

凝聚态物理学与材料研究的前沿问题*

冯 端

(南京大学物理系, 固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

摘 要 讨论了凝聚态物理学在当代材料研究的前沿问题中所起的作用. 首先, 对于那些基本物理学已通晓的常规材料, 极好的机会在于设计并制备出微结构和纳米结构. 其次, 对于具有强关联电子特征的复杂材料, 虽则其物理学尚在探索之中, 已有迹象表明这将是新材料的“富矿区”. 再次, 关于有机及聚合物材料, 物理学正在向这领域延拓, 在设计和制备分子和超分子结构方面, 将会提供许多新的可能性.

关键词 凝聚态物理学, 材料研究, 结构设计和制备

Abstract Discusses various contemporary aspects of the role played by condensed matter physics on the frontiers of materials research. For those materials whose physics is well understood, there are immense opportunities in designing and fabricating microstructures and nanostructures from them. For complex materials with strongly correlated electrons, though their physics is still under investigation, there are already indications that they will be a rich mine for new materials. In the case of organic materials and polymers, although the physics is only just opening up, great possibilities lie ahead in the design and fabrication of molecular and the supramolecular structures out of these new materials.

Key words condensed matter physics, materials research, designing and fabricating structures

现代科学与技术唇齿相依, 关系密切. 一般而言, 它们之间存在有两种基本模式: 其一是由于生产实践的需要而创建了技术(如蒸汽机等热机技术), 然后提高到理论上(建立了热力学), 再反馈到技术中去, 促使技术进一步发展; 其二是先在实验室中揭示了某些基本规律, 建立了比较完整的理论体系, 然后再在生产技术中创建全新的技术部门. 19 世纪电磁学的发展, 提供了这一模式良好的范例, 它为近代的电力工程和无线技术奠定了基础. 尽管这两种模式继续在当代社会中发挥作用, 但应该看到, 第二种模式正在发挥越来越重要的作用. 下面着重讨论凝聚态物理与材料研究的问题. 材料技术的核心问题在于新材料的研制和传统材料性能的提高. 在过去, 传统材料的发展依赖于长期的经验累积和不断炒菜式的试验, 在其中理论的指导并不起太大的作用, 即使在对于钢的相

变尚一无所知的时代, 熟练的技工已掌握了淬火使钢硬化的诀窍, 就很足以说明问题. 但自从本世纪 40, 50 年代以来, 固体物理学, 随后深化和扩大为凝聚态物理学, 发展成为成熟的科学, 可以从基础理论上解释物质的物理性质, 遂使材料研究的面目大为改观. 当然, 炒菜式的材料研究依然在进行, 但是更为重要的是有可能根据理论的线索来研制和开发新型材料. 下面谈谈这方面的一些问题.

1 开拓超微结构的领域

凝聚态物理学的一些基本理论, 如固体能带理论、点阵动力学理论、对称破缺的相变理论、有序媒质的基态理论、元激发理论、缺陷理

* 1996 年 2 月 27 日收到.

论和临界现象理论等,都是对于粒子数为无限大的体系,才能严格适用^[1]. 这些理论很有成效,例如,它说明了铜、铝等金属的导电性;锗、硅及砷化镓等材料的半导体性质;铁、钴、镍及一些稀土金属的铁磁性;锡、铋等金属与合金的超导电性;钛酸钡、铋酸锂、磷酸二铋钾等晶体的铁电性. 当今,应用能带理论有可能对晶体的特性参量依据第一性原理进行从头计算,结果的准确性可令人满意. 这样的理论计算可以作为进一步发展材料的依据. 正因为这方面的理论相当成熟,要在一些正常金属和元素或化合物半导体中发掘出前所未有的令人诧异的物理性能,也就比较困难了. 因为底牌都已亮了出来,牌局的兴趣也就减弱了. 要发掘出新的物性,看来要走不同的道路了. 著名的理论物理学家 R. Feynman 在 1959 年的一篇报告中明确指出^[2]，“毫无疑问,当我们得以对细微尺度的事物加以操纵的话,将会大大地扩充我们可能获得物性的范围”. 这段话有预见性地概括了 20 世纪下半叶发展新材料的主要动向之一,即通过设计和控制材料在细微尺度上的微结构,从普通的材料中发掘并获得许多意想不到的、崭新的物理性能.

在 50 年代,半导体器件都是制备在单晶衬底上外延生长的薄膜层之中,薄膜材料的重要性业已突出出来了. 虽然薄膜的厚度是在微米或微米以上的量级. 到 50 年代末,对固体中三明治式夹层超薄结构中隧道效应的研究,绝缘层的厚度开始进入纳米的量级^[3]. 1958 年,江琦于玲奈在半导体-绝缘层-半导体中发现了隧穿电流,从而发明了隧道二极管;1960 年, I. Gevner 发现正常金属-绝缘层-超导体的隧道效应;1962 年,约瑟夫森从理论上预言了超导体-绝缘层-超导体中电子对的隧道效应,即约瑟夫森效应,随即得到实验的证实. 这些工作对于后来半导体电子学和超导电子学均产生深远的影响,他们三人合得了 1972 年的诺贝尔物理奖.

1970 年,江琦与朱兆祥考虑到量子相干区域的尺度,首先提出了半导体超晶格的概念(见

图 1). 随后利用卓以和发展的分子束外延新技术,张立纲与江琦等制备了能隙高低不同的半导体多层膜,在实验中实现了量子阱、多量子阱和超晶格,观察到了极其丰富的物理效应^[4]. 从基础理论来看,这项研究为半导体物理学打开了新局面,经过多年发展,已经成为当今半导体物理学的主流^[4];同时在制出新器件上也卓有收获,制出了超快速的场效应管和高效率的半导体激光器等,它们融物理设计、材料制备与表征和器件发展为一体,宛然成为当今新材料发展最先进技术标志. 超晶格技术还在不断发展:正统的超晶格是以 III-V 族化合物为主;应变超晶格则扩大了应用材料的范围,诸如 III-V 族的硅-锗合金的量子阱与超晶格,由于可和硅基的大规模集成电路相匹配而受到重视;II-VI 族的 ZnSe 等具有宽的能隙,以制出发射蓝光的激光器而引人注目^[5].

图 1 量子相干区域与超晶格的示意图

从二维量子阱向更低的维度开拓,到达一维的量子线和零维的量子点,这方面的理论和实验研究都十分活跃. 以相干量子输运现象为主的介观物理(mesoscopic physics)应运而生,成为当今凝聚态物理学的热点^[1].

令人惊奇的多孔硅可见光发射的发现^[6],又将发展硅基材料光电子学器件的课题提到议事日程上来了. 块状的硅是间接能隙材料,只能发射微弱的红外光,因而虽在微电子学材料中独占鳌头,而在光电子学中一直无立足之地. 多

孔硅的光发射改变了这一情况,虽则多孔硅由于结构脆弱,可能难以发展为实用的材料,但在它的指引下,纳米硅基材料的研究方兴未艾,其中有关纳米硅、纳米 SiC 的强蓝光发射的报道^[7],特别引人注目。

电子不仅有电荷,还有自旋.与电子自旋有关的输运现象成为磁电子学这一新兴学科的基础^[8].半导体超晶格的周期要求小于电子的平均自由程,因而局限于几十纳米的量级;而磁性交互作用的范围不过几个纳米,因而相应多层膜的周期就要更短.1970年,科学家开始进行与自旋有关的隧道效应的实验.1975年,Juliere 在 Fe-Ge-Co 的夹层膜中观察隧穿电流随外加磁场的变化率可达 14%.这一结果开了磁电子学的先河,但在当时未受到重视.1986年,Grönberg 在 Fe-Cr-Fe 夹层结构中发现,当 Cr 层厚度恰当,Fe 层的自旋中反平行排列.1988年,Baibich 等发现在反平行耦合的 Fe-Cr 多层膜中,加磁场引起的电阻的变化率 R/R 达到 60%.过去一般材料中磁电阻的变化量级仅为 1—2%,因而这种异常的磁电阻效应被称为巨(giant)磁电阻.这一发现引起了学术界和技术界的广泛重视,揭开了富有应用前景的磁电子学的序幕.1992年,两个研究组同时发现在颗粒膜中也存在巨磁阻效应.美国 IBM 公司的 Almaden 实验室利用磁电阻器件作为磁存储盘的读出磁头,存储量提高了 17 倍之多.巨磁电阻元件也可能用作为磁随机存储器、磁传感元件等,表明磁电子学的应用正方兴未艾^[8].

早在 1962 年,久保就提出了超微颗粒的量子限制理论,推动实验物理学家向纳米尺寸的微粒进行探索.在 80 年代,处于大块凝聚态物质和单个原子之间的原子团簇(clusters)受到了重视.实验科学家采用了多种方法,如蒸发和超喷注、激光蒸发等,制备了一系列团簇,原子数从几个到几千(见图 2).质谱分析表明,团簇的丰度具有一系列幻数(magic number),对应于特别稳定的团簇结构.在金属中,幻数对应于电子壳层填满的情况;而在惰性元素中,团簇的

幻数则可归结为几何壳层的效应.特别有意义的是在共价键的碳团簇中,发现了丰度特高的幻数 60. Kroto 和 Smalley 认为,价键完全饱和的 60 个碳原子分布于一个截顶二十面体的顶角上,像一个足球状的分子,即 C_{60} ,被称为巴基球或富勒烯.随后科学家又利用在氦气氛中石墨电极的电弧放电法,制备了大量的 C_{60} ,有的形成了固体,引起了科学界的轰动. C_{60} 分子可以衍生出许多化合物,有人推测它对有机化学的意义可能不亚于苯环的发现.掺碱金属的 C_{60} 固体具有超导性, T_c 达到 30 K 的水平,是除氧化物超导体以外, T_c 最高的材料. C_{60} 是团簇组装材料的一个特例,其特点在于有序度非常高.80 年代初, Gleiter 利用金属在超高真空中蒸发后冷凝,再原位压结,获得另一种不规则

图 2 纳米尺寸的微结构材料的示意图

(a) 团簇或纳米微粒;(b) 多层膜或超晶格;

(c) 颗粒膜;(d) 块状纳米材料

的三维团簇组装材料[见图 2(d)],被称为纳米结构材料^[9].其晶粒尺寸、形状和取向均不一致,而晶界上的原子数达到原子总数的 50%,观测到了异常的性能,包括力学性能.其他的方法,如非晶晶化、机械合金化,乃至改进传统的陶瓷工艺也可以制备这类材料.利用这种纳米结构材料来获得韧性陶瓷也是颇有前景的.人们也许要问,除 C_{60} 外,是否还有其他的有序的团簇组装材料?这是一个很有挑战性问題.通过一些理论计算,得出了一些设想的稳定团簇,

如何制备大量的单一尺寸的这类团簇,再组装起来,是一个很值得花力气来解决的实验技术问题.

如果说半导体技术中体块材料向薄膜材料的过渡在 50 年代就已经完成了,而铁电、压电材料和非线性光学材料,这一过渡则尚在进行之中,集成光学和集成铁电学的发展指明了这一趋向.相应地这类材料通过微结构设计来获得优异性能也就提到议事日程上来了.早在 1980 年,我国科学家就利用铈酸锂规则的畴结构来取得激光倍频增强效应,实现了非线性光学晶体的准位相匹配.近年来这一领域已经成了国际上的热门领域,这类微米尺度的微结构设计也在高频超声换能、电光效应等领域发挥作用^[10].

2 探测强关联体系中的材料宝藏

凝聚态理论的长足进展已经搞清楚了许多材料的物性问题,但是还存在一些疑难问题悬而未决,其中最突出的莫过于强关联电子体系的问题.所谓电子关联,就是意味着电子和电子之间存在库仑相互作用,这一点也不稀奇,传统的能带理论在处理固体中的电子系统时,首先是忽略了电子之间相互作用,将电子系统视为相互独立的理想气体,考虑单电子与晶体的周期结构之间的相互作用,从而得到了固体的能带结构,然后再引入电子间的相互作用加以修正.这样的理论处理显然适用于弱关联的电子体系,即高浓度的电子体系,其电子简并能大大超过了电子之间库仑相互作用的势能,也就是通常的宽能带物质的情况.能带理论的巨大成功往往掩盖了这一理论的不足之处,即它并不适用于强关联的电子体系,即电子浓度甚小的物质,标志电子之间库仑相互作用的关联能的重要性被突出出来了.这类材料往往具有很窄的能带,只比完全局域化的能级略宽一点.早在 1937 年,科学家就发现 NiO, MnO, CoO 等氧化物并不是能带理论所预言的金属,而是能隙甚大的绝缘体,这一结果引起了固体理论学家的

关注^[11]. N. F. Mott 引进关联能来解释这一物理问题,认为 d 电子间库仑相互作用抑制了极化涨落,产生了关联能隙.后来这一类绝缘体即被称为莫特绝缘体.莫特还进一步讨论了 VO₂, V₂O₃ 等材料因温度或压力改变所引起的绝缘体到金属的相变,认定它们也是电子关联导致的相变,后来被称为莫特转变^[11].

莫特绝缘体为数不少,几乎占了 3d 过渡金属二元氧化物中的一半,还有难以数计的多元复杂氧化物和 4f 稀土化合物及 5f 锕系化合物.

图 3 4f, 5f, 3d, 4d, 5d 元素的 1 壳层体积与晶体的 Wigner - Seitz 元胞体积之比随它们在周期表中位置的变化关系

强关联物质往往处于金属与绝缘体的界限附近,即电子处于完全离域化的扩展态和完全局域化有能级之间.要判断电子是离域化还是局域化,就要看 f 电子或 d 电子波函数的分布范围是否和近邻产生重叠.图 3 画出了量子力学分析给出的 4f, 5f, 3d, 4d, 5d 的元素的 1 壳层体积与晶体的 Wigner-Seitz 元胞体积之比^[12].可以看出,电子壳层体积以 4f 为最小,5f 次之,其后乃是 3d, 4d 与 5d.这样,可以确认,电子态局域化程度的顺序大致为 4f > 5f > 3d > 4d > 5d;换言之,电子态形成的能带宽度按此顺序增加,而关联性则按此顺序递减.还可以看出,从左往右穿过周期表时,部分填充电子壳层

的半径逐步降低,而关联性则逐步增强.利用以上规则,科学家画出了一张准周期表(见图4)^[12].表上画出了两根斜线,将线外划分为两个区域:一是左下角,离域能的能带效应占优势;另一是右上角,反过来,局域化和关联性占优势.在两条线的中间或近邻,是强关联(窄能带)的区域.在这区域内,材料常会出现反常的物理性质.

图4 显示稀土、铜系过渡金属的f,d轨道局域化趋势的准周期表

我们来分析一下准周期表和它的斜线区:具有强铁磁性的金属Fe,Co,Ni都在斜线区域之内,它们的d能带具有强关联性,它们的电子巡游相互作用是其铁磁性的根源;但由于窄的d带和宽的s带交叠,因而它们的导电性仍接近于正常金属.和斜线邻近的Mn和Cr,在低温下具有反铁磁性.而以Fe₂O₃为重要成分的铁氧化物,如尖晶石型的NiFe₂O₄,石榴石型的Y₃Fe₅O₁₅(YIG),磁铅石型的BaFe₁₂O₁₉和钙钛石型的YFeO₃,都是具良好的绝缘性能的强磁性材料.它们通常是亚铁磁性,即磁矩不相互抵消的反铁磁序.其反铁磁序的根源在于磁性离子通过间隔的氧离子的超交换相互作用而实现的,而超交换相互作用也和强关联有关,如Anderson的超交换理论所指出.另一方面,强关联还可以导致由C. Zener提出的双交换作用,使某些复杂氧化物具有铁磁性和金属导电性,如La_{1-x}Ca_xMnO₃(0.2 < x < 0.4)即为一例.值得注意Mn,La均在准周期表上为斜线区域的近邻.

我们再来看重电子金属^[11].斜线区中或近邻的Ce,U,Np等元素,成为这些合金的必要成分.它们的特征在于低温比热异常地大,从而可以推断其电子的有效质量 m^* 与自由电子的质量 m 之比值异常地高($m^*/m \sim 100-1000$),名副其实的是重电子,例如CeAl₃的比值为600,CeCu₆为740,CeCu₂Si为460,UBe₁₃为300,NpBe₁₃为280,UPt₃为178,而U₂Zn₁₇与UCd₁₃均大于100.如此重的电子应接近于局域态,但这些合金又均具有金属导电性,使人困惑不解.重电子合金中,CeCu₂Si₂,UBe₁₃,UPt₃在低温具有超导电性,但 T_c 不高,均小于1K.但其超导电性质,由于偏离常规,因而被科学家所注意研究.在常规超导体中,少量磁性杂质就可以破坏超导电性;但在重电子超导体中,反铁磁关联可以和超导电性共存.看来它的电子配对机制与BCS理论的有些不同,可能是由于电子间的直接相互作用.

如果说研究重电子合金的兴趣主要是由于理论上有意义,那末,氧化物高温超导体的发现,就因其潜在的巨大实际意义而轰动全球^[13].La-Sr-Cu-O,Y-Ba-Cu-O,Bi-Sr-Ca-Cu-O,Tl-Ba-Cu-O,Hg-Ba-Ca-Cu-O等相继问世, T_c 值已达到135K.在这些材料中,准二维的CuO₂平面起了关键性作用.以La-Sr-Cu-O系的相图来看,在掺杂浓度 x 为零的材料是反铁磁序的莫特绝缘体,随着 x 的增大,发生了绝缘体到金属的转变.而在低温就具有超导电性,随着 x 的增大, T_c 达到一峰值之后,又逐渐下降.高温超导体的正常态的电子性质都十分异常,这也是强关联材料的一种特性.

值得注意的是,近年来在La-Ca-Mn-O系的材料中又发现了超巨(colossal)磁电阻效应^[14],加上磁场后的电阻变化率 R/R 值可达到 10^3-10^6 .这种材料的铁磁性的根源是双交换相互作用,而且磁性转变与绝缘体-金属转变相邻近.磁场在这类材料引起的电阻变化的量级达到 10^6 .显而易见,这种异常的物理性质将会得到技术上的应用.

应该指出,我们对于强关联体系的科学认识

尚不完备,这方面科学的研究,不管是实验上还是理论上的都尚有待深入.从材料研究的角度来看,这些多元复杂结构的氧化物是尚未勘探清楚的新材料的“富矿区”.过去,像铁氧体这类适用于高频技术的磁性材料的开发实验早于超交换相互作用理论的提出,更不要说 Fe, Ni, Co 具有强铁磁性是早已众所周知.在 J. G. Bednorz 与 K. A. Müller 发现氧化物超导体过程之中,机遇起了重要的作用.随着对强关联体系物理学的较深入的了解,将会大大地促进这一领域中新材料的勘探和开发工作.

3 迎接有机物质的挑战

具有复杂结构的有机物历来是化学家的世袭领地,物理学家很少问津.固体物理学在对于结构简单的金属和半导体等材料的研究取得了巨大成功之后,就企图突破简单结构物质的框架,关注于结构更为复杂的物质.固体物理学向凝聚态物理学的发展就反映这一动向.这一发展体现为理论范式的重建,通过对称破缺这一主线,从基态、元激发、缺陷和临界现象为基本内容,就可将在简单体系中行之有效的许多概念和方法延拓到复杂结构的体系之中.液晶物理学和分子物理学的日趋成熟,表明了这种努力收到了实效.许多有名的凝聚态物理学家,如 P. G. de Gennes, S. F. Edwards, J. R. Schrieffer 等都参与了这项工作,de Gennes 还由此而获得诺贝尔物理学奖.

液晶既具有液体的流动性,而又具有类似于晶体的各向异性光学性质^[15].一般而言,它的分子是棒状的(见图 5),按其对称性和有序性,可以分为三种类型:向列型、胆甾型和近晶型(见图 6).它是分子取向有序和位置无序的体系.在受到界壁以至电场和磁场的作用时,可以改变其分子排列的方向.长期以来它只是作为一件珍奇事物,只受到少数科学家的研究,脱离了现代物理的主流.到 70 年代初,扭曲液晶盒中电光效应的被发现,一举奠定了液晶在光显示器件中的地位,也引发了对液晶进行基础研究的热潮.

在手表或计算器中的数字显示应用了向列型液晶,已经建立了上亿元的企业.胆甾型液晶的颜色受其螺距尺寸的影响,由于螺距对温度、压力和杂质都很敏感,故可用于测量体温、压力或化学分析.近晶 C 型的分子取向与层面法线有一倾角,若组成的分子具有手性,即成为近晶 C* 型,对称性容许 C* 型具有和层面平行的首发相化矢量,呈现了铁电性.利用铁电液晶可制成平板电视,目前正处于积极开发试制阶段,一旦成功,又将大幅度提高液晶在企业中的身价.

图 5 若干液晶分子的示意图

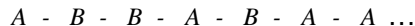
图 6 液晶分子排列的示意图
(a) 向列型; (b) 胆甾型; (c) 近晶型

近来小分子的电致发光已取得了长足的进展,例如苯基二甲撑 Alq_3 等材料,不仅可发射单色光,还可以制作能发出强烈白光(由三原色光混合而成)的发光二极管^[16],受到了学术界的重

视. 它的优点是价格低廉, 容易做到大面积的发光; 它的问题在于稳定性和可靠性还有待于改进, 因而, 要做到实用化还有一段距离.

我们目前是生活在充满高分子材料的世界之中, 当前全球合成的高分子材料的年产量已达到 1 亿吨, 就体积而言, 业已超过了金属材料. 塑料、纤维和橡胶等广泛应用于社会生产的各个领域和日常生活的各个角落. 生物体内的蛋白质、核酸、纤维素、多糖等是结构更加复杂的高分子.

长链中, 单体不一定等同, 如共聚物, 两种不同单元 A, B 无序地排列在链上, 如



也可以形成有序系列, 如块状聚合物. 两种聚合物又可以混合在一起, 形成共混聚合物, 亦被称为聚合物合金. 共混聚合物有两种情况: 一种是两类聚合物相容性较好, 构成均匀共混体; 另一类相容较差, 形成两相分离, 即不均匀共混体. 共聚与共混构成了剪裁高分子材料的基础.

高分子链甚长, 成为其结构特征. 柔性链的高分子材料中, 高分子就若一团乱毛线. 如何描述其构形就是一个重要的科学问题. 浓溶液或熔体可用简单的无规行走理论来解释; 稀溶液则可用自回避无规行走来解释; 介于其间的半浓溶液如何来处理呢? de Gennes 将它类比于磁系统, 采用临界现象的理论解决了这一问题^[17], 显示了凝聚态理论处理这一复杂体系的有效性. 又如高分子滞弹性行为则可用长链分子沿管道的蛇行理论来解释; 橡皮的高弹性是交联高分子体系的特征, 则用形变导致有序化造成熵的减少来予以说明. 要提高分子材料的强度, 使长链分子取向一致乃是一条有效途径. 尼龙纤维依靠拉制来获得高强度; 高分子液晶的取向脱溶则又是另一种强化的途径, 聚酰胺纤维(商品名 Kevlar) 就是一个突出的例子, 其强度业已超过了最强的钢丝(钢琴弦), 而其强度密度比更是高达钢琴弦的 8 倍, 是制造避弹衣的良好材料(见表 1).

表 1 若干材料的强度与密度

	拉伸强度 R (10^7N/m^2)	相对密度	$R/$
钢琴弦(钢)	200	7.8	26
铝丝	17	2.7	6.3
人造丝	30	1.56	19
聚酰胺纤维(Kevlar)	300	1.3	230
尼龙	100	1.15	87

图 7 若干形成聚合物的单体结构式

高分子系由大量的单体聚合而成(见图 7), 单元数可高达 $10^2 - 10^5$. 单体可以简单重复方式形成聚合物, 如



X, Y 为终端单元. 在聚乙烯中 $X = Y = H$.

高分子材料的电子性质是另一个备受重视的领域. 可以近似地将长链高分子看作为一维周期结构, 因而采用能带理论来处理其电子结构问题. 共轭高分子(如聚乙炔和聚噻吩)中的

孤子与极化子就受到物理学家的注意和研究,澄清了其导电机制^[11]。另外,通过化学家和材料科学家的共同努力,制出了取向相当一致的高分子导电材料,其电导率接近于铜的水平,而密度则小得多,其力学性能还算不错,这样就为高分子材料的应用开辟了新领域。高分子发光材料也取得不少进展:科学家发现苯乙炔 PPV 薄膜具有良好的发光性能,发射的波段为黄绿光。对其结构进行剪裁,如将共轭段与非共轭段嵌镶起来,可以使发光峰值蓝移。如果能够解决其老化与稳定性问题,也是很有发展前景的发光二极管材料^[18]。由于在分子材料中易于进行各种分子的配合的剪裁,可以使各种性能相互补充,从而达到优化的效果。最近科学家演示了聚合物层中获得了高效的光折变效应就是一个突出的例子^[19]:将优良的光电导性能和电光性能联合起来,使其净光增益达到了 200cm^{-1} ,而目前最好的无机光折变晶体的水平仅为 $20-50\text{cm}^{-1}$ 。这说明发展高分子功能材料还有很大的潜力。

以上这些进展说明,“分子电子学”经过多年的努力,已经具有不少实质性的内容了^[20],其中包括导电聚合物、显示器件、存储器件、磁体、生物传感器、计算元件、智能材料等。在这一领域进行工作,大体上可分为 4 步(见图 8): (1) 根据其应用的功能来选择特定的分子; (2) 剪裁分子使其具有特定的特征(电性能、构形、荷电量、光性能、自组装性能等); (3) 制成体现设定结构的超分子组装体; (4) 与基于无机材料(如 Si, SiO_2 等)的表面相相接。所选择的分子可以是一般的有机分子或生物分子。从实际的生物系统中往往可以获得有启发性的线索,例如肽花青,是植物和红细胞细胞的成分,可容许小于皮秒的开关时间,且不产生大量热量,因而可用光信号来触发,用于快速信息传递。上面我们已经提到对分子进行剪裁的实例。J. M. Lehn 所提出的超分子自组装的概念对于分子电子学的实践十分重要。此外,Langmuir-Blodgett (LB) 膜的方法以及激光淀积等方法也可以用来制备三维的多层分子膜。最后,如何和无机基质的表

面相相接,也是制成器件所必需解决的问题。这里我们无法细论有关分子电子学的材料问题。应该指出,这是一个具有强烈的挑战性,同时又富于机遇性的领域,期待着凝聚态物理学家和材料科学家与化学家和生物学家携手并进,共同来开拓。

图 8 分子电子学的研究层次(示意图)

4 结语

将以上三个方面的论述汇合起来看,有一条主线贯穿其间,即从简单到复杂,沟通了凝聚态物理学的发展和新材料的研制。第一部分所讨论的问题涉及从结构(包括晶体结构和电子结构)比较简单的物质之中发展新材料的问题,其主要对策在于引入超微结构这一层次来增加其复杂性,从而使材料的面目焕然一新。第二部分所论述的问题涉及电子结构具有复杂性的物质,一般而言,其化学成分也相当复杂。随着物理机制的逐渐探明,新的材料亦将不断涌现。第三部分所论述的问题,复杂性主要体现在分子和超分子的层次上,而且随着研究的深入,可以

更加充分利用众多层次上的复杂性来优化材料的性能. 目前,已经探明的部分还只相当于冰山浮露在水面上的部分,大部分问题还潜伏在水面之下,尚有待于进一步的探测.

参 考 文 献

- [1] 冯端、金国钧,凝聚态物理学新论,上海科技出版社,(1992).
- [2] R. Feynman, *Engineering and Science*, Feb. (1960) ,22.
- [3] R. M. White, T. H. Geballe, *Long Range Order in Solids*, Academic Press.
- [4] 夏建白、朱邦芬,半导体超晶格,上海科技出版社,(1995).
- [5] M. A. Huse et al., *Appl. Phys. Lett.*, **59**(1991) ,1272.
- [6] L. T. Canham, *Appl. Phys. Lett.*, **57**(1990) ,1046.
- [7] L. S. Liao et al., *Appl. Phys. Lett.*, **66**(1995) ,2882.
- [8] G. Prinz, *Phys. Today*, April(1995) ,58.
- [9] H. Gleiter, *Progr. Mat. Sci.*, **33**(1989) ,4.
- [10] 闵乃本,凝聚态物理学进展,江苏科技出版社,(1993) ,26.
- [11] P. P. Edwards, C. N. R. Rao, (eds.), *The Metallic and Nonmetallic States of Matter*, Taylor and Francis, (1985).
- [12] J. C. Fuggle, G. A. Sawatzky, J. W. Allen, (eds.), *Narrow Band Phenomena*, Plenum Press, (1988).
- [13] 张其瑞(主编),高温超导电性. 浙江大学出版社,(1992).
- [14] S. Jin et al., *J. Appl. Phys.*, **76**(1994) ,6929.
- [15] P. G. De Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd ed., Clarendon Press, (1993).
- [16] J. Kido et al., *Science*, **267**(1995) ,1332.
- [17] P. G. De Gennes, *Scaling Concepts of Polymer Physics*, Cornell Uni. Press, (1979).
- [18] J. H. Burroughs et al., *Nature*, **347**(1990) ,539.
- [19] K. Meerholz et al., *Nature*, **371**(1994) ,497.
- [20] R. S. Phadke, *Cond. Mat. News*, **4-4**(1995) ,18.

高级脑活动的功能性核磁共振成像*

崔 汪云九 陈润生

(中国科学院生物物理研究所,北京 100101)

唐 孝 威

(中国科学院高能物理研究所,北京 100039)

摘 要 功能性核磁共振成像(fMRI)技术可以显示大脑各个区域内静脉毛细血管中血液氧合状态所起的磁共振信号的微小变化.使用fMRI的方法,可以在正常的活体上无损伤地实现大脑活动的功能定位.时空分辨率可分别达到秒和毫米数量级,尽管目前还面临一系列技术上的困难,fMRI已日益成为观察大脑活动,研究人脑的拓扑结构,进而揭示脑和思维关系的一种重要方法.

关键词 功能性核磁共振成像(fMRI),大脑,认知活动

Abstract Functional magnetic resonance images (fMRIs) exhibit small differences in the magnetic resonance signal intensity in positions corresponding to focal areas of brain activation. These signal are caused by variation in the oxygenation state of the venous vasculature. Using this non-invasive and dynamic method, it is possible to localize functional brain activation, in vivo, in normal individuals, with an accuracy of millimeters and a temporal resolution of seconds. Though a series of technical difficulties remain, fMRI is increasingly becoming a key method for visualizing the working brain, and uncovering the topographical organization of the human brain, and understanding the relationship between

* 1995年10月16日收到初稿,1995年12月15日收到修改稿.