

中国科学院第二批开放研究实验室介绍(二)

北京分子动态及稳态结构开放研究实验室*

(Beijing laboratory for structural chemistry of
unstable and stable species)

一、隶属单位: 中国科学院化学研究所、北京大学化学系

二、研究方向及主要研究内容

研究方向是: 活泼中间体的动态结构研究; 晶体与络合物分子的稳态结构研究与理论计算; 分散体系的表面结构化学。

主要研究内容包括:

1. 活泼中间体的动态结构研究

(1) 发展研究气相、液相、固相及多相反应过程活泼中间体的新实验方法。逐步建成闪光光解、微波放电分解等与磁共振、质谱、红外、拉曼、紫外可见及荧光光谱、电化学等技术相结合的新实验方法, 以期能检出寿命在 $1-10^{-6}$, $10^{-6}-10^{-9}$, $10^{-9}-10^{-12}$ 秒等不同时间范围的活泼中间体, 及测定其结构和性能。

(2) 活泼中间体的理论研究

深入开展活泼中间体的结构及其与能量传递、电荷转移、反应性、稳定性的关系的研究, 五年内归纳出活泼中间体的结构与其反应性、稳定性的规律; 找出气相、液相、固相及多相界面活泼中间体结构、反应性间的差异, 为人们从微观上深入了解基元反应, 有效地控制和选择反应途径, 逐步实现分子设计的宏愿提供科学依据。

(3) 电子及核动态极化过程活泼中间体的研究

与磁共振相结合, 弄清微环境效应对化学诱导动态核极化中活泼中间体的影响, 以期由此发展出富集和分离同位素的新方法。

(4) 光化学过程活泼中间体的研究

结合信息科学, 开展银盐、非银盐信息材料光物理、光化学过程活泼中间体的结构性能研究, 指导其灵敏度、分辨率、稳定性的提高和发展新的信息材料。

结合高分子材料, 开展高聚物降解及聚合过程活泼中间体的研究, 为有效控制聚合反应、合成预定性能的高聚物及防止其降解提供数据。

研究非均相电子转移过程中的活泼中间体, 为提高能量转化效率, 控制光电化学合成的立体选择性等, 提供科学依据。

深入研究有机光化学过程中与能量传递、电子转移有关的活泼中间体结构, 发展光化学理

* 为国家重点实验室。

论并开拓其各种应用。

逐步开展模拟生物体内光化学过程中活泼中间体的研究,为光合作用的深入研究积累科学数据。

2. 晶体与络合物分子的稳态结构研究与理论计算

(1) d区金属有机物、簇合物的合成与晶体结构化学研究

各类d区元素化合物的合成与结构工作,是化学学科中最活跃领域之一。其影响所及除合成化学与结构化学外还对金属有机化学、生物无机、催化理论等学科的交叉领域有推动作用。本课题选择我国丰产元素如钼、钒等,为开发丰产元素资源储备理论基础。

(2) 酶抑制剂-酶复合物空间结构的研究

在前一阶段取得的绿豆胰蛋白酶抑制剂-胰蛋白酶复合物研究的基础上,进一步研究丝氨酸蛋白酶抑制剂及小分子抑制剂与胰蛋白酶的复合物的立体结构,总结这些抑制剂的结构特点,以及它与胰蛋白酶复合物的相互作用特征。同时开展降血压用药激肽释放酶,抗衰老药过氧化物歧化酶,抗血栓药尿激酶以及胰蛋白酶与它们的复合物的立体结构研究,为这些酶的蛋白质工程设计新的合成路线并设计及获得疗效更好的酶分子。

(3) 结构数据的精密测定、加工利用及分子设计探索

用分子力学方法检索晶体结构数据库数据来计算分子几何形状与能量和物理化学性质关系,并对关键性化合物采用低温衍射技术作精密结构测定。关于检索晶体结构数据库及分子力学计算国内目前还研究较少,近期的具体对象是中枢神经系统药物和抗癌药物以及多肽构象研究及活性酰胺合成多肽反应机理,以期在这些领域里达到分子设计水平。

(4) 稀土化合物的谱学研究和量子化学计算

对重要类型的稀土化合物进行谱学研究和量子化学计算,弄清其电子构型与成键情况,并与其性能紧密联系,为寻找有特定功能的稀土化合物以及分离萃取稀土化合物提供理论基础。

3. 分散体系的表面结构化学

表面科学是目前国际上最活跃的领域之一。结合我们过去所提出的“氧化物和盐类在载体表面有自发分散倾向”的规律,发展实验方法,深入研究单层分散相的微观结构、生成机理,并根据这些机理制成某些有用的吸附剂推广到工业上应用。

三、发展本学科研究的科学意义及应用前景

活泼中间体在信息科学、能源科学、生命科学、环境科学、材料科学等领域占有重要地位,是涉及多学科的边缘和前沿课题。

显然,如能确定某过程的活泼中间体,即可获得决定反应进行与否、进行快慢的电子效应、结构效应、微环境效应等的信息,从而可达到控制反应按预定方向、预定速度、分子按预定方式断裂的目的。发展新的科学实验方法,对活泼中间体的结构与性能进行深入系统研究,会引伸出一些新概念,总结出规律,则不仅有助于解决具体课题,而且能把活泼中间体的基础研究及应用基础研究推进到一个崭新高度。

所以活泼中间体的研究,一直是国际上经久不衰、极为活跃的前沿和边缘科学课题。分子动态光谱学的各种谱学方法(光学光谱及射频波谱等)是研究活泼中间体的有力武器;同时在研究活泼中间体的过程中,分子动态光谱学也得到了发展、丰富和完善。

动态结构的基础是稳态结构,近年来,由于计算机、电子学、激光、核技术和超高真空等技术的发展,使物质的微观结构测定技术大为改观。除了出现X光扩展吸收精细结构(EXAFS)、穆斯堡尔谱和一批表面结构及瞬态结构测定技术外,稳态结构测定的速度和精度大大提高,研究的领域大大扩展,过去需要几个月,甚至数年才能测定的一个晶体结构或分子结构,现在利用四圆衍射仪或各种谱学手段,用计算机收集和处理数据,只要几天甚至几小时就能解决问题,对蛋白质和核酸等生物大分子的结构测定的周期也大大缩短。结构测定的条件已从常温、常压发展到低温、高压或超高真空等特殊环境。过去根本无法测定的表面结构,现在在超高真空条件下利用低能电子衍射、光电子能谱、俄歇电子能谱、高分辨电子能量损失谱、离子散射谱、二次离子质谱和电子隧道显微镜、表面扩展能量损失精细结构等技术,已获得大量固体表面结构的资料,以表面结构测定为核心的表面科学已成为目前国际上最活跃的科学前沿领域之一。非晶态和无定形结构的研究,也因扩展X光吸收精细结构谱等新技术的出现而有所突破。过去很难研究的短寿命、低浓度活泼中间体这类动态结构的研究如前所述已成为国际上很活跃的前沿领域。

四、目前国内外的研究状况,本实验室的水平和特色

1. 国内外的研究状况

20世纪物理学在理论和实践方面的成就,为研究分子的动态结构提供了一系列新的手段。近20年来,电子计算机、激光、高能物理实验方法等的广泛应用使信息探测、记录和数据处理更加快速、灵敏、精确。因此,对分子动态结构的测定及其与性能间关系的研究,已达到自动、多通道、快速、高灵敏、高精度、高分辨的新水平。如脉冲辐射分解、脉冲闪光分解,微波放电分解等的不断进展,在时间分辨上达到 10^{-6} — 10^{-12} 秒的数量级;而且各种方法的相互结合或联用,派生出很多新的实验方法(如闪光光解与时间分辨质谱、快扫描电子自旋共振谱、核磁共振谱及电化学方法的联用、时间分辨光声光谱、光学检测磁共振、磷光微波双共振、化学诱导动态核极化、化学诱导动态电子极化、电子-核双共振、电子-电子双共振等等),使人们能检出很多以前未能发现的短寿命、低浓度的活泼中间体(自由基、激发态、正负离子、水合电子等)及追踪它们的变化过程。

微观结构的研究范围已从较简单的小分子结构扩展到复杂的生物大分子结构,从常规条件下的结构扩展到特殊条件下的结构,从体相结构扩展到表面结构,从稳态结构扩展到动态结构。研究方法不断改进,新的研究手段层出不穷,大大增加了人们认识物质微观结构的能力,物质结构的理论因此也得到大大丰富和发展。现在已经可以在某些情况下和一定程度上做到根据要求的性能,对材料进行原子分子水平的设计,然后进行合成以满足人们的需要。

2. 本实验室目前的水平、特色

化学所自1956年建立以来,就确定以物理化学为主要研究领域之一,迄今已形成了一定特色。

建立了能综合应用近代物理化学方法和理论探讨物质结构及其变化过程的研究体系。

对国际上极为活跃的活泼中间体结构和性能的研究领域,化学所已有较坚实的研究工作基础。首先,对作为活泼中间体的结构、性能研究的基础之一的物质静态结构和性能研究,做了大量工作。其次,对作为活泼中间体结构、性能研究的动力学方法,化学所曾开展过很多工

作。第三,近年来,又发展了研究中间体结构与性能的新实验方法(发光光解-自旋捕捉技术-色谱-电子自旋共振,电解-自旋捕捉技术-电子自旋共振……等方法),并做了大量、系统的工作。迄今为止,发表论文约 400 篇,其中 40 篇在国际会议上报告过,并有 13 项获国家级或院级奖。通过以上研究工作,化学所已形成一支层次合理、水平较高的科研队伍。他们是徐广智、朱起鹤、傅亨、陈尚贤、黄寿龄、严继民、吴国桢、邱联雄等研究员,还有副研究员 11 人,助研 45 人。

化学所相继建立了一般荧光、磷光光谱、毫微秒荧光光谱、毫秒至微秒的闪光光解谱及分子动力谱、激光诱导荧光光谱、激光拉曼光谱、傅氏变换红外光谱、傅氏变换核磁共振谱、高分辨质谱、X-光四圆衍射、电子自旋共振谱、光电子能谱、环伏安、激光交叉分子束装置。发展了化学诱导动态核激化、光解-自旋捕捉技术色谱-电子自旋共振谱相结合的方法,形成了能研究物质稳态结构和性能,以及寿命从 10^{-6} 秒、 10^{-6} 秒到 10^{-9} 秒的活泼中间体的结构和性能的配套手段。

北京大学的结构化学研究是颇有基础的。早在 50 年代唐有祺教授和徐光宪教授率先在北大传播结构化学知识。1955 年在唐有祺教授主持下在国内第一个建立了晶体化学实验室,培养了大批研究生和进修教师。1963 年物质结构实验基地已初具规模,国家科委又下达任务由北大主持测定胰岛素晶体结构。“文革”中物质结构实验基地遭到很大破坏,但北大教员仍坚持参加胰岛素晶体结构测定,完成了 2.5Å 分辨率胰岛素晶体结构测定任务。1978 年北大恢复了结构化学研究室,在科委、教委支持下,先后建立了晶体化学实验室(包括生物大分子结构测定),表面结构实验室和稀土化合物谱学实验室。至今为止发表的论文约 300 篇,其中近 30 篇在国际会议上作过报告或在国外杂志上发表。并有 12 项工作被评上国家级或部级奖。

目前共有教师 39 位。其中教授 7 人,他们是唐有祺、徐光宪、桂琳琳、邵美成、谢有畅、黎乐民、吴瑾光等。副教授 8 人(其中获博士学位 3 人),讲师 14 人,助教 3 人,工程师 2 人,助理工程师 3 人,还有在职博士生 2 人。每年平均招收硕士、博士生 10 人以上,累计在校研究生为 30 人左右。在唐有祺教授和徐光宪教授指导下,北大在结构化学方面已形成了一支老、中、青三结合,结构比较合理,基础雄厚有较高学术水平的研究和教学梯队。

3. 同国内外的合作交流情况

一些老一辈科学家,如吴征铠、刘有成、蒋丽金、卢嘉锡、唐敖庆等学部委员,都表示积极支持这个实验室的建立,并愿给予指导,而且有的已在指导的工作。

一些中年专家,也将来此实验室工作。有的已进行合作并取得成果,如清华大学宋心琦教授,北京化工学院师树简教授和王作新副教授,农业大学沈其丰教授,南开大学谢庆南、孙家缤副教授,兰州大学杨弟伦,吉林大学袁祖文教授,重庆大学黄宗卿教授,复旦大学高滋教授等等。

化学所和北大化学系先后派出了几十名有 15—20 年工作经验的同志,去国外有关实验室学习用分子动态光谱研究活泼中间体以及学习晶体结构、生物大分子结构、表面结构和量子化学计算等。有的已学成归国,有的即将回国。目前还有 20 人在国外进修或攻读博士学位,他们也是此实验室的中坚力量。

在国际合作交流方面,已与英、美、日本、澳大利亚、民主德国等的一些大学和研究所建立关系。如与澳大利亚几所大学分别在激光分解、激光喇曼、紫外光电子能谱、电子自旋共振和光

学检测磁共振、闪光光解与电子自旋共振联用等方面开展合作研究,共同发展研究活泼中间体的新实验方法,共同培养研究生,交换访问学者等。还与澳方科学家商定于 1990 年在北京召开关于活泼中间体研究的中澳双边学术报告会,并由实验室主办。并与日本分子科学研究所分子动态及量子化学方面签订了 3 年合作研究协议,与大阪大学蛋白质研究所签订了为期 5 年的学术交流协议等。

五、实验室规模

1. 研究人员总数 50 人。其中绝大多数均为流动研究人员。
2. 技术人员总数 20 人。其中技术人员 18 人,管理兼技术人员 2 人。

六、实验室主任、学术委员会主任 唐有祺

七、地址: 化学所,北京中关村
北京大学化学系,北京

模式识别开放研究实验室*

(laboratory of Pattern Recognition)

一、隶属单位: 中国科学院自动化研究所

二、研究方向及主要研究内容

实验室的研究方向是:

1. 模式识别、人工智能及计算机图形学的一体化(或集成)研究,以期在模式识别的理论及基础方法研究中有所突破。
2. 适用于模式识别的高速、高并行度的专用计算机体系结构与并行算法研究,以期使模式识别技术在大多数需要高速、实时处理的实际应用中有突破。

主要研究内容

1. 模式识别、人工智能及计算机图形学的基础理论与基础方法。
 - (1) 人与其它生命体的视觉、听觉、思维模型及心理试验;
 - (2) 统计与结构方法相结合的模式识别方法;
 - (3) 模式识别中的模糊数学方法;
 - (4) 模式知识表达、知识获取及推理机制;
 - (5) 模式识别、人工智能及计算机图形学中的并行计算方法,由高级语言向平行计算机体系结构的智能化变换方法。
2. 计算机视觉。

* 为国家重点实验室。

- (1) 为各种智能机器人配置能识别与理解三维景物的高级视觉系统;
- (2) 为微电子工业提供 VLSI 解剖分析系统;
- (3) 为军事工业提供能识别活动目标的高级末制导系统;
- (4) 为生物医学领域提供新的分析方法。例如, X 光、超声、核磁共振的断层分析与三维重建技术;数字减影血管造影系统;微循环的显维图象分析方法等。

3. 建立在多处理机并行结构的语音、文字文本、自然语言理解基础上的智能化人机接口。

三、发展本学科研究的科学意义及应用前景

模式识别是信息与自动化科学的重要分支,主要研究对各种光、电、声信号(如图象、语言、文字等)的处理、识别、分类与理解。

当前,我们正面临一场世界范围的新技术革命,生命科学、信息与自动化技术以及新材料、新能源的开发与利用,将是推动这场技术革命的重要支柱。模式识别理论与技术的研究与开发,或者本身就是上述科技领域的重要研究分支,或者能对上述科技领域的突破提供强大的技术手段。

在生命科学方面,由于模式识别研究对图象、语音、文字等模式信息的处理、识别与理解,因此对于研究人体及其它生物的视觉、听觉及脑的思维机制有重大科学意义。生物在细胞、分子水平上的信息传递与识别机制,例如细胞膜与生物膜中的物质传递与识别,神经元之间的信息传输,染色体遗传基因中的模式信息存储与分类方式等,这些都是与模式识别密切相关,并将对生命科学的发展与突破有重要影响。

在信息科学方面,模式识别技术的应用正在使传统的、唯一的计算机输入输出方式——键盘方式,变为灵活的多种模式智能输入输出方式。语音、图象、图形等输入输出方式是新一代智能计算机必不可少的组成部分,它将改变计算机与人、计算机与自然界的交互方式,从根本上提高计算机的智能水平。

在自动化领域,尤其是制造业的自动化技术正在进行一场重大革命。传统的以生产过程自动线为标志的自动化,由于计算机与工业机器人的大量使用正在朝智能化方向迈进,其根本目的在于极大地提高生产的柔性以适应小批量、多品种的自动化生产,从而大大提高工厂的应变能力、市场竞争能力与劳动生产率。在柔性制造系统或者更高级的计算机集成制造系统中,模式识别技术成为重要的关键技术,它将用于:

1. 为保证产品质量的各种在线检测装置;
2. 为保证加工精度的各种在线补偿装置;
3. 为实现设计智能化的智能计算机辅助设计与辅助制造系统(如自动阅读理解各种工业图纸);
4. 智能机器人的视觉系统;
5. 现代化生产管理系统中对市场、销售、经营情况的各种模式信息的预测、分类、理解。

在新材料、新能源的研究开发方面,模式识别技术也正在发挥越来越大的作用。利用模式识别技术对工艺参数进行快速处理与分类,可以指导新的复合材料与金属材料的试制;利用对显微图象信息的识别与理解技术,可以对材料的性能与细微缺陷进行检测与分析。在新的能源基地的发现、勘探、开发中,利用模式识别技术对遥感图象、航空物探图象、石油测井曲线进

行识别与理解也正在取得越来越重要的进展。工业机器人要用于如核电站、水下石油开发等危险、复杂的环境,也必须利用模式识别技术以提高其在听觉、触觉、视觉方面的智能水平。

除了上述对当代新技术革命有重大决定性作用的科学领域外,模式识别技术还成为如地质、气象、空间科学、微电子技术、医疗诊断、军事侦察等重要领域的关键技术。因此,对模式识别理论与技术的研究具有重大科学意义与应用前景。

四、目前国内外的研究状况,本实验室的水平和特色

1. 国外研究概况

由于模式识别理论与技术的研究具有重大的科学意义与广泛的应用前景,世界各国都将有关模式识别的研究列为高技术发展计划中的主要内容。

日本制定的 PIPS 计划(模式信息处理系统,1970—1980)、KIPS 计划(知识信息处理系统,1980—1990)、新一代计算机十年规划(1982—1991)等都属于信息领域的高技术计划,其目标就是为了“使日本能自如地在处理语音、图形、图象和文字的信息系统”方面跃居世界领先地位。在新一代计算机十年计划中列出了 10 项与模式识别有关的研究课题,其中包括图象图形理解系统、语音理解系统、机器翻译系统等。

日本通产省还组织了几家大公司和大学进行对原子能工厂维修、海洋开发和救灾等类型的智能机器人研究,而目前从工业机器人到智能机器人进化的关键,均在于机器视觉(美国的统计表明,目前智能机器人研究经费的 50% 用于机器视觉)。

美国国防高级研究计划署(DARPA)的“战略计算与生产能力”计划,里根政府的“战略防御计划(SDI)”中,都将模式识别、人工智能列为重大研究课题。例如 DARPA 计划中的具有高级视觉的对地导弹系统,关于具有视觉导引的自主式机器人等,都要求计算机具有快速实时的模式信息处理能力。

英国的 ALVEY 计划(1982 年提出)将智能化人机接口列为四大研究方向之一。

欧洲经济共同体的“ESPRIT”(1983—1993)计划将人机接口、智能机器人列为主攻课题。

2. 国内研究概况

在国内,开展有关模式识别的理论与应用研究工作,虽然只有十多年时间,但进展还是很快的;形成了一支不小的研究队伍,取得了一批可喜的研究成果,召开了五次全国模式识别与机器智能学术会议,1986 年 6 月在西安举行的全国第五届模式识别及机器智能学术会议,有近百个单位 300 余人参加,共宣读论文 200 余篇。

中国科学院是国内最早开展模式识别研究的单位之一。从 1969 年起,先后在北京自动化所和沈阳自动化所建立了模式识别研究室。北京自动化所研制成功了信函自动分检文字识别机,具有高精度飞点扫描输入和彩色图象显示的小型模式识别与图象处理系统;沈阳自动化所取得了印刷体汉字识别 2500 字的成果;北京和沈阳自动化所都在集成电路引线键合自动化上成功地运用了模式识别技术;生物物理所与清华大学自动化系合作,在生物医学图象识别方面进行了癌细胞识别的研究;北京自动化所完成了白血球分类方法与软件包的研究;声学所、北京自动化所、清华大学等单位在语音处理、识别与合成方面都取得了重要进展。

最近,北京自动化所研制成功了集成电路智能解剖分析系统,并开始实际使用,系统具有 3 微米分辨能力,并取得了解剖一次投片成功的成果。

北京自动化所还在 1986 年研制成功图象信息末制导跟踪装置,具有实时动态图象目标跟踪能力。这项工作的完成为研究高级末制导自动寻的技术及实时序列图象处理系统提供了模式识别、系统结构,快速算法等方面的研究基础。

清华大学,北京大学,哈尔滨工业大学,上海交通大学与西安交通大学等院校,在此领域也作了许多很好的工作,取得了不少重要成果。

当前,国家高技术计划正在开始实施,其中的信息领域与自动化领域都将模式识别人工智能的研究列为重要研究方向。在国家的“七五”科技攻关计划中,模式识别与机器智能的研究也占有重要的位置。

3. 与国内外的合作与交流情况

实验室将坚定不移地贯彻开放、合作的精神,正在创造条件以吸引国内外同行来实验室共同工作,开展学术交流,以争取做出第一流工作。

在科学院内部,已与声学所、电子所、计算所、生物物理所、合肥智能所等有关实验室组成“认知科学与智能系统研究中心”,将共同承担国家高技术研究计划的重大课题,并组成学术委员会,以促进学术交流。

实验室已与北京大学的“视觉、听觉信息中心”,清华大学的“智能技术与系统实验室”两个国家开放实验室共同组成智能研究中心,建立了执行委员会,研究中心将协调各个国家实验室的工作,开展学术交流,共同培养研究生等。与中国科大图象研究室、合肥智能所、北京大学与清华大学等地的青年科技工作者商定,定期举行科学讨论会,以期发现与培养青年科技人员,为学术研究带来不断创新的勃勃生气。

实验室还与哈工大机器人研究中心、上海交大机器人研究所建立了在机器视觉方面合作研究的意向性协议。

实验室与法国各主要有关实验室建立了良好的交流关系,法国在信息与自动化方面的牵头所—法国国立信息与自动化研究室已无偿地定期向实验室提供全部技术与研究报告。

实验室还与美国的 Maryland 大学计算机视觉实验室、威斯康兴大学的机器人研究中心、联邦德国的数据与信息处理研究所等著名实验室有人员交往与学术交流。

五、近期研究重点

实验室近期研究重点是机器视觉。

机器视觉是机器人与计算机智能化的最关键技术,人对外界信息的感受有 70% 来自视觉。

首先,视觉系统本身是一种智能系统。在工业自动化,尤其是当前制造业的智能自动化中,来自计算机辅助设计的大量关于工件与工具的信息,以知识的形式进入视觉系统的知识库中;特定环境的三维视觉信息进入视觉系统,经模式识别与图象处理的办法进行低层次特征与抽取;利用人工智能的技术,对低层次特征与高层次知识描述,进行自上而下或自下而上的匹配与理解。以上三个过程将模式识别、人工智能、计算机图形有机地结合在一个智能系统中,成为当前机器视觉最主要的方法论与发展趋势。

第二,机器视觉在大多数场合要求实时性,因此,研究以上三个过程的并行处理机制是研究与应用工作突破的关键。

实验室近期将以机器视觉为核心,在模式识别、人工智能及计算机图形学一体化研究与并行计算机体系结构上力争走在世界前列,并带动其它有关技术与研究内容的发展。

六、实验室规模

1. 研究人员总数 80 人左右。其中固定研究人员 20 人,客座研究人员 60 人(包括聘请国外客座 5—10 人)。

2. 技术服务人员 26 人。其中技术人员 24 人,管理人员 2 人。

七、实验室主任 马颂德,学术委员会主任 常 迥

八、地址 北京中关村

磁学开放研究实验室 (Magnetics Laboratory)

一、隶属单位: 中国科学院物理研究所

二、研究方向及主要研究内容

实验室的研究方向是磁学和磁性材料的基础研究和应用基础研究。主要研究内容如下:

1. 磁性理论: 巡游磁性理论、局域磁性理论及统一的磁性理论的研究,无序系统磁性、低维磁性、微磁学、表面和界面磁性理论、磁晶各向异性理论和特殊磁性的研究。

2. 信息存贮材料的结构与磁性: 高密度快速磁盘、磁带、磁头,实用磁记录材料的研究及金属和新型磁记录材料的探索,多元磁光薄膜的磁性及其在光盘和磁光器件中的应用。

3. 稀土金属化合物的结构与磁性: 稀土永磁材料性能的改进和第四代稀土永磁材料的探索,稀土化合物变价特性的研究,重费米子研究。

4. 快速凝固材料的结构和磁性: 非晶态合金的磁性、输运性质及稳定性研究,非晶态结构、原子组态和电子态的研究。准晶体和超微晶材料的磁性、稳定性及与结构关系的研究。

5. 晶态和非晶态磁性薄膜和人工超晶格材料的结构和磁性、电性的研究。

6. 其它磁性材料的应用基础研究: 软磁铁氧体、永磁铁氧体、微波铁氧体、磁致伸缩材料、金属软磁材料和永磁材料、磁敏感元件等。

三、发展本学科研究的科学意义和应用前景

磁学和磁性材料的研究是一个既古老又不断焕发青春活力的研究课题。目前,磁性材料已渗透各个领域,大到托克马克、加速器、通讯卫星等,小到所有电机、电器及收音机、电视机等民用产品,无一不关连着磁学的发展,无不随着磁性材料的发展而更新换代。硅钢片的生产和改进对电力工业和电子工业起着重要的推动作用。铁氧体的出现促进了电子工业、计算机技

术及微波通讯的巨大发展。稀土磁体的出现大大促进了电子设备的小型化,并为微型马达、微波技术、核磁成象等技术革新提供了切实可行的材料。而磁记录材料已成为计算机技术及信息技术的最重要支柱,磁芯、磁鼓、磁盘、磁带的每一点进步都导致信息技术的新发展。近年来,非晶态磁性材料及钕铁硼永磁体的出现又一次震撼了世界物理学界。因此,磁性材料的研究具有广阔的应用前景。

在研究磁性材料时,必须重视内禀磁性的研究,而这种研究大大促进了磁学本身的发展,具有很重要的学术意义。譬如每一种新材料都与各元素的磁矩大小有关,与磁结构有关,除通常的铁磁、反铁磁结构外,铁氧体的出现促进了亚铁磁结构的研究,稀土磁体的出现促进了螺旋磁结构的研究,非晶态磁性材料的出现又促进了散铁磁、散反铁磁结构的研究。至于铁族过渡元素为什么会具有铁磁性,各元素的磁矩值是怎么决定的等等非常基本的问题,一直是科学家努力探索的问题,然而至今未得到完满的解决,因为它涉及到原子结构和电子态,物质的磁结构和电子结构等方面的复杂问题,如今人类对自然界研究手段有了极大的改善,是进一步解开这类奥秘的时候了,因此各国都在加强磁学的基础研究。

四、目前国内外研究状况,本实验室的水平和特色

1. 国内外研究状况和发展趋势

(1) 磁信息存贮材料的研究

磁记录材料是应用面广、量大的功能材料。它不仅广泛用于广播、电视、科研,更是计算机产业不可缺少的部分。每年磁记录介质的世界产值超过大规模集成片的产值,年增长率高达30%。以计算机外存中的硬磁盘为例,自1956年美国IBM公司研制成功以来,记录密度每两年增加约1倍,存贮每位信息的价格每5年约下降3倍。目前记录密度已达 10^7 位/英寸²,约为1956年的 10^4 倍。最大存贮容量为IBM 3380和日立公司的H-8576,分别为800MB和1260MB。

硬磁盘仍在朝提高密度、速度和容量方向发展。从现实的观点看,磁盘仍是最切实可行的存贮器,因此欧洲“尤里卡”计划中仍把研制大型磁盘作为首先发展的磁信息存贮器。进一步改进可采取的主要途径是:用薄膜代替涂层;提高材料的分散性和矫顽力;混乱取向;采用垂直磁记录及薄膜磁头等。

从更长远的观点看,磁光存贮是可能的方向之一,它具有存贮密度高、容量大、非接触记录等优点,存贮位密度比高级磁记录的位密度约高一个数量级。磁光盘目前还处于试验阶段。有人预言,它可能取代微型和超微型温氏磁盘,将在磁记录介质的世界产值中占~20%。

到目前为止,已对多晶MnBi系,单晶、多晶石榴石及尖晶石氧化物,非晶RE-TM合金薄膜磁光记录材料作过研究。目前磁光存贮器主要存在两方面的缺点:(1)信噪比较低,只有50dB左右;(2)数据传输速度较慢,样机的传输速度为IBM 3380磁盘数据速度的1/5。

为了进一步改善信噪比,最好的办法是增大信号量,这就要提高材料的克尔偏转角 θ_k ,或发现 θ_k 大的材料。目前大量的工作是在RE-TM二元非晶膜内添加几种组元或采用多层膜结构来增加 θ_k 及耐氧化、孔蚀能力。

我国较早就开始磁记录材料的磁性研究,国内若干高校及研究单位都作出不少高水平的

研究成果,并已推广生产,获得院级、部级或省级的成果奖。对于磁光存贮材料,也有单位作了长时期的探索。但总的讲,与国际水平仍有相当的差距,需要我们组织力量,深入工作。

(2) 稀土永磁材料的磁性研究

永磁材料在现代科学技术、工业和国防、民用等方面都有广泛的应用。60年代开展对稀土合金磁性的研究。先后研制出 SmCo_5 、 $\text{Sm}(\text{Co}, \text{Cu}, \text{Fe}, \text{Zr})_{7.8}$ 及 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 三代稀土永磁材料,磁能积从过去的几个兆高奥,逐步发展到二十多、三十多、四十多乃至五十多兆高奥,对电子技术、雷达技术、音响技术、微型马达、加速器、核磁成像技术的进步起了巨大的促进作用。因此世界各国都极重视对稀土永磁材料的研究,可以说世界有四大研究中心:美国、日本、欧洲共同体及中国。由于我国是稀土的资源大国,稀土储量占世界的80%以上,因此我国在这方面的研究对世界有举足轻重的作用,受到全世界的关注。

从材料的指标角度讲,我国已达到了国际先进水平,但从实际对比看,无论研究人员的数量和水平、研究领域的深度和广度,还有生产的品种和数量,设备、工艺的现代化程度,都和国外相差甚远,因此要参与国际竞争还是困难的。特别是目前许多国家正探索更新的永磁材料,没有足够的基础研究积累,足够广的知识面和足够的深度,就更难在世界上有立足之地了。因此,我国必须加强这方面的基础和应用基础研究,同时注意加强同国外的合作,努力争取对我国永磁材料的发展作出重大的贡献。

(3) 快速冷凝材料的磁性研究

自古以来,人类就掌握了淬火技术,现代的冶金工业中,淬火也是重要的工序之一,然而这类淬火的冷却速度并不高,均在 $10^3\text{C}^\circ/\text{秒}$ 以下,由于冷却速率达到 $10^5\sim 10^6\text{C}^\circ/\text{秒}$ 的高速冷凝技术的发展,大大促进了材料科学、冶金学的发展,也促进了其它学科的发展。首先是15年前出现的非晶态金属,主要是非晶态磁性材料,对磁学和磁性理论的发展都产生了较大的影响,因为原子结构的无序性导致所有内禀物性都发生涨落,因而原有的理论都不能完全适用,甚至完全不适用。譬如散磁性磁结构不可能存在于晶态磁性材料中,而反铁磁性磁结构又不可能存在于非晶态材料中,这类材料中就必然有许多课题有待科学家们去解决。从应用的角度看,非晶态软磁材料具有极好的软磁性,同时又具有良好的机械性能及抗腐蚀、抗辐射性能,既可以作为高饱和磁化强度、低损耗的变压器铁芯材料,又可作成高磁导率材料,应用面很广,在节约能源和促进电子技术的发展方面将发挥相当可观的作用。

我国对非晶态磁性的基础研究及应用研究都取得了很大的成绩,并已取得可喜的经济效益,但距非晶态磁性材料应该在国民经济中发挥的作用来讲,相差还甚远,比美、日两国的研究深度和广度差距也很大,在应用基础研究方面还有不少问题需要探索。

随着非晶态材料的发现和发展,以及通过快速冷凝技术而发现了许多亚稳态微晶新相及准晶体, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 这种新一代永磁体的出现,实际上也与快速冷凝技术紧密相连,而另一些微晶新相也各具有很特殊的物性,大大丰富了材料科学的内容,而一种不可思议的大颗粒不具有平移对称性的准晶体的出现更使物理学界、化学界震惊。目前各国科学家都以极大的兴趣研究着这种材料,虽然完全是基础研究,但难以预料是否会对材料园地又增添另一类新的材料系列。我国在准晶体研究方面一直居世界前列,随着研究的深入,准晶体的磁性研究必然会提到议事日程,我们必须不失时机地抓紧这一研究。

(4) 超晶格薄膜的磁性研究

用反应溅射或蒸发方法将两种或两种以上元素交替地按一定周期排列淀积而成的多层膜,称为磁性人工超晶格薄膜。由于可以人为地改变不同种类原子层的厚度和周期,以制备合成大块材料时不能形成的磁性薄膜,就为研究磁性的一些基本问题,如铁磁性的本质、交换作用、各向异性、表面和界面磁性、磁性和结构的关系等开辟了新的途径。此外,随着对这种薄膜的深入研究,还为人工合成新磁性材料开创了新的前景。因此,近几年来国外开展磁性人工超晶格薄膜的研制工作迅速增多。然而由于国际上也是新兴领域,国内还处于酝酿阶段,因此研究论文还不多,但已经得到了若干很有兴趣的结果。譬如非晶态超晶格在适当厚度时可得到垂直膜面各向异性,具有应用前景。稀土-过渡族超晶格中改变超晶格周期能改变膜的结构,发现新的结构,氧化物超晶格中出现不对称磁滞回线,并获得分散度很好的超细颗粒,常态的亚铁磁体在超晶格中成了反铁磁体等等,可见对磁性超晶格有许多基础问题值得研究和探索,并一定能发现新的结构、材料和现象,也会研究出相应的应用领域。

(5) 物质基本磁性的研究

随着磁性材料日新月异的发展,物质磁性本身的研究也越来越深入。基本磁性研究的成果不仅深化了人们对物质本质的了解,而且促进新材料的探索和提高原有材料的性能。原子磁矩之间的直接交换相互作用,通过氧原子的超交换相互作用,通过传导电子的 RKKY 相互作用; S-d、S-f 相互作用等,是一些最基本的相互作用。局域磁性、巡游电子磁性以及物质中电子相关现象和电子态都是了解磁性起源的一些最基本问题。原子磁矩在磁性物质中的排列和分布,即磁结构问题,对于深入了解磁性材料性能是很重要的。目前已经发现多种磁结构类型,如顺磁性、铁磁性、反铁磁性、亚铁磁性、散铁磁性、散反铁磁性、散亚铁磁性以及螺旋磁结构等。由于物质晶场的作用或其它作用引起自旋磁矩有一个择优取向,产生材料的各种磁向异性,它的强弱和择优方向不同都对实用材料产生很大影响。一些特殊的磁性现象,如 Invar 效应、Kondo 效应、自旋玻璃、低维磁性、重费米子系统、稀土中间价化合物磁性等,也是目前基础研究的重要问题。

2. 实验室目前特色、水平与研究情况

实验室在建所开始就建立。30 年来,不仅在基础研究方面取得一定成绩,而且在我国磁性材料的研制和生产中也发挥过一定的开拓作用。从过去的双取向硅钢、铁氧体、宽温快速矩磁磁芯、微波铁氧体,磁膜,到近期的磁泡、非晶态材料、磁光材料、钕铁硼永磁材料,可以说都在国内发挥了开拓作用。多次获得国家 and 科学院的各项奖励,单 1986 年就获得科学院的一等、二等、三等奖各一项。在这过程中还陆续派出 39 人次出国学习或工作,从事不同方面的课题研究,取得了一定的成果。

实验室最早开展了非晶态磁光膜的研究和最早着手非晶态快速冷凝合金的研究,也最早研制出 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 永磁体和磁性超晶格材料,许多方面都已达到或接近国际水平。

从 60 年代开始就着手有计划地加强了实验室建设。目前,研究队伍的素质和实验室的装备水平在国内是先进的。已拥有一支配套的科研骨干。

3. 同国内外的合作与交流情况

与国内同行有着广泛的合作,包括合作研究、共同培养研究生等方式。合作单位有北京大学、南京大学、兰州大学、云南大学、武汉大学、科技大学、北京师范学院、山东大学、钢铁学院、冶金所、金属所、电子所等。

还与国外同行有着广泛的合作和联系,其中包括美、法、英、日、罗马尼亚、意大利、保加利亚、苏联、奥地利、荷兰、瑞典等。

五、近期研究重点

1. 高密度快速磁盘、磁带实用磁记录材料的研究及金属和新型磁记录材料的探索;多元磁光薄膜的磁性及其在光盘和磁光器件中的应用。

2. 稀土金属合金和化合物的结构与磁性的研究,稀土永磁材料性能的改进和第四代稀土永磁材料的探索。

3. 快速冷凝材料的新相的研究,非晶态合金磁性和输运性质及稳定性的研究,准晶体和超微晶材料的磁性研究。

4. 晶态、非晶态磁性人工超晶格材料的研究。

5. 基础磁性研究,微磁学理论,表面和异面磁性理论,稀土中间价化合物的磁性和输运性质,稀土化合物中交换作用理论和磁晶各向异性理论的研究。

6. 经学术委员会批准的其他磁性材料的基础研究和应用基础研究。

六、实验室规模

1. 研究人员总数 21—26 人。其中固定研究人员 6 人,流动客座研究人员 15—20 人。

2. 技术服务人员总数 10 人。其中技术人员 8 人,管理人员 2 人。

七、实验室主任 詹文山 学术委员会主任 章 琮

八、地址 北京中关村