

国际关于团簇研究的某些进展

王广厚

(固体微结构物理国家重点实验室, 南京大学物理系, 南京 210093)

[摘要] 由于团簇具有许多既不同于原子分子又不同于大块固体的性质, 预计在科学技术中有重要应用前景, 引起科学界广泛重视。本文介绍第七届国际小颗粒和无机团簇会议所讨论内容, 阐述近年国际上关于团簇研究的某些进展, 主要包括: 气相团簇的奇特性质, 团簇电子和动力学性质, 团簇与表面相互作用, 嵌入团簇和团簇组合, 笼形结构的团簇和团簇的理论问题等。作者还提出一些建议。

[关键词] 原子团簇, 结构, 奇特性质, 进展

1 引言

原子团簇(简称团簇)是由几个至上千个原子组成相对稳定的聚集体, 具有许多奇特的性质, 例如: 电子壳层和能带结构并存, 气、液、固的并存和转化, 幻数的稳定性和几何非周期性, 异常的化学活泼性和催化特性, 量子尺寸效应, 极大的表体比效应和同位素效应等。这些特性使团簇在力学、电学、光电子学、电子学、磁学、热统学、化学、催化、生物学方面出现了许多新的现象。研究这些现象和规律将带动原子分子物理, 凝聚态物理、表面物理和化学、化学动力学的发展, 丰富燃烧和大气科学、宇宙科学和生命科学等学科的内容。利用这些奇特的性质, 可能将在未来的信息工程、材料工程、化学工程、生物和医药以及团簇聚变等方面产生巨大的意义。

团簇研究可追溯到1956年Becker首先用超声喷注加冷凝方法制得团簇。之后, 法国科学家Joyes和Leleyter在溅射中发现各种带电(或中性)团簇。80年代团簇研究有了突破性进展, 其中最为突出的是, 1984年美国加州大学伯克利分校Knight教授发现超声膨胀产生Na团簇具有幻数结构, 与其价电子结构呈满壳层分布相对应。之后, 发现C₆₀笼形团簇及其大量制备的简单方法, 引起了科学界的轰动。目前世界各发达国家投入巨资、组织人力以期在团簇制备和性质研究方面取得突破。自1985年开始, 我国有20多个单位相继开展这一领域工作, 建立了一批有自己特色的实验研究装置。在最近召开的第七届国际小颗粒和无机团簇会议(ISSPIC)及相关卫星会议上, 南京大学、北京大学、复旦大学、上海科技大学、中科院化学所、长春物理所等单位派出了学者参加, 受到国际学术界的重视。ISSPIC是原子团簇这一新兴学科领域最高水平的国际会议, 反映国际上对原子团簇研究的最新进展和发展趋势。下面仅就该会议上讨论的若干专题做一评述。

本文于1995年1月3日收到。

2 气相团簇的奇特性质

2.1 磁性 研究团簇和小颗粒的磁性不仅在制备高密度磁存贮器件中有实际应用价值,而且在物理基础研究中也具有重要意义。大块铁磁性金属 Fe, Cu, Ni 等的平均原子磁矩分别为 $2.21 \mu\text{B}$, $1.6 \mu\text{B}$ 和 $0.6 \mu\text{B}$, 这种非整数磁矩可由 $3d$ 电子在整个晶格中巡游的能带理论得到。然而,团簇在三维空间尺度上趋于零,巡游电子的能带理论是否适用? $3d$ 电子的非局域程度是如何随团簇尺寸减小而变化的? 瑞士科学家 W. A. deHeer 等人系统地研究了铁、钴、镍团簇从几个原子至上千个原子,温度在 $80-1000 \text{ K}$ 的磁性变化,发现尺寸小于 30 原子的团簇磁矩属于原子类型,而当尺寸达 700 个原子时接近于大块材料。对于孤立原子磁矩的测量仍然采用斯特恩-盖拉赫方法。美国弗吉尼亚大学测得团簇中每个原子磁矩较大,尺寸到达 200 个原子时磁矩增强效应消失,且磁矩取向有热波动,在外场下变成超顺磁性;尺寸为 700 个原子时接近大块磁矩。但是, Gd, Tb, Dy 等团簇的磁矩小于大块材料且磁矩不受团簇晶格的影响。稀土团簇存在铁磁或反铁磁有序,其有序度随温度变化。实验发现 Rh 团簇有巨磁阻,而大块 Rh 没有磁矩。碱金属团簇镶嵌于沸石 LTA (具有 α 笼形结构,笼内直径为 11 \AA), α 笼按筒立方排列。当 K 进入脱氢 K-型 LTA,则由于 $4s$ 电子与 K^+ 阳离子共享而产生阳离子团簇, $1s, 1p, 1d \dots$ 轨道是团簇电子的量子态。由于相邻团簇间电子波函数的重叠,一个电子可以穿过许多团簇,构成新的团簇三维阵列,其光学反射谱所示的带间跃迁 $1s-1p$ 和 $1p-1d$ 等依赖于 K 原子数。K 原子数的变化可使磁化率改变几个数量级。如果每个 α 笼中含 5 个 K 原子,发生显著的铁磁性。这种磁学性质被认为是巡游电子的铁磁性造成的,此时每个 α 笼中有 5 个电子与 $1p$ 能带费米能级处态密度最大的条件相吻合。磁性强烈地与阳离子类型和沸石类型有关,说明沸石中金属团簇的电子性质变化很大。

2.2 团簇裂变和原子核裂变 十年前,美国加州大学 Knight 教授发出 Na_n 团簇质谱出现幻数结构时,就联想到原子核内的中子和质子构成幻数时对原子核稳定性的影响。团簇的某些性质可与原子核类比。丹麦物理学家 S. Bjørnholm 指出原子核的对称裂变和非对称“裂变”(α 发射)同时发生的可能性是在 Z^2/N 值足够大,否则以 α 发射为主(这些带电粒子发射与蒸发中子相竞争)。在热团簇中,是蒸发中性原子和发射带电粒子之间的竞争,并有一个临界尺寸 $N_c(Z)$ 。实验发现, Z^2/N_c 的值为 $1/2$ 时,即出现对称裂变,裂变碎片中常有单电荷三体,这是一种表面能控制的反应“裂变”位垒可用类似于 α 衰变位垒的 Gamow 值算法求出。

2.3 几种新的壳层结构 T. P. Martin 实验又观察到几何壳层结构,如, Al 和 In 金属团簇具有八面体壳层;在 C_{60} 分子上外延生长成非 Mackay 型的金属二十面体壳层;碱金属卤化物巨立方壳层 ($9 \times 9 \times 9, 9 \times 9 \times 10, 9 \times 10 \times 10, 10 \times 10 \times 10$);二元系统 (ZnS) 的八面体壳层。这些壳层结构,如果以 (质量) $^{1/3}$ 作标度,均具有严格的周期性。

2.4 团簇反应 日本东京大学化学系教授 T. Kondow 研究尺寸选择气相团簇的反应过程有:(a) Ar_n, Na_n 团簇离子与稀有气体原子或单分子碰撞离解;(b) 尺寸选择团簇离子自轰击表面的散射;(c) 丙烯腈团簇阴离子的光电子谱 $(\text{AN})_n^-$, 用光电子吸附使烯烃分子进行结构聚合成丙烯腈。

2.5 光电子谱研究 二元团簇阴离子 $\text{Al}_n\text{S}^-, \text{Fe}_n(\text{CO})_m^-$ 和 Si_nC_m^- 等是用脉冲团簇阴离子源、带质量门的 TOF 质谱仪、磁瓶型的光电子谱仪进行研究的。从质量分布及电子亲和力的值获

得团簇电子和原子结构的信息。研究过渡金属团簇 Ni_n^- , Pd_n^- 和 Ag_n^- 同 O_2 和 CO 反应的光电子谱, 给出反应前后电子结构的变化, 例如, 用光子能量 $h\nu = 4.025 \text{ eV}$ 照射得到 Ni_3^- 和 $Ni_3(CO)^-$ 的光电子谱, 发现 $Ni(CO)^-$ 有精细结构, 其能量间隔相应 CO 伸展模式 (0.2 eV) 和金属— CO 键合模式 (50 meV)。至于 $C-Si$ 二元团簇与 O_2 的反应, 则是采用射频离子阱研究的 ($Si_n C_m^+ + O_2$), 例如, $Si_2 C_2^+ O_2 \rightarrow Si_2 C^+ \cdot, Si C^+, Si_2 C^+, Si C_2^+$ 。

3 团簇电子和动力学性质

(1) 德国马-普研究所使用 He 原子散射作为团簇动力学性质的探针, 类似于 He 原子在固态晶体表面衍射, 测量表面声子谱。实验测量的是: $He \rightarrow Ar_n$ ($n = 11 - 4600$) 或 $He \rightarrow (NH_3)_n$ ($n = 189 - 1617$), 使用的是交叉分子束装置, 能量分辨率好于 1 meV 。团簇由同轴喷嘴生成, 散射 He 的角分布呈衍射特征, 并与团簇半径和几何形状有关。随着偏角增大, 能量转移增加。偏转角为 30° 时, 能量损失谱呈现极大值 (转移能量极大不超过 9 meV , 相应于单光子激发)。最可几能量转移是 $2 - 4 \text{ meV}$ 。随着团簇尺寸增大而移向小值, 对应于表面激发。对于 NH_3 , 能量转移则大得多, 最大值为 60 meV 。除了横向运动外, 还有内激发对振动谱的贡献。

(2) 关于 $Mg^+ (H_2O)_n$ 团簇光离解的尺寸效应, 是用反射式质谱仪研究的。美国加州大学用负离子光嬗变研究半导体阴离子团簇的振动和电子谱, 得到 Ge_n^- 和 $In_x P_y^-$ 团簇化学键合图象。

(3) 德国 J. Woernckhaus 等人首次报道硅团簇的电极化, 并测得 Si_n ($n = 11 - 70$) 的电极化率。束流偏转法适用于低强度的半导体团簇束。实验发现 $n = 29 - 44$ 的团簇比 $n = 52 - 69$ 的电极化率大, 且是笼形结构。德国康斯坦茨大学还研究了难熔金属团簇的能量损失过程, 如非分子衰变、热离子发射和黑体辐射。美国橡树岭国立实验室考察了 $C_{60} \rightarrow C_{60}^+ + e$, 得出中性团簇也存在热离子发射。

(4) 金属团簇的超快速弛豫现象和化学特性。德国 L. Woste 研究团簇内部快速振动弛豫现象——电子跃迁谱线展宽。随着团簇尺寸的增加, 团簇内如何从单电子跃迁转到带结构, 尺寸增加, 跃迁的复杂性明显增加。因此, 用高分辨谱学研究团簇束的特性变得十分重要。德国 Freiburg 大学采用团簇束、离子电子谱和飞秒 (fs) 激光泵浦探针技术研究了 Na_n , Hg_n 等单和双电子金属团簇的共振吸收、寿命、衰变道、电离过程。实验显示, Na_n ($n = 21$), 除了纳秒 (ns) 实验中集体激发和表面等离子体特征外, fs 实验中还表现出团簇原子的结构、激发和性质。对于 Hg_n 团簇 (直至 $n = 60$), 瞬态多光子电离谱包含“短”时间波包动力学性质, 对于所有单电荷和双电荷团簇都相同, 而“长”时间碎裂动力学来说, 每个团簇各不相同, 表明存在一个未知的物理过程。因此, 具有 fs 分辨的实时研究将开辟团簇物理的一个新方向。

4 团簇与表面相互作用

用 ^{197}Au Mossbauer 研究具有 2 个壳层的 Au_{55} 和 4 壳层的 Pt_{309} 团簇化合物 (配位体)。QS 产生于 Au 的 $5d$ 和 $6p$ 价电子非球形电荷分布, IS 取决于 Au 核处的 $6s$ 电子密度, 从而决定 Au 在团簇中的环境是否与大块固体相同。研究四种不同的 Au_{55} 配位体的 IS 和 QS, 表明 13 个原子所构成的团簇核心与大块 Au 几乎相同, IS 有所不同, 团簇内部晶格间距比大块小, 而

配位体对团簇表面 42 个原子影响大。研究 Pt_{309} 时, 采用热中子激发, 使 Pt 核变成 ^{197}Pt , 而 ^{197}Pt 是 Mossbauer 核 ^{197}Au 的母核。用 $\text{Pt}_{309}/\text{Au}$ 作源, Au 箔作吸收体, 表明 Au_{147} 的芯与大块金属 Pt/Au 相同, 表面受配位体的极大影响。

瑞士洛桑 H. V. Rog 等人用 XPS, UPS 谱表征用离子轰击产生质量可选择的 Pt_n 和 Pd_n ($n=1-15$) 于室温下淀积到 Ag (110) 单晶上 (量不到一层), 单分散团簇给出 Pt-5d 和 Pd-4d 电子分立发射的特征, 观察到 3%PtAg 和 PdAg 合金形成的束缚态。当尺寸增加时, 成键和反成键的 d 态之间分裂增加, 表明分子间相互作用聚合能增加; d 发射的重心向费米能移动表明有金属形成的趋向。而 Pt-4f 和 Pd-3d 芯能级随尺寸增加几乎没有移动, 表明团簇是一个二维结构的。在不同衬底温度下, 所观察到 Pt-5d 和 Pd-4d 束缚能是在不同的吸附位置, 从而清楚地给出表面-衬底原子的交换位置。采用嵌埋原子法计算总能量得到小的 Pt_n 和 Pd_n ($n=1-7$) 在 Ag (110) 表面成链状排列且沿着 [110] 方向。

用时间分辨和位置高分辨电子谱直接观察真空淀积在 MgO 单晶膜上的钨原子和团簇的迁移特征。衬底为 MgO 或 WO_3 在 NaCl (001) 单晶上淀积成膜, 其真空度为 10^{-6} Pa, 衬底 300°C 。孤立的钨团簇的形成是用 $50\text{A}/\text{cm}^2$ 辐照几十分钟得到的, 钨团簇的尺寸为 2\AA , 处在 MgO 晶格边缘的交叉处, 说明 W 原子聚集在 Mg 或氧原子的顶上方 (on-top-site), 这与 Au 原子团簇的实验结果不同。室温下它们移到第一最近邻位置, 加 200°C 时则第二或第三最近邻位置, 450°C 时发生跳跃。通过这些观察可确定 W 原子在表面迁移的激活能。用 FIM 观察 Re/W (110) 和用 STM 观察 Ge/Si (111), 也得到类似的结果。

德国 R. D. Beck 等研究各种富氏体 (C_{60} , C_{70} , C_{84} , $\text{C}_{110}-\text{C}_{118}$, $\text{C}_{156}-\text{C}_{178}$) 在表面的散射, 采用新建团簇-表面散射装置可测得碎片的质量分布、反应速度、散射角及其随碰撞能量的变化 (能量变化范围是 $50-1000\text{ eV}$)。散射事件与固体靶表面的性质密切相关, 从而为研究团簇-表面相互作用提供详细信息。理论上则用分子动力学模拟团簇-表面碰撞或团簇淀积于表面的特性。

日本东北大学 T. Hashijume 和 T. Sakurai 用 STM 研究富氏体吸附到 Cu (111) 和 Ag (111) 表面的特征, 包含: C_{60} , C_{70} , $\text{C}_{60x}\text{C}_{70(1-x)}$ 以及金属富氏体 ($\text{Sc}_2/\text{C}_{84}$, Y/C_{82} , Cd/C_{82} , etc), 在 Cu (111) 1×1 和 Ag (111) 1×1 表面所形成的单层膜, 观察到室温下富氏体分子在平台表面是移动的, 并逐渐聚集到台阶处, 构成线性链状排列, 然后再形成二维岛状和密排结构。在 Cu (111) 表面上吸附单层的 C_{60} 或 C_{70} , 可构成高度有序的 4×4 公度相, 还能看到 C_{60} 分子之间的结构。这表明 C_{60} 和 Cu 衬底间有很强的相互作用, 从而使富氏体自转降低, 观察到 C_{60} 和 C_{70} 存在有序化取向特征。至于 $\text{Sc}_2/\text{C}_{84}$ 在 Ag (111) 面上形成的单层膜则有八种不同的相, 但最近邻原子间距 (nnd) 都差不多为 $11.6\pm 0.2\text{\AA}$, 是表面 Ag 原子 nnd 的 4 倍, 而它们相对于衬底表面的转角各不相同。 C_{60} 在 Ag (111) 表面存在多相结构, 说明富氏体与 Ag 表面互相作用较 Cu 为弱。此时富氏体之间的相互作用占主要的地位, 较易形成范德瓦尔斯密堆型六角相。

用 STM 研究 HOPG 的 C-平面或 Si (111) 面上淀积单层 Se_n ($n=5$ 至 8 个原子) 环状团簇。在 HOPG 上 Se_n 形成矩形晶格排列, 晶格间距 $0.72\text{ nm}\times 0.85\text{ nm}$, 单个团簇尺寸为 $(0.53\pm 0.05)\text{ nm}$ 直径。针尖偏压一直下降至 $V_T=-0.7\text{ V}$ 以前, 都是矩形图案, 而小于 -0.7 V , 矩形图案突然消失, 变成随机分布。Au 团簇淀积在 HOPG 和 Si (111) 表面的方法, 是用一

组脉冲电压把 Au-STM 针尖上的 Au 团簇淀积在衬底上, 形成团簇陈列。这种人工制造的结构非常稳定, 淀积数天后观察结果不变, 并测得了电流 (I)-电压 (V) 和 $d \ln I/d \ln V$ 曲线, 显示出此时团簇不是金属性的。

关于 ICB 技术, 现在已逐渐把 ICB 用于沉积、溅射和注入, 用团簇离子代替过去离子, 以便研究: (a) 气相团簇生长机制, (b) 团簇尺寸分布, (c) 薄膜成核的初始阶段, (d) 薄膜生长和衬底的匹配等。在应用方面有: (a) 化学气相团簇离子淀积形成高质量膜, (b) 表面清洁和刻蚀, (c) 浅注入。由于团簇在表面能量损失低和横向溅射可使表面光滑, 具有一定的优越性。

5 嵌埋团簇和团簇组合

这一方面的研究具有较强的应用背景, 是目前的研究热点。日本 Nagoyo 大学将纳米量级的半导体微晶 CuCl 和 CuBr 嵌埋于玻璃介质中, 研究其光学响应和 fs 时间范围的瞬态相干现象。其样品制备方法是: 把半导体材料 CuCl 或 CuBr 掺杂到玻璃基质中去, 然后进行热处理得到纳米颗粒, 控制热处理过程可改变晶粒的大小。使激子的 Bohr 半径小于晶粒尺寸, 于是激子的横向运动受到约束。当 CuCl 纳米晶粒尺寸为 $R=1.8-8.0$ nm 时, 激子的吸收峰蓝移 (由于约束效应)。通过四波混合测量, 观察到三阶光极化率 $\chi^{(3)}$ 随尺寸的变化: 尺寸为 5 nm 时有极大值, 达到 2×10^{-6} esu; 团簇尺寸继续增大, $\chi^{(3)}$ 则减小。约束激子的振动强度与尺寸关系为 $R^{2.2}$ (当 $R < 4$ nm), 取最大值时的激子振动强度增量大约是大块激子的 940 倍。当团簇尺寸增大或温度升高时, $\chi^{(3)}$ 增强效应明显减弱, 说明在纳米晶体中相干激子的形成对非线性效应起着重要作用。在具有 fs 分辨率的四波混频实验中, 观察到 CuBr 纳米晶体相干激子衰减所出现的“量子拍”(beats), 这是由于约束激子多能级结构的量子相干性。

团簇正在作为人们构造新型固体的基石。美国 P. Jena 等人用特殊光化学方法在两类沸石 4A 和 13X 中使 Cd 和 S 反应生成 CdS 团簇, 沸石的 Na^+ 离子首先被 Cd^{2+} 离子交换, 然后通过激光辐照吸附 S 生成 CdS 团簇。用高能 Ar^+ 离子激光辐照可增强 CdS 团簇的形成过程, 然后用 Raman 散射和荧光测量。沸石中 CdS 团簇呈现 300 cm^{-1} Raman 带向低频方向移动 (与大块 CdS 相比), CdS 发射边的荧光带向高能移动 0.2 eV。可用团簇紧束缚模型来解释这种量子尺寸效应 (比有效质量模型要好)。用蒸汽法直接把 Se 蒸入沸石的 3A, 4A, 5A 和 13X 的各种尺寸孔中, 形成 Se 团簇, 测量了温度范围 300—500 K 的 Raman 谱, 发现 Se 团簇结构仅与沸石孔约束状况 (即孔的尺寸) 有关, 而与温度无关。可是热蒸发得到的非晶 Se 在 390 K 时出现三角相, 表明 Se 团簇结构单元受到沸石孔的几何约束。

南京大学在会上报告了我国研究成功的具有团簇产生、原位分析和样品制备于一体的多功能团簇研究装置, 以及用多层嵌埋技术制备 LiF 中嵌埋 Cu 团簇样品。用高分辨电镜、EXAFS、光吸收谱和 Raman 散射研究其结构和量子约束。当团簇尺寸为 2 nm 时, 观察到表面声子振动模和高阶纵向振模, 光吸收出现蓝移。同理论计算相结合, 表明团簇已是非导体性质, 在 LiF 团簇和 Ge 团簇制备的纳米相薄膜材料中, 呈现高阶振动模式和非线性光学性质。

日本神户大学研究 SiO_2 膜中含 IV 族元素的电性质。用磁控共溅射 (rf) 法制备 SiO_2 和 IV 族元素混合膜, 此膜被 Al 电极夹在中间, 进行 dc 导电测量, 呈现非欧姆性导电, 其电导率随膜中含 IV 族元素浓度增大而增大。dc 电导率的温度关联是 $\ln \sigma \propto T^{-1/4}$ 。光学测量表明, 其

中 Si 或 C 团簇尺寸小于 2 nm。

6 团簇的理论问题

(1) 重金属团簇的电子结构。对于金属 Hg, Pd 和 Au 构成的团簇, 在实验方面已有库仑爆炸、金属-非金属相变、电子结构等, 理论上常采用局域密度泛函近似 (LDA)。而第一原理计算电子结构的只适用于轻元素。Y. Ishii 采用原子轨道自洽的线性组合 (LCAO) 法, 并取标准守恒赝势, 计算了 Pb_{25}^{2+} , Pb_{27}^{2+} 等电子结构 (分别含有 58 个和 106 个价电子)、电子壳层结构及电荷分布、荷电能量及稳定性。

(2) 另一种是把简单金属团簇无结构的凝胶模型进行修正, 通过二阶赝势理论, 再引入离子结构, 这种做法与研究固态表面层的驰豫和重构做法雷同。计算结果与号称完全从头计算的 Car-Parinello 法在定量上完全一致。用这种近似法研究了 Na_8 , Na_{20} , Na_6 , Na_{10} 团簇的离子结构对等离子激发的影响。

(3) 用第一原理密度泛函赝势法计算直径为 0.7—1.7 nm 的 Si_n 的结构、电子和光学性质, 发现在完全端接的团簇中, Si 原子坐标完全类似于大块 Si, 但能隙蓝移于团簇直径成倒数关系, 穿过能隙的偶极跃迁是允许的 (而大块 Si 是间接能隙), 计算表明 Si 团簇有可能用于光电子器件。

(4) 团簇动力学的计算。德国 R. Schmidt 讨论两种极端的情况: (a) 高能 $C_{60}^+ + C_{60}$ 碰撞的多重碎裂和集体流效应, (能量为 $E_{c.m.} = 500$ eV) 采用量子分子动力学计算方法, 团簇初始取向是随机的。所得结果——自发多重碎裂特征和集体流效应, 类似于高能重离子碰撞过程。(b) 里德堡团簇, 即两个带反向电荷团簇在大距离构成束缚态, 称之为 Rydberg 团簇, 研究其波包动力学和基本性质。这种新型的里德堡系统长时间演变可用一个时间标度的系统来表征, 包含着再生和超再生, 即再生的再生过程。

(5) 用凝胶模型来讨论简单金属团簇的裂变允许轴对称变形和裂变, 再分立变量表象来解 jellium 模型的 Kohn-Sham 方程, 用零阶正弦函数和零阶 Bessel 函数作为 Z 坐标和 ρ 坐标的基矢, 而自旋密度函数采用的是 Perdew 和 Zunger 局域自旋密度函数。其结果与壳模型修正法的结果比较, 证明壳模型对裂变位垒估计过高, 因为 $Ag_{23}^{2+} \rightarrow Ag_{12}^{2+} + Ag_{11}^{2+}$ 裂变反应中碎片自旋多重性与裂变路径有关。另外, 西班牙 J. A. Alonso 还套用原子核裂变过程讨论了 $Na_{24}^{2+} \rightarrow Na_{21}^{2+} + Na_3^{2+}$ 所采用的扩延 Thomas-Fermi 近似。

此外, 用非局域性讨论小颗粒材料的非线性光学响应, 用从头计算分子动力学研究 Cu_n^- 的垂直电离势并与实验结果相比较, 均取得一定的成功。

7 其它有关的问题和建议

本届会议为纪念 Kubo (久保) 教授从事金属小颗粒研究 30 周年组织的专题报告有: 金属颗粒的久保效应, 小颗粒的超导性, 包裹纳米颗粒中的量子约束效应, 金属超微粒的电子性质, 半导体纳米结构中分立电子的转移和约束, 嵌埋于玻璃体中的半导体量子点 CdSe, CuCl, CuBr 的空穴燃烧效应以及微球颗粒的光学吸收——集体共振模式。

目前国际上对团簇研究的发展趋向是选择有较强应用背景的课题, 为此, 1994 年还召开了团簇动力学和纳米结构的光学性质两个国际会议作为 ISSPIC-7 的卫星会议, 分别讨论同步

辐射研究团簇和团簇在工业上应用以及半导体团簇的性质。1995年还将在日本举行团簇和泡沫材料国际会议，在美国举行原子设计材料国际会议，主要讨论团簇和团簇构成材料。我国也将在1995年9月召开首届“团簇科学和原子工程国际研讨会”，以进一步推动我国在这一领域的发展。

为使我们在完善和发展团簇科学理论，而且在促进团簇基础研究向应用转化方面做出一批有较大国际影响的成果，建议将我国现有分散的力量组织起来，开展跨学科的协作，突出重点，抓住团簇制备、结构和性质的研究，一方面向小尺寸方向发展，研究团簇内部原子和电子的结构和特征，弄清物质由单个原子分子向大块物质转变的基本规律；另一方面，向大尺寸方向发展，研究由团簇构成各种材料的结构和性质，逐步在团簇构成新型结构材料、超微光电器件和新一代高性能催化剂等方面开发高技术产业。

SOME DEVELOPMENTS IN CLUSTERS RESEARCH

Wang Guanghou

*(Department of Physics and National Laboratory of Solid State Microstructures,
Nanjing University, Nanjing 210093)*

Abstract Recently, cluster research has attracted great attention scientifically and technically because clusters have many properties neither like those of atoms and molecules nor those of bulk solids, and are expected to have potential application. This paper gives an introduction of some recent developments on cluster research, including: abnormal properties of gas phase clusters, electronic and dynamic properties of clusters, interaction of clusters with solid surface, embedded clusters and cluster assembly, and caged clusters and their theoretical problems. Finally, some suggestions are presented.

Key words atomic clusters, structure, abnormal properties, development

征 订 启 事

《中国科学基金》杂志1996年的征订工作已经开始，请读者到当地邮局预订。邮发代号：82—413。1996年定价不变，全年16元。

本刊英文版——《Science Foundation in China》(半年刊)已从1993年开始出版发行。每年定价40元人民币，境外订阅美金40元(包括邮费)，由本编辑部自办发行。刊号CN11--2851/N。