

## 钱学森开创的物理力学<sup>†</sup>

朱如曾

中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点实验室 (LNM), 北京 100080

**摘 要** 回顾物理力学的创立和半个世纪的发展, 表明物理力学对工程技术和力学基础研究的双重作用, 以及钱学森对物理力学的创建和发展的卓越贡献, 并展望物理力学的未来, 说明我们这代人负有主动促进物理力学发展的历史责任.

**关键词** 物理力学, 大跨度思维方式, 技术科学, 基础科学, 量子力学, (非)平衡态统计力学, 微观, 微观, 第一原理分子动力学

20 世纪初, 自然科学体系的建立使工程技术从以经验为基础的模式向以包括应用力学在内的技术科学 (按照钱学森的定义<sup>[1]</sup>, 技术科学是有科学基础的工程理论) 为基础的模式转换, 从而导致了 20 世纪下半叶高新技术爆炸般地涌现和成长. 这一欣欣向荣的非凡景象虽然有其历史的必然性, 但也不是自然形成的, 这与许多学识渊博、经验丰富并高瞻远瞩的学术领袖们指引了正确的研究方向是分不开的. 钱学森创立物理力学以及物理力学后来的发展就是生动的写照之一. 本文想对此作一些回顾和展望, 借以说明钱学森以他那智慧的大跨度思维方式所提出的物理力学, 作为技术科学, 已经并继续不断地对工程技术做出巨大贡献; 作为基础科学, 越来越显示出它是一种影响深远的学术思想和一条成果丰硕、日益宽广的力学基础性研究道路. 还说明我们这代人负有主动促进物理力学发展的历史责任.

### 1 物理力学学科的创立

#### 1.1 物理力学学科创立的基础与钱学森的大跨度思维方式

二十世纪三、五十年代, 随着火箭和喷气推进技术以及核能工程的兴起, 需要提供非常条件下的宏观物性, 例如很高温度 (譬如说,  $4000^{\circ}\text{K}$ ) 下物质的热力学性质. 对于这些物性, 直接的实验测量是很困难的, 有些是完全不可能的, 怎么办? 能否从当时已发现了的量子力学所给出的物质的微观知识计算物质的宏观性质呢? 钱学森的科学观肯定地回答了这一问题. 他认为, 不同的学科, 其对象都是相同的, 即统一的整个世界, 只是人们看问题的角度有所不同<sup>[2]</sup>. 既然量子力学和连续介质力学是分别从微观和宏观的不同角度对同一对象进行描写, 那么物质的微观知识与宏观知识之间必定存在着紧密的联系. 这种联系由沟通微观与宏观的统计理论所表示. 当时已建立了平衡态系综统计理论, 以涨落耗散定理、昂萨格对易关系和最小熵产生定理为核心的近平衡输运理论和以玻尔茨曼积分微分方程为核心的气体分子动理论以及适合于等离

收稿日期: 2001-10-25

<sup>†</sup> 谨以此文祝贺钱学森先生 90 周年诞辰

子体的符拉索夫方程等理论；还发展了量子化学方法、原子分子结构理论和量子辐射理论；并有光谱、色谱等实验技术。所有这些为基于一些间接测量和物质微观结构的知识进行真实宏观量计算的可行性提供了一定的基础。当时包括钱学森在内的一些科学家们确是在做着这样的重要计算工作，解决着重要的工程问题。但是钱学森毕竟是站在巨人肩膀上的人，他有广博的学识，精通上面所提到的微观理论、统计理论、宏观的理论和应用力学、喷气推进以及应用数学等领域，他有辩证唯物主义的世界观，还有独到的科学观、方法论和智慧的大跨度的思维方式，因此他在科学技术的发展上有准确的前瞻性，在物质及其运动的宏微观层次的巨大差异和复杂关系上，有雄才大略的驾驭力，所以他决不满足于有限问题的具体解决，而能准确地判断和预见到，这种扎根于物质的微观存在，服务于实际工程技术的计算和研究模式不仅仅是喷气推进等少数工程需要采用，而是未来相当普遍的工程中都需要并能够采用的。所以从科学技术的整个系统及发展来考虑，他断定，这种计算和研究模式及其工程目的已决定了一个极有发展前途，并且影响必定深远的新的力学分支。他把这一新学科命名为“物理力学”。为了吸引科学家和工程师们对这一新领域的注意，以推进其发展，他于1953年及时地发表了具有科学史意义的开创性文章“Physical Mechanics, a New field in Engineering Science”<sup>[3]</sup>，提出了“物理力学”这一新学科、新方向；回国后又于1957年发表了向中国学者介绍“物理力学”的文章<sup>[4]</sup>。由此可见，物理力学学科是在工程技术的迫切需要和自然科学体系的支持下，钱学森运用他那智慧的大跨度思维方式而作出的创新之举，这正体现了他后来所总结的“跨度越大，创新程度越大”的经验<sup>[2]</sup>。

### 1.2 物理力学的规范目的、内容和方法

没有规范则不成学科（这里，规范与著名科学史家 T.S. Kuhn 在其《科学革命的结构》中所提的范式 (paradigm)<sup>[5]</sup> 相近），规范起纲领作用、认识作用和指导作用。钱学森在上述两篇文章中，对物理力学的目的、内容和方法作了如下的规范：

物理力学的目的是从材料的原子、分子结构的微观性质预见其宏观力学性质。研究内容是工程所感兴趣的物质的宏观力学性质，它包括宏观平衡态性质和宏观非平衡态性质两大类。在方法上，原则上用量子力学和统计物理，但由于计算能力的限制，原子、分子的性质不能单靠量子力学导出，也要利用灵活的实验数据，物理化学和物理学的已有成果，甚至工程技术的经验规律；由于面临的是实际问题，内容复杂，因素较多，因此必须深入研究问题的机理，构造包括最重要机理在内的简化模型；物理力学是要解决具体问题的，因此问题的答案要真正可用，所以要运用最有效的数学工具和运算方法（包括简化和近似方法），把问题算到底，而不是停留于原则上的解决。这些规范使物理力学确实不同于统计物理、物理化学、物理学等学科。钱先生把上述规范概括为一句话：物理力学是用物理学的观点来解决力学里的问题。这一概括还为物理力学规范后来的发展留下了极大的空间。

### 1.3 物理力学的二重性及其统一性

物理力学由于它的目的、从而内容和方法都服务于工程，是一种有自然科学基础的工程理论，故属技术科学；另一方面，它从微观本质上研究物质的宏观力学性质，所以它还自然地代表了力学革命的方向和路线——力学的细观、微观化，因此它同时也是一门基础性学科和一条宽广的力学研究道路。自然界就是这样，既复杂又简单，宏观现象是复杂而令人眼花缭乱的，然而它由简单而井井有序的微观规律所操纵，你不走细观化、微观化的基础性研究道路，就得不到好的回报，得不到为现代和将来高新工程技术服务的技术科学充分知识，这就是物理力学二重性的统一性。春江水暖鸭先知，钱学森物理力学的提出预报了对技术科学依赖性极强的现代高新工程技术新时代和力学革命的来临。

#### 1.4 钱学森第一批物理力学的力作

除了撰文倡导和解释物理力学以外,早在1951~1954年,钱先生就发表了数篇物理力学方面的重要论文<sup>[6~9]</sup>内容涉及液体特性、高温高压气体的热力学性质、双原子气体的辐射计算和光谱吸收系数的计算.这些文章每篇都清楚地体现了物理力学的规范和风格以及钱学森解决困难问题的灵活高超的技巧,并在当时的喷气推进等工程中起到了技术科学应有的作用,堪称物理力学论文的楷模.钱学森的这些论文与当时国际上其他科学家的同类论文一起构成了以简化和近似手法为特点的第一批物理力学论文.同时他在加州理工学院亲自给 Daniel and Florence Guggenheim 喷气推进中心的研究生们讲授“Physical Mechanics”课程,传播他的学术思想,大力培养具有物理力学风格的技术科学专家,用的是他自己编写的讲义,此讲义就是他回国后出版的《物理力学讲义》<sup>[10]</sup>前身.

从此,一个新的、从应用和基础两方面看都富有极大生命力的力学分支学科就以钱学森的倡导文章、学术论文和讲义为标志而拉开了发展的序幕.而创建物理力学这一举措的正确性和远见性已为下文要讲的,后来国内外的发展状况所证明.

## 2 物理力学之路越走越宽、影响日益增大

### 2.1 我国物理力学队伍的建立和壮大

1955年钱学森回国后,为了促进祖国科学技术、国防和民用工业的发展,决心大力倡导发展包括物理力学在内的技术科学,增加科技储备.用现在的话来说,就是他当时(实际上更早些,是1948年<sup>[11]</sup>)就认识到科学技术是第一生产力.为此,于1957年,他在《科学通报》上著文“论技术科学”<sup>[1]</sup>指出物理力学和计算技术等十项技术科学的新方向应该大力发展.为了培养技术科学人才,1958年,在他与其他一些有远见的科学家的建议下,在北京成立了中国科学技术大学这一理工综合型大学.

为了发展物理力学,1956年钱学森在他领导制定的《我国科学发展的十二年远景规划》中,把物理力学列为边缘学科之一.1956年和1962年两次自然科学规划中都将物理力学列为重点.在他和郭永怀的主张下,中国科学技术大学设置了化学物理系,郭永怀任主任,下设物理力学专业,他亲自授专业理论部分,并在百忙中抽空答疑,教材就是他的《物理力学讲义》,笔者就是有幸聆听他讲课的学生之一.文革前先后培养了三届毕业生,1962年还招收了一届研究生.他对物理力学发展前途的无限信心和对后辈的殷切期望充分地流露在他鼓励学生们的言语之中:“我们只是物理力学的第零代,你们才是真正的第一代.”在他自己领导的中国科学院力学研究所,他推进物理力学研究的构思是三大步:建立队伍→培养→接受国家任务.1956年,他在力学所成立了一个物理力学研究小组,并亲任组长,后来逐步扩大,到1964年底,成立了包括高温气体、高压气体、高压固体、高温辐射和临界现象等方向的物理力学研究室.他培养的方式是通过每周一次的室内定期学术讨论会,要求大家轮流作学术报告,最后由他作评论和指导,当时许多研究课题即来源于这样的讨论会.到1965年,物理力学研究室已发展到50人的规模,建立了一个初具规模的高温激波管实验室,初步建成一支有攻坚能力的研究队伍,并承担了若干国家任务.

在全国范围内,由于他的倡导和影响以及葛庭燧、吴有训、苟清泉和孙湘等的积极支持或参与,国内吉林大学、中科院物理研究所、合肥固体所、东北金属物理研究所、哈尔滨军事工程学院及有关国防科研单位都纷纷搞起了物理力学研究.1966年,当条件成熟时成立了中国力学学会第一届物理力学专业委员会,召开了第一届全国物理力学学术讨论会.钱学森为了动员当时力量已较强大的物理学界关心和参与新兴的物理力学的发展,第一届全国物理力学学术讨论会是同原子分子物理讨论会联合召开的,名为“原子分子物理与物理力学学术讨论会”.

文革期间虽然处境困难,但不少单位仍坚持工作,做出了成绩.改革开放以后,在谈镐生促成召开的,郑哲敏主持的1978年全国力学规划会上,钱学森亲临讲话,强调力学的技术科学性质和力学的微观化道路.在最后制订的规划中,物理力学被列为要重点发展的边缘科学之一.力学所也恢复了物理力学研究室.此外,钱学森还曾根据我国和世界科技发展状况,先后对物理力学的规范作了四次发展(具体内容后面将详细论及).在这些举措的促进下,物理力学研究工作恢复和发展得很快,到1986年便恢复成立了第二届物理力学专业委员会和每三年一次的全国物理力学学术讨论会.到现在队伍已相当壮大,研究队伍和研究工作比较集中的已有中科院力学研究所高温气体动力学开放实验室和非线性力学国家重点实验室、中科院金属研究所中科院国际材料物理中心、钢铁研究总院电子结构组及清华大学电子结构组、吉林大学原子与分子物理研究所超硬材料国家重点实验室,航天部二院二零七所、国防科技大学、四川大学原子与分子物理研究所及高温高压物理研究所、中国工程物理研究院应用物理与计算数学所、西南流体物理研究所、中国科学技术大学、中国科学院固体物理研究所、中国科学院物理研究所、北京理工大学应用物理系材料科学研究中心、中国空气动力学研究与发展中心高速所、云南大学物理系、浙江大学材料科学与工程学系等单位.各单位之间密切合作,互相交流,除国内会议外,还经常参加国际会议,不少专家在国外有一定影响.

## 2.2 物理力学的需要、内容和方法的不断扩大与规范的四次发展

半个世纪以来,世界科学技术的发展状况使物理力学变得比它刚被提出时更为重要,内容更为充实,方法也更为有力,充分显示出钱学森建立这一学科的远见性.

### 2.2.1 物理力学的需要和内容的继续扩大

(1)出现了更多、更复杂或极端条件下的力学问题,需要用微观分析的方法阐明介质和材料的性质;(2)用本构关系表达材料的塑性变形与强度出现的困难,以及人们对固体材料断裂过程的宏观表现对微观差异跨尺度敏感性的认知使力学的物理化和微观化更为迫切;(3)新材料如纳米材料、智能材料、微机械、纳米机械中的力学问题和材料设计目标的提出;(4)现代高速飞行技术、现代燃烧技术、现代高温化工或等离子体化工、强激光等等技术导致气体动力学的内态化以及化学反应流和辐射气体动力学的兴起.

### 2.2.2 物理力学基本方法的新发展

(1)平衡态和非平衡态统计力学都有了很大发展,为物理力学分析问题提供了新概念、新理论、新思路 and 得力的新工具,如格林函数理论<sup>[12]</sup>;临界现象理论中的标度律和普适性概念和重正化群理论;非平衡过程随机理论中的广义Master方程,非平衡统计算符法,广义正则算符法和关于开放系统用投影算子法得到的广义郎之万方程,Prigogine等从等价于刘维定理的BBGKY方程链出发,建立的关联动力学普遍理论<sup>[13]</sup>,还有非平衡热力学和非平衡动力学方法方面的许多进展.对近平衡态输运系数建立了统一理论.对于系统在外参数变化下的行为,已形成了这样的一般认识:非平衡定态的线性区是稳定的,达到某一临界点则失稳,在涨落的触发下,发生非平衡相变,进入另一对称性或遍历性不同的非平衡定态、耗散结构或混沌.(2)量子化学方法、原子分子物理继续发展,为物质微观图像的清晰化提供了基础.(3)早在1957年就被钱学森在“论技术科学”一文中列为应该大力发展的十项技术科学新方向之一的计算机技术获得了迅速发展,出现了大容量高速电子计算机,使大规模计算成为现实,促成了分子动力学方法、蒙特卡罗方法和从头算分子动力学方法的发展<sup>[14~15]</sup>,为研究介质及材料的平衡或非平衡态乃至瞬态力学性质,提供了有力的方法.(4)微观实验技术有了重要突破,已出现了原子力显微镜和扫描隧道显微镜等新型观测分析仪器,可实现原子分辨的观测,为原子尺度的微观力学理论分析提供了实验数据.

### 2.2.3 钱学森对物理力学规范的四次发展

半个世纪以来, 根据上述世界科技发展状况向物理力学提出的高要求和所提供的新条件, 钱学森曾先后四次调整和发展了物理力学的规范. 第一次是在 1966 年召开的第一届全国物理力学学术讨论会上. 钱学森根据当时计算机能力较差, 但原子分子物理无论在世界还是在我国都已有长期积累, 做了“如何从原子分子物理出发搞发明创造”的重要报告, 指明了当时条件下发展物理力学的最佳途径是从原子分子物理出发, 这一号召还起到动员一大批原子分子物理学者转向物理力学方向, 或有意识地与物理力学研究结合起来的作用. 第二次是在 1978 年的全国力学规划会议上, 他建议采用苟清泉提出的“细观”概念. 从此细观力学的概念得到公认, 并明确纳入物理力学的范畴, 成为物理力学在固体问题上的当时的侧重方向. 第三次是在 1985 年. 当时, 虽然如上所述, 统计力学已取得很大进展, 但是在简化和近似方法的基础上完成实际物理力学计算的能力仍很有限, 特别是对于稠密系统, 另一方面, 随着计算机能力的迅猛增强, 国际上开始兴起量子力学密度泛函理论与分子动力学相结合的从头算方法. 钱学森看到这一方法会使物理力学解决实际问题的能力大为提高, 研究面貌大为改观, 他向苟清泉和崔季平建议把巨型电子计算机的计算能力用到固体物理力学的研究中去, 从量子力学开始, 严格地算, 尽量不用简化和近似手法. 这就明确指出固体强度问题也要走微观道路. 第四次是 1993 年, 他在给崔季平的信中指出物理力学的范围应包括纳米材料的性质研究, 并建议崔季平成立一个研究所, 以促进物理力学的发展.

物理力学规范的四次调整和发展, 对物理力学在我国的持续进展起到了不断推动的作用, 使物理力学之路越走越宽.

### 2.3 物理力学的学术思想在国际上产生了深远的影响

物理力学思想的正确性使它从一开始就在国际上得到了普遍承认并产生了极大影响. 其最显著的几项标志是钱学森的《物理力学讲义》在出版后不久就被译成俄文, 并被广泛引用; 1964 年, 前苏联乌克兰科学院成立了现在在国际上很有影响的“物理力学研究所”(英译名是 Karpenko Physico-mechanical Institute of The Ukraine Academy of Sciences), 主要研究方向是用物理力学的有关方法研究固体材料的强度、塑性、韧性和断裂. 1965 年该所还创办了《材料的物理化学力学》期刊. 1986 年美国国家标准局蔡锡年博士明确认为, “分子动力学是钱学森教授在 50 年代初创立的物理力学的延伸”<sup>[16]</sup>. 随着国际上力学微观化总趋势的发展, 2000 年, 俄罗斯科学院西伯利亚分院强度物理和材料科学研究所又创办了国际杂志《Physical Mesomechanics》. 除去明确挂上物理力学牌子的单位以外, 那些未挂牌子而实际搞物理力学研究的单位就是数不胜数的了.

近十多年来, 计算机技术的突飞猛进所促成的分子动力学和蒙特卡罗法及第一原理分子动力学的发展, 对物理力学来说简直是如虎添翼. 可以毫不夸张地说, 物理力学从微观到宏观的研究模式已成为当今材料科学和力学学科的世界潮流. 具体例子将在第三节提及.

## 3 半个世纪以来物理力学的丰硕成果和对工程技术的巨大贡献

一切使用量子力学、原子分子物理学和统计力学来解决工程技术所提出的力学问题而取得的成果都应属于物理力学的成果和贡献. 显然物理力学的成果和贡献数不胜数, 最突出的应数中外核爆炸、核受控、现代航空航天技术、微机械、纳米科技等. 可以毫不夸张地说, 没有物理力学, 这些工程将一事无成. 现以我国为主, 略举数例如下:

(1) 高温、高压下的辐射不透明度和物态方程等问题的研究

①为供核爆炸、飞行器再入大气现象、强激光与材料相互作用研究的需要, 已形成了系统

的关于原子分子的电子结构计算方法和辐射理论,为吸收及散射截面提供了系统的实用计算方法,归纳在赵伊君等的著作中<sup>[17]</sup>;赵伊君等并已用气体物理力学方法对有关的辐射流体力学中的高温状态方程、不透明度进行了计算,完满地完成了军工任务。

②对于高温高压下局域热动平衡系统的辐射不透明度问题,徐锡中等人从相对论自治场平均原子模型出发,取得了很好的结果,并研制了程序,满足了重大国防任务的急需。

对于经历离解、电离、化学反应等各种过程和多种相变的物质,他们发展了一整套提供全区域物态方程的规范方法,不仅给出物态方程函数形式,还给出数据库形式。四十年来,根据国家项目的需求,共作出近40种材料的全区域物态方程及相应的数据库。在完成这些艰巨的工作中,他们在理论和方法上也取得了不少成果。在实验上,经福谦等人建立和发展了炸药平面透镜及二级轻气炮等物态方程新的实验技术,可以测量金属材料在约500 GPa以内的 Hugoniot 曲线,其冲击波速度测量的不确定度达到了国际先进水平。

③陈致英、周富信等人提出了一个预测炸药最高装药密度的经验方法,与国际上同类工作相比,该方法精度高,使用方便。他们还用 Monte Carlo 方法研究了纯物质和混合物的状态方程,得出在计算多元混合物的热力学性质和炸药爆震参数时,应当采用单液范德瓦尔斯混合物模型,特别是当各组分分子势参数相差较大时更是如此。

#### (2) 高压效应、高压相变理论和应用以及二维 Ising 模型解法研究

①苟清泉从原子与分子的结构理论出发,提出了在高温高压条件下石墨转变成金刚石的结构转化理论框架,包括微观机理、触媒作用机理及其优选原则以及金刚石的粘结晶理<sup>[18]</sup>,并得到了多次重复的实验证明。他还从理论上预言 LiH 和 LiD 有一个新的相变,这些工作受到国外同行高度评价和重视。

②邹广田等人在高压相变与压力导致的新效应、地球及行星内部物质的高压、高压实验技术、超硬材料和多功能高压相材料方面取得了一系列成果,获教育部科技进步一等奖1项,二等奖1项,三等奖2项。

③朱如曾、孙祉伟等人于1990年发现二维 Ising 相变模型著名的 Onsager 解法中所用的复正交矩阵区对角化条件是错误的,他们给出了正确的条件,使该解法的基础更为坚实<sup>[19]</sup>。

#### (3) 离子化气体和高温气体的化学反应及其动力学研究

崔季平、竺乃宜等人研究了激波管诱导的电离及其过程,对激波引发电离的平衡与非平衡的本质了解及数据的累积起了非常积极的作用,并应用于再入体等离子体鞘套的研究,为开拓再入通讯的可行性途径取得了实际效果,获得了中国科学院与航天部的科技进步奖。利用单脉冲激波管研究含卤碳氢化合物及其它有机物燃烧的动力学,研究了含氯氟聚合物的烧蚀动力学及其气相产物的化学反应,系统地测定其速率常数,获得中国科学院科技进步二等奖。

#### (4) 气体化学反应速率常数的微观理论及化学平衡态下的统一分布研究

朱如曾<sup>[20]</sup>于1982年针对反应位能面上存在低洼的普遍情况,给出基元化学反应的微观速率常数公式;在反应物服从玻尔茨曼分布的条件下,进而导得反应的宏观速率常数公式,并给出其中穿透系数的表示式。在反应位能面上低洼深度为零,且穿透系数与温度关系不大时,宏观速率常数公式退化为经典的 Eyring 公式。这一工作被高等学校教学参考书《化学反应动力学原理》(赵学庄等,高等教育出版社,1990年)等书刊所引用。朱如曾、孙祉伟于1982年对多组分化学平衡态的气体引进了“假想分子”等概念,从而给出了统一的玻尔茨曼分布,简化了有关计算。

#### (5) 气流介质与激光相互作用的理论和数值研究

高智、严海星、朱如曾等人对气流介质与激光相互作用的体系提出了气流介质用连续介质描写、激活分子用分子运动论方程描写、辐射场用经典描写并采用光强叠加原则,突破了传统

的速率方程框框, 适用范围更宽广, 得到了明显改进了的宏观输出结果, 并解释了过去不能解释的反常烧孔效应. 获中国科学院自然科学二等奖.

#### (6) 液体结构的分子动力学研究

对于简单液体的局部结构, Nelson 等人于 1984 年提出的键球谐函数法, 由于含有键序参数, 对局部结构的描述具有了完备性, 是一种很有前途的方法. 但在分子动力学模拟中对体系键序参数与标准构型键序参数相比较时, 难以得到定量的结果. 程兆年等在分子动力学模拟中提出了等近邻键序参数方法, 克服了这一困难.

#### (7) 量子蒙特卡罗方法研究<sup>[21]</sup>

孙祉伟 1983 年至 1993 年在美国 UC Berkeley (加州大学伯克利分校) 及罗伦兹 (Lawrence Berkeley National Laboratory) 国家实验室工作期间, 从事量子 Monte Carlo 研究, 在电子相关函数的形式、波函数最优化、电子随机行走特性研究方法、Motropolis 随机行走效率的提高、能量导数计算方法等方面取得多项重要成果, 发表有关文章 20 余篇, 被 SCI 收录杂志引用的次数超过 120 次. 加州大学伯克利分校的 Lester 教授在他最近撰写的文章 “Research Developments and Progress During the Nineties” 中, 较为详细地介绍了孙祉伟在量子 Monte Carlo 研究方面的贡献.

#### (8) TFD(Thomas-Fermi-Dirac) 理论的改进及其对材料研究的应用<sup>[22]</sup>

程开甲等人根据电子密度函数连续条件和能带理论对 TFD (Thomas-Fermi-Dirac) 近似提出了新的边界条件. 据此建立了系统的电子理论分析计算方法. 这一电子理论已用于材料性能研究的实际问题中: (1) 给出了与实测相符的金属及多元合金的状态方程; (2) 证明了复合薄膜材料间界面上存在巨大的内应力, 微米级厚度内的应力值可达 GPa 量级, 与实测结果相符, 据此分析计算, 提出了改善半导体材料表面张力的有效途径; (3) 对纳米级材料的特性开展了研究, 给出位错可以存在的极限尺寸, 提出共晶结构的机制.

#### (9) 晶界弛豫研究

葛庭燧等人于 80 年代以来, 揭示了晶界弛豫具有一个临界温度, 从而提出了一个适合于各种温度的综合的晶界模型. 发现了竹节晶界内耗峰, 并阐明其机理, 从而揭示了晶界附近的位错亚结构能够影响晶界本身的性质和结构, 这对于多晶金属力学性质的研究提供了一个广阔的途径. 他还发现晶界与邻域位错的非线性交互作用, 为奠定非线性滞弹性这门新学科提供了实验基础.

#### (10) 固体力学性质的第一原理分子动力学研究

①美国加州理工大学材料模拟中心 W. A. Goddard III 等人<sup>[23]</sup>, 对于材料的力学性质计算, 提出了一套从第一原理 (即量子力学密度泛函理论) 出发连续计算的多尺度方案, 并已用于研究金属、氧化物、陶瓷和多聚物的力学性质, 位错芯的结构、能量和运动, 还将研究金属和氧化物的相形为, 以及金属和合金中的缺陷机制等, 此外, 他们已进入原子设计和纳米机器和纳米装配的模拟.

②英国剑桥大学凯文迪什实验室 R. Q. Hool 和皇家学院的 M. Nekovee 等人<sup>[24]</sup> 提出了可用于真实材料模拟的, 密度泛函理论与量子蒙特卡罗方法相结合的第一原理分子动力学方法, 其中, 采用以密度泛函理论为主干, 但用量子蒙特卡罗方法精确计算 “交换关联穴” 的形状, 以消除密度泛函理论中半唯象的交换关联能项所带来的误差, 计算结果的精度将没有限制 (当然 Born-Oppenheimer 近似以及原子核运动的牛顿近似带来的误差还是存在的). 他们正在对用局部密度近似第一原理分子动力学方法已经得到的硅的自由能和熔点, 重新用这一方法提高精确度, 并预期这将会对地心情况的研究有用处.

③李微雪和王自强<sup>[25,26]</sup> 在局部密度近似密度泛函理论中采用赝势平面波基, 对金属铝和

双原子组分材料  $\beta$ -SiC 在各种加载方式下的力学行为进行了系统分析。

#### (11) 电子结构与跨尺度物性耦合研究<sup>[27~28]</sup>

王崇愚等人从 80 年代初期以来, 基于密度泛函理论及第一原理离散变分方法以及多重散射波 Xa 方法和格林函数递推方法并结合分子动力学方法和有限元方法以及位错理论, 较广泛地研究了金属缺陷复合体电子结构及掺杂效应, 给出了键合特性(原子间相互作用能)及缺陷体系的能量表述, 建立了相关的计算模式, 探索或揭示了电子结构与物性耦合机制, 为材料组分设计提供了一定的理论研究基础。

#### (12) 固体破坏问题研究

固体破坏是力学中典型的复杂现象之一, 曾被钱学森归入物理力学中“连基本概念也还不十分清楚的问题”<sup>[9]</sup>。由于这类问题的异常复杂性, 不能期望问题能在物理力学的标准上一蹴而就解决, 因此从不同角度进行探讨(甚至一些十分简单的模型)而取得一些见解和启示, 是十分必要的。

##### ① 固体破坏的共性特征研究<sup>[29]</sup>

白以龙、夏蒙莽等人近十年来将力学、统计物理学及非线性科学结合起来, 研究固体的损伤和破坏问题。指出其复杂性主要起源于多尺度非均匀性与动力学非线性的耦合效应。特别是, 探讨和揭示了固体破坏的一些共性特征。这方面的进展大体可分为以下两个方面:

- 发展了统计细观损伤力学。基于微损伤成核、扩展和连接的细观机制和统计物理学原理, 导出了微损伤的统计演化方程, 并给出了微损伤数密度随时间演化的基本解。在此基础上, 导出了宏观损伤场的演化方程, 从而构成了应力、变形和损伤相耦合的场方程组。由上述统计演化方程还自然地引出了一个联系细观和宏观损伤的无量纲数。

- 基于耦合斑图动力学演化模型, 提出了非均匀脆性介质损伤破坏的演化诱致灾变的概念, 即整体稳定的损伤积累会导致灾变性破坏。发现了演化诱致灾变的样本个性行为的显著差异性。样本个性行为显著差异性的机理是一种跨尺度敏感性, 是细观无序性效应在非线性演化过程中被强烈放大的结果。但是演化诱致灾变也显示某些共性特征, 如: 临界敏感性和跨尺度涨落。接近灾变点时, 系统的敏感性显著提高, 在演化诱致灾变过程中出现从细观到宏观的强烈涨落。

这些结果在材料破坏及地震预测领域已引起学术界和工程界的重视。

##### ② 固体断裂过程的协同论观点研究<sup>[30]</sup>

近二十年来, 俄罗斯科学院西伯利亚分院强度物理和材料科学研究所 V.V.Panin 等人根据已有的实验结果和理论分析, 主张把位错运动与应力引起的细观和宏观尺度的缺陷都予以处理。对固体材料的断裂过程, 采用“物理细观力学”的方法和协同论的观点考虑应力集中区的剪切失稳, 后者在不同尺度上的发展使得损伤逐渐积累以致失效。得到了如下一般性的原则和框架: 荷载下的固体是一个自组织多尺度高度非平衡的系统; 剪切流作为微观、细观和宏观尺度剪切失稳的协同演化而发展; 对三种尺度上的缺陷的类型、性质、产生原因、运动特点、相互关系以及所涉及的细观耗散亚结构、标度不变性等给出了原则描述。对具体材料和荷载条件, 这样得到的数据输入计算机, 可用于材料力学性质的表征和计算机辅助设计。

##### ③ 固体断裂非平衡统计理论研究<sup>[31]</sup>

邢修三等人自 60 年代以来尝试用非平衡统计方法研究固体材料的断裂问题, 提出了一个微裂纹相互独立的简化的理想模型, 其中微裂纹的成核和长大速率由位错模型决定, 并受到马尔科夫性质随机力的作用, 从而微裂纹长度概率分布的演化遵从福克-普朗克方程。据此给出微裂纹分布函数随时间的变化, 进而应用最弱链条件, 得到材料的断裂几率、可靠性和各种宏观力学量的统计分布函数、统计平均值和统计涨落表示式。此工作 1997 年获得国家自然科学基金三等奖。



#### ④材料断口分形研究<sup>[32]</sup>

龙期威等人将分形理论和材料组织结构以及线弹性断裂力学相结合,于1985年推导出,并在1988年实验证实了断裂韧性是断口分维的指数函数,这是国际上继 Manddrot 等1984年在 Nature 上发表的经验定性关系之后这方面最早的工作. 论文引起国际上广泛重视和讨论,并获中科院1993年自然科学二等奖. 1993年结合材料多层结构特点提出多度域分形新概念. 从实验和理论上否定了国际上提出的断口在微米度域范围的分维是普适值的说法,后来美国国家研究委员会报告(1999)也不同意普适值的看法. 共发表论文140多篇,被引用315次以上(扣除自引). 他的指数关系和多度域分形处于国际领先地位. 这些工作是他2000年获得何梁何利科技进步奖的主要内容之一.

#### (13) 固体界面物理力学研究<sup>[33]</sup>

周富信等人应用分子动力学方法,在国际上首先使用 Cu 多体相互作用势,并在此基础上首先构造了 Cu-Bi 和 Bi-Bi 多体相互作用势,用来研究铋在铜晶界中的偏聚. 结果模与实验相符,从而从原子层次上解释了晶界断裂的原因.

吴希俊等人1989年在国内首先研制成功大尺寸定向金属铜双晶和三晶;首先实验研究了铜双晶和三晶的形变与断裂强度与晶界结构的关系,并且与周富信合作分子动力学从理论上模拟了铜双晶的形变与断裂的原子过程. 此项研究应邀在两次国际会议上作邀请报告. 1990年又在国内首先研制成功采用惰性气体凝聚—真空原位固结技术制备三维纳米块体材料的装置,研制成功屈服强度比普通多晶粗晶金属银高六倍的纳米金属银,以及其他多种高强高韧清洁界面金属、离子导体和陶瓷纳米块体材料,并提出纳米金属的范性形变和屈服过程不仅与晶粒尺寸有关,而且与晶界结构以及晶界原子迁移有关的新观点. 这些研究结果获得省部级科技进步二等和三等奖各一项,发表论文六十余篇,被引用七十余次.

透过上述诸例,并联想两弹一星的雄伟气势,可以看到物理力学无与伦比的辉煌景象. 此时此刻当我们重新捧读钱学森1957年发表的“论技术科学”或“物理力学介绍”时,怎能不产生“已是山花烂漫时,他在丛中笑”的感觉呢?

## 4 展望与我们的责任

### 4.1 物理力学的手段将继续不断地增强

(1) 非平衡态统计力学一定会进一步发展出较为系统的理论,解决过去不能解决的问题. 凝聚态物理也会不断有新的进展. 这样,物理力学就会有更为有力的概念、思路和方法来分析它所要解决的具体问题. (2) 随着计算机芯片的快速更新和量子电脑的问世,第一原理分子动力学方法的不断改进,计算速度、精度和可计算的原子数将大幅度快速提高. (3) 观察仪器和实验手段将会随着计算机技术和电子技术的发展而有不断的进步.

### 4.2 物理力学的对象和可处理的难度将会大大扩大,对未来工程技术的贡献将会更大

随着物理力学的手段大大加强和世界科技总体发展的需要,物理力学的对象和可处理的难度将会并大大扩大. 复杂分子构成的液体和固体、纳米材料、智能材料、微型机械有关材料、纳米机械、生物组织等对象的平衡和非平衡性质研究将会广泛深入地开展并为材料设计做出巨大贡献. 现在尚无法解决,或解决得不彻底的一些困难问题,如真实物质(包括三维、低维和分维系统)的平衡相变问题,摩擦问题,高度非平衡现象问题(如有快速化学反应的气体动力学问题,真实物质远离平衡的不可逆生长过程,如金属的电解沉积、烟灰、胶体及肿瘤等实际生长过程,凝聚态物质中激波的结构,固体材料的塑性变形和断裂问题等等)都将会不断地有突破性进展.

所有这些,都对未来的高新技术有明显的支撑作用.所以,物理力学对未来工程技术的作用将会更大.

#### 4.3 我们的责任——发扬钱学森的创新精神,主动地促进物理力学的发展

今天一方面我国物理力学已取得可观的成绩,可以为工程技术提供进一步的支撑、做出进一步的贡献,另一方面,我国技术科学储备薄弱的局面尚未根本扭转,因此钱学森发展物理力学等技术科学、增加科技储备的思想并未过时,我们仍需要有逐步发展的恒心,学习和发扬钱学森远见卓识的开拓精神,敢于在科研安排上,果断地、坚定地、对物理力学这一方向投入继续创新的人力、物力和财力,为我国当代和未来高新技术的持续发展,以及力学学科的革命性进展从战略上提供保证.然后,在战术上要仔细地、科学地进行了课题方案的充分论证,开展踏踏实实的研究,并在实际科研工作中培养和造就钱学森所殷切期待的物理力学的下一代.

另一方面,在自然科学和技术科学体系中,作为学科,只有物理力学是咱中国人提出来而得到国际承认,并已呈现了一派欣欣向荣的发展景象.对于这样一门事关民族兴衰的重要学科,我们这一代中国人肩负着因势利导、继往开来、促进发展的历史责任.

**致谢** 在本文的撰写过程中,笔者与崔季平、周富信、郑哲敏、白以龙诸教授进行过有益的讨论.特别是与崔季平教授讨论的次数最多,他还介绍了不少有关的历史情况,提供了不少宝贵资料;周富信教授将他尚未出版的稿子<sup>[34]</sup>提供给笔者参考和选用.对于他们的帮助,笔者谨致谢忱.

#### 参 考 文 献

- 1 钱学森.论技术科学.科学通报, 1957, (4): 97~104
- 2 钱学敏.试论钱学森的科学观与方法论.中国科学报, 1996, 2月26日~2月28日
- 3 Tsien H S. Physical mechanics, a new field in engineering science. *J Amer Rocket Soc*, 1953 23: 17~24
- 4 钱学森.物理力学介绍.近代物理介绍.北京:科学出版社, 1957
- 5 Kuhn TS. The Structure of Scientific Revolution. Chicago: Chicago Press, 1960
- 6 Tsien H S. The properties of pure liquids. *J Amer Rocket Soc*, 1953, 23: 14~16
- 7 Tsien H S. Lennard-Jones and Devonshire Theory for dense gas. *Jet Propulsion*, 1955, 25, Part, Issue 9: 471~478
- 8 Tsien H S. Asymptotic analysis of some integrals connected with calculation of spectralline absorption coefficient. In: 郑哲敏主编.钱学森手稿.太原:山西教育出版社, 2000. 388~394
- 9 Tsien H S. Emissivity of diatomic gases at low pressure. In: 郑哲敏主编.钱学森手稿.太原:山西教育出版社, 2000. 395~405
- 10 Joined in Penner SS. Ostrander MH and Tsien H S. The Emission of radiation from diatomic gases. III. Numerical emissivity calculation for Carbon Monoxide for low optical densities at 300°K and atmospheric pressure. *J of Appl Phys*, 1952, 23: 256~263
- 11 钱学森.物理力学讲义.北京:科学出版社, 1962
- 12 Tsien H S. Engineering and Engineering Sciences. *J of Chinese Institute of Engineers*, 1948, 6: 1~14
- 13 Abrikosov AA, et al. Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics. New York: Dover Pub Com, 1975
- 14 Balescu R. Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics. New York: Wiley, 1975
- 15 Binder K. Monte Carlo Methods in Statistics. Berlin: Springer-Verlay, 1979
- 16 Car R and Parrinello M. Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory. *Phys Rev Lett*, 1985, 55: 2471~2474
- 17 蔡锡年.分子动力学和物理力学.力学未来15年国际学术讨论会论文集,第一卷,北京:科学出版社, 1986
- 18 赵伊君,张志杰.原子结构的计算.北京:科学出版社, 1987
- 19 苟清泉.人造金刚石合成机理研究.成都:成都科技大学出版社, 1986
- 20 朱如曾,孙祉伟等.复正交矩阵区对角化条件及其对相变问题的应用.力学学报, 1990, 22(2): 171~175
- 21 朱如曾.化学反应速率的微观理论.中国科学, 1982, 11: 481~492
- 22 Zhiwei Sun, Soto M M, Barnettand R N, Lester W S Jr. An approach for improved variational quantum Monte Carlo. *J Chem Phys*, 1994, 101: 394
- 23 Cheng Kaijia. Application of TFD model and Yu's theory to material design. *Progress in Natural Science*, 1993, 3(3): 211~230

- 23 Goddard W A, et al. First principles multiscale approaches to prediction of mechanical properties. In: Schiehlen W O ed. Proceeding of ICTAM 2000, 2000-08-27~09-02. Chicago: Kluwer Academic Publisher
- 24 Hood R Q, et al. Quantum Monte Carlo investigation of exchange and correlation in Silicon Phys. *Rev Lett*, 1997, 78: 3350~3353
- 25 Li W X, Wang T C. Ab initio investigation of the elasticity and stability of aluminums. *J Phys Condens Matter*, 1998, 10: 9889~9904
- 26 Li W X, Wang T C. Elasticity, stability and ideal strength of  $\beta$ -SiC in plane wave based ab initio calculations. *Phys Rev B*, 1999, 59: 3993
- 27 Wang Chongyu, Yu Tao, Duan Wenhui, Wang Ligen. A first principles interatomic potential and application to the grain boundary in Ni. *Phys Lett*, 1995, A197: 449~457
- 28 肖慎修, 王崇愚, 陈大朗. 密度泛函理论的离散变分方法在化学和材料物理学中的应用, 北京: 科学出版社, 1998
- 29 夏蒙芬, 韩国生, 柯孚久, 白以龙. 统计细观损伤力学和损伤演化诱致突变. *力学进展*, 1995, 25: 1~40; 145~173
- 30 Panir V E. Modern problem of physical mechanics. In: *Mesomechanics 2000*, Vol 1. Beijing: Tsinghua Univ Press. Edt GC Sih, 2000. 127~142
- 31 邢修三. 非平衡统计断裂力学基础. *物理力学特辑*, *力学进展*, 1991, 21, 153~168
- 32 Lung C W, March N H. *Mechanical Properties of Metals: Atomistic, Fractal and Continuum Approaches*. Singapore: World Scientific, 1999
- 33 Zhou Fa-Xin, Ba-Yi Peng, Xi-Jin Wu. Molecular dynamics study of deformation and fracture for pure and bismuth-segregation tilt copper bicrystals. *J Appl Phys*, 1990, 68(2): 548
- 34 周富信. 物理力学. 20世纪中国学术大典, 力学卷. 北京: 科学出版社, 2002

## PHYSICAL MECHANICS PIONEERED BY H.S. TSIEN

Zhu Ruzeng

LNM, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China

**Abstract** The foundation of Physical Mechanics and its development during the past half century are reviewed to show its double function on engineering-technology and the research of mechanical basis, and Tsien Hsue-Shen's preeminent contribution on the foundation and development. The future of Physical Mechanics is looked forward and we shouldering the historical responsibility to promote its development is pointed out too.

**Keywords** physical mechanics, big span mode of thinking, technical science, basic science, quantum mechanics, (non-)equilibrium statistical mechanics, meso, micro, first principle molecular dynamics