

# 内涵都在表面上

曹则贤

虽然整个宇宙应该被当作一个整体加以理解，科学研究在很多时候却要求我们首先确立一个具体而微的研究对象：一个星系、一个液滴、或者一个基本粒子。对象之外的存在被称为环境。在对象和环境之间，环境可以理解为只是构成了一个大的背景，牛顿经典力学里的所谓绝对时空，就是这样一个大背景或者大舞台，我们关注的对象在这个大背景上运动或变换。我们关注的对象，并不必然是全封闭的，它同环境间可以存在交换，这包括能量、物质的交换以及背景对对象占据空间的挤压。一个对象同其外部环境间的界面，如果可以关切外部环境则称其为体系的表面或者边界，具有特殊的地位，表现出特殊的性质。因此，表面和界面成为一类特殊的科学研究对象。各种边界问题，表面/界面问题常常具有关键性的地位，甚至在许多情形下我们可以说内涵都在表面上。这一点在我们的物理以及相关学科的宣传中未能明确地加以强调，不能不说是一种疏忽。

在数学上，我们研究一个空间区域，会将之分为内部和边界，分别记为 $\Omega$ 和 $\partial\Omega$ 。对于 $n$ 维空间，其边界为 $n-1$ 维的空间。对于三维空间内的三维物体（我们生活于其中，并且是自身就是这样的三维物体，我们的身体构造就受这个几何现实的约束），其表面是二维的。固体和液体的表面，或者固体和液体相互之间以及同气体之间的界面，就是表面科学研究的对象。一般情况下，像晶体的表面、液滴的表面，都是凸的（表面上任意两点间的联系在体系内），但并不总是这样。近年越来越多的凹的表面吸引了研究者的注意，像五角星柱状的晶体、多孔材料等，其固-气界面可能就是以凹面为主。随着

对多孔材料包括泡沫塑料、泡沫金属研究的深入，对这些结构中的界面进行多学科考察也显得越发迫切。单个三维物体的表面是二维结构的，但是若由界面本身堆积起三维结构，比如泡沫（英文bubble、foam、froth对应不同的泡沫结构，提请读者注意），则这样的结构具有更大的复杂性。据说时空在普朗克尺度下因为量子涨落也是呈泡沫结构，这么说来，宇宙不过是个表面结构罢了（图1）！

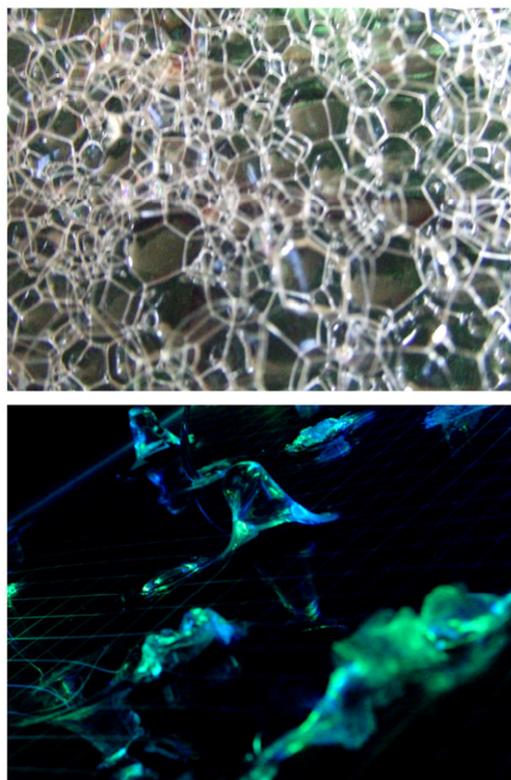


图1 液体泡沫与传说中的量子泡沫

对于内部与边界间的关系，数学上处理了一类

问题,这表现为 Stokes 定理。Stokes 定理表述如下,如果  $\omega$  是个  $(n-1)$ -形式,其紧致支撑为  $\Omega$ ,且  $\partial\Omega$  为该支撑的有方向的边界,则有  $\int_{\Omega} d\omega = \oint_{\partial\Omega} \omega$ 。这段挺难懂,不过它的一维形式是大家所熟悉的基本积分公式,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{[a,b]} dF = \int_{\{a\}^-; \{b\}^+} F = F(b) - F(a),$$

也就是说 1-形式的函数  $f(x)$  在  $[a, b]$  段上的积分等于母函数  $F$  在  $\{a\}^-$ ,  $\{b\}^+$  两点上的积分,因为有方向,所以写成了  $F(b) - F(a)$  的形式。电磁学中的高斯定律  $\int_W \nabla \cdot F dV = \oint_{\partial W} F \cdot dS$ , Stokes 定律  $\int_S \nabla \times F \cdot d\sigma = \oint_{\partial S} F \cdot d\ell$ , 分别对应的是三维和二维的情形。这些定理表明,这类体系内部的事情,可以完全是由其表面上的性质所决定的。可惜,我们学积分的时候,没有学明白这些内容的实质。要不,早就能体会到这一点了。



图 2 食盐晶体  
由晶体的外形可以推测其内部原子的排列方式

“内涵都在表面上”最有力的证据是关于晶体的研究。在 1992 年以前,晶体的定义是组成单元(原子、分子)具有平移对称性的结构,因为平移对称性的约束,晶体只有 230 种空间群,或者说只有 230 种不同的晶体。这是关于晶体的内部结构的论断。但是这些结论早在人们有能力用 X 射线衍射、电子

显微镜等手段能确认原子排列方式之前已经通过观察加数学的方式建立起来了,建立的基础是晶体的外观。1669 年斯丹诺(Steno)注意到晶体保持特定的外形(图 2),晶体小面间的夹角只取少量的几个固定值,因此提出了恒二面角定律,即晶体特定的面间角为一固定值。从这一事实出发,人们推导出了晶体的组成单元的空间排列方式。

如果要给量子力学、电动力学、晶体学、CT 扫描、图像处理、传热学等学科一个共有的关键词,笔者以为应该是傅里叶变换。傅里叶变换是傅里叶在研究传热过程时引入的。研究传热学的一个重要问题是确定一个导热体上的温度分布。人们发现,处于热平衡态的物体,其体内的温度分布可以由其边界上的温度分布决定。比如要决定一个铜圆盘上的温度分布,只要知道环状边缘上的温度分布就行了。

边界问题在电磁学中具有举足轻重的地位。给定电荷分布,电势在空间中的分布由泊松方程  $\nabla^2 \phi = -\rho/\epsilon_0$  决定。可以证明,若给定一空间之表面上的电势  $\mathcal{A}$  (Dirichlet 边界条件)或者电场  $\nabla_n \mathcal{A}$  (Neumann 边界条件),则此空间内的电势分布可以唯一地被确定。比如,金属作为封闭边界构成的无电荷空间中,电场处处为零,或电势为恒定值。当然,确定归确定,但如何从给定的边界条件得到体内势函数的显式表达,并不总是件容易的事情。边界元方法提供了利用边界条件数值解分布问题的方法。若把微分方程的积分形式看成微分方程的精确解,使用给定的边界条件来确定积分方程的边界值,然后可利用积分方程从数值上直接计算解在任意定义域内点上的值。

表面(界面)之作为内涵的表现者还见于更实际的问题中。一块材料总有一些原子、分子是处于外表面上的,有时材料的功能则完全是由表面上的原子表现出来的。比如,催化反应是在催化剂表面上进行的,则如何设计催化剂的表面形貌就成了提高催化剂效能的重要步骤。随着材料 dimension (对应汉语的维度、尺度多重意思)的减小(减少),居于表面上的原子的比例不断增高。对于许多薄膜材料、纳米线和纳米点来说,表面上的原子分布和电子(态)分布成了决定材料性质的关键因素。近两年受到强烈关注的碳单层(graphene),因为它只有一个原子层,则所有的原子都处于表面上(图 3)。对于这样的结构,内涵只能都在表面上。

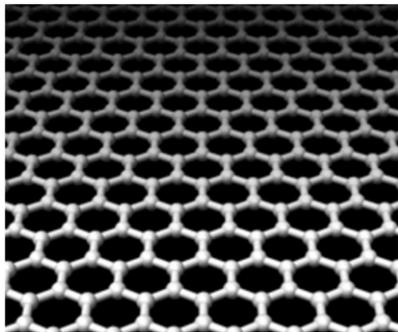


图3 碳单层。所有的原子都在表面上

内涵在表面上，是一种存在的现实，也是一种关于世界的常识性的认知。不信吗？看看剑桥大学出版社出版的书你也许就信服了。智慧、高贵、渊博、优雅，都明白无误地体现在那书的外观上，真是做到了内在学术品味与隽秀外观之间的完美匹配。不知这个道理我们的出版社什么时候能懂。但是，亲爱的读者，这个道理，你懂的。

(中国科学院物理研究所表面物理国家重点实验室 100190)

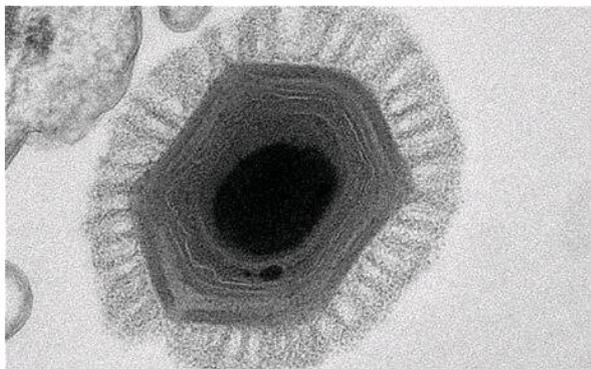


### 科苑快讯

#### 世界最大的病毒

病毒和细菌不同之处在于病毒太小，仅靠自身无法实现复制。于是病毒需要一个载体——宿主细胞，实现复制。2003年400纳米长的噬棘变形虫拟态病毒(俗称“米米病毒”)被发现，这种巨型病毒具有许多以前认为是细胞生物独有的基因，它们是否窃取自细胞生物的基因目前还不得而知。

法国马赛市结构和基因组信息实验室(Structural and Genomic Information Laboratory)的克拉弗里(Jean Michel Claverie)和同事在智利沿岸的海水中发现一种有1000多个基因的巨大新病毒——百万病毒(Megavirus chilensis)，它似乎与米米病毒是远亲，也有类似细胞生物的基因。外表也颇为相似，表面都覆盖着类似毛发和纤维的物质，但是百万病毒(如图)却比米米病毒大了将近6.5%。这些巨型病毒是否有宿主生物体，宿主生物体到底是怎么样，目前尚不清楚。



(高凌云编译自2011年12月《欧洲核子中心快报》)

#### 同步跳动的的心脏

让另一个心脏与你的同步跳动并非易事。但是对于婴儿和他们的母亲来说，只要相视而笑就可以轻松做到。一项新的研究表明，3个月大的婴儿与其母亲的母亲心脏能够同步跳动。

研究者选择了40对母子相对而坐，心脏一侧都贴上了有黏性的皮肤电极。当他们充满爱意地相视而笑或啾呀对话时，母子的母亲心脏就会几乎一起跳动。这种同步跳动只存在于母亲和自己的孩子之间，只在同时微笑和进行其他愉快地互动行为时才发生，这篇论文已发表于12月的《婴儿行为与发展》杂志(*Infant Behavior and Development*)。



研究者推测，当人类互相模仿对方的面部表情时可能启动了脑部的特殊区域，控制心脏何时跳动。同步跳动虽然只有几下，然而根据该实验室以前的研究，婴儿与母亲不同，很少像成人那样产生移情现象。早产儿或母亲曾患产后抑郁的婴儿大多数会失去这种能力，因为他们在出生早期错过了与妈妈互动的机会。

(高凌云编译自2011年12月5日 [www.sciencemag.org](http://www.sciencemag.org))