

2. 基础研究是很难预料新的突破点的, 因此稳定和加强全国基础研究队伍应和重点支持并重。面上的、低强度资助的基础研究科研经费仍应维持, 基础研究中鼓励竞争的方法不应是强迫“断奶找奶”, 而是加强交流、考核, 制订一些强制性的人员流动办法, 始终保持基础研究队伍的精干。

为稳定信息科学基础研究队伍, 必须改善人员的生活待遇, 使之和从事开发、经营的信息技术人员的收入大体持平。

3. 促进信息科学基础研究向信息技术转化。

高技术发展项目中拨出一定比例的经费重点支持一些有关的基础研究, 这是促进转化的一种手段。

在已有的一些信息科学技术研究所基础上, 发展成包含基础研究、应用研究、产品开发经营的, 相互有机联系的整体。以实现信息科学基础研究向信息技术转化, 并由产品开发支持基础研究的良性循环。

## 材 料 科 学

### 材料科学调研组\*

#### 一、地位与作用

材料是人类文明的物质基础, 历史上曾以材料来划分时代, 这表明材料的变化会直接影响社会的巨大变革。在当代, 材料是技术进步的关键之一。早在 70 年代, 就有人把“能源、信息和材料”称为现代文明的三大支柱。近年来, 又把“信息技术、生物技术和新型材料”作为“新的产业革命”的重要标志。材料的发展, 包括老材料的改造和新材料的发现, 必须依靠材料科学提供科学的依据和理论的指导。材料科学就是为适应材料的发展和社会对材料的日益增长的需要, 而于近 20 多年来发展起来的一门应用科学, 它是多学科相互交叉和彼此渗透的结果。美国的材料科学与工程调查委员会曾有过这样的定义: “材料科学与工程是关于材料的成份、结构、工艺与它们的性能和使用之间相互关系的知识开发和应用的科学。”材料科学是知识的开发, 而材料工程则是知识的应用。

材料科学的出现, 大大推动了材料的发展和进步, 它是人类在长期实践中认识材料的规律并进行研究和发展, 再反馈到材料的生产这一过程的科学总结; 它使人类逐渐摆脱了单纯依靠经验来研制和改进材料的局面, 更有目的地探索新材料、逐步实现“材料设计”的理想。材料科学把人类关于分子、原子和电子行为的基础性知识与器件、构件、机器和产品的性能、质量联系了起来, 它是发展新型材料和改进及合理使用现有材料的基础、它贯穿在从材料的研究发展到使用的整个过程中, 因为任何传统材料的改造和新材料的开拓, 都需要深刻了解材料的制造加工、成份和结构与它们的性能和功能之间的关系。只有深刻了解半导体材料的结构与性能的

\* 调研组成员: 刘翔声 王中光 刘家浚 朱逢吾 楼翰一 程兆年 陈人鹏 张维纲

关系。才可能有固态电子工业的出现、半导体材料的工业化生产及今日计算技术的蓬勃发展;只有深入了解合成材料生物相容性的物理和化学过程,才可能给假肢工业带来巨大效益和影响;氧化锆中相变过程的研究为陶瓷增韧开辟了途径;而光通讯的实现,正是光导纤维结构与光传输性能的深入研究结果。

一种改进的材料或一种新的材料的采用,有时对于产品的成功和社会价值是决定性的。如由于材料科学的研究成果,开发出一特殊种类的磷,才使彩色电视成为可能。材料科学的发展将改变材料的格局和体系,除了传统的材料以外,许多具有优异性能的新型材料,如有机合成材料、无机非金属材料、半导体材料和复合材料将占有越来越重要的地位。材料科学在改变能源供应的格局和体系方面将做出贡献。例如它将为获得价廉、长寿命、光电转换效率高的材料找到途径,最终可能使太阳能直接成为人类取之不尽,用之不竭的主要能源。在控制环境污染和改善环境条件方面,材料科学也在许多方面起着领先的作用,例如找到较清洁的材料加工方法,有效地利用废物,使材料进入再循环等等。

大量事实证明,一个国家的材料发展、生产和使用的水平,很大程度上取决于这个国家的材料科学水平。

## 二、国内外现状和发展趋势

### (一) 国外现状和学科发展趋势

近 20 多年来,国际上材料科学的发展十分迅速,研究领域不断扩大,研究内容不断深入。结构材料向着高强度、高韧性、耐高温、耐腐蚀和多功能的方向发展;具有光、电、声、磁、力等效应的功能材料,在材料科学研究中占有愈来愈大的比重;薄膜、纤维、超微粒子、微晶、非晶、准晶和复合材料的出现大大丰富了材料科学的研究内容;材料的表面和界面的结构与性质的研究非常活跃;对于材料在制备和加工过程中的科学问题的研究,发展出许多新技术和新工艺。对于材料在使用过程中失效和损毁机理的研究,特别是对于断裂、老化、腐蚀和磨损的研究,为合理地发展和使用材料、为产品可靠性分析和寿命估算提供了越来越可靠的依据和理论的指导。由于航天技术的发展,微重力和外层空间条件下的材料制备和材料结构与性能关系的研究,已成为材料科学的一个崭新的内容。众所周知的高温超导体的出现,已掀起了世界范围的超导体研究热潮。所有这些,都向材料科学提出了更高的要求 and 严重的挑战。美国的材料科学界已在谈论“材料科学 II”,它的内容就是通过有意识地堆垛和组合原子分子或原子集团,获得所需性能的新材料。“原子级加工”新技术就是这方面的例子,它可以把不同物质的原子层按照一定规格排列起来,创造出自然界没有的新材料。

由于计算机的发展,数据库和人工智能技术已开始材料科学中得到应用,人们已经用来合理地选择成份和工艺,控制材料结构,以得到预想的性能。一个典型的例子就是借助电子计算机设计镍基高温合金的工作。它通过模拟数十万种镍基合金的成份和结构,从中筛选二十种左右的合金,再通过实验选出最佳合金成份。

尽管材料科学今天已发展到很高水平,但它还远不是一门成熟的学科,还没有建立可以准确预测材料性能的理论,仍处在不断的发展之中,有着广泛的研究前沿。

### (二) 国内现状

从 50 年代开始,我国在材料科学的一些主要领域里开展了工作,取得了一批有水平的成果。最近 10 年,又开辟了许多材料科学的新研究领域。一些高等学校相继建立起材料科学与工程系,各产业部门都把与其有关的材料的发展和材料科学的研究摆在重要的位置上。1986 年 11 月,全国 19 个学会联合举办了我国第一届材料研讨会,总结了我国材料科学研究的成就和发展以及所存在的问题。我国从事材料科学研究的科技人员的数目尚缺乏确切的统计,仅中国科学院就有 20 余个研究所、2500 多名科技人员从事材料的研究,其中约百分之十从事材料研究中的基础性工作。在“材料科学与工程”方面,全国每年培养本科毕业生几千人,硕士生几百人,博士生几十人。根据来自国家自然科学基金委员会的资料,我国 1986 年在材料科学方面的基金申请项目为 844 项,金额为 6323 万元,获准 155 项,金额为 507 万元(三年)。1987 年申请 986 项,金额为 5157 万元,获准 340 项,金额为 598 万元(三年)。材料科学重大项目已获准六项,五年内经费为 870 万元。这些项目基本上覆盖了我国材料科学研究的主要领域和学科前沿。近些年来,我国从事材料科学研究的科技人员活跃在国际学术舞台上,与国外同行建立了广泛的联系,每年都有同材料科学有关的国际会议在我国举行。

30 多年来,我国在材料科学方面做出了很大的成绩。起到了支持和推动我国材料生产和使用的作用。例如:研究包头和攀枝花矿的冶金物理化学过程,对制定冶炼流程提出了指导性的意见;金属学和金属物理的研究为金属材料工业的发展提供了理论储备;高分子分子量的测定和高分子物理的研究,有力地促进了我国高分子工业的发展;晶体生长过程的研究,推动了我国人工晶体产业的建立和发展等等。在材料科学的某些领域,我国已进入了国际先进行列。个别研究成果取得了国际领先的地位。我国与国外几乎同时发现了五次对称准晶,首先发现了八次对称准晶,冲破了几百年来建立起来的晶体学规律;在熔渣和液体合金的热力学理论以及熔液理论方面取得了国际水平的成果;关于晶粒间界和位错亚结构的内耗研究,澄清了国际上关于晶粒间界内耗峰起源的争论;在材料强度与断裂,特别在环境断裂机制的研究方面已进入学科前沿;在晶体生长方面,在第一块“中国牌”非线性光学晶体偏硼酸钡(BBO)问世后,又研制出三硼酸锂(LBO)晶体。使我国在新型非线性光学材料的研究领域继续保持国际领先地位;在高温超导体的研究方面。我国也取得了国际一流水平的成果。尽管如此,我国材料科学的研究水平,总体上与国外先进国家还有相当的差距。存在的主要问题是:

(1) 在理论上或实验上,很少具有开创性的或在某一领域里系统的、自成体系的和居于主导地位的工作。

(2) 对材料的研究,只重视材料生产,对材料科学重视不够,两者没有紧密结合起来,使我国材料的发展长期处于以“炒菜”方式为主的阶段。重复多、效率低、周期长、浪费大、创新少,对量大面广的材料的科研工作没有给予应有的重视,致使这些材料不但数量不能满足需要,质量也不稳定。

(3) 新材料是一种知识密集和技术密集的产业。它们多数是固体物理、固体化学、有机化学、冶金学、陶瓷学等学科的成就的体现。新型材料的发展必须重视与其有关的基础研究,才能有所发现,有所创新。但是我国新材料的发展,比较重视其生产和使用中的问题,对某些具有重大意义的学科前沿的工作重视不够。

(4) 最近十年我国从国外引进大量的技术和设备,由于其中的材料问题未能实现国产化,



致使这些技术和设备不能充分发挥作用,甚至停产。通过材料科学的基础研究,大部分引进技术和设备中的材料是完全可以替代和实现国产化的,但是我们还没有在这方面做出适当的和合理的安排。

(5) 富有元素没有得到充分研究。我国稀土元素储量占世界之首,但是我们对其材料科学问题,诸如它在材料中的作用机理、稀土化合物的性能与结构、稀土相图等,都缺乏系统的、深入的研究。近十年来,国际上永磁材料,高温超导材料和光存储材料的突破,都是应用稀土的结果,而我国作为稀土大国,却没有能够首先开发先进水平的含稀土元素的新型材料,原因之一就是没有对稀土进行系统的基础研究,缺乏理论的储备。

(6) 材料科学研究队伍不稳定。最近几年,由于材料研究中的基础性工作得不到足够的经费保证,以及比较强调基础性研究工作中的学科前沿性和国际水平,其结果是,基础性研究缺乏吸引力。特别是我国大量存在的传统材料中的科学问题,无人或少人问津。即使有人想在这些方面开展工作,也很难得到支持。据调查,一些产业部门的研究院(所),已经很少有人从事材料科学方面的研究。

(7) 材料科学是一门实验科学,它的发展很大程度上依赖于高精度、高灵敏度和多功能的现代化仪器的采用。但由于投资强度太低,大多数材料科学研究单位无力进行实验设备的更新或自制改造。

### 三、材料科学的前沿领域和战略重点

如果说材料是一个日益相互关联的、统一的领域,那么材料科学则是一个日益交叉和渗透的学科。它涉及材料的合成(热力学、动力学、有机及无机反应和相变等)、结构(电子、原子、微观及宏观)、性能(光、电、热、磁、化学和力学等)、制备(单晶、多晶、非晶、薄膜和复合等)和应用(选择与保护、老化、腐蚀和损毁分析等)。它的主要任务是利用基础科学的成就和近代技术的发展,通过实验研究和理论分析,阐明材料的制备、结构、性能及应用之间的关系,探索通过改变材料的结构,以获得所需性能的途径。最终达到正确地使用现有材料、改造传统材料和发展新材料的目的。

#### 1. 材料制备和生产过程的物理和化学问题

材料的生产工艺十分复杂,涉及众多物质和复杂过程。研究这些过程的物理化学原理,查明其规律,有助于新材料的研制和现有材料的改进。也有助于我国富产元素和复杂矿的利用开发。材料制备和生产过程中的关键科学问题有:(1)冶金溶体和溶液的结构和热力学;(2)材料制备和生产过程中的热力学和动力学;(3)高分子材料聚合、复合机理,超细粉末制备和烧结过程的机制;(4)毫微米复合中的科学问题;(5)超临界条件下材料合成的机制;(6)我国富产资源和复杂矿综合利用的物理化学。

#### 2. 材料的性能与结构关系

材料是通过它所具有的种类繁多的性能服务于人类的,而材料的性能取决于它的内部结构。材料科学的重要任务就是阐明材料的组成、结构、形态与性能之间的关系。因为弄清其中规律之后,就可以进一步挖掘已有材料的潜力,为创造新材料找到途径,在这方面活跃的学科前沿是:(1)相变机理及其在材料中的应用,包括聚合物材料加工过程、马氏体相变、过饱和固

溶体的分解、非晶态固体的相分离和铁电压电陶瓷的外场诱导相变；(2) 微量元素及缺陷对半导体、玻璃和金属间化合物性能的影响；(3) 稀土元素在材料中的分布规律及其作用机理；(4) 非晶、准晶和微晶材料的形成、结构和稳定性及其对性能的影响；(5) 纳米结构及其性能，包括纳米多晶陶瓷和多晶金属以及非晶态固体中的纳米级的有序区；(6) 高温超导体的结构与超导电性的关系；

### 3. 材料设计的理论和方法

“材料设计”的提出始于 50 年代中期，其目的是预报预期性能的新材料和预报材料制备的工艺途径。“材料设计”学科正处在草创时期。近年来，由于计算机技术的应用，由于材料科学家、化学家、物理学家和计算机科学家从不同角度的介入，“材料设计”已日益显示其在预言新材料方面的生命力。

一般认为，材料设计系统应包括材料数据库、材料知识库和决策专家系统。我国关于材料设计的工作应当包括：(1) 建立有关各种材料性能、结构及它们之间关系的数据库和知识库；(2) 开展不同微观层次的材料设计，建立计算机辅助材料设计系统，对材料结构与性能进行预测；(3) 采用理论物理和理论化学的概念和方法，通过超级计算机计算，探索演绎法进行材料设计的可能途径。

### 4. 材料的表面和界面

材料的表面和界面，历来是人们重视的课题，但只是在近 20 年来表面和界面才真正形成为一门独立的学科，并取得了引人瞩目的成就。这是因为集成电路、微波器件、太阳能材料、敏感元件、陶瓷材料、微晶材料、特种涂层和薄膜等一系列新技术、新材料、新工艺、新器件的发展，提出了大量的表面和界面问题。另一方面，现代实验技术的进展，又使得在原子尺度上研究表面和界面成为可能。表面和界面研究的进展，大大推动了新材料的发展和老材料的改造。使表面和界面的研究成为目前材料科学中一个极其活跃的前沿领域，在材料科学范围内，需要着重研究的表面和界面问题有：(1) 表面和界面的基础原理，包括表面热力学、表面原子结构、表面电子结构、吸附与偏析、界面物质迁移、界面电磁特性、成核与生长、界面化学作用等；(2) 表面优化技术和薄膜技术的基础性研究。例如离子、原子、电子、分子、离子或原子团束、电磁波、等离子体与材料表面的交互作用及其对材料性能的影响等；(3) 晶界和晶界工程，包括晶界的结构和晶界杂质的偏析及其对性能的影响、晶粒尺寸效应和晶界的湿润等；(4) 界面性能和特征，包括薄膜与基体界面、两相物质界面；(5) 材料的超晶格结构及其性能。

### 5. 材料在使用中的损毁过程和机理

材料在使用过程中最常见的失效或破坏方式是断裂、腐蚀和磨损三大类。它们遍及国民经济、国防建设和人民生活的各个部分，常常导致巨大的物质损失和灾难性事故。据美国 1982 年统计，断裂造成的直接损失是 1190 亿美元，腐蚀是 1260 亿美元，磨损是 1190 亿美元。三项加起来，损失了美国当年国民经济总产值的 10% 以上。因此世界各工业国家，无不对材料的这三大破坏方式的机理进行广泛而深入的研究。其研究成果不但对发展新材料和挖掘老材料的潜力起指导作用，也是材料的合理使用、寿命估算和失效分析的基础。

材料在载荷作用下的断裂，特别是在变动载荷作用下的疲劳断裂，是材料最严重的损毁形式，危害最大。目前主要的研究领域有：(1) 形变特征与裂纹形成机制；(2) 裂纹尖端的力学和物理状态、裂纹尖端的形变和相变及其对裂纹扩展的影响；(3) 裂纹的形态、尺度和分布与裂

纹扩展行为的关系,如短裂纹、表面裂纹和多裂纹的行为等;(4)表面和界面(晶界和相界)对断裂的影响,例如晶界结构和杂质偏聚与断裂的关系、各种层次的复相和复合材料中的界面反应与断裂的关系;(5)环境和介质对断裂的影响,包括高温下的疲劳与蠕变的交互作用、氢致断裂和低温下的脆断等。

腐蚀科学是研究材料在环境因素作用下的破坏机制和防护原理的学科,我国需要着重加强的方面是:(1)腐蚀电化学的研究,如金属,特别是微晶、非晶等新型材料的钝性和钝化膜的破坏机理;阴极保护,牺牲阳极和缓蚀剂等腐蚀控制的机理;(2)高温腐蚀的研究,如高温腐蚀过程热力学和动力学、氧化膜形成、破坏及自愈修复的微观过程。抗高温腐蚀涂层的防护原理及稀土元素在抗高温腐蚀中的作用机理;(3)力学因素作用下的腐蚀,如应力腐蚀和腐蚀疲劳;(4)耐蚀合金理论的研究,如合金元素及组织结构对抗腐蚀的作用机制;(5)表面和界面在腐蚀中的作用,如应用近代表面分析技术,在纳米范围内研究腐蚀过程的本质;(6)我国的特定的自然环境(大气、土壤和海水)对各类材料腐蚀的基本数据的积累和分析,全国腐蚀图的编制和数据库的建立。

我国关于材料磨损的基础性研究还刚刚起步,今后应着重开展:(1)材料磨损机理的研究,包括完善和发展现有磨损机制模型。研究磨损表面层微观结构的动态变化和磨屑形成过程;(2)材料耐磨性与组织结构及各种力学性能之间的关系;(3)耐磨表面技术的研究,包括各种表面涂层的摩擦磨损特性、磨损机理及其影响因素,非晶态及微晶表面层的耐磨性;(4)材料磨损的在线监控,包括铁谱分析、摩擦温度测量和同位素分析等。

随着科学技术,特别是高技术的发展。将要求有越来越多的材料能够在超高真空、超高温、超低温、重载、高速、失重和辐照等极端条件下进行工作,材料在极端条件下的退化、老化和损毁过程与机制有其特殊性,也是当前的活跃的研究领域。

#### 6. 材料的无损检测、评价和断裂失效分析

无损检测是材料内部缺陷的非破坏检查,它是评价材料质量和产品可靠性的一门技术,而且可以用来研究材料中缺陷形成和发展的动态过程。为提高无损检测的水平,准确评价材料,必须重视其中的基础性工作。它们是:(1)超声波与物质交互作用的原理;(2)声发射源的识别;(3)断层分析技术、声学显微镜在材料研究中的应用,如三度空间裂纹扩展的动态过程;(4)材料物理性能和力学性能的无损测试。

材料在长期工作过程中由于承受不了设计要求而受到破坏,称之为失效。断裂是材料失效的主要方式,它给社会带来的危害是巨大和多方面的。材料断裂失效分析就是研究分析材料在各种条件下的断裂机制(过载、疲劳、氢脆、应力腐蚀等)和原因(设计、材质、制造和使用等)。提出改进和防止的方法和措施,以提高产品质量和运行可靠性,避免再发生类似的事故。同时使人们对有关学科理论的认识得到进一步的深化和提高。为不断提高失效分析的水平,必须加强本学科的理论和方法的研究。主要内容有:(1)断口形貌的定量描述及其与断裂参量和断裂模式之间的关系;(2)复合断裂机制的研究和图谱的建立;(3)高性能材料的失效模式和失效力学;(4)计算机技术和数学方法(如数理统计、布林代数等)在材料失效分析中的应用。

## 四、发展战略和学科布局的建议

根据我国材料科学的现状和今后的发展,本世纪末,材料科学领域总的战略目标是:建立一支结构合理的、精干和稳定的材料科学队伍,能够解决国内材料发展中的重要科学问题,推进材料工业的进步,能够跟上国际材料科学的研究水平。并在若干有相对优势的领域里有所突破,进入国际先进水平或居于国际领先地位。为实现这一目标,对学科布局提出如下建议:

1. 重视传统材料的基础性研究。传统材料(主要是金属材料)的使用量在我国仍占很大部分,由于基础性研究工作不够,至今存在大量的质量问题。今后应当继续重视传统材料,特别是金属材料的基础性研究。

2. 加强新型材料科学问题的研究,现代材料家族有强大的活力,许多新领域是活跃的研究中心,20年后大有希望的领域可能是复合材料、超导材料、光电子材料、工程塑料和结构陶瓷等。必须对其中有重大意义的材料科学问题的研究做出合理的安排。

3. 集中人力、物力和财力,提高研究水平,从整个材料科学的全局出发,就若干基本学科方面,建立国家重点实验室或研究中心,实行联合和开放的体制。

4. 建立和健全若干国家材料研究数据库、测试网站和情报网以及国家材料评价机构。

# 能 源 科 学

## 能源科学调研组\*

### 一、引 言

能源是当代社会面临的四大问题之一,它关系到人类社会的经济发展,又是人类赖以生存的条件。

18世纪,当人类社会从柴草时期过渡到煤炭时期,由于蒸汽机的发明和热力学第一、第二定律及卡诺循环理论的产生,出现了第一次产业革命,使生产力得到了快速的发展。19世纪,随着法拉第电磁感应和麦克斯韦方程的建立,电力进入社会各领域,从而引起了第二次产业革命,生产力又一次出现了大飞跃。从20世纪50年代中期开始,石油和天然气成为世界能源供应的主力,这种划时代的能源结构演变,推动了燃烧学、传热传质学、热流体力学及其它能源分支学科的进一步发展。

但是,70年代初期,能源危机的出现,却使发达国家如美、英、德、法、意、日本的国民经济发展速度分别减慢5.9—1.3%。固然,能源危机是国际政治斗争的产物,但从科学上看,也是对能源战略、能源科学研究不力的结果。

当前,人类面临的问题是,首先将被迫从石油转向第二次以煤炭为主能源。1~2个世纪

\* 调研组成员: 张仁元 蒋洪德 毛兆明 宋之平