

学科发展

二十一世纪初的材料科学技术*

师昌绪

(金属研究所 沈阳 110015)

摘要 根据目前材料科学技术的动态,提出以下观点:信息时代的信息功能材料仍是最活跃的领域;能源功能材料将取得突破性进展;生物材料在生命科学的带动下将有很大发展;智能材料与智能系统将得到更多的关注;随着资源的枯竭,环境的恶化,环境材料将日益受到重视;高性能结构材料的研究与开发是永恒的主题;材料制备工艺及测试方法是制约材料能否得到广泛应用的重要因素;纳米材料科学技术将成为 21 世纪初最活跃的领域;21 世纪将逐步实现按需设计材料。最后对不同类型材料的发展前景作了简要估计。

关键词 21 世纪,材料科学技术



材料是人类进化史的里程碑,现代文明的重要支柱,发展高新技术的基础和先导。随着科学技术的进步,人类生活水平的提高,21 世纪对材料科学技术提出了更高的要求;特别是由于世界人口的迅速增加,资源的加速枯竭,生态环境的不断恶化,对材料生产技术的开发与有效利用提出更高的要求。知识经济的蓬勃发展与信息的网络化将促进材料科学技术突飞猛进,因而本文只能对 21 世纪初的情况做一粗略的预测,谨供参考。

1 信息时代的信息功能材料仍是最活跃的领域

信息功能材料是指信息获取、传输、转换、存储、显示或控制所需材料,种类繁多,涉及面广。

1.1 半导体材料

以硅为基础的微电子技术仍占重要位置。由于量子效应、磁场及热效应,再加制作困难、投资过大,芯片特征尺寸到 2010 年可能达到极限(0.07 μm)。但不同档次的硅芯片在 21 世纪仍将大量存在,并将有新的发展,如在硅绝缘衬底上的硅(SOI)及单个芯片上的系统(IS)。单晶硅的直径不断增加,从目前的 8 寸(200mm)到 2010 年要达到 18 寸(450mm),而且对晶片质量要求愈来愈高,因此,硅单晶生产技术必须不断提高。

* 收稿日期:2000 年 12 月 13 日

④ (Ⅲ)族化合物是第二代半导体材料,如 GaAs 以其电子迁移率快、禁带宽而用于高速、高温、高频、大功率,是移动电话的主要材料,又是光纤通讯所必需。现已广泛得到应用。

第三代半导体材料是禁带更宽的 SiC 及金刚石,它们可用于高温。

硅集成电路以后的可能途径:一是光集成(光子材料),一是原子操纵(纳米技术)。

1.2 光电子材料

光电子材料在 21 世纪将得到更大发展。光子运动速度高,容量大,不受电磁干扰,无电阻热。光电子材料包括激光材料,变频晶体(非线性光学晶体)、红外探测材料、半导体光电子材料、显示材料、记录材料、敏感材料及光纤,特别光导纤维是信息高速公路的关键,其发展速度比芯片还要快,已进入第四代。

2 能源功能材料将取得突破性进展

由于人口的迅速增长,生活水平的提高,能源需求量大幅度增加,而化石能源日益枯竭,且环境污染难以解决,21 世纪能源材料重点有以下几个方面。

2.1 可再生能源将加速开发

太阳能的利用与材料密切相关。地球上的太阳辐射能量 1 万倍于人类所消耗的能源,但密度低 ($1\text{kWh}/\text{m}^2$),气候影响大。目前常用光伏转换材料效率太低,如非晶硅薄膜一般在 10% 以下,转换率较高的硅单晶或 GaAs 也不到 30%,且成本高,难以大规模推广^[1]。因此,开发高效、价廉、长寿命的光伏转换材料是当务之急。这对我国西部大开发至关重要,那里日照时间长,可供光伏发电的面积大,而且居民分散,有可能成为以太阳能为主的地区。

太阳能射向地球时,30% 被大气反射,23% 被大气吸收,因此,有人设想在太空建立空间太阳能电站,以微波传回地面,由此所得电能可能有竞争力。

风能也是不可忽视的再生能源,因太阳能有 2% 变为风能,在某些多风地区,如新疆,应充分利用。此外,潮汐能、海水温差与地热在 21 世纪都将

会得到不同程度的利用,这些都存在材料问题。

2.2 核能在 21 世纪也将会有新的发展

首先是铀资源的有效利用。目前热中子反应堆只用了铀矿中占 0.71% 的 U^{235} ,而占 99.28% 的 U^{238} 要通过快中子增殖堆。这种堆型虽已运行多年,但所用冷却剂液钠腐蚀性太强,容易造成泄漏,难以大量推广,这是有待解决的问题。当然还存在 Pr^{239} 的污染,最近提出的加速器驱动的核电站,用嬗变原理可望解决这一问题。

21 世纪大力开发的是可控热核聚变反应堆。它是利用海水中氢同位素氘的聚合反应所产生的能量。据估计,一吨海水所含氘相当于 300 吨汽油,而海水中氘的含量为 10^{13} 吨,这可视为人类的永久能源。惟技术问题难以解决,对材料来说,要求耐高温、抗辐射和抗氢脆。据目前估计,要到 2050 年或更长的时间才能进入实用化。

2.3 超导材料是最重要的节能材料

低温(液氮温度, -269°C) 超导材料产业化已几十年,但因冷却剂氮的价格昂贵而受到限制。高温(液氮温度, -196°C) 超导体已发现 30 多种,只有 YBaCuO (薄膜、块体) 和 BiSrCaCuO (带、线材) 接近实用状态,但稳定性和均匀性有待解决,估计 2010 年有望产业化。21 世纪的另一任务是探索室温超导材料和现有高温超导的机理。

2.4 作为能源用的磁性材料将继续发展

硅钢片是最重要的软磁材料,全世界年产 650 万吨;铁基非晶态合金尽管有明显优势(铁损只有冷轧硅钢片的 1/3—1/6),但在价格上缺乏竞争力而未能大发展。

永磁材料从性能看, NdFeB 最好,而从价格性能比来说,铁氧体有很强的竞争力(表 1),因此在 21 世纪二者都将占重要位置。

2.5 贮能材料将受到高度重视

贮能材料主要指贮氢材料和高密度蓄电池。这是电网调峰和环保的需要,是某些机械装置的动力源,或太阳能发电的配套装置。

金属间化合物作为贮氢材料(表 2)已基本成熟,并试用于汽车燃料,但存在比重大、易中毒和价

格太高的问题。最近发现的纳米碳管, 贮氢量高、质轻, 有发展前景。

表 1 几种永磁材料对比

材 料	NdFeB	SmCo	AlNiCo	铁氧体
比重(t/m^3)	7.4	8.4	7.3	5.1
性能(kJ/m^3)	295	191	56	25.9
价格(USD/t) 10^4	17	28	5.2	0.55
价格/性能(USD/J)	4.3	12.3	68	1.08

表 2 几种贮氢金属间化合物

	液氢($-235\text{ }^\circ\text{C}$)	Mg_2Ni	LaNi_5	TiFe
相对含氢密度	1	1.33	1.48	1.36
相对含氢量(%)	100	3.8	1.4	1.8

电池的种类繁多, 表 3 为几种典型电池。当前发展最快的是 NiMH 电池, 而从比能量密度看, 锂电池最好, 但价格是前者的 3.5 倍。 NiMH 电池与

汽油混合用于汽车已实用化, 低速与起动时用电池, 而高速时自动转用汽油并充电, 如此可节油 50%, 且排放减到 1/10, CO_2 排放只有一半。

表 3 几种典型电池特性

电池系列	电极		电性能参数(理论)		
	负极	正极	电压(V)	比容量($\text{A}\cdot\text{h}/\text{kg}$)	比能量($\text{W}\cdot\text{h}/\text{kg}$)
铅酸蓄电池	Pb	PbO_2	2.1	120	252.00
碱性锌锰电池	Zn	MnO_2	1.5	224	336.00
镉镍蓄电池	Cd	NiOOH	1.35	181	244.35
氢镍蓄电池	H	NiOOH	1.5	289	433.50
锂二氧化锰电池	Li	MnO_2	3.5	286	1 001.00
锂亚硫酰氯电池	Li	SOCl_2	3.65	730	2 664.50
锂离子蓄电池	LiCo	CoO_2	4.1	170	697

2.6 燃料电池是提高燃效减少污染的有力措施

燃料电池是将化学能转变为电能的一种装置, 燃效可达 60%, 表 4 为几种正在开发的燃料电池, 其中电极材料是关键。

表 4 正在开发的燃料电池

电解质	磷酸盐	熔融碳酸盐	ZrO ₂	聚合物薄膜	碱性溶液
工作温度(℃)	150—210	550—650	1 000—1 100	60—110	70—200
燃料	天然气、CH ₄	天然气、煤气	天然气、煤气	煤气 H ₂	天然气 H ₂
效率(%)	35—42	50—60	> 60	> 40	> 60
目前状态	成熟	工业试验	实验室	工业试验	工业试验

最近美国 NASA 正在开展一种试验,即用太阳能电池与氢氧燃料电池联合开动的小飞机,时速 37 哩,白天太阳能电池工作,并将剩余电用来电解水,晚上氢氧燃料电池启动。目前虽还不能载人,但可用于通讯,估计 21 世纪将会有很大进展。

3 生物材料在生命科学带动下将有很大发展

21 世纪是生命科学时代,生物材料也随之会有很大发展。所谓生物材料包括三部分,即医用生物材料,仿生材料和生物模拟。

3.1 医用生物材料

最重要的是材料与人体相容性和材料本身的性能。通过组织工程、生长因子、DNA 和自组装技术,可生产出人类的各种器官。事实上,除神经系统以外,人的各种器官都可制造。目前正在利用照相机、光导系统与视网膜细胞相联接,为盲人复明。

3.2 仿生材料

生物是多年演化的结果,有很多特性值得模仿。珍珠壳和骨骼表面虽然也都是碳酸盐构成的,但其强度和韧性却远远高于陶瓷。深入研究表明,它们是纳米结构的无机盐与有机物聚合体。人造丝与蚕丝结构相近,但舒服感则不相同,又是何故?因此,深入研究现有生物体和生物现象而进行仿造,对材料的发展将起到推动作用。

3.3 工业生产中的生物模拟

催化剂使化肥、石油化工大规模生产成为可能,石墨转变为金刚石主要采用了镍溶媒的催化反应而实现工业生产。人体中物质与能量转换在常

温下完成,是酶催化的结果,其效率和速度千百万倍于工业催化剂。今后的任务是高效催化剂的探索与光合作用的模拟,后者一旦实现,使 CO₂ 和水成为碳水化合物,粮食问题即可得到解决,过剩的 CO₂ 也有了出路。

细菌冶金已实现处理低品位铜、铀矿石、尾矿,并大幅度降低污染,这将是 21 世纪解决金属矿日趋枯竭的有效途径。

4 智能材料与智能系统将得到更多重视

变色眼镜就可视为一种智能材料,或机敏(Smart)材料。因此,智能材料可以定义为材料随外界条件而发生变化,在变化条件去除以后又可复原。形状记忆合金、压电体都属于此。利用材料的这种性质与传感器、光纤和电脑相结合可成为一个系统,达到操纵一种机构的目的,称之为智能系统。但具有这些特点的材料并不多。

利用这种系统可随外界条件而改变飞机机翼、潜艇、车体以及建筑物的外形以减少阻力,既节省能耗,又提高安全度。

智能系统可使材料实现自检测、自恢复或自修复,以延长机械寿命和安全度。

智能材料可实现药物的控制释放以提高药效,减少药的副作用。

5 随着资源的枯竭、环境的恶化,环境材料将日益受到重视

环境材料就是指与环境相适的材料,称为环境友好材料或绿色材料。这类材料主要指节约资源和能源;无污染或少污染,其中包括可降解的废品。

废品回收,是节约资源和能源、减少污染的重要措施。

6 高性能结构材料的研究与开发是永恒的主题

所谓高性能结构材料是指高比强度、高比刚度、耐高温、耐腐蚀、抗磨损的结构材料。对动力机械来说,工作温度愈高,比强度和比刚度愈高,效率也愈高。表 5 为军用发动机的发展趋势,可以看

出,涡轮温度和推重比都在逐年提高,要求材料及冷却技术要不断改进。有资料表明,飞机及航空发动机性能的改进,其 2/3 和 1/2 是靠材料性能的提高。对飞行速度更高的卫星和飞船来说,能减重 1 公斤就能带来极高的效益。汽车节油有 37% 靠材料的轻量化,40% 靠发动机的改进,而绝热发动机(不需水冷),主要靠材料性能的提高^[2]。

表 5 军用发动机的发展趋势

代	定型年代	单位推力($\text{daN}\cdot\text{S}\cdot\text{kg}^{-1}$)	推重力	总增压比	涡轮前温度($^{\circ}\text{C}$)
⑦	1960—1976	< 100	< 7	< 20	< 1 250
⑧	1977—1997	100—110	7—9	20—30	1 350—1 500
⑨	1993—2010	110—125	9—13	20—30	1 550—1 750
(九)	2010—	125—135	15—20	20—30	1 800—2 500

从高温材料来看,碳复合材料可达2 500℃,但抗氧化能力太差,只能用于火箭、导弹。树脂基复合材料,已得到广泛应用,但工作温度只有 300—350℃,金属基复合材料虽有较好的综合性能,由于其成本高,也只限于宇航,只有颗粒或短纤维增强的金属材料有大量推广于民用的可能。钛及钛铝中间化物以其比重小、工作温度高(600—1 000℃),在空间机械有广阔应用前景。陶瓷无论从资源或性能来说都有十分明显的优越性,只是脆性问题难以解决,即使断裂韧性达到工程合金的水平,但其临界裂纹太短(几十微米),造成性能分散度大、稳定性差,而且成本居高不下,是陶瓷材料有待解决的问题。

7 材料制备工艺及测试方法是制约材料能否得到广泛应用的重要因素

材料制备是从基础研究到工程应用必由之路,是提高材料质量及降低成本的重要途径,是有效利用资源和能源、减少污染的重要手段。

高温超导发现至今已 15 年,工程陶瓷进行大

量研究与开发近 40 年,因未开发出合适工艺而不能大量推广;高温合金涡轮叶片工作温度不断提高,重要原因之一是制造工艺的不断改进,由常压冶炼,到真空冶炼、真空精铸、定向凝固和单晶叶片。所以材料制备工艺的研究与开发十分重要,90 年代初美国科学基金会在材料领域有 40% 的投入是用于材料的制备与加工。

制备工艺的发展趋势,对电子信息材料来说,趋于功能结构一体化、多功能化、小型化与微型化,因而气相外延、液相外延、金属有机气相沉积和分子束外延乃至原子操纵是重点。对冶金、化工材料来说,尽量做到零排放,制造工艺自动化与智能化等。

检测方法的新进展往往带来材料研究与质量控制的新突破,如扫描隧道显微镜和原子力显微镜的出现,使“原子操纵”成为可能。工程陶瓷断裂的临界尺寸为微米级,因而要使陶瓷生产稳定就必须开发更为精确的探伤手段,而且要求在线检测和动态监控。

8 纳米材料科学技术将成为 21 世纪初最为活跃的领域

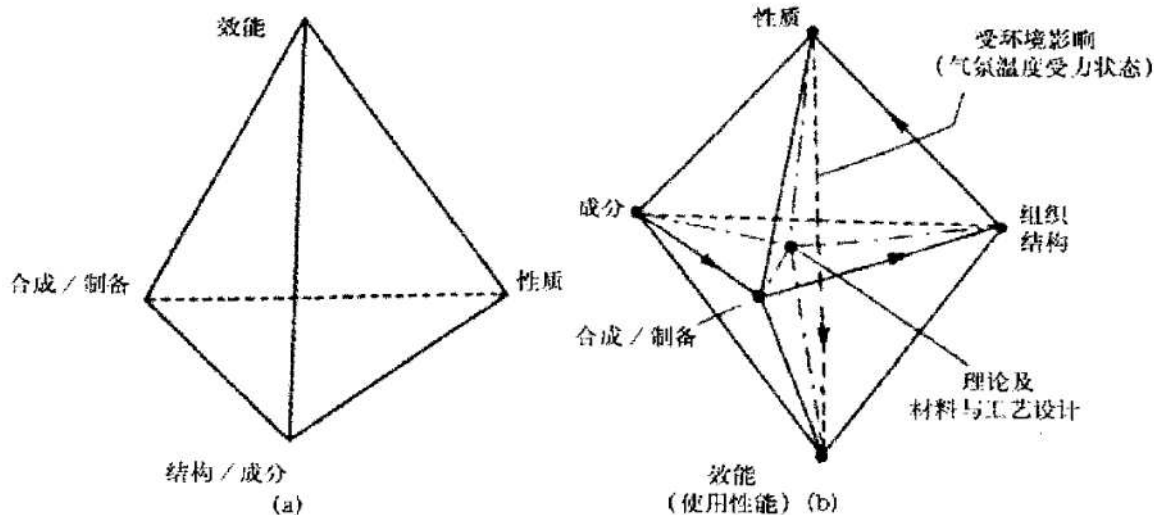
纳米材料是利用物质在小到原子或分子尺度以后, 由于尺寸效应、表面效应或量子效应所出现的奇异现象而发展出来的新材料。早在 1959 年就有人提出纳米科学技术的概念, 并倡导要开展在原子或分子水平制造材料的物理规律研究。只是到 80 年代初发明扫描隧道显微镜和原子力显微镜以后, 纳米材料的研究才成为现实, 80 年代中期以后逐渐热起来, 并取得一定进展。2000 年 2 月美国提出“国家纳米技术的建议”(National Nanotechnology Initiative), 认为纳米技术可导致下一代工业革命, 因为这一技术涉及到材料、能源、信息、医学、航空航天以及国家安全的各个方面。除纳米材料以外, 还有纳米电子学、光电子学和磁学、纳米医学。目前纳米科学技术已成为全世界科学技术的热点, 我国也不例外, 应注意加强领导, 以免犯过去一哄而起的错误。我国的纳米材料技术在国际已有一

定显示度, 如纳米碳管有不少创新性的成果。

纳米科学技术目前仍处于基础研究阶段, 估计要 10—20 年才能达到预期效果。当然, 基础性与产业化相结合, 使研究成果及时转化为生产力仍然是最重要的努力方向。

9 21 世纪将逐渐实现按需设计材料

材料科学与工程一般都认为由四要素组成^[3], 即结构/成分、合成/流程、性能与效能(Performance)。考虑到结构与成分并非同义词, 相同成分通过不同制备方法可以得到不同结构, 从而出现不同性能。所以应为五要素, 即成分、合成/流程、结构、性能与效能。连接各项点, 前者形成一个四面体(图 a); 后者则成为一个六面体(图 b)。在六面体中心为理论、材料设计、工艺设计; 而且材料性能在一定条件下(如温度、气氛及受力状态等)的表现就是使用性能(效能)。材料设计可以从电子、光子出发, 也可从原子、原子集团出发, 可以从微观、显微到宏观, 视所要求的性能而定。



材料科学与工程的内涵

材料设计是一个很复杂的过程, 如材料的制备与存在状态往往属于非平衡热力学; 有些结构敏感性质(材料的力学性质), 可变因素太多, 即使一个微小缺陷都会产生很大影响; 表面与内部结构及性质的不一致性, 以及复杂的环境因素等等。所以材

料设计的实现是一个长期过程, 最终应达到提出一个需求目标, 就可设计出成分、制造流程并做出合乎要求的工程材料以至零件、器件或构件。

为实现材料设计, 必须开展深入的基础研究, 以了解物质结构与性能的关系; 要建立完整的精确

的数据库;建立正确的物理模型;需要有大容量计算机;更重要的是要不同学科科学家与工程技术人员的通力合作。

10 不同类型材料的发展前景

金属在结构材料中仍占主要位置,特别是钢铁在今后几十年内的产量不会下降(目前全世界产量7—8亿吨),但钢的性能会大幅度提高^[4]。我国重大基础研究的阶段结果表明,碳钢和低合金钢的强度可提高1倍,分别由200 MPa、400 MPa提高到400 MPa和800 MPa。

有些有色金属,如铜、铅、锌的资源接近枯竭,代用品的开发成为当务之急,同时要加速开发低品位矿的提炼方法。镁和钛将得到更广泛的应用。随着功能材料需求的增加,稀有金属、稀散金属与稀土金属的用途将不断扩大。

功能陶瓷将会有更大发展,工程陶瓷的性能将进一步提高,生产成本下降,但能否得到广泛应用,前途难卜。水泥和玻璃仍是重要建筑材料,水泥的生产将大量采用矿渣、炉渣等废料,提高水泥标号,改进增强组元,减少水泥产量。玻璃将走向智能化达到节能的目的。

有机高分子将得到更大发展,特别是功能高分子材料,包括导电高分子、铁磁高分子、光学高分子,半导体及超导体以及存储和显示材料都已显示出发展前景,但稳定性和老化仍是目前人们担心的问题。

先进复合材料在20世纪下半叶有很大进展,但只有树脂基复合材料得到较为广泛的应用,金属基与陶瓷基复合材料则以其成本过高而未打开局面。21世纪虽可得到进一步发展,也很难像钢铁或高分子材料那样得到普遍应用。

碳素材料以其资源丰富,碳的同位素多形体而成为多用途的材料,并将得到更大发展。如片状石

墨是最好的固体润滑剂;碳纤维强度高而价廉;金刚石至今仍是最硬的材料,又是高温半导体的候选材料之一;活性碳是物美价廉的吸附材料;玻璃态碳是优良阻氢材料等。1985年发现巴基球(C_{60}),随后又发现了纳米碳管,虽然目前仍处于基础研究阶段,但应用前景广阔,将成为21世纪研究与开发的热点。

11 结束语

(1) 新材料的发现能否应用于实际,主要取决于生产工艺和价格竞争力。

(2) 新材料的发现往往出于偶然。

(3) 新材料的发展有赖于高技术产业的进步,而高技术又以新材料为基础和先导。

(4) 在开发先进材料的同时,必须重视对传统材料的研究,因为后者资源消耗量大、污染严重,又是支柱产业的主体。

(5) 通过纳米科学技术,新型材料将不断涌现,为信息技术、能源技术、机械制造、空间技术等的发展创造条件,使之实现小型化、智能化和多功能化。

参考文献

- 1 Wronski C R. Amorphous silicon technology: Coming of age. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 1996, (41/42): 427.
- 2 Taya M, Arsenault R J. *Metal Matrix Composites*. 1st ed. Oxford: Pergamon Press, 1989. 1.
- 3 *Materials Science and Engineering for The 1990s, What is Materials Science and Engineering?* Washington D C: National Academy Press, 1989. 19–34.
- 4 Okada M. Strategy of materials research for sustainable development. In: *Proceedings of the third International Conference of Ecomaterials*, Trukuba, 1997.

Prospects of Materials Science and Technology at the Turning of 21st Century

Shi Changxu

(Institute of Metal Research, CAS, 110015 Shenyang)

Based upon the existing state- of- the- art of materials science and technology, the following prospects are predicted:

(1) Information functional materials are the most active field in the information age. (2) Energy functional materials will have a break- through. (3) Biomaterials will have a prominent progress under the influence of the achievements of biological science. (4) Intelligent materials and intelligent system will be emphasized greatly. (5) Ecomaterials will draw more and more attention. (6) R & D of high performance structural materials is an eternal subject. (7) Materials processing and characterization are limiting factors of whether the material can be widely applicable. (8) Nanomaterials science and technology will be the most active field at the turning of 21st century. (9) The materials design based on requirements will be gradually realized during the 21st century. Finally, prospects of different type of materials are mentioned.

师昌绪 金属学及材料科学专家。中国科学院院士, 中国工程院院士。国家自然科学基金委员会研究员、特邀顾问。1945年毕业于国立西北工学院, 1952年获美国欧特丹大学冶金博士, 后在麻省理工学院从事博士后研究。1955年回国, 历任金属研究所研究员、所长, 金属腐蚀与防护研究所所长, 中国科学院技术科学部主任, 国家自然科学基金委员会副主任, 中国工程院副院长。我国高温合金开拓者之一, 领导开发出我国第一代航空发动机用多孔气冷铸造镍基高温合金涡轮叶片, 使我国歼击机性能上了一个新台阶。针对我国当时缺镍无铬情况, 50—60年代主持研究开发出我国第一代铁基高温合金、铬锰氮不锈钢、耐热钢及铁锰铝奥氏体钢, 并推广到工业生产。发表论文200多篇, 培养硕士及博士生近100名。