

VISIONS OF
THE FUTURE
科学展望丛书

化学与生命科学

Chemistry and Life Science

主编：迈克尔·汤普森 (J. Michael T. Thompson) (英)
陈淮/译

VISIONS OF
THE FUTURE
科学展望丛书

化学与生命科学 Chemistry and Life Science

主编：迈克尔·汤普森 (J. Michael T. Thompson) (英)
陈淮/译

(京)新登字 083 号

图书在版编目(CIP)数据

化学与生命科学/(英)汤普森主编;陈淮译. —北京:中国青年出版社, 2006

书名原文: Chemistry and Life Science

ISBN 7-5006-7202-0

I. 化... II. ①汤... ②陈... III. ①化学—普及读物②生命科学—普及读物 IV. ①06-49②Q1-0

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 111096 号

The Royal Society 2001

This book is in copyright. Subject to statutory exception
and to the provisions of relevant collective licensing agreements,
no reproduction of any part may take place without
the written permission of Cambridge University Press.

First published 2001

北京市版权局著作权合同登记章

图字: 01—2003—6465 号

责任编辑: 彭岩 徐泳

Email: pengyan@cyp.com.cn

*

中国青年出版社出版 发行

社址: 北京东四 12 条 21 号 邮政编码: 100708

网址: www.cyp.com.cn

编辑部电话: (010) 64034350 营销中心电话: (010) 64065904

三河市君旺印装厂印刷 新华书店经销

*

635×965 1/16 14 印张 1 插页 150 千字

2006 年 10 月北京第 1 版 2006 年 10 月河北第 1 次印刷

印数: 1—6000 册 定价: 16.00 元

本书如有印装质量问题, 请凭购书发票与质检部联系调换

联系电话: (010) 84047104

内容简介

本书中这些精彩文章的作者，多为荣获英国皇家学会研究基金支持的首席青年科学家；在他们撰写的文章中，除了分别描述了自己的研究成果之外，还评述了有关学科领域的发展前景。这些文章选自英国皇家学会创办的、全球历史最悠久的权威性科学杂志《自然科学会报》的新千年专辑。该杂志主编、皇家学会会员迈克尔·汤普森(J. M. T. Thompson)教授为本书精心遴选的这些重要文章，包括宇宙大爆炸创生学说；人类对太阳系的探测研究；地球深层结构以及现代对全球变暖与气候变化问题的科学分析。全书充满了这些年轻作者积极献身天文学和地球科学研究工作的信念与热情。本书还另有两册姊妹篇，分别是关于物理学与电子学，以及天文学与地球科学的。对于任何关心未来科学发展的读者来说，本书的所有文章，都提供了一些具有权威性的科学见解。

主编简介

迈克尔·汤普森(Michael Thompson), 皇家学会《自然科学会报》(A 辑)的现任主编。1958年毕业于剑桥大学力学科学系, 获得一级荣誉学位^注(first class honors), 并于1962和1977年分别获得科学博士(PhD)与理学博士(ScD)学位。曾担任斯坦福大学(Stanford University)的Fulbright奖学金研究员, 并于1964进入伦敦大学学院(University College London, 简称UCL)任职。他已发表了的四部专著, 分别论述了有关不稳定性、分枝现象(bifurcations)、灾变理论以及混沌理论等方面的诸多问题。1977年被聘为伦敦大学学院教授。1985年被遴选为皇家学会会员, 并荣获英国土木工程师学会(the Institution of Civil Engineers)授予的Ewing奖章。他曾是科学与工程研究委员会(SERC: Science and Engineering Research Council)资深研究员, 并曾服务于国际矿物学协会(IMA, International Mineralogical Association)理事会。1991年, 他被任命为非线性动力学研究中心(the Centre for Nonlinear Dynamics)主任。2004年他获得国际矿物学协会金质奖章, 以表彰他毕生在数学研究方面所作的贡献。

注: 英国的大学学位分类制度非常独特, 其学士学位分四个等级: 最高等级是获得一级荣誉学位, 最后能达到这一层次的人很少。接下来是二级甲等荣誉学位、二级乙等荣誉学位和三级学位。没能达到荣誉学位要求的学生被授予“通过”或“普通”学位。

序言

本书所包含的内容，是一批首席青年科学家按照图文并茂的通俗化格调，撰写的十篇文章；其中包括了他们自己的研究成果以及他们对未来科学进展的看法。本书通篇充满了这些年轻作者献身科学的激情与热情，并为那些对于未来科学发展感兴趣的广大公众——其中包括科学研究人员以及具有科学意向的在校儿童，提供一些具有权威性的观点。

这些文章都是在皇家学会《自然科学会报》新千年三本特辑中正式发表过的权威性学术论文的通俗化版本。创办于1665年的《自然科学会报》，是世界上历史最悠久的权威性科学杂志。三百多年以来，它一直都在发表尖端性的科学论文。自从1672年艾萨克·牛顿在本刊发表自己的第一篇论文“光与色彩的新理论”(New Theory about Light and Colours)开始，本刊便一直被他用来说述自己的科学生涯。从1703年牛顿当会长至1727年牛顿去世，英国皇家学会在牛顿的带领下，在欧洲的学者中牢固地树立了科学声望。现在，英国皇家学会成了英国科学院。本书的许多作者都得到了权威的英国皇家学会研究基金的资助。

《自然科学会报》A辑专注于整个物理科学，作为本刊主编，我对所涉及的那些正处于快速增长、并且可能具有长远意义和重要性的课题内容，进行



了仔细挑选。每篇文章都描述了最新的尖端研究结果，比较广泛地说明其来龙去脉，并展望其未来的发展前景。这本文集对于处在千年之交转折点时刻的物理学态势，提供了一幅独具特色快照，而书末的作者简历及其照片，则提供了一些对个人的了解。

本刊新千年的三个特辑，由剑桥出版社分为三本书籍出版。其内容分别包括：天文学和地球科学（其中包括根据大爆炸理论描述宇宙的创生和演化，人类对太阳系的探测研究，地球深层结构，以及关于全球变暖和气候变化的现代科学见解。）；物理学和电子学（其中包括量子物理学和引力物理学，电子学，高级计算和无线电通讯）；化学与生命科学（其中包括反应动力学，新的处理过程和材料，生物物理技术以及构建描述心脏的理论模型）。

J. M. T. 汤普森

皇家学会《自然科学会报》主编，
非线性动力学研究中心主任，
伦敦大学学院教授

目 录

序言

第一章 运动的原子与分子

1 分子运动的激光瞬态图像

加雷思·罗伯茨 1

2 酶学的量子飞跃进展

迈克尔·J. 萨克利夫

奈杰尔·S. 斯克鲁顿 22

第二章 新工艺与新材料

3 世界顶尖化学家：人与计算机

乔纳森·M. 古德曼 47

4 化学的内涵：中孔材料的绿色化学

邓肯·J. 麦考尔瑞 65

5 金刚石薄膜：21 世纪的材料

保尔·W. 梅 83

第三章 生物的成长和形式

6 自然界微观模式的奥秘

艾伦·R. 赫姆斯利、彼得·C. 格里菲斯 105



7 骨架结构：力学与细胞生物学之集成

马乔莱恩·C. H. 范德穆兰、

帕特里克·J. 普伦德加斯特 13

第四章 理解人体

8 虚拟心脏的制作

彼得·科尔、丹尼斯·诺布尔、

雷蒙德·L. 温斯洛、彼得·亨特 14

9 用计算机探索人类器官

保尔·J. 科尔斯顿 15

第五章 理解人的头脑

10 逆向运行人类的头脑

文森特·沃尔什 16

作者简介 18

索引 20

第一章

运动的原子与分子

1 分子运动的激光瞬态图像

加雷思·罗伯茨, 英国剑桥大学化学系

Department of Chemistry, University of Cambridge

Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, UK

1.1 引言

驱动物理、化学的和生物学中物质和能量转化的分子运动, 就发生在一段非常短的时间内, 即 10^{-15} 秒内(1 飞秒(fs))。在这样一个短暂的时间过程中, 原子和分子相遇, 交换能量, 迁移原子, 完成由一种物质向另一种物质转化的特定过程。为了在这个过程发生时将其用图像描述出来, 就需用激光脉冲在飞秒的几十倍或最多几百倍的时间内来为其拍摄“快照”, 从而实时地描绘出这些变化。

本章讨论的是, 应用飞秒级激光来研究分子运动动力学, 并力图描述出理论和实验的协同配合是怎样使物质的相互作用可以在极短时间内的曝光过程中实现, 又是怎样从基础量子理论的角度来理解这个超快过程的发生情况。通过考虑以不同量级的激光诱导出的、处于气相和团簇中的分子所发生的反应来对该过程进行描述。根据一种对新的激光技



术发展的预测，科研人员强调，通过探索更短的激光脉冲的方法，将使研究和控制原子核和分子中的电子动力学成为可能。

1.2 强飞秒级激光与分子的相互作用

飞秒级激光与原子和分子之间的相互作用，和较长的激光脉冲与原子和分子之间的相互作用是完全不同的。这种产生于超短时间内的飞秒级激光脉冲，比原子运动的特性动态时间规模还要快，而且，它的超高的强度，形成了一系列前所未有的现象。当一束强烈的、超快的激光束辐射在分子样品上时所发生的确切的情形，很大程度取决于激光的强度。激光的强度决定提供到单个分子上的光子数，还可能强行改变分子的允许能量级；同样重要的还有激光的频率，频率和强度共同为不同的分子能态提供光通道。光/物质相互作用方面的详尽的物理学也将理所当然地取决于被辐射分子的结构，但不管它的本质特征如何，原子和分子被超快激光光子激发的一些特定性质已在全世界各个前沿研究组的研究中展现。

首先对激光场发生反应的是较轻的电子，反应过程的时间规模为阿托秒(即飞秒的千分之一)：根据入射光的强度，被分子吸收一个或多个光子，或将一个电子提升到分子的较高能态，或将一个电子完全从分子中释放出来，留下一个带正电荷的离子。如果强度极高，还有可能依据不同机理而发生多个电子被激发或离子化的情况。而在几十或几百飞秒的相对较长

时间段内，分子中的原子核位置将重新排布，来适应突然发生的由超快激光脉冲造成的新的电子态占有率引起的新的静电相互作用。核的运动可能包含分子的振动和转动，或由于作用于原子上的离心力太强，分子可能会崩溃，从而不能保持原始的结构形态。另外，在超短的激光脉冲过程中，在入射强度很高的情况下，随激光束产生的电场会使约束分子中的电子和原子核的电稳定性发生变化，变化的程度之大，可以改变分子的特有能级。

上述的每一种现象都是值得开展深入研究的议题。图 1.1 提供了以上一些现象的简化的描述。图中表示被强激光脉冲所处理的原子的扭曲的势能结构中的电子的离子化，其路径是由电子对激光脉冲引起的振动电场的反应，放出高频的谐光子。当电子从离子核心散射时会发放出这种谐光子（高谐放射可用来产生阿托秒级激光脉冲，参见 1.4.1 节的讨论）。强激光照射下的分子会发生一系列相似的相互作用，有的只是细节不同而已。

通过对这些过程的详尽测量，可以开发出量化

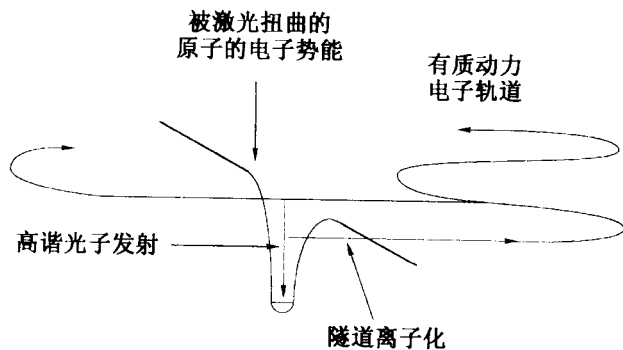


图 1.1 一束强的、超快的激光脉冲与一个原子之间相互作用之后所发生的结果。电子的势能结构，原本应该会在最小值的两侧均呈现对称状态，从而将电子限制在原子核的邻近区域，现在却被激光辐射所扭曲。电子首先离子化，从原子中释放出来，而后沿着由它的有质动能决定的、在激光脉冲的电场中形成的振动轨道通过隧道化越过处于低势能的能障。如果电子的轨道能将其带回到离子化的原子的核周围，由于带负电的电子被带正电的离子所加速，就会发生高频光子的发射。现已发现，这个高频光子是与最初被原子吸收的激光频率完全谐调的谐波。



的模型来描述分子对脉冲式激光活化的动态反应。这些方法使我们能够根据量子理论，以波来描述物质与光的原理，去理解极强和超快激光与分子之间基本的相互作用。

根据对飞秒级激光的描述，本章此后的内容将集中在受到超快激光辐射的分子的核动力学，而不是电子的效应，目的是尽力去理解分子在飞秒时间尺度中如何分裂和碰撞。分子物理学的特殊兴趣集中在总时间进程中的关键和中介的阶段，在这个阶段，在短暂的分子形态内的快速变化的力操纵着质和能的流动。

1.3 飞秒级激光

分子中的实时的基本过程的结构的和动态的测定，也就是光谱学，有必要应用长度为数十飞秒，或最多为数百飞秒的激光脉冲来从时间上解决分子运动的问题。百飞秒以下的激光脉冲，是在上世纪 80 年代初由 AT&T 贝尔实验室的杉克(Shank)研究组首次通过碰撞脉冲式锁定染料激光实现的；到 1987 年，他们成功制成的短达 6 飞秒的脉冲，突破了历史纪录，是通过对产生的命令锁定染料激光进行光学脉冲压缩而完成的。在 1987 年以后的 10 年中，在可能的最小脉冲幅度方面的研究仅取得了很少的进展，可是，在生成超短激光脉冲并使其典型化方面，取得了真正的长足发展。

支撑这个进展的主要技术驱动力是由希贝特(Sibbett)研究组于 1990 年发现的，在固态材料中超快激光运作的一个新的类型。该项发现的最重要一

点，是将蓝宝石注入到钛中(或其他的掺铬的氟铝钙锂石)。这些设置依赖于引进介质的与强度有关的折射指数，从而在单一“锁定”形式下生成强有力的、超短的激光脉冲：参见图 1.2 所示的商业化的钛 - 蓝宝石激光照片。

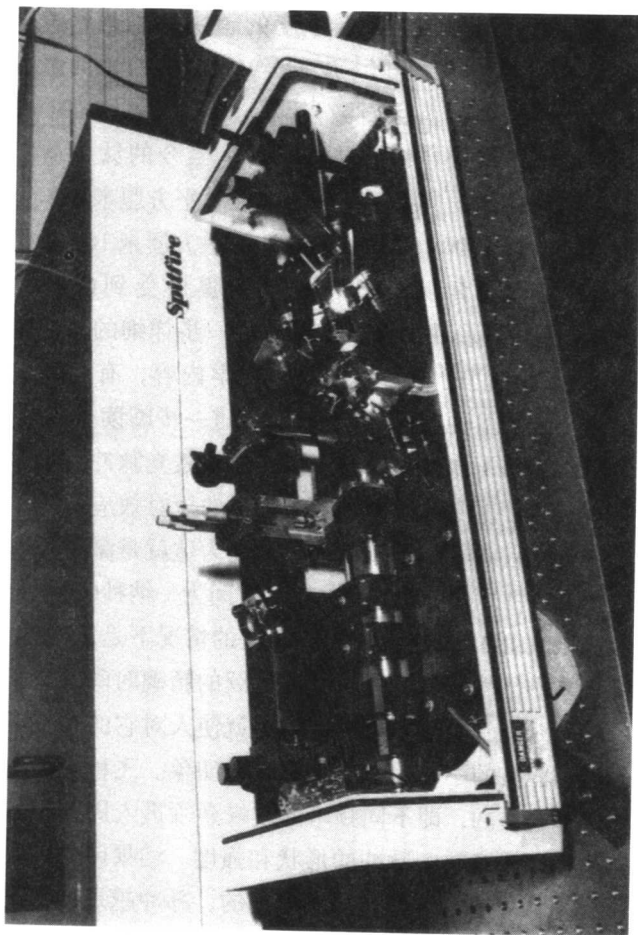


图 1.2 加州 (Mountain View, California) 的 Spectra-Physics Lasers Inc. 公司制造的茨乌那米 (Tsunami) 钛 - 蓝宝石激光装置的照片。钛 - 蓝宝石中的持久的转化发生在 Ti^{3+} 离子的不同电子态的振动层次之间。激光的形式锁定，是由一个声 - 光调制器引发的，它可生成高峰值强度的脉冲，并在一种单一的“锁定”形式持续飞秒级时段，或持续的波形。驱动钛 - 蓝宝石所需的能源是由一个二极管或氩 - 离子激光提供的，它们都在绿色波段放射激光， Ti^{3+} 在这个波段被强吸收。当活化态的 Ti^{3+} 的粒子个数超过了基态，激光就会在红色或近红外波段，即，在 670 到 1070 微米之间发射。



钛 - 蓝宝石激光有代表性地发射 4.5 至 100 飞秒的脉冲, 并能达到差不多 0.8 瓦的能量峰值, 但这个高度还不足以在吸收光的分子数低的实验中获得适当的信噪比。要克服这个局限, 飞秒激光的能量峰值可以通过扩大线性调频脉冲而得到很大程度的提高。使用这种技术, 弱强度的超快脉冲首先被牵伸至 100 至 1000 皮秒 (1 皮秒 = 1000 飞秒), 而后在一个或多个钛 - 蓝宝石激光晶体中被扩大约 100 万倍, 最终再次被压缩到飞秒长度。当今的钛 - 蓝宝石激光可达到的典型能量峰值, 在 1 平方厘米面积上的激光束达 1000 亿瓦 (最高可达每平方厘米 100 万亿瓦), 与通过直视太阳的人眼虹膜接受到的大约 0.001 瓦能量形成了反差。有关进一步详细的超快激光运行和它们的放大过程的物理学内容, 有兴趣的读者可以从其他方面获取信息 (见进一步阅读材料)。

对于分子物理学研究来说, 超快激光脉冲的很多特性是非常重要的。飞秒激光脉冲的短时效应的基本结果就是它们不是单频的。通常认为这就是激光辐射的定义特性之一, 但这只在脉冲时间为一纳秒 (一亿分之一秒或 100 万飞秒) 或稍长一些的情况下是正确的。由于我们已然了解了飞秒脉冲持续的精确时间, 量子力学的时间 - 能量不确定性原则就使人对它的频率或颜色的固有的不精确性有了强烈的印象。飞秒脉冲也必须是连贯的, 即不同频率的波峰必须进入周期性的阵列, 以构成整个脉冲的形状和强度。结果就是: 飞秒激光脉冲是由一系列频率组成的, 脉冲越短, 它支持的频率数越大, 反之亦然。

对超快光学物理学研究的第二个要求是，波长范围要宽。波长调谐的能力是分子动力学研究中的基本组分。这是因为，分子的量子级别是由不同的能量差分开的：比如共振是被红外光激活的，而同时对应于分子中的电子的不同排布的电子态，则涵盖在可见光和紫外光谱中。线性调整脉冲放大的飞秒激光的高产出动力使其成为理想的光学参数装置的同步泵送，一个频率的光子在非中心对称媒介中通过它的自-相互作用被转化为不同频率的光子。现今，利用这个方案可以使我们做到从近紫外光区域，通过可见光区域，到红外区域光谱的连续性的调谐。

一个重要的观点就是，这些进展与伴随出现的创新的脉冲描述过程的发展相辅相成。创新的过程，例如飞秒光学脉冲的所有特性，它们的能量、形状、持续时间和状态，都可以在实验过程中在原位被进行量化的研究。综合起来，这些资源使飞秒级激光能够被用于整个超快过程范围，包括等离子体形成和核的熔解的不同阶段、分子的断裂和碰撞过程及关键的单个的光学合成步骤。

1.4 分子动力学的飞秒级光谱学

1.4.1 超快的分子断裂

要确定实时的分子运动需要用有时间调节的序列的至少2个超快激光脉冲来处理分子样品：第一个脉冲起到了引发启动特定过程的作用，例如，分子的断裂；而同时，第二个脉冲从时间上来说比第一个脉冲延迟，主要探查以时间为函数的分子进化情况。对于



在气相中各个分离的分子，这个方法是由加利福尼亚理工学院 1999 年诺贝尔奖得主泽维尔 (A. H. Zewail) 首次发明的。其中包含的特性被完全体现在应用中，这里图示的就是溴化碘的光学断裂作用。

图 1.3 实时的分子飞秒级光谱可以用一种光学转化来描述，这种光学转化是由势能曲线之间的超快激光脉冲激活的，势能曲线标示的是分子的不同能态怎样随原子之间的距离而异。本例所示的是溴化碘 (IBr) 的离解。一束初始的抽吸激光激活由最低的 (基态) 电子态 V_0 的势能曲线向活化态 V_1 的一种纵向的转化。以量子理论来描述形成碘原子 (I) 和溴原子 (Br) 的溴化碘的断片，就是在 V_1 的两极摆动，或是穿越到陡峭的排斥势能 V'_1 从而导致断裂的波束，如图中两个箭头所示。这些运动在时间区域内由两个探针脉冲光子的同步吸收来监控，在这种情况下，将正在离解的分子离子化。

可以最方便地用图示的势能表面来表示在分子中的原子之间的力，作为以“埃”测量的原子间尺度的函数 (10 埃相当于 100 万分之一毫米)。对于气相中的溴化碘分子，电子的基态也就是分子处于平衡态的状态，由图 1.3 中标为 V_0 的边界势能曲线来代表。分离的过程是由 2 条相互作用的势能曲线 V_1 和 V'_1 来控制的，表示不同的活化态，这些活化态可以使分子沿着相同等级断裂发展为基态原子 (碘 + 溴) 或沿一条较高能量途径，导出被激化的溴化物 (碘 + 溴)。典型的分离速度在 1500 - 2500 米/秒。同样的数字标示了在抽吸 - 探针序列中成形的飞秒激光脉冲如何可被用在监测光分离作用的时间进程。

