].

不同于自然界原子, 超原子是以自然元素原子为原料可人工合成的基元. 正是由于原子在物质科学中的基本意义, 超原子可以配得上是原子层次上最为基本的人工基元,

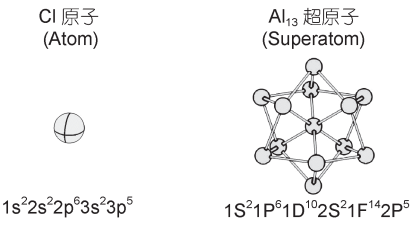

图 1 典型的原子与超原子之间相近电子壳层排布特性

Figure 1 Similar electron shell arrangement between the Cl atom and Al_{13} superatom

而不仅仅是其中之一. 基于超原子与原子的电子结构相近性, 利用超原子人工基元来模拟乃至替代自然界中原子基元的重要前景已经形成[11,14~17]. 如此, 超原子的物理学探索, 对从人工基元出发的相关科技发展将具有基础性意义, 将为人类从认识自然到改造自然的实践注入新的活力.

2 建设超原子物理学的逻辑必然性

为何要建设超原子物理学? 本文将从四个方面来体现逻辑必然性.

第一, 建设超原子物理学将为科学研究范式的转变提供基本支持. 长期以来, 人类从物理基本模型出发不断发展出原子层次上物质的功能, 但相应科学研究的一般思路却是从物质结构出发, 再进一步探索结构的功能特性(图 2). 这种思维可谓根深蒂固, 成为了习惯性的科学研究范式. 事实上, 这种范式所导致的困难逐渐凸现, 主要表现是受限于原子层次的结构特性, 难以实现物理模型化的

© 2020《中国科学》杂志社

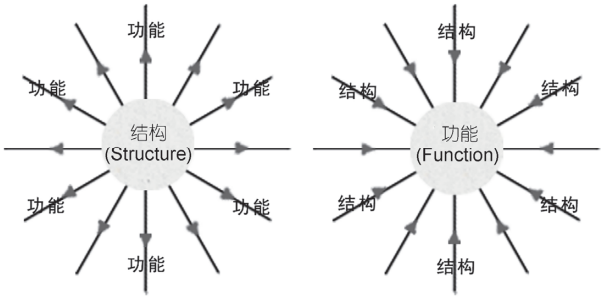

图 2 从结构出发转变为以功能为导向的思维范式
Figure 2 A paradigm transformation from structure to function

理想功能或者难以达到功能的参数指标, 从而限制了人类改造自然的能力. 导致这种状况的重要原因是, 作为物质科学基础的地球上自然可稳定存在的元素原子只有 90 余种, 再经过元素周期表规律划分, 能够被选中实现特定功能的原子基元种类就更少了. 与此相对, 超原子作为最基本的人工基元, 其种类近于无穷. 这给人类提供了原子层次上广阔的底层空间, 可以不再从自然元素出发去实现可能因种类少而被限制的功能, 转为从功能需要出发, 从庞大的种类数目中搜寻需求对应的超原子基元结构, 以此来构造理想中的大千世界. 于此, 超原子物理学研究将有助于带来新的科学研究范式.

第二, 建设超原子物理学是物理科学自身不断发展的重要体现. 2019 年是现代元素周期表被提出 150 周年, 人类已经积累了丰富的关于元素原子的知识, 相关于原子物理学的基础物理科学探索, 已经从基本的相互作用规律认识发展到了预测调控的新阶段. 超原子丰富的物理内涵及人工基元属性, 为原子层次上的物理规律把握和预测调控能力进一步发展提供了新的重要机遇. 由此, 从原子物理学来酝酿发展出超原子物理学, 就成为了物理学在原子层次上不断发展的重要阶段性体现. 而且, 当前学科间交叉融合正在几乎所有的基础科学领域蓬勃发展, 这些都为超原子物理学的建立提供了前提条件.

第三, 建设超原子物理学是超原子科学与技术研究发展的必然需要. 超原子在化学和材料学等领域中的研究一直在不断进步[16~20], 而且, 长期掣肘超原子发展的制备合成能力也取得了新进展[21]. 但是, 由于缺乏深刻的物理学支撑, 束缚了超原子模拟乃至替代原子的意义体现, 更会束缚超原子人工基元属性的功能发展. 目前, 即使是得到部分证实的(诸如高温超导[22]、新型光源[23]等)功能方面, 进一步的性能提升亦缺乏原子层次上深刻的规律把握支持. 这些问题都需要物理学来给出答案, 凸显出建立与发展超原子物理学的客观迫切性.

第四, 建设超原子物理学将有助于纳米科技的不断进步. 超原子概念提出时[24~26], 纳米科技也进入了繁盛发展时期. 纳米科技本身的发展不会停滞, 其中一个主要发展方向就是不断实现更为精密的表征与调控, 也就是“尺寸越做越小, 精度越来越高”, 从而逐渐进入到原子层次. 作为这种发展趋势的一个典型方面表现, 当前被重视的纳米材料与团簇的尺寸边界问题研究[12,13,27,28], 不但体现了纳米科学与原子层次上物理学相交叉乃至重叠的研究兴趣, 还促进了相关于超原子的结构演化规律研究取得新进展[27,28]. 可见, 超原子物理学将为纳米科技的未来发展提供新机会.

3 超原子物理学的基本研究内容

探索超原子系统中的相互作用物理规律, 并以此形成可促进相关学科和领域发展的物理学工具, 将是超原子物理学的基本任务, 也是超原子物理学存在的基本价值体现.

超原子发端于对原子的原子层次认识, 因此, 即使是着眼于与原子相比较的科学研究, 超原子物理学也会展开极为丰富的探索工作. 那些以原子为基本研究对象实现的物理学研究与工具构建, 诸如量子光学、势散射、强场物理等, 都可以在超原子中得到映射, 并将找寻到新的规律. 不仅如此, 考虑到超原子已被证明能够通过彼此键合而形成可被称为超分子的新型结构[14,29,30], 这为那些以分子为主要研究对象的物理学探索同样带来了新的重要机遇. 甚至, 如果再考虑到作为超原子前期经验阶段的“幻数规则”, 其最早是被用于理解原子核的基本结构这一事实[31,32], 则超原子物理学的探索还可透过原子层次对亚原子层次的物理学研究起到作用. 概括地讲, 以往基于原子开展的基础研究, 都可以在超原子中获得新的机遇.

超原子的发展空间必然不会限于与原子比较, 它的人工基元属性预示着超原子物理学的发展更须聚焦于人类改造自然的努力. 作为一种最基本的人工基元, 超原子的功能特性会通过以超原子来构建功能材料与器件而得到体现[33~35]. 在此方面, 包括高精度自组装在内的方法, 已经在包括超原子在内的人工基元光学功能等方面体现了重要意义[23,36~38], 未来会更多引导以物理学为基础的相关科学技术不断进步. 而且, 为发展功能导向下的新科学研究范式, 超原子的物理学探索也会不断地结合新的科技发展成果, 人工智能、大数据科学等将会为超原子物理学的丰富和发展提供强大工具保障, 尤其会促进构建包括超原子在内人工基元数据库方面的进展. 这些都将使人类逐渐能够摆脱从结构出发去探索功能的较为被动局面, 转而走上一条从功能需求出发来找寻对应结构的新道路.

4 总结与展望

综上所述, 本文提出了建设超原子物理学的观点. 从原子层次的基本认识出发, 我们论述了建设超原子物理学的逻辑必然性, 提议了超原子物理学的基本研究内容. 超原子物理学成长于原子物理学的巨大成就, 因此, 是不能脱离原子物理学来单独描绘超原子物理学的. 随着物理学

的不断进步, 思维范式的转变会为超原子物理学的向前发展提供重要保障. 在原子物理学研究中存在着这样一句非常贴切的谚语: 小原子, 大物理. 超原子物理学的前景会远超过今天所能达到的想象, 但借鉴原子物理学这句话, 我们确实可以写出一句未来会被证明是适用于超原子物理学的谚语: 超原子, 新物理.

致谢 感谢国家自然科学基金(11974136, 11674123, 11374004)资助.

推荐阅读文献

1 Li S H. Atoms (in Chinese). Shanghai: The Commercial Press, 1929 [李书华. 原子论. 上海: 商务印书馆, 1929]
2 Cowan R D. The Theory of Atomic Structure and Spectra. Berkeley: University of California Press, 1981
3 Bohr N. Atomic Theory and the Description of Nature. London: Cambridge University Press, 1962
4 Mariscal M M, Oviedo O A, Leiva E P M. Metal Clusters and Nanoalloys: From Modeling to Applications. New York: Springer Science & Business Media, 2013
5 Inoshita T, Ohnishi S, Oshiyama A. Electronic structure of the superatom: A quasiatomic system based on a semiconductor heterostructure. Phys Rev Lett, 1986, 57: 2560
6 Teo B K, Yang S Y. Jelliumatic shell model. J Clust Sci, 2015, 26: 1923–1941
7 Li J, Li X, Zhai H J, et al. Au_{20}: A tetrahedral cluster. Science, 2003, 299: 864–867
8 Bergeron D E, Castleman A W Jr, Morisato T, et al. Formation of $Al_{13}I^-$: Evidence for the superhalogen character of Al_{13}. Science, 2004, 304: 84–87
9 Feng M, Zhao J, Petek H. Atomlike, hollow-core-bound molecular orbitals of C_{60}. Science, 2008, 320: 359–362
10 Dognon J P, Clavaguéra C, Pyykkö P. A predicted organometallic series following a 32-electron principle: $An@C_{28}$ (An=Th, Pa^+, U^{2+}, Pu^{4+}). J Am Chem Soc, 2008, 131: 238–243
11 Wang J P, Xie W Y, Gao Y, et al. Emerging disciplines based on superatoms: A perspective point of view. Sci Bull, 2018, 63: 395–397
12 Liu L, Corma A. Metal catalysts for heterogeneous catalysis: From single atoms to nanoclusters and nanoparticles. Chem Rev, 2018, 118: 4981–5079
13 Taylor K J, Pettiette-Hall C L, Cheshnovsky O, et al. Ultraviolet photoelectron spectra of coinage metal clusters. J Chem Phys, 1992, 96: 3319–3329
14 Liu L R, Cheng L J, Yang J L. The superatomic molecule theory of metal clusters (in Chinese). Sci Sin Chim, 2018, 48: 143–153 [刘立仁, 程龙玖, 杨金龙. 金属团簇的超原子分子理论. 中国科学: 化学, 2018, 48: 143–153]
15 Jena P. Beyond the periodic table of elements: The role of superatoms. J Phys Chem Lett, 2013, 4: 1432–1442
16 Luo Z, Castleman A W. Special and general superatoms. Acc Chem Res, 2014, 47: 2931–2940
17 Jena P, Sun Q. Super atomic clusters: Design rules and potential for building blocks of materials. Chem Rev, 2018, 118: 5755–5870
18 Yang H Y, Wang Y, Huang H Q, et al. All-thiol-stabilized Ag_{44} and $Au_{12}Ag_{32}$ nanoparticles with single-crystal structures. Nat Commun, 2013, 4: 2422
19 Champsaur A M, Yu J, Roy Xr, et al. Two-dimensional nanosheets from redox-active superatoms. ACS Centr Sci, 2017, 3: 1050–1055
20 Doud E A, Voevodin A, Hochuli T J, et al. Superatoms in materials science. Nat Rev Mater, 2020, 5: 371–387
21 Kambe T, Watanabe A, Li M J, et al. Superatomic gallium clusters in dendrimers: Unique rigidity and reactivity depending on their atomicity. Adv Mat, 2020, 32: 1907167
22 Halder A, Liang A, Kresin V V. A novel feature in aluminum cluster photoionization spectra and possibility of electron pairing at $T\geqslant 100$ K. Nano Lett, 2015, 15: 1410–1413
23 Gao Y, Wang B, Lei Y Y, et al. Actinide-embedded gold superatom models: Electronic structure, spectroscopic properties, and applications in surface-enhanced Raman scattering. Nano Res, 2016, 9: 622–632
24 Khanna S, Jena P. Assembling crystals from clusters. Phys Rev Lett, 1992, 69: 1664
25 Leuchtner R, Harms A, Castleman Jr A. Thermal metal cluster anion reactions: Behavior of aluminum clusters with oxygen. J Chem Phys, 1989, 91: 2753–2754
26 Knight W D, Clemenger K, Deheer W S, et al. Electronic shell structure and abundances of sodium clusters. Phys Rev Lett, 1984, 52: 2141
27 Li H, Li L, Pedersen A, et al. Magic-number gold nanoclusters with diameters from 1 to 3.5 nm: Relative stability and catalytic activity for CO oxidation. Nano Lett, 2015, 15: 682–688
28 Zhou M, Higaki T, Li Y W, et al. Three-stage evolution from nonscalable to scalable optical properties of thiolate-protected gold

nanoclusters. J Am Chem Soc, 2019, 141: 19754–19764
29 Cheng L J, Yang J L. Communication: New insight into electronic shells of metal clusters: Analogues of simple molecules. J Chem Phys, 2013, 138: 141101
30 Jin R, Liu C, Zhao S, et al. Tri-icosahedral gold nanocluster $[Au_{37}(PPh3)_{10}(SC_2H_4Ph)_{10}X_2]^+$: Linear assembly of icosahedral building blocks. ACS Nano, 2015, 9: 8530–8536
31 Haxel O, Jensen J H D, Suess H E. On the ‘magic numbers’ in nuclear structure. Phys Rev, 1949, 75: 1766
32 Wang G H, Han M. Some similarities between atomic clusters and nuclei (in Chinese). Nucl Phys Rev, 1993, 10: 11–15 [王广厚, 韩民. 原子团簇和原子核的相似性. 原子核物理评论, 1993, 10: 11–15]
33 Xie W Y, Zhu Y, Wang J P, et al. Magnetic coupling induced self-assembly at atomic level. Chin Phys Lett, 2019, 36: 116401
34 Yu X L, Zhou J, Liang H Y, et al. Mechanical metamaterials associated with stiffness, rigidity and compressibility: A brief review. Prog Mater Sci, 2018, 94: 114–173
35 Wang Z G. Physical insights on self-assembly at an atomic level (in Chinese). Chin Sci Bull, 2018, 63: 1775–1782 [王志刚. 自组装的原子层次物理视角. 科学通报, 2018, 63: 1775–1782]
36 Haran G, Chuntonov L. Artificial plasmonic molecules and their interaction with real molecules. Chem Rev, 2018, 118: 5539–5580
37 Aikens C M, Schatz G C. TDDFT studies of absorption and SERS spectra of pyridine interacting with Au_{20}. J Phys Chem A, 2006, 110: 13317–13324
38 Xu H X, Bjerneld E J, Käll M, et al. Spectroscopy of single hemoglobin molecules by surface enhanced raman scattering. Phys Rev Lett, 1999, 83: 4357

Summary for “超原子物理学: 原子层次上物理的新方向”

Superatomic physics: A new direction in atomic-level physics

Zhigang Wang

Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China
E-mail: wangzg@jlu.edu.cn

It is proposed that the construction of superatomic physics is due to the development achievements of related disciplines such as atomic physics. The essence of superatomic physics is to explore the physical laws of artificial elements at the atomic level and construct new physics tools. As a stable microstructure, the superatoms exhibit orbitals symmetry in the arrangement of electron shells like to the atoms, and the species number of superatoms is extremely large compared to the elemental atoms in nature. This provides an important opportunity to simulate and even replace natural element atoms, and thus further facilitates the paradigm transformation of scientific research from structure to function at the atomic level. More far-reaching, the study of superatomic physics will promote a shift in the driving force from discovering to transforming nature, thus promoting the development of related disciplines and even scientific and technological progress.

This paper is divided into three parts. In the first part, the basic concepts of atom, atomic level, superatom and artificial elements, especially their generation and corresponding development process are introduced. In the second part, the logical necessity of constructing superatomic physics is discussed from the following four aspects: Building superatomic physics (1) will provide basic support for the paradigm transformation of scientific research; (2) is an important manifestation for the continuous development of physical science; (3) is a necessary demand for the growth of superatomic science and technology research; (4) will contribute to the continuous progress of nanotechnology. Following in the third part, the basic research contents of superatomic physics are introduced. Considering that superatoms originate from the understanding of atoms at the atomic level, therefore superatomic physics will carry out extremely rich exploration work, even if it focuses on the scientific researches of comparisons with atoms. Briefly, the previous basic researches based on atoms can obtain new opportunities in superatoms. More importantly, the development potential of superatoms will not be limited to the comparisons with atoms, the artificial elements properties of superatoms indicate that the development of superatomic physics should focus more on the efforts of human beings to transform nature.

As the most basic artificial element, the functional properties of superatoms could be demonstrated by constructing materials and even devices. From this, the methods including the high-precision self-assembly and the quantum regulation and control have shown important significance in the optical functions and electrical transporting properties of artificial elements including superatoms. These will promote the advance of physics-based science and technology. Moreover, in order to develop a new scientific research paradigm for functioning purpose, the exploration of superatomic physical would constantly integrate new achievements of science and technology. Artificial intelligence (AI) and big data science would provide powerful tools to guarantee the enrichment and development of superatomic physics. All these will gradually enable human beings to get rid of the relatively passive situation of seeking functions based on naturally available structures and embark on a new path of designing structures for certain functions instead. Owing to the fact that the prospect of superatomic physics is bound to be far beyond the imaginations today, it is almost impossible for us to give a definite insight for the future of supreatoms. However, by reviewing the history of atomic physics, it could be generalized and confirmed that superatoms will bring new physics.

atom, superatom, atomic level, structure and function, paradigm transformation

doi: 10.1360/TB-2020-0412