

无机功能材料的组合设计、制备和筛选

陈 荣

(国家自然科学基金委员会化学科学部, 北京 100085)

随着科学的不断发展和人类认识水平的提高, 科学研究的手段必然要求高效和多能, 研究的对象也日趋复杂和多样化, 组合化学就是在这样的形势下发展起来的。组合化学最早被用于合成肽组合库, 后来被用于药物的合成与筛选, 也称组合合成、组合库和自动合成法。组合化学是一门集合成化学、组合数学和计算机辅助设计等多学科交叉形成的一门边缘学科。因此, 组合化学可定义为利用组合论的思想和理论, 将构建单元通过有机/无机合成或化学法修饰, 产生分子多样性的群体(库), 并进行优化选择的科学。

组合化学从制药领域逐步发展到有机小分子/高聚物合成, 分子构造与分子识别, 均相和异相催化剂, 功能材料等诸多领域, 同样在无机材料科学的发展中也不例外。无机功能材料的制备, 除经常采用的制备手段固相反应、熔盐合金反应、配位化学、电化学等方法外, 更动用了包括离子溅射、激光沉积、金属有机化合物气相沉积等大型物理设备; 材料本身的尺寸也从过去的体相深化到纳米相, 更加注重材料的形貌、表面和界面特性, 组成更趋复杂, 复合材料、杂化材料更加引人注目。如何高效地设计和制备需要的材料体系, 调控体系的组成、相态和形貌, 同时确定其功能特性, 从而筛选出所需的功能材料, 是材料科学工作者追求的目标。组合设计、制备和功能筛选方法恰好满足上述要求。与传统的制备方法相比, 组合制备方法具有可大范围调控材料的组分, 利用最少的步骤同时合成和筛选大量材料, 降低材料制备过程的环境污染, 并已开始应用于高技术功能材料的研究和开发, 显露出十分巨大的发展潜力。

近年来, 美、日及欧洲发达国家政府和产业界纷纷投资该领域, 目的是想利用组合制备方法在材料科技竞争中占有更多的创新体系, 在高技术功能材料领域占据优势, 获取更大效益。就国内而言, 虽然以组合化学为主题, 国家自然科学基金委员会、科技部、中科院和教育部也曾专门召开包括“香山会议”在内的学术研讨, 以中科院上海硅酸盐研究所、中国科技大学和大连化学物理研究所为核心的研究组在科学院的支持下开展了相关的工作, 在有机合成和药物筛选等研究领域, 有单位也开始了有益的尝试。但就总体而言, 我国在这方面的研究还显得薄弱。

与制药行业不同, 材料领域的科学家更多的关注组合化学在具有特殊光、电、磁和催化等性质的化合物及合金化合物, 因此它的研究领域更宽广。虽然目前国际上组合化学在材料方面的研究刚起步, 但国内与国外相比还存在很大的差距。国内功能材料的合成与表征方面做了一些工作, 特别是在数据库与化学合成相结合方面有很多经验积累。在以下领域取得一些进展:

(1) 固体材料领域, 包括超导材料, 巨磁阻材料, 介电及铁电材料, 发光材料, 分子筛, 有机固体及高聚物。

(2) 有机及金属有机化合物, 包括模拟生物活性酶和肽的金属配合物, 非对称催化合成, 石蜡聚合催化的组合化学。

(3) 无机催化剂, 包括电致氧化、催化、合金化合物的组合化学合成, 作为均相催化剂的无机多核阴离子簇组合库的建立等。

另外人们还在组合库筛选方法方面进行创新,如利用红外热成像仪、扫描质谱仪以及活性染料分子进行快速筛选催化剂的方法,都大大提高了新型催化剂的开发效率。

组合化学作为合成化学的一个新分支,展现出巨大的发展潜力。组合化学与计算机科学相结合,特别是与数据库技术相结合,是组合化学发展的未来方向。

无机功能材料科学研究是无机化学研究的重要内容,组合制备技术对无机功能材料的研究也将产生巨大的推动作用。结合我国现有的工作基础,基于组合制备和性能测定方法的特长,我国无机功能材料组合化学研究应集中在具有特殊光、电、磁和催化等性质的材料上。主要在以下几个方面:

(1) 无机结构基元或虚拟结构基元的组合化学。以无机微孔材料、无机/有机杂化材料中存在的基本结构单元为基础,组合合成具有设计结构单元的化合物。功能材料组合库的合成与表征,包括无机功能材料,如发光材料、铁电及介电材料、巨磁阻材料等;

(2) 分子工程学研究中的组合化学。包括结构化学组合库的建立、特殊结构基元的组合化学、结构的多级调控和生物矿化过程模拟以及水热与溶剂热合成化学规律;

(3) 特殊技术和特定结构组合化学。包括激光喷涂组合化学研究、主客体组装组合化学等;

(4) 无机材料组合合成技术与表征方法的基础研究。各种合成体系的组合研究技术和表征方法不同,需要针对性研究;

(5) 固体氧化物燃料电池中新型中、低温(600~800℃)区工作的固体复合氧化物电解质材料的探索和筛选;

(6) 从热力学平衡角度研究材料的相态、结构及稳定性,获得所述材料体系的相图,同时进行性能测定,由此全面掌握不同组成、结构和工作温度下的材料特性;

(7) 无机材料组合化学基础理论研究。包括组合化学自身的理论研究。

无机材料组合化学研究应在具有雄厚无机合成基础的条件下,选择有潜力的方向开展工作,利用组合数学的理论思想来指导不同材料库的建立,完善材料合成的组合技术及筛选方法,将无机材料组合化学与数据库分析相结合,推动国内组合化学在无机材料合成中的应用,最终实现无机材料的定向合成。

基于以上考虑,经专家评审通过,国家自然科学基金委员会已对此进行重点项目立项,以跨学部交叉的形式支持此项研究。针对制备具有高效光、电、磁等性质的无机功能材料,发展组合化学的设计原理和方法,研究材料性质与结构(微结构)形貌和形态、制备条件等因素间的关系和规律,为所述无机功能材料的研究和开发提供新的方法和技术。