



中国科学院研究生教学丛书



分子科学前沿

白春礼 主编



科学出版社
www.sciencep.com

中国科学院研究生教学丛书

分子科学前沿

白春礼 主编

科学出版社

北 京

内 容 简 介

分子科学是化学的核心,是研究分子的结构和性质的科学,是创造新物质的科学,也是物质科学研究的核心和前沿之一。研究分子和物质的创造及其转化已成为化学科学本身面临的最根本的任务之一。

本书共分10章,介绍了目前分子科学前沿领域的研究动态。第1章概述分子科学的定义、发展历程、研究内容和领域,以及未来的发展方向和挑战等,第2~10章具体探讨了分子科学研究某一领域的研究概况和最新的进展,并且对该领域未来的发展进行了展望。

本书可供高等院校化学、材料、生命科学等专业高年级本科生、研究生,研究院所科研人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

分子科学前沿/白春礼主编. —北京:科学出版社,2007

(中国科学院研究生教学丛书)

ISBN 978-7-03-019927-0

I. 分… II. 白… III. 分子晶体-研究生-教材 IV. O7

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 139408 号

责任编辑:林 鹏 杨 震 吴伶俐 / 责任校对:陈玉凤

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:王 浩

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2007年9月第 一 版 开本:782×1092 1/16

2007年9月第一次印刷 印张:40 1/2

印数:1—3 000 字数:928 000

定价:86.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈科印〉)

《中国科学院研究生教学丛书》序

在 21 世纪曙光初露,中国科技、教育面临重大改革和蓬勃发展之际,《中国科学院研究生教学丛书》——这套凝聚了中国科学院新老科学家、研究生导师们多年心血的研究生教材面世了。相信这套丛书的出版,会在一定程度上缓解研究生教材不足的困难,对提高研究生教育质量起着积极的推动作用。

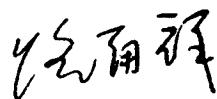
21 世纪将是科学技术日新月异,迅猛发展的新世纪,科学技术将成为经济发展的最重要的资源和不竭的动力,成为经济和社会发展的首要推动力量。世界各国之间综合国力的竞争,实质上是科技实力的竞争。而一个国家科技实力的决定因素是它所拥有的科技人才的数量和质量。我国要想在 21 世纪顺利地实施“科教兴国”和“可持续发展”战略,实现邓小平同志规划的第三步战略目标——把我国建设成中等发达国家,关键在于培养造就一支数量宏大、素质优良、结构合理、有能力参与国际竞争与合作的科技大军,这是摆在我国高等教育面前的一项十分繁重而光荣的战略任务。

中国科学院作为我国自然科学与高新技术的综合研究与发展中心,在建院之初就明确了出成果出人才并举的办院宗旨,长期坚持走科研与教育相结合的道路,发挥了高级科技专家多、科研条件好、科研水平高的优势,结合科研工作,积极培养研究生;在出成果的同时,为国家培养了数以万计的研究生。当前,中国科学院正在按照江泽民同志关于中国科学院要努力建设好“三个基地”的指示,在建设具有国际先进水平的科学研究基地和促进高新技术产业发展基地的同时,加强研究生教育,努力建设好高级人才培养基地,在肩负起发展我国科学技术及促进高新技术产业发展重任的同时,为国家源源不断地培养输送大批高级科技人才。

质量是研究生教育的生命,全面提高研究生培养质量是当前我国研究生教育的首要任务。研究生教材建设是提高研究生培养质量的一项重要基础性工作。由于各种原因,目前我国研究生教材的建设滞后于研究生教育的发展。为了改变这种情况,中国科学院组织了一批在科学前沿工作,同时又具有相当教学经验的科学家撰写研究生教材,并以专项资金资助优秀的研究生教材的出版。希望通过数年努力,出版一套面向 21 世纪科技发展、体现中国科学院特色的高水平的研究生教学丛书。本丛书内容力求具有科学性、系统性和基础性,同时也兼顾前沿性,使阅读者不仅能获得相关学科的比较系统的科学基础知识,也能被引导进入当代科学研究的前沿。这套研究生教学丛书,不

仅适合于在校研究生学习使用,也可以作为高校教师和专业研究人员工作和学习的参考书。

“桃李不言,下自成蹊。”我相信,通过中国科学院一批科学家的辛勤耕耘,《中国科学院研究生教学丛书》将成为我国研究生教育园地的一丛鲜花,也将似润物春雨,滋养莘莘学子的心田,把他们引向科学的殿堂,不仅为科学院,也为全国研究生教育的发展作出重要贡献。



前 言

分子科学是研究分子的结构和性质的科学,是创造新物质的科学。分子科学研究的范围不仅包括单个分子的结构、基本特性和功能的研究,而且包括对分子聚集体、分子体系、分子功能材料以及分子器件和分子机器的研究。

分子科学以研究分子以及分子物质的创造为契机,将直接推动人们对分子的直观认识和对分子基本特性的了解,进而使化学研究的层次越来越深入,极大地推动化学、物质科学的发展。分子科学的发展可以使我们在单分子层次上观测、理解已有的物理现象、发现新的物理现象并揭示其本质。因此,分子科学是物质科学研究的核心和前沿之一。

分子科学已经渗透到生物学的各个领域。一批在分子水平上研究生命的学科如分子生物学、化学生物学和化学遗传学迅速崛起并飞速发展。分子科学的发展将极大地推动材料科学的发展,特别是促进纳米材料的发展。对分子尺度上新现象、新效应和新功能的理解,会极大地推动纳米科技的发展。分子科学研究在微电子学中的应用显著地表现为分子器件研究和分子机器的出现,而分子器件和分子机器对未来的发展将产生极大的影响。

值得指出的是,扫描探针显微镜、微区光谱分析技术、荧光探针技术、光镊技术等先进技术的发展,极大地提高了分子科学研究的能力,使科学家能够观察并操纵单个分子,研究结果丰富了分子科学研究的内容,推动了现代分子科学的蓬勃发展。

本书共分 10 章,介绍了目前在分子科学前沿领域的研究动态。第 1 章概述分子科学的定义、发展历程、研究内容和领域,以及未来的发展方向和挑战等;第 2 章着重介绍晶体工程在超分子化学和材料化学等领域中的应用,以及手性聚集体和配位聚合物方面的研究前沿;第 3 章主要讨论与分子光谱及分子动力学相关的前沿研究课题以及近期的一些重要进展;第 4 章介绍了扫描探针技术在分子科学研究,特别是单分子识别和分子组装研究领域中的应用和进展;第 5 章阐述了高分子科学的发展历史和当前的研究前沿;第 6 章主要论述分子聚集体化学领域的研究前沿;第 7 章介绍了分子器件的基本概念和分子电子学的发展;第 8 章主要讨论生物分子螺旋结构的模拟和生物分子相互作用的测定方法两方面的最新研究进展;第 9 章介绍了纳米领域的一些新物质和新材料的合成与制备;第 10 章介绍了理论化学的发展和主要的研究内容以及我国的理论化学研究概况。

本书对从事分子科学和相关学科研究的研究人员有参考意义,而且可以作为化学、材料、生物专业的研究生和大学本科生的参考书。希望本书出版对分子科学的研究和该领域人才的培养起到积极的推动作用。

本书的出版得到中国科学院科学出版基金的大力支持和帮助,在此一并表示衷心的感谢。

虽然经过作者和编辑的多次修改和校对,书中难免会有疏漏和错误之处,恳请广大读者批评指正!

各章编写人员

第1章 概论

白春礼,中国科学院

第2章 分子晶体——晶体工程与功能

刘彩明,张德清,朱道本,中国科学院化学研究所;田金磊,卜显和,南开大学化学系

第3章 分子光谱学与分子动力学

张东辉,杨学明,中国科学院大连化学物理研究所

第4章 单分子识别——扫描探针显微术在分子识别研究中的应用

万立骏,方晓红,中国科学院化学研究所

第5章 高分子——从合成到天然

徐坚,中国科学院化学研究所

第6章 分子聚集体化学

刘鸣华,陈鹏磊,张莉,中国科学院化学研究所

第7章 分子器件

魏大程,刘云圻,中国科学院化学研究所

第8章 生物分子螺旋结构的模拟及生物分子相互作用的测定方法研究

范青华,陈传峰,胡志强,赵睿,章群丹,中国科学院化学研究所

第9章 合成与制备科学——碳、非碳及部分有机材料

王春儒,李玉良,杨振忠,刘辉彪,中国科学院化学研究所

第10章 理论化学

帅志刚,中国科学院化学研究所;邵久书,北京师范大学化学学院

目 录

第 1 章 概论	1
1.1 分子科学的发展	1
1.1.1 科学原子论的提出及分子和原子的研究	1
1.1.2 分子科学研究的技术发展	2
1.2 分子科学研究推动了其他学科的发展	3
1.2.1 化学	3
1.2.2 物理学	5
1.2.3 生命科学	6
1.2.4 材料科学	8
1.2.5 微电子学	8
1.3 分子科学的研究内容举例	9
1.3.1 分子转化的本质、规律、控制以及单分子操纵	9
1.3.2 单分子表征、检测和调控的方法与技术	9
1.3.3 分子自组装规律研究	9
1.3.4 手性起源与手性分子科学	10
1.3.5 高分子结构与功能的调控	10
1.3.6 分子仿生与智能材料	10
1.3.7 分子材料与分子器件	10
1.3.8 分子科学与生命科学的交叉与融合	11
1.3.9 与环境协调的分子转化过程与调控机理	11
1.3.10 以再生资源为基础的分子科学	11
1.4 分子科学研究面临的挑战	12
1.5 本书内容概要	12
参考文献	13
第 2 章 分子晶体——晶体工程与功能	15
2.1 晶体工程与超分子化学	15
2.1.1 氢键在超分子自组装的作用	16
2.1.2 通过配位作用进行超分子的自组装	24
2.1.3 超分子中的其他弱相互作用	35
2.2 晶体工程与材料化学	37
2.2.1 非线性光学晶体材料的晶体工程	37
2.2.2 分子磁体的晶体工程	40
2.2.3 电荷转移复合盐类分子导体的晶体工程	54

2.3 手性配合物	58
2.3.1 手性的相关概念	58
2.3.2 零维手性空腔配合物和手性配位聚合物的结构和制备	60
2.3.3 零维手性空腔配合物和手性配位聚合物的某些应用	74
2.3.4 手性配位聚合物或零维手性空腔配合物分子聚集体的未来发展方向	78
参考文献	78
第3章 分子光谱学与分子动力学	88
3.1 概述	88
3.2 现代分子光谱学研究	89
3.2.1 基本概念	89
3.2.2 气相自由基分子光谱	91
3.2.3 高振动态分子光谱及分子内传能动力学	92
3.2.4 分子团簇的光谱及结构研究	94
3.2.5 超低温氦纳米团簇内的分子光谱研究	97
3.2.6 低温基质中非稳态分子的光谱研究	99
3.2.7 低温仲氢量子晶体中的分子光谱	102
3.2.8 分子离子的光谱研究	104
3.3 分子反应动力学的实验研究	105
3.3.1 引言	105
3.3.2 实验技术	106
3.3.3 分子光解动力学研究	107
3.3.4 双体分子反应动力学研究	115
3.3.5 较复杂体系的化学反应动力学研究	121
3.4 分子反应动力学的理论研究	123
3.4.1 简介	123
3.4.2 玻恩-奥本海默(Born-Oppenheimer)近似和分子势能面	124
3.4.3 核运动的薛定谔方程及散射矩阵	128
3.4.4 非含时量子反应散射计算方法:超球坐标法及其应用	130
3.4.5 含时量子反应散射计算方法:含时波包法及其应用	132
3.4.6 准经典轨线方法	142
3.5 趋势与展望	144
参考文献	145
第4章 单分子识别——扫描探针显微术在分子识别研究中的应用	156
4.1 修饰 STM 针尖法对 18 硫醇分子中巯基的观测识别	157
4.1.1 利用未修饰的 STM 针尖成像时得到的 18 硫醇分子的 STM 图像	157
4.1.2 利用碘修饰的 STM 针尖成像时得到的 18 硫醇分子的 STM 图像	158
4.1.3 利用硫修饰的 STM 针尖成像时得到的 18 硫醇分子的 STM 图像	159
4.2 手性识别	160

4.2.1 中心手性分子的识别	160
4.2.2 轴手性分子的识别	164
4.2.3 二维组装超分子手性表面的识别	167
4.3 杯[8]芳烃/ C_{60} 复合结构的识别	170
4.4 不同电位下相变结构的识别	172
4.5 原子力显微镜研究纤维蛋白原的吸附结构	178
4.6 单分子力谱研究生物分子间相互作用力	180
4.6.1 核酸识体与蛋白质的相互作用	181
4.6.2 转录因子与 DNA 响应元件的相互作用	182
4.7 原子力显微镜单分子识别成像	184
参考文献	185
第 5 章 高分子——从合成到天然	190
5.1 高分子发展历史	190
5.2 高分子和大分子的几个前沿问题	194
5.2.1 高分子合成与制备	195
5.2.2 高分子制备和材料的绿色化	195
5.2.3 纳米尺度上高分子和大分子聚集态研究	196
5.2.4 高分子成型中基本物理问题研究	197
5.2.5 功能高分子和大分子	197
5.2.6 医用高分子	198
5.2.7 仿生高分子	199
5.2.8 高分子和大分子的智能化	200
5.2.9 生命体系中的大分子	201
5.3 小结	201
参考文献	201
第 6 章 分子聚集体化学	204
6.1 概述	204
6.1.1 分子聚集体构筑的理解	206
6.1.2 分子间作用力	207
6.2 Langmuir-Blodgett (L-B) 膜技术	213
6.2.1 Langmuir-Blodgett (L-B) 膜的历史与基本概念	214
6.2.2 L-B 膜的制备	216
6.2.3 L-B 膜的发展动向和现状	223
6.3 自组装膜技术	227
6.3.1 自组装膜的基本过程	228
6.3.2 几种常见的自组装膜体系	229
6.3.3 自组装膜的发展动向与现状	233
6.4 层层组装技术	236

6.4.1 层层组装技术的基本过程和概念	236
6.4.2 基于静电作用的层层组装技术	237
6.4.3 基于氢键作用的层层组装技术	240
6.4.4 基于配位作用的层层组装技术	241
6.4.5 各种成膜技术的比较	243
6.5 溶液中的有序分子组合体	244
6.5.1 水性胶束、反胶束和微乳液	246
6.5.2 表面活性剂囊泡和聚合囊泡	248
6.6 新型两亲分子研究进展	250
6.6.1 Gemini 型两亲分子	250
6.6.2 双头基两亲分子	255
6.7 超分子手性问题研究进展	264
6.7.1 手性超分子的制备	264
6.7.2 手性超分子功能的研究进展	270
6.8 小结	275
参考文献	275
第 7 章 分子器件	281
7.1 概述	281
7.1.1 分子器件的定义	281
7.1.2 分子电子学的诞生和发展	282
7.1.3 分子器件的优点	285
7.1.4 分子器件面临的挑战	285
7.2 分子导线	286
7.2.1 分子导线的定义	286
7.2.2 分子中的电荷和能量转移	286
7.2.3 分子导线实例	300
7.2.4 展望	308
7.3 分子开关	308
7.3.1 电子通道开关	308
7.3.2 能量传输开关	312
7.3.3 超分子体系分子开关	313
7.3.4 其他分子开关	316
7.4 分子整流器	319
7.4.1 分子整流器的基本原理	319
7.4.2 具有整流效应的分子	324
7.4.3 整流效应的来源	325
7.4.4 分子整流器最新进展和存在的问题	329
7.5 分子存储器	331

7.5.1 光致变色材料体系	332
7.5.2 超分子体系的分子存储器	336
7.5.3 卟啉分子存储器	337
7.5.4 负阻效应分子的自组装单分子膜	338
7.5.5 自旋转变高分子化合物体系	341
7.5.6 生物分子及生物的信息存储	342
7.6 分子电路与分子场效应晶体管	345
7.6.1 分子电路	345
7.6.2 分子场效应晶体管	357
7.7 分子逻辑门与分子计算机	362
7.7.1 分子逻辑门	362
7.7.2 分子计算机	381
7.8 分子机器与马达	386
7.8.1 分子机器	387
7.8.2 分子马达	393
7.8.3 轮烷、准轮烷、索烃组成的分子机器	398
7.9 纳米碳管在分子器件方面的应用	407
7.9.1 引言	407
7.9.2 纳米导线	408
7.9.3 分子间隙电极	409
7.9.4 纳米碳管场效应晶体管	410
7.9.5 纳米碳管整流器	411
7.9.6 单电子输运晶体管	413
7.9.7 隧穿二极管	414
7.9.8 分子存储器	415
7.9.9 分子逻辑门	415
7.9.10 分子机器	417
参考文献	419
第8章 生物分子螺旋结构的模拟及生物分子相互作用的测定方法研究	423
8.1 概述	423
8.2 芳酰胺型螺旋折叠体研究进展	424
8.2.1 引言	424
8.2.2 芳酰胺型螺旋折叠体	425
8.2.3 小结与展望	439
8.3 生物分子相互作用的测定与表征	439
8.3.1 生物分子的相互作用	439
8.3.2 平衡状态下生物分子相互作用的测定与表征	441
8.3.3 动态生物分子相互作用的测定与表征	446

参考文献	454
第9章 合成与制备科学——碳、非碳及部分有机材料	458
9.1 概述	458
9.2 富勒烯纳米材料的制备	458
9.2.1 富勒烯的制备研究	459
9.2.2 内嵌富勒烯	462
9.2.3 富勒烯衍生物的制备研究	465
9.3 纳米管及相关纳米材料制备	481
9.3.1 纳米管的结构和性质	481
9.3.2 多壁碳纳米管	484
9.3.3 单壁纳米管	487
9.3.4 纳米管修饰	489
9.4 非碳纳米材料	492
9.4.1 纳米结构中空微球	492
9.4.2 纳米结构有序介孔材料	501
9.5 共轭大 π 体系的化合物的合成	505
9.5.1 卟啉的合成	505
9.5.2 卟啉的功能化	510
9.5.3 功能花四甲酰二亚胺的合成	524
9.5.4 共轭寡聚物的制备、性质与应用	536
9.5.5 水溶性共轭聚合物	543
9.5.6 氢键的非共价作用	554
参考文献	559
第10章 理论化学	575
10.1 概述	575
10.2 电子结构理论	578
10.2.1 薛定谔方程	578
10.2.2 电子哈密顿量的求解——Hartree-Fock 理论	580
10.2.3 Post-Hartree-Fock 理论	583
10.2.4 密度泛函理论	592
10.2.5 国内关于电子结构的理论化学研究	594
10.3 凝聚相化学动力学理论	595
10.3.1 分子振动弛豫	596
10.3.2 反应速率理论	598
10.3.3 半经典理论	604
10.4 分子材料计算模拟的理论模型与应用举例	606
10.4.1 分子聚集体与有机纳米结构性能	606

10.4.2 有机电致发光材料的激发态过程	613
10.5 趋势与展望.....	623
参考文献.....	625

第 1 章 概 论

白春礼

分子科学是研究分子的结构和性质的科学,是创造新物质的科学,也是物质科学研究的核心和前沿之一。分子科学研究的范围不仅包括对单个分子的结构、基本特性和功能的研究,而且还包括对分子聚集体、分子体系、分子功能材料,以及分子器件和分子机器的研究。

1.1 分子科学的发展

1.1.1 科学原子论的提出及分子和原子的研究

原子和分子是构成物质的基本单位。从古希腊时期提出原子概念,到今天形成科学的原子分子理论,原子分子科学构成了整个自然科学的基础,其科学概念已经深入到人们日常生活的各个方面,发挥着举足轻重的作用。

人们对分子的正确认识最早要源于科学原子论的建立。早在 1661 年,英国化学家波义耳(R. Boyle)认识到组合而成的原子是以化学意义上的基本粒子的方式起作用,并且首次提出化学元素的科学定义:不由其他物质构成的、一般化学方法不能再分解为更简单的某些实物。1798 年,法国化学家拉瓦锡(A. L. Lavoisier)通过实验首次制得了氧气,进而列出了第一张化学元素表。到 1803 年,被誉为科学原子论之父的英国化学家道尔顿(J. Dalton)将波义耳、拉瓦锡等科学家的研究成果同原子论的观点结合起来。他提出,有多少种不同的化学元素,就有多少种不同的原子;同一种元素的原子在质量、形态等方面完全相同。他还强调确定原子的相对质量以及组成一个化合物“原子”的基本原子的数目极为重要。关于原子组成化合物的方式,道尔顿认为这是每个原子在牛顿万有引力作用下简单地并列在一起形成的。在化学反应后,原子仍保持自身不变。尽管现代科学的发展在一定程度上修正了原子本身的物理不可分和万有引力将原子连接在一起的观点,但是道尔顿对原子的定义却被广泛地接受。

科学原子论确立后,化学的发展进入了一个辉煌的时期。从描述物质数量的阿伏伽德罗定理的发现、定量化学的发展,到门捷列夫(D. Mendeleev)发现元素周期表,人们对微观世界中原子的研究开始进入科学系统的轨道。在现代原子论中,基本粒子始终不变的思想已经被抛弃,基本粒子可以转化成为辐射,反之亦然;在组成更大的单元时,基本粒子也不一定保持自身不变。科学原子论的创立使人类在认识物质的本质方面产生了一次飞跃,各种原子可以依据一定方式通过化学键联结起来,构成分子。随后,对原子、分子的研究越来越引起更多科学家的关注。

从 17 世纪开始,科学家们就已经发展了许多实验和理论方法来研究构成物质的原子和分子。首先是气体分子运动论的研究。所有物质都处于永恒的运动之中,运动是一切

物质的固有特性。因此,原子、分子也必然处于运动之中,分子的所有特征都可以在运动中得到反映。对分子运动的最早研究是从研究理想气体的运动方式开始的。从本质上讲,分子运动论是热学的一种微观理论,它以分子的运动来解释物质的宏观热性质。它依据两个基本概念:一个是物质是由大量分子和原子组成的;另一个是热现象是这些分子无规则运动的一种表现形式。分子运动论的兴起与近代原子论的复活有密切关系。

为了解决气体分子的实际运动速度远远大于气体的实际扩散速度这一矛盾,1850年克劳修斯(R. Clausius)在分子运动论中明确引进了分子速度无规则分布的思想,认为不同的气体分子所具有的运动速度不同。气体包含了为数众多的分子,这些分子在容器内做高速的无序运动,相互间发生多次碰撞,每个分子的运动速度和方向都随时间不断地改变,并且引入了平均自由程的概念。在此基础上,麦克斯韦(J. C. Maxwell)结合概率论思想于1859年首先导出了分子速度的分布公式,这是分子运动论和统计力学发展史上的一件大事。

在理想气体的分子运动论建立后,工业革命要求进行热能和机械能互相转化的研究,从而发现了能量转化时所遵守的热力学三大定律。1847年,亥姆霍兹(H. Helmholtz)发表了能量守恒定律,指出能量可以从一种形式转化成另一种形式,但它既不能被创造,也不能被消灭。然而根据热力学第二定律(即熵值定律),每当某种形式的能量转化为另一种形式的能量时,并非所有的能量都转换成可利用的功,部分能量不可避免地以热的形式损失。

20世纪50年代,原子和分子的概念已经深入人心,对热力学定律也有了更加深刻的理解。原子和分子的概念深深影响着人们日常的行为和思想。然而在100多年前,这样的概念还很难被人们理解,受到过许多非难和质疑,并且引发了激烈的科学争论。最有代表性的反对意见是马赫(E. Mach)和奥斯特瓦尔德(W. Ostwald)所持的观点,他们从分子的实证性出发怀疑分子的存在。“眼见为实”成为反驳原子和分子存在的有力武器。甚至到了20世纪60年代仍有人断言“人类永远不可能看见原子”。

1.1.2 分子科学研究的技术发展

分子科学的发展与分子科学研究技术的发展和成熟密切相关。早期建立在理想气体分子运动基础上的分子理论都是基于对大量原子和分子的特征的研究,并不能给出单个分子或原子的直观图形,原因在于原子、分子的尺度与人们的通常思维相去甚远。因此,持分子论观点的科学家一方面必须完善理论的各个方面;另一方面又要努力寻找分子存在的间接或直接证据。为了科学地证实原子、分子的存在,前人进行了大量的研究工作,发展当时先进的科学仪器成了科学家们共同的选择。

15世纪末发明了放大镜,到了17世纪又发明了光学显微镜,可以将被观察物体放大几百倍。借助于光学显微镜,人们发现了微小的细胞和细菌。随着光学显微镜技术的日臻完善,人类的视野划时代地扩展到了神奇的微观世界。伴随着光学和显微学的进步,其他相关学科,如物理学、化学、地质学和生物学也得到了长足进展。然而光学显微镜本身受到光衍射效应的影响,只能达到微米尺度的分辨率,而原子和分子比这个尺寸小得太多,因此不可能用光学显微镜观察到原子和分子。

随后,法国的佩兰(J. B. Perrin)爵士利用 1903 年发明的超级显微镜,对悬浮在溶液中的金溶胶粒子的布朗运动进行了详细研究,推导出物质质量的单位——阿伏伽德罗常量,找到了从布朗运动中能够得到原子和分子存在的证据。

1951 年,宾夕法尼亚大学的穆勒(E. Muller)教授发明了具有高放大倍数、高分辨率的场离子显微镜(field ion microscope, FIM)。在高真空下,用于成像的气体原子在带正高压的金属钨针尖样品附近被离子化,然后被电场加速并沿电场方向飞行到阴极荧光屏,在屏上得到一个对应于针尖表面原子排列的场离子像。然而,即使这样的划时代突破也未能给出原子或分子的直观图像,因为表面上的强场是一个很大的干扰因素,所测出的表面状态不能反映一般状态,同时所能观测的样品数目很有限。同时,虽然电子显微镜的发明使得原子和分子的存在更为可信,但也不能直接给出原子或分子的直观图像。

1981 年,当 IBM 公司的宾尼(G. Binnig)和罗雷尔(H. Rohrer)博士及其同事共同研制成功了世界上第一台新型的表面分析仪器——扫描隧道显微镜(scanning tunneling microscope, STM)时,人类才第一次能够实时地观察到单个原子及其在物质表面的排列状态和与表面电子行为有关的物理、化学性质,这标志着现代分子科学发展的到来。这种新型显微镜将人类的视野带到了亚微米的纳米(或原子)水平,且可以工作在不同的环境之中。在表面科学、材料科学、生命科学等领域的研究中有着重大的意义和广阔的应用前景,被国际科学界公认为 20 世纪 80 年代世界十大科技成就之一。为表彰 STM 的发明者们对科学研究的杰出贡献,1986 年宾尼和罗雷尔被授予诺贝尔物理学奖。

在 STM 出现以后,又陆续发展了一系列工作原理相似的新型显微技术,包括扫描力显微镜(scanning force microscopy, SFM)、扫描隧道电位仪(scanning tunneling potentiometry, STP)、弹道电子发射显微镜(ballistic electron emission microscopy, BEEM)、扫描离子电导显微镜(scanning ion conductance microscopy, SICM)、扫描热显微镜(scanning thermal microscopy, SFM)、光子扫描隧道显微镜(photon scanning tunneling microscopy, PSTM)和扫描近场光学显微镜(near-field scanning optical microscopy, NSOM 或 SNOM)等。相应的扫描力显微镜有原子力显微镜(atomic force microscopy, AFM)、横向力(摩擦力)显微镜(lateral force microscopy, LFM)、磁场力显微镜(magnetic force microscope, MFM)、静电力显微镜(electrostatic force microscopy, EFM)和化学力显微镜(chemical force microscopy, CFM)。这类基于探针对被测样品进行扫描成像的显微镜统称为扫描探针显微镜(scanning probe microscopy, SPM)。这些新型强大的表面分析仪器的诞生,以及后来出现的微区光谱分析技术、荧光探针技术、光镊技术等,极大地提高了对分子科学研究的能力,使科学家能够观察并操纵单个分子,研究结果丰富了分子科学研究的内容,推动了现代分子科学的蓬勃发展。

1.2 分子科学研究推动了其他学科的发展

1.2.1 化学

分子科学是化学的核心。化学本身是一门试图了解物质的性质和变化的科学,从本质上说是研究分子的结构和性质、分子间的相互作用、反应和相互转化以及新的分子和物