

· 专题四 ·

· 面向 21 世纪新材料的科学问题

与会专家建议优先发展领域如下:

1 新型结构材料的研究。除着重提高其相应的使用性能外,还要向轻型化、复合化和多功能化的方向发展,同时在界面设计、智能化研究以及环境适应性等方面开展工作。

2 特种功能材料。尤其是信息功能材料研究。探索从宏观体系到分子水平、不同尺度上的结构与功能的关系,研究功能形成的机制进行分子和相态结构的设计、修饰和组装,解决薄膜化、微型化、集成化和智能化的关键技术。

3 生物材料生物相容性分子设计基础理论和方法的研究,及其表征和评价方法的研究。重视评价标准统一化、规范化。优先开展抗凝血材料、缓释材料及软硬组织替代材料。加强生物材料表面修饰、表面改性新技术的研究。

4 材料制备与加工的新技术。微加工与微组装的新技术,材料化学制备中的相关新技术,低维及复合材料的制备新技术,以及载能束流在材料制备与加工中的应用等。

5 材料表征与评价,发展具有高空间分辨,成份分辨,时间分辨和能谱分辨的表征方法,尤其注意发展同时具有多种功能的表征方法,以及材料性能的综合评价和无损检测方法。

6 材料科学的理论研究。在分别对各类材料的物理、化学、生物等性能研究的基础上,注意发展能反映实际材料和实际环境中的结构复杂性,性能综合性和动态变化的理论研究。

7 计算机辅助材料设计的研究,尤其是基于微观相互作用和基本运动规律的微观(原子)模拟。同时发展以现有物理化学知识库和材料数据库为基础,通过人工智能方法预测材料的性能。

8 环境材料及与材料相关的生态循环评估体系研究。这是一项有重要意义、带基础性、交叉性和全局性的项目,应尽早开展研究。

纳米材料与纳米体系物理 ——面向 21 世纪的新领域

张立德

(中国科学院固体物理研究所,合肥 230031)

本世纪 80 年代,过去人们从未探索过的纳米体系一跃成为科学家十分关注的研究对象。纳米材料刚刚诞生几年,纳米材料体系所具有的独特性质和新的规律,已使人们认识到这一领域是跨世纪材料科学研究的“热点”,它的发展很可能给物理、化学、材料、生物、医药等学科研究带来新的机会,多学科交叉,互相影响也会产生新领域的生长点,为交叉学科的发展提供新的思路。

纳米材料科学的研究主要包括两个方面:一是系统地研究纳米材料的性能、微结构和谱学特征,通过和常规材料对比找出纳米材料特殊的规律,建立描述和表征纳米材料的新概念和新理论,发展完善纳米材料科学体系;二是发展新型的纳米材料。纳米尺寸的合成为发展新材

料提供了新的途径,这就大大地丰富了纳米材料制备科学。人们已经能够制备包含几十个到几万个原子的纳米粒子,并把它们作为基本构造单元,适当排列成零维的量子点、一维的量子线、二维量子膜和三维纳米固体。纳米科学技术已经诞生,这对生产力的发展将产生深远影响,并有可能从根本上解决人类面临的一系列问题,如粮食、健康、能源和环境保护等重大问题。

1 多学科汇合交叉点

纳米材料科学是原子物理、凝聚态物理、胶体化学、配位化学、化学反应动力学和表面、界面科学等多种学科交叉汇合而出现的新学科生长点。纳米材料中涉及的许多未知过程和新奇现象,很难用传统物理化学理论进行解释。从某种意义上来说,纳米材料研究的进展势必把物理、化学领域的许多学科推向一个新的层次,也会给21世纪物理和化学研究带来新的机遇。

纳米材料为凝聚态物理提出许多新的课题。由于纳米材料尺寸小,与电子的德布洛意波长、超导相干波长及激子玻尔半径相比拟,电子局限在一个体积十分小的纳米空间,电子输运受到限制,电子平均自由程很短,电子的局域性和相干性增强。尺度下降使纳米体系包含的原子数大大降低,宏观固体的准连续能带消失了,而表现为分立的能级,量子尺寸效应十分显著,这使得纳米体系的光、热、电、磁等物理性质与常规材料不同,出现许多新奇特性。如:金属纳米材料的电阻随尺寸下降而增大,电阻温度系数的下降甚至变成负值,相反,原是绝缘体的氧化物达到纳米级,电阻反而下降;10—25 nm的铁磁金属微粒矫顽力比宏观相同材料大1000倍,而当颗粒尺寸小于10 nm矫顽力变为零,表现超顺磁性;纳米氧化物和氮化物在低频下,介电常数增大几倍,甚至增大一个数量级,表现极大的增强效应;纳米材料(氧化物)对红外微波有良好的吸收特性。作为微电子学的明星材料,半导体的硅表现极好的半导体特性。在动量空间,由于导带底和价带顶的垂直跃迁是被禁阻的,通常没有发光现象,但当硅的尺寸达到纳米级(6 nm),在靠近可见光范围,就有较强的光致发光现象。多孔硅的发光现象也与纳米尺度有关。在纳米 Al_2O_3 , TiO_2 , ZrO_2 , SiO_2 中,也观察到常规材料根本看不到的发光现象。上述现象充分证明,纳米体系大大地丰富了21世纪凝聚态物理的研究范围。纳米材料另一个重要特点是表面效应。随着粒径减小,比表面大大增加:粒径为5 nm时,表面将占50%;粒径为2 nm,表面的体积百分数猛增到80%。庞大的比表面,键态严重失配,出现许多活性中心,表面台阶和粗糙度增加,表面出现非化学平衡、非整数配位的化学价,这就导致纳米体系的化学性质与化学平衡体系有很大差别。

纳米材料在催化反应中有重要作用。通常的金属催化剂Fe, Co, Ni, Pd, Pt制成纳米微粒可大大改善催化效果。粒径为30 nm的Ni可把有机化学加氢和脱氢反应速度提高15倍,在环二烯→环烯环烷→的加氢反应中,纳米微粒做催化剂比一般催化剂的反应速度提高10—15倍。在甲醛的氢化反应生成甲醇的反应中,以 SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2 加上纳米微粒Ni, Rb为适活性部分,如果 SiO_2 等粒径达到纳米级,其选择性可提高5倍。通过光催化从 H_2O , CO_2 和 N_2 中提取有用物质。例如 H_2 和液体燃料一直是人们研究的重要课题,最近日本用纳米Pt微粒作为催化剂放在 TiO_2 的载体上,在加入甲醇的水溶液中通过光照射成功地制取了 H_2 ,产出率比原来提高几十倍。纳米微粒对提高催化反应效率、优化反应路径、提高反应速度方面的研究是未来催化科学的重要研究课题,很可能给催化在工业上的应用带来革命性的变革。

纳米合成为发展新型材料提供新的途径,新思路。非平衡动态的材料工艺学在21世纪将会有新的突破,目前世界上的材料有近百万种,而自然的材料仅占1/20,这就说明人工材料在

材料科学发展中占重要地位。纳米尺度的合成为人们设计新型材料,特别是人类按照自己的意愿设计和探索所需要的新型材料打开了新的大门。例如,在传统相图理论上根本不相溶的两种元素,在纳米态下可以合成在一起,制备出新型的材料。铁铝合金、银铁和铜铁合金等纳米尺度已在实验室获得成功。利用纳米微粒的特性,人们可以合成原子排列状态完全不同的两种或多种物质的复合材料。人们还可把过去难以实现的有序相和无序相、晶体和金属玻璃、铁磁相和反铁磁相、铁电相和顺电相复合在一起,制备成有特殊性能的新材料。

纳米微粒的诞生也为常规的复合材料的研究增添了新的内容。把金属的纳米颗粒放入常规陶瓷中可大大改善材料的力学性质,如纳米 Al_2O_3 粒子放入橡胶中提高橡胶的介电性和耐磨性,放入金属或合金中可以使晶粒细化,大大改善力学性质;纳米 Al_2O_3 弥散到透明的玻璃中既不影响透明度又提高了高温冲击韧性;半导体纳米微粒 (GaAs , Ge , Si) 放入玻璃中或有机高聚物中,提高了三级非线性系数;极性的 PbTiO_3 粒子放到环氧树脂中出现了双折射效应;纳米氧化物粒子与高聚物或其他材料复合具有良好的微波吸收特性;纳米 Al_2O_3 微粒放入有机玻璃 (Pmma) 中表现出良好的宽频带红外吸收性能。最近,美国成功地把纳米粒子用于磁致冷上,8 nm 铁粒子分散到钇铝石榴石或钇镓石榴石中,形成的新型磁致冷材料,使致冷温度达到 20K。纳米粒子与纳米粒子复合,受到世界各国极大的重视,英国制定了一个很大的纳米材料发展计划,重点制定纳米 Al_2O_3 +纳米 ZrO_2 , 纳米 Al_2O_3 +纳米 SiO_2 , 纳米 Al_2O_3 +纳 Si_3N_4 或 SiC 等新型纳米复合陶瓷。

纳米材料与医疗药物领域的交叉是必然的发展趋势,美国 MIT 已成功研究了以纳米磁性材料为药物载体的靶向药物称为“生物导弹”,即在磁性 Fe_2O_3 纳米微粒包敷蛋白表面携带药物,注射进人体血管,通过磁场导航输运到病变部位释放药物,可减少肝、脾、肾等由于药物产生的副作用。纳米微粒在医疗临床诊断及放射性治疗等方面的应用。如在人体器官成像的研究中,纳米微粒可以做为增强显示材料进入核磁共振生物成像领域。

2 发展趋势和展望

当前,纳米材料的研究已在世界普遍开展起来,从 90 年代开始,已举办过多次国际会议和研讨班,发表学术论文 2000 余篇。美国、德国、日本、俄罗斯、法国、比利时、中国和印度在纳米材料的研究方面居于领先地位。几年来,我国研制了一些纳米材料制备装置,制备了金属、合金、离子晶体、陶瓷、氧化物、氮化物、半导体、形状记忆合金、金属间化合物及多种纳米复合材料。在物理特性及微结构研究方面取得了一批高水平的结果,如纳米材料的介电反常及尺寸效应,纳米材料的光致发光现象,催化和敏感特征等都是我国科学工作者率先开展并做出特色的研究成果。当前这一领域的研究现状是:(1)在纳米材料的制备科学方面,追求获得量大、尺寸可控、表面洁净、制备方法趋于多样化、种类和品种繁多;(2)在性质和微结构研究上,着重探索普适规律;(3)研究纳米尺寸复合,发展新型纳米复合材料一直是该领域研究的热点。90 年代后期和下一世纪的发展趋势是:(1)高性能新型纳米材料的探索,纳米复合工艺将会有很大的发展,纳米材料的应用、开发提到议事日程,市场前景看好,应用和高技术开发可以与基础研究同步进行;(2)纳米势能阵列体系的设计和制备及奇特物理现象的探索等研究有上升趋势;(3)纳米体系微区物理很可能成为引人注目的前沿热门研究领域。最新的研究进展更加证实了这一点,如尺寸限域诱导的导体向绝缘体的转变;(4)通过纳米复合设计人工超结构可能形成新的研究热点,量子限域诱导的光学非线性、弱晶场控制的纳米固体发光、纳米磁性颗粒膜

的巨磁阻现象、电场限域引起的绝缘体电阻下降、纳米势垒阵列体系的设计及反常物理特性、团簇凝聚体光吸收频移的尺寸效应等,都是传统凝聚态物.里从未发现过的新现象,已引起物理学家极大的关注.加强这个领域研究,挖掘新现象,探索新规律,提出新概念,建立新理论,必将成为今后若干年凝聚态物理发展的趋势。

21世纪纳米体系的研究对象按尺寸、有序性和周期性可划分两个层次,四类体系:第一层次是以纳米微粒为基本单元(1—100 nm),包括(1)由纳米微粒无规堆积成的凝聚体和薄膜以及纳米微粒与常规二维或三维材料的复合体;(2)由纳米微粒(小于10 nm)按一定周期排列的纳米阵列体系。第二个层次是以 Cluster (小于1 nm)为基本构成单元,包括(1)团簇聚合体;(2)团簇点阵. 围绕上述体系开展纳米材料和纳米体系物理,将酝酿新的突破。

NANOMETER MATERIALS AND PHYSICS OF THE NANOMETER SYSTEM——FACING A NEW FIELD OF THE 21ST CENTURY

Zhang Lide

(*Institute of Solid Physics, CAS, Hefei 230331, China*)

分子材料

朱道本

(中国科学院化学研究所,北京 100080)

1 引言

新材料的出现往往来自于对物质特殊物理化学性质的研究结果。目前,人们已合成了近千万种有机化合物,并且以每年合成十几万种新的有机化合物的速度在发展。在如此众多的有机固体中究竟有哪些物理化学性质为人们所感兴趣,又怎样提供了其利用的机遇呢?除结构材料之外,可有以下几种简单的对应关系:有机固态光化学反应——光信息储存;固态反应——化学传感器;有机铁磁性——磁、磁光记录;液晶现象——电子显示;电光、非线性光学效应——倍频器、调制器、集成光学及光计算机;有机超导电性——Josephon 结、计算机逻辑门、强磁体、超导体及电能输送;金属电导等特性——电子器件、塑性电池;有机光导和有机半导体——光记录及太阳能电池;压电、铁电现象——换能器、传感器。除固态光化学反应和固态化学反应外,它们都直接或间接地与电子行为有关,所以广义地说它们属于所谓分子材料的范畴。

分子材料之所以得到重视,主要有两个背景:(1)以无机半导体晶体为材料基础的固体电子学经历了40多年的发展,形成了当今的繁荣局面,但要进一步提高集成度必须另辟途径。科学家提出了在一个有机分子区域内实现对电子运动的控制,从而使分子聚集体构成有特殊功能的器件。这类器件很可能成为21世纪的新型器件。(2)有机固体的电子性质、导电机理及杂质影响不同于传统的无机半导体。在深入研究其结构与性能的关系和它特殊的物理性能的基