

科技新路

NEW PATHWAYS IN SCIENCE AND TECHNOLOGY

编者按：1985年5月在美国出版的一本题为《科技新路(New Pathways in Science and Technology)》的论文集，汇集了关于美国科学技术21个前沿领域发展概况和远景的调研报告。这些报告是在美国科学、工程和公共政策委员会、美国科学院、美国工程学院和美国医学研究院的指导下，在1982~1984年期间由各自领域的专家小组经广泛调查研究后草拟的。报告不是各领域发展的全面综述，但提出了美国在制定有关科学技术政策时应特殊关注的问题。报告都已提交美国政府各有关机构，包括总统科学技术政策办公室、国家科学基金会及其它机构，作为制定国家科学技术政策的依据。本刊选择其中一部分，陆续予以译载，供有关人员参考。

材 料 科 学

MATERIALS SCIENCE

摘 要

目前是扩大材料科学领域、增加新技术所需材料的时机。新型复合材料、结构陶瓷以及聚合物有可能发展成具有高性能的材料，因为这些材料的强度及抗蚀性得到改善而能耗降低。用新的半导体复合材料、超导复合材料、光学晶体、玻璃及纤维，有可能制造出先进技术所用的具有更良好的电气、磁性以及光学性质的材料。用快冷得到的非平衡材料，采用表面（离子）注入以及其它方法，有可能成为解决美国战略材料问题的技术源泉。固液转变、磁性、超导性、金属-绝缘体转变、声波、电荷密度波以及自旋波之类的合作现象（cooperative phenomena）由于理论上的进展以及新材料的出现可以得到更好的认识。目前对光洁表面的精确描述可以在技术上推广到各种重要的表面并指出生产急需的新型催化材料的方向。目前以宏观概念为基础的断裂科学有发展到以原子的微观领

域为基础并能作定量预测的可能。几乎整个材料科学都有可能集中在微观现象的研究上。用新的工具及思想探索微观现象和进行材料分析的时机业已成熟。仪器是一个必不可少的要素；让更多的学生、专业人员掌握现代化的仪器及合成技术、鼓励新的合成及分析方法的进一步发展，有可能推进本报告中所涉及的几乎全部领域的进步。

总之，材料科学的许多领域为基础科学和技术的进步提供了良好时机。小组认为下面六个方面是最适时、最有发展前途的领域。

1. 扩大采用市售现代化设备的机会；
2. 利用合成及分析技术来发明新材料，这些技术是以已被人们认识但尚未利用的物理知识为基础的；
3. 为毕业生的培训提供更多的支持和更多的现代化设备；
4. 研究含“小”量原子的系统（例如表面、界面以及晶界系统）中的现象和结构；
5. 对贯穿加工技术的基础科学认识的深化；

导 言

材料科学是一个广泛的多学科研究领域, 这个领域将物理、化学、冶金、陶瓷科学的概念、理论认识及实验技巧结合在一起。具有科学及技术价值的新材料已经合成出来, 在这些材料中, 力学、热学、化学、电气、光学、磁性及其它物理性能可通过对缺陷、杂质、成分及结构的作用的认识来进行控制。作为硅片技术积木式元件的无位错硅就是过去这种多学科型的成就之一。在材料科学中的一项重要活动就是探索具有独特的或料想不到的综合性能的新材料。

由于凝结物质理论在处理与真实材料基本上近似的模型系统时愈来愈有效, 以及材料的制备和分析技术愈来愈精密, 凝结物质研究中的理论及实验正在汇合。材料科学正在为新型的工程材料技术奠定基础。要使一种以上的性能达到最佳化往往需要采用相互矛盾的加工工艺方法。因此取得一个可以接受的折衷方案, 取决于对基本现象认识的深度。材料技术的各个领域发展到目前的完善程度是由于政府及工业支持的结果, 但这种支持将愈来愈多地由政府负主要责任, 因为将复杂的新材料的基础技术转为商品, 需要一个长期的试制过程。

在美国, 铬、钴及铂之类的战略材料大多依靠国外进口, 因此迫切要求寻找其代用品。最有前途的并且也许是唯一非政治性的途径就是通过材料科学来寻找这种战略材料的代用品。一般地说, 材料的战略性是因为它具有诸如抗蚀性、高硬度、高强度、抗高温氧化以及催化能力等这样一些独特性能。对某一些用途来说, 可以采用价格更高的代用品, 但在另一些情况下, 对现行材料进行代用会降低产品性能。当然, 在新的高性能材料发展趋势中, 有可能出现成本合适及(或)性能有效的代用品。例如以聚合物为基体的材料、玻璃以及玻璃-陶瓷涂层有希望用作耐蚀的化工材料。表面合金化材料具有高的硬度和抗蚀性。结构陶瓷有耐磨性和高温使用能力。快凝晶体金属有可能出现新的合金系统, 它们有高的固溶度, 有的系列有高的强度、硬度及耐高温性能。可以预计, 会出现预料不到的新材料, 从而出现解决战略材料问题的全新方案。

从以上讨论得知, 对研究的支持不能单纯以产品来定向。材料科学中的一些基础研究为广泛的应用奠定了基础。例如, 关于质点-固体交互作用的研究引起了新的离子注入仪出现, 通过这种仪器可以精确测量出扩散的分布图, 可以制得半导体系统。没有基础研究, 这样的工具及仪器就不会出现, 这种技术也就不存在。新的以及发展中的技术对美国工业实力以及新型职工的出现所作的贡献最大。

本小组拟按以下程序讨论材料科学在哪些方面值得加强科学投资。本文所涉及的各种材料是用于电子、光学、磁性和声学仪器等先进技术的材料以及用于力学、化学或热学仪器的高性能材料。先对这些材料的基本性能加以叙述, 然后讨论深化认识所需的基础科学。基础研究是准确材料分析的需要, 因此最后将对新仪器发展的可能性加以说明。

由于材料科学与许多学科交叉, 不像天文学或质点物理学那样单一, 因此取得研究优先权的舆论总是不太一致。许多研究只在少量研究人员中进行。因此, 为适应新形势的研究工作的变化可能很快, 以致已取得成果的研究领域又不得不很快放弃。

重点是放在大型的全国性研究机构还是小型的以学会为基础的研究单位, 必须进行选择。虽然两者都重要, 但必须不断监控使其保持平衡。为了保持发展并完成大型设施的能力, 甚至要中止或者压缩虽有价值、但在发展新科学方面不再有竞争能力的设施的费用。

目前有四个全国性的同步辐射源设施在运转, 为科学、医学及工业部门的许多不同用户服务。仪器分析上的新的科学进展, 已经取得的或将要取得的技术, 凡接近预定水平的, 均值得在财政上给予资助。

全国性的实验室[布鲁克黑文(Brookhaven)、橡树岭(Oak Ridge)、洛斯阿拉莫斯(Los Alamos)、阿尔贡(Argonne)]以及其它政府实验室中都有中子谱测定及辐射设施。关于怎样确定重点以及利用新成就的问题已由中子散射委员会的评论小组进行了论述。象麻省理工学院的马格勒特(Magnet)实验室、康乃尔(Cornell)大学的亚微观设施、太阳能研究所(The Solar Energy Research Institute)以及其它一些专门实验室的成本效果, 应当与小型的以学会为基础的小组完成的全部研究和技术进行对比。一般来说, 资源最有效的应用是发挥现有实验室的专长而不是建立新的实验室。必须着重考虑用新研制的现代化设备来培训工作人员, 以解决目前工业中优秀材料科学家短缺的问题。

高性能结构材料及特殊用途材料

这些材料由于其内在的特性而具有优良的使用性能, 而内在特性是由组元以及合成方法决定的。

复合材料及结构陶瓷

应用优质复合材料和结构陶瓷, 可以提高能源的效率, 减少对战略材料的依赖性, 有助于提高美国飞机、汽车以及动力涡轮之类的产品在国外的竞争力。

有前途的复合材料是由高模量纤维(例如石墨或碳化硅)和几种类型的基体(聚合物、金属、陶瓷)组成的材料。它们具有较高的强度质量比、高韧性、良好的疲劳性能、高的抗蚀性。这些性能的实现取决

于良好的界面分析和控制,也取决于得到最佳组元分配的工艺学。适用于界面分析的光谱学及纤维-液体悬浮液流变学的成果,有可能成为加工工艺发展的科学基础。

有前途的结构陶瓷包括碳化硅、氮化硅以及有关材料。已取得的具有足够高的强度及韧性的结构陶瓷有可能在1100℃短时使用100小时。如果能得到更强的晶界,则可应用于更长的寿命以及更高的温度。这些优质材料的应用可以提高柴油机及涡轮发动机的能量效率,延长许多磨损率高的机械的使用寿命。由于烧结时需要添加剂,现有陶瓷材料的晶界持久强度及抗氧化性均相当低。改进粉末的生产以及对晶界质量迁移的控制看来是可能的。近代表面分析法以及分析电子显微镜有可能将晶界的设计(包括杂质浓度效应)置于科学基础之上,从而得到持久蠕变以及氧化小的材料的最佳烧结条件。

另一类重要的新型结构陶瓷是以用氧化铝增强的氧化铝为代表的相变初化陶瓷。强度和韧性有显著的提高。这种技术有希望用来强化其它的陶瓷,但关于强化机理的一些基础科学问题尚需解决。目前提出了几种理论模型,需要进行涉及微观结构分析的详细实验,这些看来也是有可能的。

聚合物

在过去五十年中,聚合物的应用每年增加10~15%,是材料中增长速率最快的。聚合物现正用作或考虑用作材料系统中的关键部分(从结构复合材料、眼科透镜到半导体组件及集成电路芯片的制造)。

由于缺少科学知识,可能使未来的发展受到影响,而新的知识则可能对技术有重大推动作用。其中有四个领域特别值得注意:(1)液晶聚合物,(2)高温聚合物,(3)石印聚合物(Litho graphic Polymers)以及(4)聚合物胶接剂。

液晶(刚性链)聚合物具有特殊的、以前不可能得到的综合性能(拉伸强度接近钢而密度小于1.5克/厘米³,较高的导热性和低的热膨胀性)。它的应用范围从增强纤维到整体模塑材料,从承受大载荷的飞机到油耗高的汽车。这种尚未充分探索的聚合物的有效发展,主要取决于对刚性链分子的统计物理学、材料的组织、流变学、再结晶以及松弛行为的进一步认识。

高温聚合物(工作温度超过300℃)为新型保护层和半导体组装等诸领域的发展提供了极好的机会。这些机会的成果取决于在合成、工艺以及分析方面富有想象力的努力。将有机金属催化剂与聚合物基体相结合之类的化学方法还远未得到探索,正如同固化时产生的化学及结构变化以及这些变化对力学、热学和化学性能的影响尚未得到探索一样。

石印聚合物是制造集成电路器件的主要材料。大规模集成化以及生产效率的提高要求具有高灵敏度、

高分辨率、在曝光区及非曝光区之间腐蚀率不同的聚合物。为满足这些要求,须对紫外线、X射线以及电子束辐照和对这些辐照有所需灵敏度的聚合物有更深入的认识。在这方面,优质聚合物对集成电路制造商将产生很大的影响,但是这种材料需要的量小,因此对从事传统聚合物的工业集团诱惑力不大。石印聚合物的未来发展将取决于对各种辐照与聚合物交互作用、对具有所需的综合性能的新聚合物合成和对抗降解的新途径(因新聚合物在适当辐照时会分解和挥发)的基础研究,以及对诸如活性离子腐蚀有关过程的认识。

新的聚合物型胶接剂有可能使制造技术及产品设计产生根本性的变化。同时,过去十年在表面光谱技术以及断裂力学方面的发展有可能对胶接的本质、抗环境因素的灵敏性、接头的断裂力学、粘合剂的作用以及中间材料获得关键性的新认识。对这种物理和化学结构经过剪裁的聚合物进行上述工作会显著地改变现行的技术。这里,关键需要进行认识;因为进行这种认识所用的手段已经存在。

高性能材料在使用中经常要承受高的材料应力。其破断所付出的代价可能是十分高的,甚至是灾难性的。保证安全可靠的运转常常要作很大努力,花很多费用。加深对断裂过程的认识并采用先进的诊断技术,有可能提高可靠性并降低成本。

先进技术用电磁、电子及光学材料

这些材料是力学、控制、计算机及通讯工业的基础。电子学特别是微型电路在过去二十年中进展很快,使信息技术产生了重大的革命。这些进展均以高水平的材料制造技术为基础,由不同薄膜组成的多层复杂微电路结构的制造精确度已达到1微米或1微米以下。下面讨论一些日趋重要的材料技术。

电气及磁性材料

发电、分配及控制行业已对先进的磁性合金及复合绝缘材料有强烈的依赖性。重要的电气新材料包括发电设备用的大面积硅晶体(它在交流电向直流电转换方面以及变频设备中起着日益重要的作用)。发展中的先进材料包括高电场高电流超导复合材料,它可用于制造效率更高的发电机。在核聚变厂中,优质多纤维超导材料是产生磁性密封的关键。高饱和和低损耗的非晶态磁性材料在技术上可望用于变压器及机器。

电子材料

自1948年贝尔实验室对面结型晶体管进行的基础工作开始,在过去三十年中已发展了以材料为基础的新型固态电路技术,使得通讯、计算机、指挥以及控制取得了惊人的进展。这种新技术的第一个高潮是能生产无缺陷、高纯度单晶硅以及制造在微型晶体管电路中有金属氧化物半导体层的微型器件。微型电路的

制造可以代表迄今最先进的材料加工技术。这一事实说明,在该领域中我们还只是抓住了事物的表面,尚未取得大的成就。目前初露头角的新的电子技术可能对美国整个工业(通讯、自动化、指挥及控制)起重大影响。

这些新的技术将不只采用硅而且要采用诸如砷化镓、磷化铟、碲化汞镉以及碳化硅之类的半导体材料。集成电路将与先进传感器相耦合,用以探测整个电磁谱讯号。信号的处理速度将愈来愈高,并牵涉到低温半导体及超导约瑟夫逊结(Josephson-junction)薄层器件。还将采用其它的非电磁法,例如表面声波技术。这些技术需要多种新的电子晶体、新薄膜及多层材料和加工方法(包括光子、相干光子、电子束、X射线等先进加工技术)。具有垂直的磁异向性的磁性薄膜由于其很高的数字存储能力而受到重视。非晶态稀土基材料可能是长期以来寻求的磁光记录介质。

光学材料

与电子革命几乎相当的是光学技术的新纪元,它将成为世界上多数信息传输的主要通道,有可能遍及全国性的广播、电缆及电话讯号、计算机网络以及工厂的控制线路。这种新的通讯手段正在通过三种独立但又联系在一起的材料加以实现:

- 1.低损耗光学纤维。
- 2.激光器,特别是微型固态激光器,
- 3.固体光子探测器及电光元件。

今后二十年,光学材料及电光学器件可望迅速发展,引起过程控制的其它革命性变化。许多新的电光、声光及其交叉耦合材料,例如光学耐损伤的铈酸锂、硒化钇砷等正在出现。在大多数情况下将需要单晶,并且需要先进的制造高纯度、无缺陷单晶(例如遥感用的单晶纤维)的方法。这个领域将大大影响航空电子及国防技术,代表了美国最大的刚露头角的技术发展之一。

在今后十年,掺铈的玻璃以及晶体(石榴石)激光材料的效率可望提高一倍甚至两倍。比提高效率更重要的可能是减小尺寸和重量,这样可以将几千瓦的激光器安装在机器人上用以进行切割、钻孔及焊接。

非平衡材料

远离平衡的材料一般可用防止形成低自由能或基态组织和成分的工艺进行生产。控制动力学的特别有价值的方法是将溶液及蒸气进行快速冷却。通过改变工艺条件可以得到各种不同的非平衡组织,从而使其具有很大科技价值的性能。对在这些工艺中产生的材料转变有可能进行认识并加以控制。快速测定局部温度、反应速率以及包括短寿命中间物质在内的化学物质的质量迁移用的光谱技术,有助于建立工艺控制和工艺修订的科学基础。也存在改进新结构分析技

术的可能。这些新结构包括新的玻璃、扩大的固溶范围、梯度结构、层状结构以及改性的表面。在材料科学中一个新出现的领域就是研究这些新结构和所需性能的关系以及产生这种组织所需的工艺细节。

材料新品种及加工工艺的出现为减少国家对某些战略元素的依赖性指明了道路。例如,快速凝固法可以制出化学成分全新的合金,而用传统工艺是得不到这种成分的。由于这种进展,在铝合金中加入铁及锰就有可能提高其高温强度。这样,选择富有元素来合成高性能材料的机会就大为增加。

激光加热表面处理可显著改进金属的抗磨性及抗蚀性。这样,不锈钢中必须用的抗蚀战略材料铬,就可主要用在产生腐蚀的表面上。通过采用新的表面处理法,有可能制出新的不锈钢,其含铬量只有目前不锈钢所需铬的一小部分。离子注入开辟了新表面合金的制造途径。新表面合金抗开裂,耐腐蚀,耐磨。其它的合金可能还有催化性能。

作为了解半导体深层缺陷的一个重要杂质置换元素氮,是首先在硅中通过离子注入及激光退火产生的,当时其它的方法都失败了。这种技术最近已将透明铁电陶瓷的光敏度提高达十万倍,并在光谱灵敏性方面引起重大变化。这些新材料用作永久性以及电可擦图象存储器。

未来的凝结物质学

非平衡组织为我们从本质上认识凝结物质提供了强有力的检验方法。由于非平衡结构的成分范围加大,使得物理、化学以及某些力学性能的理论可在更大的相关变量范围内进行评价。例如,关于原子结构的有序及无序作用这个重要而又难以捉摸的概念,可以通过对同一化学成分的非晶及晶体材料的研究加以澄清。

固态合作现象

从本质上说,一切固体及液体的属性,无论是用中性原子、带电离子还是用在正离子点阵范围内活动的电子来表示,都是以大量的电子及原子核之间的相互作用为基础的。在这样一种复杂的群体系统中遇到的现象,其范围是很大的。尤其是这种系统具有自发的结合现象,这种现象是孤立的单个原子点阵所不具备的。在这种现象中,最简单的是固体变成原子或离子规则排列的结晶。其它现象还有固相和液相间的热力学转变、磁性、超导性、金属-绝缘体转变、声波、电子波、自旋波。正如下面所说的,某些特别重要的结合现象实际上是在一维及二维材料系统中发生的。因为许多化学及电子学现象作用的位置(例如催化及晶体管作用)是在表面上,在二维系统中发现的合作现象为科学技术的发展展示了令人鼓舞的前景。

要从理论上和实验上研究凝结材料中的合作现象

是有困难的,因此物理学家首先寻求最简单的系统,对于这样的系统可以从原子的基础上进行认识,例如纯一价的金属以及纯的单晶半导体。因为在这种情况下,可以根据单个电子的运动进行有效的近似处理,在这里合作现象不起主导作用。在此之前,要从原子上来认识单晶相的稳定化、磁性、超导性以及其它合作现象是凝结物质物理学力所不及的。

目前,由于强有力的理论及实验方法的发展,情况已大不一样。有序单晶的基态能量,在许多情况下可以根据一些基本原理并考虑到群体相互作用以高的精度加以计算。物质可以放在高压及低温的极限条件下进行研究,在这里,新的热力学状态及转变可以用来校验新的思想。由于重正化分类法(Renormalization Group Method)的引入,二级相变化得到深入的认识。由于自巴丁-库珀-施赖弗(Bardeen-Cooper-Schrieffer)开始以来的一系列理论上的进展,超导性已可以从原子上进行更好的认识,但尚不能用来预测转变温度或解释为什么还不能在试验中发现高于23K的临界温度。目前磁性已可以从引起自旋对中的原子交互作用以及磁性-非磁性之间的转变来更好地认识。两个与磁性紧密相关的合作现象正开始得到很好的认识。第一个是价的波动,由于这种波动,某些化合物中的稀土原子无一固定的价而是在两个电荷状态之间动态地波动;另一个是金属-绝缘体间的转变,在这种转变中,过渡金属氧化物及其它材料有一转变温度,在该温度下,化合物的导电率产生许多个数量级的改变,由导体变成非导体。这两种现象与磁性都有一共同点,即它们都是物质的大块性质因而具有大的宏观效应。虽然它们在材料技术上还未占有牢固的地位,但由于其潜在的用途,值得进一步加以注意。

量子物理学认为,自然界存在的系统只显示一维或二维的行为及许多实际效应,这是因为一个量子力学系统由于零点效应(Zero Point Effect)横向运动受到约束,使系统实际上只有一维或二维足够小的激振。在合作现象方面最令人鼓舞的进展是在低维系统(Reduced Dimensionality System)中的现象。例如二维系统,已发现在半导体的逆温层中有强烈的合作效应。在有磁性存在的情况下,在Si及GaAs上的二维逆温层有完全出乎意料的精确量子化的霍尔效应,结果使基本常量比 e/h 的测定得到改进。在一个由捕集在液氮表面的电子组成的二维系统中,已首次发现了威格纳(Wigner)再结晶,通过这种再结晶,带电子体凝结成为二维的电子晶体。在其它的二维电子系统中(例如单层液晶膜以及掺入过渡族金属的二硫化物层中的原子层)已观察到二维晶体的熔化。

另一个已被部分认识的合作现象是无序固体中电子运动的局部化(localization)。通过这种效应,动能足够低的电子可以捕集在一无序导体的局部区域。这种在一维及二维系统中表现特别显著的效应使欧姆传导偏离理论。这种效应在大规模硅集成电路中当导电

路途缩小至0.1微米以下时有实用意义,特别是如果未来的集成电路在深冷下运转以增加电子活性以及改善热传导时更是这样。

另一类一维的合作现象是在聚乙炔之类的导电聚合物中产生的,在这种聚合物中,电流传导通过电子沿线性分子链或通过分子的线性堆叠产生,例如在四硫富瓦烯-四氰基对醌二乙烷(TTF-TCNQ)有机导体中导电就是这样产生的。这些材料有许多合作现象,例如自旋波、带电波以及所谓的皮尔斯不稳定性(Peierls Instability)。在某些情况下,这些材料产生孤电子(Soliton),由于这种孤电子的形成,耦合的电子-核子系统产生高幅运动,使具有多性能的无交互作用的自由质点带电体扩展。

在合作现象物理学的最前沿有一个问题人们认识甚少,但这种认识在不断增长中,这就是有电荷或质量迁移的远离平衡的系统中,当驱动场增加开始出现紊乱及湍流后,非线性效应是怎样同期地使这种系统产生分流的。这种不稳定性的例子在流体动力学的流体中、化学反应中、相变中及以非线性电子电路中均有存在。

如前所述,合作现象一般在较复杂的材料系统中如高温半导体(A15结构)、磁泡贮存铁磁体(钇铁石榴石及其类似材料)、量子化霍尔效应(人为分层的GaAs)、金属-绝缘体转变(氧化钒)、二维熔化(液晶、单层稀土气体)以及孤电子的形成(聚乙炔),一般有增长趋势或者表现最强烈。研究工作使凝结物质物理学、冶金学、固体化学之间形成了紧密联系并使这些领域汇合成为统一的材料科学。

表面科学

纯净表面的研究是与超真空技术同时迅速发展的一个领域。金属及半导体晶体不同面上的结构可以从理论上及实验上进行非常详细的测定。外层原子至其未松弛的位置(这个位置从内部通过点阵平移确定)的计算位移常常与低能电子衍射观察到的重建表面对称(reconstructed surface symmetry)非常吻合,也与由角分辨的光电光谱及其它表面敏感技术测定的原子位置非常吻合。吸附原子(ad-atoms)的位置以及连结(bonding)也可以用计算机观察。场离子显微镜可以用来观察吸附原子的运动。目前已有可能将研究扩大到更多表面(包括技术上重要的面)以得到更多的关于吸附原子行为的知识,并进而认识表面原子在化学反应中的行为。

表面化学包括诸如催化(化学反应在化学及结构性能高度控制的表面上进行)、腐蚀(由于表面化学反应使材料性能产生不希望有的变化)以及光化学反应(有可能提供合成化学产品的新方法)这样一些领域。

腐蚀率牵涉到的现象对建筑、轮船、核废料的处理以及高温电池诸领域都很重要。表面光谱技术方面取得的最新进展为认识这些现象的化学物理基础以及

找出描述腐蚀现象的详细模型提供了可能性。缓蚀剂的作用可以深入地进行探索以便揭示其热力学及动力学。

胶结领域是另一个以表面为主的现象的例子。制造在恶劣环境中稳定的粘接接头的技能可通过对分界面化学、结构及力学更深入的认识而大大简化。表面光谱技术以及表面化学改性技术的进展为提出新的见解提供了极好机会。

非均质催化是一个以固体材料为基础的领域,这种材料的表面化学使其价值不大的分子易转变为更有价值的分子。非均质催化剂是石油、石油化学及化学工业的核心。正因为这样,它们通常被认为属于化学工程领域,不作为材料科学的一部分。这种情况虽然可以理解,但并没有反映事情的本质。目前有可能将表面分析技术扩大到表面催化反应动力学的研究。

在石油及石油化学领域内,有采用更重(大分子)及更脏(含S、N等)原料的趋向。原油质量在下降。为减少分子数量及S、N的含量,需采用优质催化剂。另外,虽然合成燃料的时代比前几年所预料的更遥远,但只不过推迟十年左右。这个额外喘息时间可以用来改进我们的技术。例如,页岩油的氮浓度比一般石油的高,必须加以排除。目前在寻求可优先排除氮而不是消耗过量氢的催化剂。

最大的、技术上很重要的表面问题之一是与油田疏松岩的内表面有关的问题。油田是由充油的有巨大表面积的疏松岩形成的。当采油时,只有一部分(不到一半)来自岩石,余下的仍留下,被岩石内表面吸收。因此,在已废弃的油田中仍有“油库”,其数量远远超过目前已消耗的油量。

一个未充分利用的能源是边远地区的天然气。需要发展可以将沼气液化的经济方法。目前还没有能直接将沼气变为这种成品的催化剂。如有这种催化剂,这种工艺的经济性将大为改善。

合成气体或CO/H₂将是未来的主要原料来源。它是将煤进行气化后的产品,从它可衍生出许多燃料及石油化学产品。目前还没有能将CO/H₂有选择地变成所需产品的催化剂,必须进行分离并进一步处理。

强度及断裂现象

根据理论,材料的极限强度应是很高的,这在少数无缺陷、结构完整的材料中确实已观察到。对于一些较新的高强度材料,特别是象石墨以及凯夫拉(Kevlar)之类的高模量聚合物来说,很有必要进一步研究其断裂物理学,因为影响这些材料断裂的基本因素及其与工艺参数、环境条件等的关系还不十分清楚。

大多数实用材料常在比较低的应力下就发生断裂,这是由应力集中、缺陷运动和交互作用以及环境等多种因素引起的缺陷的作用,多年来这种作用在概念上已清楚了,在认识单个的位错、裂纹以及空穴的行为上已取得某些进展。后者对高温断裂特别重要。

处理变形及断裂中缺陷系统交互作用的数学方法极其复杂,在很大程度上阻碍了基础理论在实际条件下的应用。由于原子级及连续体的最新研究成果,这种情况正在起变化。在原子级基础上,现代的计算方法已可以处理缺陷交互作用,并把这种模型扩大到大的缺陷集合体上。

最近的一些进展为建立以原子级模型为基础的真实断裂科学提供了可能。裂纹原子结构的二维仿真模型已得到解决,并用来描述与“点阵俘获”(lattice trapping)有关的缓慢断裂。说明近裂纹区连续体的新论点已用于聚合物断裂的实验研究。在另一个前沿,一个详细的化学模型已用来预测什么样的极性分子是硅酸盐潜在的应力腐蚀剂。

目前,将点阵效应、交互作用的缺陷、化学活性分子模型以及应力场中连续机理的处理结合起来以建立基本断裂理论的道路已经打开,这种理论可以用试验定量地验证。在这方面适度的支持就可能取得很大的效果。

合成及加工工艺的科学基础

过去二十年,真空合成方法进展迅速。作为这种技术的例子有蒸发、溅射、化学气相沉积(CVD)及等离子沉积。这些技术中(例如溅射或等离子沉积)的许多基本物理机制尚不甚清楚。对于用途更广的半导体外延生长来说,有两种技术特别有前途,这就是分子束外延法(MBE)及金属-有机化学气相沉积(MO-CVD)。

超高真空(UHV)技术($<133.322 \times 10^{-10}$ 帕)的出现已使分子束外延法成为结构合成的一种方法,合成是通过对每一层的沉积进行控制来实现的。超真空技术广泛用于材料合成时,将能制出高纯度、控制得更好的材料。这个方法已被认为比在失重条件下合成材料(空间合成)更有意义且更有希望。

另一种看来特别有意义的外延生长技术是金属-有机化学气相沉积。它是通过金属-有机分子在热反应器中分解来完成的。对进入反应室的气流进行监控即可以对外延生长进行精确控制。它可以制出质量特别高的半导体材料,尤其是III-IV化合物族半导体。

新过程的发展常常是一种半经验式的活动。这是因为过程的本质复杂,重要的参数也很多,且有时也不甚清楚。典型过程各阶段的科学理论基础常常是不正确的。因此,过程的发展很可能招致失败,成为耗费时间的活动。

在许多加工技术中都贯穿一些基本现象,对这些现象加强认识会有助于加工工艺科学的发展。成核就是一个重要的例子。新相的成核实际上是所有宏微观加工技术中的一个重要侧面。由于对成核深入认识而收到益处的技术有快速凝固、气相沉积、超细粉末(monodisperse powder)的生产以及溶胶-凝胶技

术。另一方面,由于缺乏对垂直于界面以及沿界面的迁移的认识,限制了技术的发展。因此,对于垂直于有异常几何形状及边界条件的界面的质量迁移及热传导的新研究,将有助于技术的发展。尤其应该指出,离子技术就有这样的可行性,也就是说有可能将离子加速器用于材料的分析和材料的合成改性(离子注入)以及中性原子的非弹性散射。

以溶胶-凝胶技术为基础的加工过程有可能用来生产新的玻璃及陶瓷,这种玻璃及陶瓷具有新的微观组织及性能。这个领域的发展取决于对溶胶-凝胶-干燥转变以及凝胶-玻璃-晶体陶瓷转变、形成凝胶所需条件(包括PH效应及阴离子)以及凝胶衍生材料的组织及性能的认识的深化。由凝胶衍生的混合型有机-无机材料也是有前途的,尽管关于它的组织及性能尚了解不够。

超细粉末的生产技术取决于对成核动力学(气相及凝结相)、小颗粒(500~5000埃)长大及聚集动力学、颗粒间交互作用以及与粉化现象有关的认识的深化。

颗粒或致密体的转化取决于对颗粒与连接剂之间的交互作用、干燥现象、烧结动力学(特别是共价键材料的烧结动力学)以及促进烧结或阻止晶粒长大的添加剂作用的认识。陶瓷的注射成形、聚合物基复合材料的浇注(固化时不产生体积变化)是控制尺寸稳定性的独特方法。这个领域的发展取决于对高载悬浮体的流变学、这种悬浮体的注射成形动力学以及固化时聚合物体积变化与化学结构关系的认识的深化。

目前很有必要进行旨在说明聚合物材料的物理及化学结构的基础研究。关于半晶体聚合物的微观结构还存在不同看法(晶片的相邻重入折叠模型或配电板式模型)(adjacent reentry folding versus switch-board models for the lamellar plates)。质量扩散中心的表面蠕动(reptation)及蛇形摆动两者都被认为是液体扩散迁移的主导过程;液晶聚合物的重要结构特征大多尚未分析;热固性聚合物的化学结构特征及其与工艺过程的依赖性基本上尚未探索;半晶体聚合物中作为改性剂的橡胶之类第二相材料的作用尚不明白。这样一些领域中的研究工作将加深我们对材料的认识和增加改进材料性能的能力。

仪 器

采用现代化的仪器几乎是所有材料领域取得进展的必要条件。在新材料的合成-加工-分析-应用整个周期中,新仪器的发展和应用可以将周期缩短并研制出全新的材料。在这个周期中材料科学家的需要已形成新的尖端仪器发展的一种重要动力。下面所讨论的是对材料科学所需仪器发展有重要影响的一些问题,在这些方面可望进一步进行投资以继续加速技术发展。

掌握现代化设备的经验对训练材料科学家是重要的。本小组的五个工业界成员认为有必要在仪器上进行大的投资,满足有资格的博士的需要以及新的科学发现的需要。

分析技术

超高真空技术的发展也促进了表面科学及表面分析的进步。使表面保持干净几个小时,就有可能对该表面进行分析并在上面进行试验。目前正在将超高真空技术扩大到其它分析技术(例如电子显微镜分析)。将俄歇(Auger)及光电光谱分析之类的表面分析工具与超高真空环境中的电子显微镜及能量损失谱结合时有可能得到一种具有高水平的仪器,目前正在几个研究单位加以实现。

许多材料分析技术是以束线光谱为基础的。一束光子或质点打在样品上,将发出的光子或质点的能量、强度、极性及角分布加以分析。凝结物质物理学在束线与物质交互作用方面的认识促使这些技术用作分析工具。在这个物理学与材料科学之间有强烈联系的领域内取得更大的进展是有很多可能性的。

同步辐射源、高功率激光、自由电子激光之类的新电磁源的进一步发展,为材料科学提供了广泛应用的可能性。表面灵敏分析技术的快速发展将因为这些能源的应用而加快。

在这些分析技术中,某些技术的灵敏度已达到很高的程度。例如在有些情况下,微区痕量杂质的测定率达到 $1/10^8$ (亿分之一)。与这样的进展成为鲜明对照的是我们还在寻求轻元素的良好分析工具。表面分析技术已发展到这样的完善程度,已可以将比氮重的元素分析到单层的几分之一。而对于埋在块状材料中的轻元素,百分含量的分析也是很困难的,因此对于绝缘材料及有机材料来说,分析特别麻烦。

全国性设施

上述某些射线的产生需要大型设施,例如中子射线的核反应堆或加速器,同步辐射用的电子储存环以及电子显微镜的高压设施。不断地将这些设施最佳地用于材料科学取决于仪器的不断发展。

同步辐射源可以用于小角散射、结晶学、形貌学、X射线显微镜、电子探针、EXAFS(扩展的X射线吸收精细结构分析仪)、光电发射光谱。随着摆动仪及波动仪的发展,使上述仪器有可能用于研究与时间有关的现象。某些所需仪器的发展是由于材料制造上的进展而获得成功的,例如人工制造的X射线单色仪以及X射线传输光学。

中子源可提供独特的材料研究手段。除磁散射、氘的取代、非弹性散射以及小角度散射外,还有类似的X射线法。由于仪器上的进展,将出现特别重要的新的高能分辨率法,用于聚合物的研究。

很明显,全国性的主要设施必须为广大地区服务。

但是,即使象电子显微镜、核磁共振分光计(NMR)、表面分析以及离子束加速器的成本及操作技巧已达到如此高的程度,需要有一定程度的集中化。国家科学基金会的区域仪器中心是试图解决这些问题的场所,它们定会受到密切的注视以便对这一方法的成败进行评定。与此类似的是材料实验室在所在范围内起着重要作用。

材料制备及分析集成系统

材料合成及材料分析步骤间的最终耦合是将这两个系统组成一个系统,让材料在生长的同时完成材料的分析,例如分子束外延生长就是一例。随着微型计算机控制的设备及分析工具的广泛应用,这种趋向将进一步加强。目前是发展适宜监控过程参数的传感器的机会。

计算机

大容量计算机将是材料理论认识进步的前提。目前已有可能计算给定结构的基态能量并预测某一多元系统的相图,指出这一点是很有意义的。对材料系统及过程进行成功模拟的必要条件是拥有大型计算机。最后的目标将是得到这样一个材料模型,即在它生产之前可精确预测出它的性能。

由于电子革命的结果(部分地由于材料科学的突出进展),每次程序的计算费用显著下降,并发展了以集成电路芯片为基的大容量计算机。采用近代的“定做”设计及制造工具,甚至有可能制造为专门计算而设计的特种芯片“专用”计算机,其费用均在合理范围内。目前是迅速吸收这种用于材料科学的技术的极好机会。

微处理器形式的计算机在材料数据处理以及制造过程控制上将起愈来愈重要的作用。计算机网络的迅速增长可以对大型设施上的试验进行遥控。这种网络在传播情报以及在强有力的信息数据库系统的建立上将起重要作用。使用现代电子仪器及计算机训练材料科学家是一个挑战性任务。

危险材料的分析

虽然在本报告中关于危险材料的科学问题未讨论,对于它的分析有必要谈一谈。随着分析工具日益灵敏,安全水平已有下降趋势。

随着传感器技术的发展,再加上微处理器及数据自动传输装置,现在已有可能对潜在的危险环境进行周密的监控,并且能够采取避免事故及灾难性事件的措施。目前很有必要对在危险情况下,例如对超速干道上的化学溢出物进行材料的快速分析及评价。

现代化仪器

仪器的发展需要物理现象的应用、现代测量技术

的应用以及材料科学家的需要之间的密切结合方能成功。目前有可能形成促进这种结合的环境,因此等待仪器的出售常常误失良机。这种结合在工业研究实验室里常常自然产生,但在美国大学里,程度上差得多。

仪器成本

随着先进仪器的发展以及高的通货膨胀率,仪器的成本急剧增加。这就带来了严重问题,尤其在大学里是这样。解决这个问题的一种办法是以地区或学校为基地采用集中的设施。然而今日材料科学的进展要求对每一个科学家所需的仪器做出预算。

结 语

以上我们从技术上讨论了材料科学发展的各种可能性,其中包括可以预见到的新材料及其加工工艺,以及构成材料科学的基础科学和工程科学的各种挑战。

有些课题是具有普遍意义的。例如对于表面、界面以及晶界,有可能认识得更深入,从而可以对合成进行更好的控制,可以获得优异的材料。这又会影响到与战略材料、结构、动力及运输工业有关的加工工艺的发展。同时促使用更新的、快速的、便宜的微型器件来处理数据及用于通讯工业。因为许多可以预见到的进步取决于仪器及其有关技术的改进。

作为材料科学的基础科学中的一些思想及模型的探索能促进人才的成长,为培训工业所需的大学生提出极好的以大学为基地的研究课题,有时也会促使全新事物的出现。

(陈石卿译,刘先曙校)

科研生产的桥梁

技术交易的市场

请从速订阅1986年《技术市场报》

《技术市场报》创刊于1981年。是我国第一张宣传技术成果商品化,提倡技术有偿转让,推广科技成果,交流新技术信息的全国性报纸。《技术市场报》辟有“技术商店”、“技术难题招标”、“技术服务”、“国外专刊”、“新技术信息”、“技术引进”、“技术市场信息速报”等栏目,经与中国专利局商定,定期刊登中国专利公报中三种专利的公开、审定和批准的题录。这里有大量先进而适用的新技术供工矿企业采用;通过报纸您可找到能人贤士,帮您解决生产中的技术难题。最近,国家科委、国家经委、国防科工委发出关于把《技术市场报》办成全国性报纸为全国技术市场服务的通知,要求各类工矿企业、科研单位、大专院校广泛订阅。

《技术市场报》为周报,代号5—8,对开四版,每份八分,每月三角伍分。每逢周二出版,全国各地邮局皆可订阅。

《技术市场报》地址:天津市和平区南京路云峰楼十一层

电话:399847 399451

电挂:2435