

材料设计与现代科学技术发展

Material Design and Development of Modern Science & Technology

吴引江 兰 涛 周 廉

(西北有色金属研究院 西安 710016)

金志浩

(西安交通大学 西安 710049)

材料的使用和发展是人类文明进步的标志,是发展社会生产和提高人们生活必不可少的物质基础。没有材料,就没有先进的产品和现代文明;新型材料的设计和开发已成为推动世界新技术革命的重要因素。

一、材料在现代科技革命中的作用和地位

1. 材料及其开发是社会发展的主要动力

在人类的生产活动中,科学技术的作用主要表现在3个方面:提供新的物质和材料,开发新的能源,发明灵巧的机器。后二者都需要相应的材料作为保证。人类历史上曾出现过石器时代、铜器时代、铁器时代、高分子时代、半导体时代等,这些都是以材料命名的,这足以说明材料在人类文明史上的作用。300年来,人类经历了两次世界范围的产业革命,每次产业革命都离不开新材料的开发。第一次产业革命的突破口是推广应用蒸汽机。瓦特发明了蒸汽机,但只有在开发了铁和铜等新材料以后,这种蒸汽机才得以实用并逐步推广。第二次产业革命一直延续到本世纪中叶,以石油开发和新能源广泛使用为突破口,大力发展了飞机、汽车等其它工业,支持这个时期产业革命的仍然是新材料的开发,如合金钢、铝合金以及各种非金属材料的发展。

当前新材料的作用更加明显。它既是当代高技术的重要组成部分,又是发展高技术的重要支柱和突破口,也是发展现代农业和现代国防的物质基础和先导。没有半导体材料的工业化生产,便不可能有目前的计算机技术和现代信息革命;没有现代的高温、高强度结构材料,便没有今天的宇航工业;没有低损耗的光导纤维,便不会出现光信息的长距离传输,也就没有当前的光通信。人类进入信息时代,正面临着以电子、信息、材料、航空航天、生物工程、海洋开发、石油化工、原子能等工业为主体的一场

更深刻的产业革命。材料既是一个独立的载域,又与几乎所有其它新兴产业密切相关。也就是说,没有相应的材料,任何一项新的技术都难以实现,任何技术开发便成为“无米之炊”,难怪人们把材料作为技术进步的关键,称其为现代工业的骨肉、现代文明的支柱之一。

2. 材料设计和发展的几个主要阶段及其特点

纵观人类历史发展,不同的发展阶段都有其相应的材料作为标志。

第一阶段:天然材料阶段,即石器时代。古代猿人利用木棒、石块和粗略加工的石器作为生产工具,这是人类最早的开发和设计。这类材料完全取自于自然,与现代的材料设计不能相提并论。但就是这种简单的设计、加工才为古猿人发展为现代人创造了条件。

第二阶段:经验性人造材料阶段,即指青铜器时代、铁器时代和钢铁时代。此时人们已经掌握了冶炼和简单的加工技术。这是现代材料的起始发展阶段,初始时基本是凭经验摸索的。

第三阶段:设计性人造材料阶段。“二战”以前,材料的研究几乎只限于金属,50年代开始,随着军事工业的国际竞争加剧,促进了新兴材料的高速发展,而后转入民用,得到了更大的发展。目前正处于一个高速发展的阶段,新的材料不断涌现。这些新型材料具有明显的时代特征:多数是固体物理、固体化学、有机合成、冶金学和陶瓷学等学科的新成就;新材料的发展与新工艺、新技术密切相关;为适应科技发展的要求,更新换代快、式样变化多。

二、材料的设计与合成

1. 科学技术的发展推动着材料设计与合成水平的提高

近代随着科学技术的发展,人们对各种材料的性质有了更多的认识,对材料的加工有了更多更好

的办法。如钢铁材料,在漫长的奴隶社会和封建社会,它像多种铜合金一样是主要的金属合金,但发展并不快,只是在工业革命后,才得到巨大发展。人们在研究金属的物理、化学性质的过程中,掌握了适应经受得起烈性炸药的压力、抗腐蚀等要求的多种合金钢、特种钢的设计和生产技术。多种新方法和新工艺的发现、开发和运用,对人类的生活产生了巨大的影响。如金属铝的运用和生产就是一例,电解法的发明和应用最终使金属铝得到了广泛应用。1906年一位德国冶金学家发现,在铝中加入少量的铜或镁,就可以得到一种坚韧的铝合金。它很快就被应用于某些工业部门,特别是飞机制造业,从而推动了这一产业的巨大发展。

“二战”后,出现了许多新技术和新课题,其所需的材料,在性能上已远远超过了当时有的材料,这就对新材料的设计提出了更高的要求。这一时期物理学、化学及其它基础学科取得了巨大进展,如相对论、统计物理等;各种新颖精密测试手段的出现和运用,也使人们对各种物质的性能有了更深的了解。人们不仅能对材料的宏观性质进行观测,而且已深入到物质内部,知道了物质在分子、质子、离子、电子等各个层次的微观状态;认识了许多先前不能解释的现象,如金属的导电性、超导现象、非平衡状态、内耗等;对材料的研究已从一般经验性的了解、一般物理性能的测试,逐步深入到规律性的掌握、微观本质的探讨。在上述理论认识的基础上,对材料的设计、研制,就由筛选法发展到科学的设计,制备出适合各种苛刻要求的新材料,如人造金刚石。早在18世纪,人们就知道了金刚石和石墨都是由C组成的,但直到20世纪,X射线衍射法的出现才成功地证明了它们具有不同的结构,并且改变其结构是很困难的。直到本世纪50年代,在触媒催化剂的帮助下才真正地实现了石墨向金刚石的转化。进入80年代,运用现代物理和化学手段人们已经能够制作金刚石薄膜。上述材料的发展要是没有原子物理、化学反应动力学等基础理论的发展是根本不可想像的。可见,材料设计是由科学技术水平决定的,但它反过来又对现代科学技术的发展起着推动作用。

2. 现代材料的设计和开发

千百年来,金属材料、无机材料和有机材料都获得了较大的发展,但采用的方法均是配方法或常说的炒菜式筛选法,在不断试验和经过无数次失败后才得到成功的。虽说直至今日,这一古老的方法仍然是材料设计的主要方法,但已远远不能适应现代科技和社会发展的要求。近几十年来,由于原子能技术、空间技术、海洋开发和固体电子技术的发展,对材料提出了更高更严格的要求,迫切地要求逐渐将材料的研究从配方方式向科学设计转移,即

根据预定性能设计新材料,向分子、原子、电子等更深层次的设计发展,以便将材料的各种物理及化学性质与材料的内部结构联系起来进行研究。目前,物理学的发展已使人们完全可以解决低能范围的诸多问题,但是如何利用物理学的基本原理来解决更多的实际问题,仍是目前物理和材料科学界研究工作的一个重要方向。

材料设计就是利用现有的材料、科学知识和实践经验,通过分析和综合,创造出满足特殊要求的新材料的一种活动过程。其目的是改进已有的材料和创造新材料,因此必须充分地考察四大要素(性质、结构与成份、合成与加工、使用性能)以及它们之间的密切关系,必须运用系统的方法来研究材料,寻找设计材料的突破口。现在材料设计已基本上形成了一套特殊的方法,也就是:根据性能要求确定设计目标,有效地利用现有的资源,通过成份、结构、组织、合成和工艺过程的合理设计制造材料,最后通过对材料行为的评价完成整个设计过程。其关键是成份结构、组织的设计,而合成和加工则是保证成份与组织的主要手段,是材料设计开发的一个重要环节。

(1)性质 性质是确定材料功能特性和效用的描述符。如,金刚石的硬度和透明度导致它可用作宝石和多性能的涂层,而其高硬度和导热性则使它有完全不同的应用,可用作刀削工具和传导体。又如,陶瓷有很高熔点,高的强度和化学惰性,这使它可用于先进热力发动机中的火焰筒或保护涂层,而脆性是它的一种不利的性质,限制了它的广泛使用。也正是人们认识了现有材料的这些特性,才促使人们在设计时发挥其优点、抑制其弱点,也才有目前材料设计的发展。

建立材料性质数据库,是材料设计的前提。这就要求根据设计要求,区分材料的特征和制作方法,作成不同的文件。主要有四大文件:原始数据文件、主资料文件、标准数据文件、材料行为数据文件。如合金设计的过程是:根据设计的目标,检索标准数据文件,确定所要开发的合金系列;根据知识库进行推理,进行成份和组织结构的设计;在研究主要数据文件时评价实验数据以及对源数据文件所记载的实验方法或结果进行观察,在此基础上制定实验计划并予以实施;实验结果以实验报告的形式输入到源数据文件及主资料行为数据文件,而材料的评价分析结果则输入到材料行为数据文件中;以上的材料设计实验和评价过程几经反复直到能满足性能要求后,将这些设定的特性经过数据处理记入标准数据文件。这就完成了整个材料设计。

(2)成份、组织结构 它是材料设计的基本出发点,因为成份影响其组织,组织、成份决定材料的性质。材料设计的目的是通过控制其成份、

结构来制造出一种满足特殊性能的材料。每个特定的材料都含有一个从原子和电子尺度到宏观尺度的体系,这就决定了材料设计可以通过不同尺度的控制来实现。80年代以前的各种教科书和发表的许多文章可以证明,早期的材料设计基本上是通过改善材料的成份、组织。随着人们对物质结构的了解和实验测试手段的改善,已经有可能从原子、电子等深层次来指导材料设计。按照发展的过程和研究的深度可分为下列3种方法。

经验法 就是根据大量的实验数据,分析归纳出一些经验公式、判别式和相分析法。目前,使用的大多数材料都是通过这种方法制造出来的。如钢铁设计,就是材料科学工作者经过长期大量的实验确定了不同元素对钢铁性质的影响:提高耐热性,可添加Cr、Mn等元素;避免钢性能恶化,要严格控制S、P等的含量;C含量的增加可提高其强度,但又降低了塑性。又如低碳马氏体型超高强度钢的设计,为了使马氏体这一组织状态获得超高强度水平,必须在合金元素设计上既考虑其强度作用,又要发挥改善韧性的效果,为此通过正交设计和回归分析获得了Si—Mn—Cr—Mo—V系列钢中元素成份和性能之间的回归方程,从而得出新钢种的成份;主要元素的选择也是长期经验的应用,其中C、Si、Mn、Ni是强化元素,Mn、Ni、Mo是韧化元素。

半经验法 如,把物理学的新成就价电子结构理论应用到材料成份设计上,即在量子力学、Pan Ling理论、能带理论的基础上通过对78种元素和上千种化合物实验资料的分析、归纳和总结后提出处理复杂体系的“经验电子理论”,以确定晶体内各类原子的杂化状态,并以此为基础描述晶体。近年来这一方法已得到了重要的运用,如Fe—C奥氏体低C合金超高强度钢已有了很大发展。与此同时,中科院程开甲院士提出的新的“FTD”模型理论,尤其是其中的界面电子密度连续这一条件为材料设计提供了有效的方法。它对纳米材料、薄膜材料、复合材料和超导材料等从电子角度作了独到的解释,为材料设计开辟了一个新的途径。

基本计算法 就是应用现代物理知识(经典物理、量子物理、相对论、统计物理和热力学等)和数学知识,从第一原理出发进行材料设计,如AB算法、嵌入原子法、分子动力学、蒙特卡罗法等等。这些都需要大量的计算,而早些时候人们根本不可能求解,即使一个简单的原子间相互作用势的计算也要花费一个人几十年的时间。现代科学技术的发展,尤其是计算机的发展使得这一问题得到了圆满的解决。计算机模拟设计材料已经成为或将成为材料设计的主要手段,它可以把人们从大量的实验中解脱出来,进行有目的的设计。如沙宪伟等人用分子动力学模拟了NiAl热诱发马氏体的相变过程,

通过模拟系统中径向分布函数及“键连线”原子分子图的变化来研究马氏体的形核和长大过程,证实了不均匀形核的存在。

(3)合成和加工工艺设计 它是建立原子、分子团的新排列,从微观到宏观尺度对结构予以控制,以及高效而有竞争力地制造材料和零件的一个演变过程。这方面近年已取得重大发展,许多新材料的出现往往伴随着合成和加工工艺的突破。如非平衡组织和非晶结构的研究引起了一项新的技术革新——快连凝固技术,包括PREP、雾化法、急冷法、激光表面处理等,用它生产的产品比通常的产品具有更优更特别的性质,已广泛地用于金属直接成型、晶态合金和非晶态合金等方面;SHS工艺充分利用了物质化合热这一特征,形成了一个独立的领域,已成功地合成了上百种新材料;复合材料的发展,促使了CVD、PVD、P/M等许多工艺和方法的发展;随着纳米材料的兴起和研究,凝胶—溶胶法超细粉末的制取方法得到了进一步发展;在陶瓷材料这一领域,过去20年出现了许多重大的新动向,例如稳定化处理的氧化锆,用溶胶—凝胶法制取的陶瓷,新型耐火纤维、陶瓷复合材料,以及高温超导体等。可见,合成和加工是材料设计的一个重要环节,应引起足够的重视。难怪美国国家研究委员会在关于90年代的材料科学与工程如何在材料世纪中拥有竞争力的研究报告中,极力呼吁美国材料界加强材料合成加工这一薄弱环节。

(4)使用性能 设计材料的目的在于应用,故对使用性能的考查和实用性考虑在材料设计中也必不可少。过去,对市场因素和实用性考虑不够,致使许多新材料由于成本过高而得不到广泛应用,这应引起材料设计和研究者的重视。另外材料成份、组织均匀性、非平衡组织的稳定性等对使用性能的影响也是材料设计时必须考虑的。

三、材料设计的发展趋势及反思

1. 发展趋势

(1)对原有的材料进行改进和发展新材料。原有的材料(如钢铁等)在未来社会生活中仍然占有重要的地位,充分利用新工艺、新手段来更新旧材料仍然具有很大的前景。最近,日本已经公开声称在2000年前后要把钢的强度提高1倍,这是一个鼓舞人心的设想,目前已经有了一定的基础。另外,新型产业的兴起需要新的材料作支撑。新材料的设计是目前材料研究的热点,如超导材料、纳米材料、高强高温的轻质材料、复合材料、薄膜材料、陶瓷和高分子材料等等。

(2)环境意识加强,材料设计受应用前景的支配。脱离应用背景的研究将被抛弃,危害人类未来

处境的材料将被限制和被新材料所替代。

(3)材料学与生物学相融合,仿生材料设计将日益受到重视,最基本的研究方向是了解合成物质与生物组织之间的相互作用。

(4)材料设计趋向定量化。随着各学科的相互渗透和电子计算机的发展,计算材料设计已成为可能。微观层次的材料设计是今后材料设计的主要发展方向,计算机的应用将加速这一领域的进程。计算机的功能愈来愈强,已能够进行各种计算来确定某种原子特殊组合和排列的性质。目前各种层次的材料设计的计算机模拟方法得到了广泛的应用,计算机和计算机建模大大缩短了新材料、新工艺和新设计从实验室转移到生产现场所需的时间。

2. 反思

(1)目前,材料的设计仍局限于经验设计,现代科学技术成果未能转化成材料设计的有力工具,许多材料工作者习惯于传统的设计思想,在有意无意地阻碍新思想、新知识的输入。究其原因主要有以下几个方面:首先,新的设计思想是多方面知识的融合,需要从事者有系统的理论知识(包括现代物理、数学、化学、材料科学等)和材料设计经验,各学科之间的结构限制了它的运作;其次,现代材料设计思想是数学、物理、材料科学的综合,理论过于复杂和理想化,在解决实际问题时仍面临着许多困难;其三,现代材料设计趋向于以计算机知识和大型计算机作依托,但目前许多研究单位缺乏必须的物质和技术条件。

(2)现有的理论研究往往与材料设计脱节。物理学已经对微观粒子作了深入的研究,数学也提供了足够的处理问题的计算方法,但应用这些知识处理实际的材料设计问题时仍往往令人不知所措。不可否认,现代物理学和材料科学对物质的性能、组织和组成已经作了很详细的研究,即宏观、微观和介观的研究取得了很大的进展,但对三者之间的关系缺乏系统的研究,我们还找不到一个由微观参数到宏观性能指标的定量的科学的准则来指导材料设计。合金设计虽然已从基本原理的应用中得到很

大好处,但是合金设计研究以及其它类材料的设计研究中,理论的应用在很大程度上仍然处于定性的指导形式。1996年4月在北京召开了一个中俄双方关于材料研究的研讨会,与会者大多数来自物理界,普遍都认识到这个问题;俄国科学家在这一方面的工作引起了人们极大的兴趣。

(3)物理学家和材料学家紧密地结合起来是解决和攻克目前材料设计领域重大问题的关键。这样做,就有可能把物理学取得的重大成就与材料设计联系起来,人们就可以通过控制微观粒子(如原子、电子),按照预先的要求设计和合成材料,当然这一项工作需要计算机应用技术的帮助。目前在原子尺度上,利用扫描隧道显微镜和原子分辨率透射电子显微镜等仪器已经能以一个个原子的分辨率来显示材料的结构。人们已经能够运用等离子技术、分子束技术及其相应的设备在原子层次上控制物质的形核和生长;利用第一原理和统计物理在电子层次上对材料进行设计,如经验电子论和改进的TFD模型。由于计算机的功能愈来愈强,仅仅根据各种组成物的原子数量,就可以预测结构及其随时间变化的过程。

参考文献

- [1]美国国家材料科学与工程委员会著,90年代材料科学与材料工程——在材料时代保持竞争力,1989(英文)
- [2]刘志林编著,合金价电子结构与成份设计,吉林科学技术出版社,1990
- [3]程开甲等,TGF模型和余氏理论在材料设计的应用,自然科学进展,1993,1(3):5
- [4]张纬斌编,合金设计学导论,中南工业大学教材
- [5]王笑天,工程材料的成分、结构设计、工艺革新和性能优化,西安交通大学报,1994,1(28):17
- [6]黄麟维、孟宪传主编,现代科学技术革命与社会,西安交通大学出版社
- [7]师昌绪,新材料的现状与展望(百场院士报告会报告),科技日报,1996.5.2
- [8]郝志功等主编,科技进步与社会发展,经济科学出版社

(责任编辑 王宏章)

(上接第61页)

江水运的自然条件很好,其能力可以相当于10多条铁路线,而现在只相当于1条3000Km长的铁路”;“莱茵河的条件与汉水差不多,而通过能力相当于十几条铁路线”;“长江水运远没有充分利用,就不应在沿江修铁路”、“修铁路,弃水走陆,是不合理运输”;“铁路已经过时,国外在拆铁路,铁路已逐步被公路所取代”,等等。

上述论点曾长期干扰了沿江铁路的修建,使武汉与长江上下游尤其是与上海的经济联系难以紧密起来。目前,上海至武汉的沿江铁路修建已列入

议事日程,但应当进一步认识到该线路建设的重要性,将其作为我国铁路干线建设的重中之重予以加快建设。

小平同志曾经指出我国改革开放的最大失误之一是延误了上海(浦东)的对外开放。从区域经济角度而言,这的确是精辟之论。原因是无论是4个特区还是海南省,其区域效应(对全国其它地区的扩散、带动效能)与上海比较,远不在同一层次上。**笔者认为,就区域效应而言,唯武汉与上海在同一能级上。**

(责任编辑 蔡德诚)