

# 钱学森开创的物理力学之路

朱如曾

(非线性力学国家重点实验室(LNM), 中国科学院力学研究所, 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。

**关键词** 物理力学, 规范, 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, 细观, 微观, 第一原理分子动力学

20世纪上半叶, 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, 物理力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。

## 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

20世纪30~50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, 4000K)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? 只有靠计算! 怎么计算? 有无计算的可能? 20世纪20年代, 物理学家们已发现了描述物质微观行为的量子力学和描述电磁相互作用的量子电动力学。那么能否从它们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。20世纪初已建立了平衡态系综统计理论, 为从材料的原子、分子结构的微观性质计算宏观平衡态行为提供了坚实的理论基础; 在计算非平衡态行为方面, 虽然没有系统的系综理论(到现在也还没有), 但当时已有以涨落耗散定理、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力论和适合于等离子体的符拉索夫方程等理论。此外, 当时已经发展

起量子化学方法、原子分子结构理论和量子辐射理论,以及光谱、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的。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,因为许多工程涉及高温、高压、超高温、超高压等非常条件和材料强度等复杂问题。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已属于一个极有发展前途,并且影响必定深远的、新的力学分支。他把这一扎根于物质的微观存在,而服务于实际工程技术的新学科叫做“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召唤文章“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,而宏观非平衡态性质又有近平衡态性质和远离平衡态性质两种。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,有时还要利用工程技术的经验规律;由于物理力学是技术科学,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(譬如,体现铁磁体相变行为特点的极简单的Ising模型,由于它在定性上确实包含了相变的本质因素,故在统计物理中是著名的好模型、好成果,可是它在定量上与实际的差距太大而不能成为物理力学的最终成果,不过它为物理力学提供了关于相变机制的一个范例,使得人们在分析真实物质相变问题的机理时,易于抓住要领)。钱先生进一步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具有极强工程应用背景的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,其主要内容后来被收入他的《物理力学讲义》。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,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。这批论文中的大多数都在当时的喷气推进等工程中起到了技术科学应有的作用。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,这本讲义就是在他回国后出版的《物理力学讲义》<sup>[10]</sup>的前身。

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、影响越来越大

### 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,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,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《我国科学发展的十年远景规划》的“若干边缘学科建立”一节中,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订入了这门学科,并列为重点。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,他亲自授专业课的理论部分,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,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,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”。

文化大革命期间虽然处境困难,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有如下单位<sup>[12]</sup>。

中国科学院力学研究所有2个开放实验室与物理力学有关:①高温气体动力学开放实验室,主要研究领域:高温气体辐射与光谱,离子化气体的性质与等离子体诊断,松弛过程;燃烧中的反应动力学与气相化学反应;②非线性力学国家重点实验室,主要研究方向:炸药爆轰性质的研究,断裂机制、位错结构、韧脆转变、裂尖处的组态分子动力学研究和从头算分子动力学,纳米材料的力学性质和金属相变的分子动力学研究,渗流力学问题的格子玻尔茨曼模拟等。

中国科学院金属研究所中国科学院国际材料物理中心主要从事材料强度的微观理论研究。

钢铁研究总院电子结构组及清华大学电子结构组基于密度泛函理论及第一原理方法,主要从事金属合金及固态材料缺陷复合体电子结构及跨尺度物性耦合研究。

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,主要进行多功能超硬材料和高压科学研究,包括高压合成、高压状态方程与相变,侧重于静高压研究。

航空航天部二院二零七所,设有专门的研究组,从事高温下气体的辐射传输研究,以理论计算为主。

国防科技大学,设有专门的教研室及研究所,方向为辐射与物质相互作用的基础研究,包括从原分子的电子结构的微观层次研究光与物质的相互作用,直到辐射所引起的宏观效应。建有激光实验室,进行理论与实验相结合的研究。

四川大学原子与分子物理研究所及高温高压物理研究所,主要研究领域是高压合成、高压状态方程与相变,侧重于动静高压和爆轰光谱。主要设备有二级氢气炮、高温激波管及静高压设备。长期以来,已在原子分子物理、原子碰撞、高温高压和材料性质方面做了大量研究工作。

中国工程物理研究院西南流体物理研究所建立了动高压、静高压、高温激波管、新材料合成四个实验室,开展了慢电子与分子原子碰撞散射截面的系统研究与计算工作。

中国科学技术大学与中国科学院固体物理研究所主要研究领域为材料性质与分子动力学微观模拟。

中国科学院物理研究所,建立了高压实验室,主要从事高压条件下状态方程的 PV 关系研究。

北京理工大学应用物理系材料科学研究中心,主要开展了非平衡统计断裂力学的基础研究。

中国空气动力学研究与发展中心高速所,设有激波管实验室,拥有高温激波管与粉尘激波管装置。其研究方向包括:气体的辐射传输与光谱;离子化气体;着重掺加物的电离性质;高温气体的传热。

云南大学物理系,建有激波管实验室,拥有高温激波管装置,其研究方向为定量光谱,以实验与理论计算相结合的方法,对分子光谱参数进行定量研究。

中国工程物理研究院应用物理与计算数学所,从事极高压下充分离子化气体的辐射性质与状态方程研究,侧重理论计算。

浙江大学材料科学与工程学系,主要进行纳米材料的合成及其性质研究。

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。所取得的有关成果,下文将会提及。

## 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、新思路和得力的新工具。

50 年代后期量子场论中的微扰论和费曼图方法被移植到统计物理中,用以研究多粒子系统的性质,形成了一套格林函数理论<sup>[13]</sup>,它是目前量子统计中最有力、最有成效的方法,对统计物理,从而也对物理力学起了重大的推动作用。20 世纪 60 年代初,钱学森曾在力学所建议过物理力学工作者学习和利用量子场论方法,认为这一方法在物理力学中大有可为。在临界现象理论和方法方面,60 年代提出了唯象的标度律和普适性概念,表明临界点附近存在一定的对称性,70 年代初,K. G. Wilson 认识到这种对称性就是量子场论中所用的重正化群对称性,据此建立了临界现象的重正化群理论,给出了从微观上计算临界指数的方法,从而成为研究临界现象的普遍方法。因此 Wilson 曾获得诺贝尔奖金。由此也可见钱学森 20 世纪 60 年代初建议在物理力学中利用量子场论方法是多么的正确和有远见!

在非平衡态统计力学方面,虽然尚无完全统一的理论和方法,但已有不少实用但非普遍适

用的理论和方法,如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等;特别是 Prigogine 等在 van Hove 的基础上,对于由具有对势相互作用,并可允许有外场作用的粒子系统,从等价于刘维定理的 BBGKY 方程链出发,建立了关联动力学普遍理论及其量子对应形式<sup>[14]</sup>,此理论对以往一些依靠分子混沌性等外加的假设,或一些唯象假设而导得的动力学方程,如稀薄气体的玻尔茨曼方程,布朗运动的福克-普朗克方程等,只需假定初始时刻分子的混沌性,这些方程便是此理论的微扰论的必然结果。还有非平衡热力学和非平衡动力学方法,并得到了在局域平衡条件下的普遍演化判据,关于稳定性的 Glausdorff-Prigogine 判据和超熵判据等定理。对近平衡态输运系数建立了统一理论,在局域平衡概念的基础上,建立了热学输运系数与平衡态对应流的自相关函数之间的关系,它与涨落耗散定理形式相同,后者给出力学输运系数或响应系数与平衡态对应流的自相关函数之间的关系。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。

还提出了“协同性”、“序参数”和“对称性破缺”等对平衡和非平衡相变都很有用的概念。

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大容量高速电子计算机的出现,为计算微观力学提供了计算工具,使大规模的计算成为现实。

计算机技术与经验势函数相结合导致分子动力学方法和经典蒙特卡罗方法的发展<sup>[15]</sup>,与密度泛函理论的结合导致了从头算分子动力学方法的发展<sup>[16]</sup>,对于可直接模拟的原子数,前者已达数亿个,后者已达数千个,这个数字正在上升。它们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。应当指出,计算机技术早在 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。

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 物理力学规范的四次发展

半个世纪以来,钱学森曾先后四次调整和发展了物理力学的规范,以适应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,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。

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,使人们领会到从原子分子物理出发,经由物理力学这一技术科学的研究路线,是取得发明创造的好途径。原子分子物理是量子力学的已有成果,把它作为物理力学的出发点,本是物理力学题中之意,但此时此地在物理力学的规范中予以进一步的强调,就指明了当时条件下发展物理力学的最佳途径,而且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。他明确指出:“理论工作,在气体、液体、高温气体等等方面,要用微观的方法……从这里得出宏观的物理性质。关于金属材料,还有高分子材料,也要找出物性,它们的分析水平,对金属来说就是晶体颗粒,对高分子来说就是分子链、纤维结构”。并建议采用苟清泉提出的“细观”概念。从此有了细观力学的概念,并明确纳入物理力学的范畴,成为物理力学解决问题的一个得力“阶梯”,并在客观上为物理力学规范的下一

次发展准备了条件。

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,他在给崔季平的信中说:“我以前给苟清泉教授去过信,建议把巨型电子计算机的计算能力用到物理力学的研究中去。这就是从根底坚固的量子力学开始,严格地算,尽量不用简化和近似手法。今天有了巨型电子计算机了,这条路是走得通的;不像三十年前,不得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。这里,在计算机技术迅速发展的新条件下,他及时地调整了物理力学的规范,向我国物理力学研究者指出了新的广阔道路。

第四次是在 1993 年。他在给崔季平的信中说:“我在 50 年代的物理力学概念太窄了,现在是‘纳米时代’了呵”。这里,钱学森看到纳米材料的性质必须用物理力学的方法来研究,进一步发展了物理力学的规范,把纳米材料的性质研究包括在内。为了从组织上落实,他接着说:“我还是建议您在中国科学院成立一个独立的研究所,所小一点,包括院(内)搞凝聚态的同志”。由此可见,钱学森坚信物理力学将越来越大有可为。只可惜条件所限,组织未能如愿落实,不过物理力学的研究方法还是贯彻在纳米材料的研究中了。

物理力学规范的四次调整和发展,每次都大大地促进了物理力学的发展,取得了丰硕的成果,这将在后文论及。

### 2.3 物理力学的学术思想在国际上产生了巨大影响

物理力学学科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《Физико-Механика》,并被广泛引用;1964 年,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, 此处,Karpenko 院士是该所奠基者),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。该所的名称和主要方向显然与钱学森对物理力学的倡导有关。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>[17]</sup>。随着物理力学所要求的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。具体例子将在下边第三节提及。

## 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,最突出的应用中外核爆炸、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,已形成了系统的原子分子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>[18]</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,圆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,徐锡申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的成果有:把定态下的 Hellmann – Feynman 定理和位力定理推广到有限温度密度泛函理论中,提出了密度泛函的微扰自治方法,给出了能同时计算体系基态性质和激发态性质的单粒子哈密顿形式,给出了带自相互作用修正的局域自旋密度近似以及普遍求解 SIC – LSD 方程局域解的方法等;导出了非谐振固体新的热力学函数,给出了推广的 Lindemann 熔化定律和离子晶体中电子有热激发的物态方程形式;发展了混合物物态方程的计算方法,特别是在炸药爆轰产物物态方程方面提出了新的见解和给出了考虑化学反应平衡的爆轰产物物态方程的计算方法。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 500GPa 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,并用此方法对 101 种环状化合物密度进行了估算,计算值与实验值的平均偏差为 1.1%。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质的状态方程,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,特别是当各组元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微观机理、触媒在此过程中的作用机理及其优选原则以及烧结金刚石的粘结机理。这三个机理构成了一个完整的人造金刚石生长的新的理论框架,收入其专著《人造金刚石合成机理研究》<sup>[19]</sup>,并在实际上得到了多次重复的实验证明,受到国外金刚石专家们的高度评价。苟清泉还从理论上预言 LiH 和 LiD 有一个新的相变,受到国外同行重视。

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。

③二维 Ising 相变模型的 Onsager 解法是十分著名的,然而朱如曾、孙祉伟等于 1990 年发现其正确结果是通过在重要步骤上用了错误的复正交矩阵区对角化条件而得到的。他们给出了正确的条件,得到了正确的结果<sup>[20]</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、竺乃宜等人用电探针、磁探针、微波、离子采集器及光谱法,在电子浓度从 109 ~ 1016/cm<sup>3</sup>,温度由 1000 ~ 10000K 范围内及很宽的等离子参数条件下测定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。

用，并应用于再入人体等离子体鞘套的研究，为开拓再入通信的可行性途径取得了实际效果，为此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氯碳氢化合物及其他有机物焚烧的动力学。与美国国家标准与技术研究院合作，关于氯苯与硝基甲苯的研究取得重要基本数据并被广泛引用。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，并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>[21]</sup>于1982年针对反应位能面上存在低洼的普遍情况，用求界含时薛定格方程的方法导得基元化学反应的微观速率常数公式；据此，在反应物服从玻尔茨曼分布的条件下，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，他的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下的气体引进了“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架，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

液体的宏观热力学性质依赖于液体的局部结构。对于简单液体的局部结构，Nelson等于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，由于标准构型有不同的配位数，而模拟体系的配位数往往不是整数，在模拟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，其主要优点是可以对基本构型引入反映热运动所造成的几何构型涨落方差，从而克服了上述困难。此方法用于若干熔体研究获得了与实验符合很好的结果。

#### (7) 量子蒙特卡罗方法研究<sup>[22]</sup>

孙祉伟1983年至1993年在美国UC Berkeley（加州大学伯克利分校）及罗伦兹伯克利国家实验室（Lawrence Berkeley National Laboratory）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>[23]</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：凝聚体边界上电子具有负势，产生向内的压力；复合凝聚体界面两侧电子的密度必须趋于相等和化学势必须趋于相等。据此建立了系统的电子理论分析计算方法，在理论上分析研究了电子的迁移运动，初步预测了材料的力学、光学、电磁学等效应。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1980年以来,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。更为重要的是,他们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>[24]</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,相图,位错芯结构、能量和运动,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. Hooi和皇家学院的M. Nekovee等人<sup>[25]</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>[26, 27]</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。对金属铝得到了沿[001]和[111]方向单轴加载和单轴应变及[010]和[001]方向双轴比例加载情况下,完整的能量—应变曲线和应力—应变曲线,并详细地分析了沿[001]方向单轴加载情况下的稳定性及分叉行为。对 $\beta$ -SiC由于沿[111]方向加载时,4个Si-C键是不等价的,所以有相对内位移出现;当载荷较大时,内位移的影响越来越显著,裂纹在{111}面上成核,导致材料以解理形式破坏。

#### (11) 电子结构与跨尺度物性耦合研究<sup>[28, 29]</sup>

王崇愚等人从20世纪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X<sub>a</sub>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。相关的主要研究结果如下。

①基于密度泛函及有效介质理论,分别建立了过渡金属(Fe和Ni)晶界及位错体系依赖于电子密度的第一原理能量函数(原子间相互作用势),用于原子结构弛豫以及晶界能量及位错能量计算;同时基于第一原理能量函数,给出了与实验相一致的弹性模量及空位形成能(过渡金属)。

②基于电子理论建立的原子间相互作用能解析表达式已广泛应用于金属及合金缺陷复合

体系研究中,用以表征或反映键合强度及晶界断裂特征;计算发现的合金力学性质的杂质依赖性为实验所支持。

③基于第一原理离散变分方法并结合分子动力学研究,进行了过渡金属基合金缺陷体系掺杂效应的较为系统的研究,给出了晶界断裂的韧-脆判据、断裂功以及位错芯捕获杂质效应及键合特性,为合金组分设计或成分选择提供了电子理论依据。

④基于电子理论及格林函数递推方法和位错理论,计算了金属合金层错能以及交滑移激活能,给出了层错宽度,位错攀移速度以及位错反应的杂质依赖性。在此基础上预期了合金再结晶能力及材料塑性,并为实验所证实。

⑤基于分子动力学及断裂力学和有限元方法,并与电子结构计算相衔接,研究了金属(铁)裂纹扩展与微观结构演化以及韧-脆特性判据,计算发现脆断特征伴随形成层错及孪晶,而裂尖发射位错及裂尖钝化则属韧性行为,同时给出了相关力学行为的温度及载荷依赖性。

#### (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“连基本概念也还不十分清楚的问题<sup>[10]</sup>”。这一物理力学的典型难题,长期以来受到国内外力学家和物理学家的关注。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地解决,因此从不同角度的讨论(甚至一些十分简单的模型)而取得一些见解和启示,应被认为是一种可喜的进步。这也是逐渐积累和深化认识,以求“功到自然成”的一种可行途径。

##### ① 固体破坏的共性特征研究<sup>[30]</sup>

白以龙、夏蒙努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。指出损伤局部化是破坏的一个重要前兆,并导出了出现损伤局部化的判据。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,它是细观损伤扩展速率与成核速率之比,从而蕴涵了细观尺度效应,它的特征值则控制了宏观损伤局部化的发生。

- 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,即:宏观上相同的样本其演化诱致灾变行为可呈现显著差异。这使得演化诱致灾变不能仅由介质的平均性质表征。这种宏观不确定性是预测破坏所遇到的困难的根源之一。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。

这些结果有助于启发对破坏现象的理解,并为破坏预测提供线索,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>[31]</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 等人注意到经典的位错理论单纯用位错的成核、运动和相互作用来考虑塑性变形所遇到的困难,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>[32]</sup>

邢修三等人自 20 世纪 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三等奖。

#### ④材料断口分形研究<sup>[33]</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 Mandelbrot 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 年)也不同意普适值的看法,龙期威等人共发表论文 140 多篇,被引用 315 次以上(扣除自引)。其中 Prog. Mater. Sci. 的一篇持非普适观点的综述论文中将龙等 1988 年的实验工作和 Mandelbrot 的开创性论文列为非普适观点的可信赖的两项依据。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>[34]</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。结果发现,随着结构的变化, $\Sigma 3$ , $\Sigma 33$ , $\Sigma 11$  和 $\Sigma 9$  晶界的偏聚依次增强;还发现晶界断裂强度取决于铋原子偏聚浓度与分布,并且 $\Sigma 9$ , $\Sigma 11$  和 $\Sigma 33$  分别发生沿晶断裂、沿晶撕裂和穿晶断裂。这些结果与实验结果相符,这样就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,并且与周富信合作用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 6 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奖和三等奖各一项,发表论文 60 余篇,被引用 70 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

### 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。例如在寻求中等密度气体和稠密气体的玻尔茨曼型方程中遇到的发散问题；非平衡态涨落问题等。非平衡态统计力学已有理论中有一些是对实际问题很少能圆满求解的（如关联力学的理论和方法，尤其是其高阶解），对这些实际问题，将一定会进一步发展出较实用的解法。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计算速度、精度和可计算的原子数将大幅度快速提高。

计算机芯片现在更新很快，1971年英特尔生产的一个芯片只含2300个晶体管，去年下半年推出的“奔腾4”芯片已含有4200万个晶体管，而去年年底问世的30纳米晶体管技术将使硅芯片可以容纳4亿个晶体管。英特尔公司工程师保罗·帕肯前年在《科学》杂志上指出，硅芯片技术10年后将走到尽头。但是，接下来它的接班人是更厉害的量子计算机。去年，郭光灿领导的中国科技大学量子通信和量子计算开放实验室已成功地研制出4个量子位的演示用量子电脑，之后，美国IBM公司又推出5个量子位的演示用量子电脑。据估计，它的实用化和商品化大约在20年后。它用微观粒子的状态来记录信息。它所使用的基于态的叠加原理的量子算法与经典计算机的二进制算法相比，能更迅速地对大量或更复杂的计算进行分类处理，在存储容量、运算速度上都会有指数数量级的提高。加上现在计算技术已有的并行方法和基于物理考虑已提出的一些大大减少计算量的有效算法（如将全电子计算用价电子计算代替的膺势方法，把密度泛函理论中比例于原子数立方( $N^3$ )的计算量减为比例于N的线性标度算法<sup>[35]</sup>，以及引入了电子虚拟运动的CP法<sup>[16]</sup>），人们用分子力学、第一原理分子力学与蒙特卡罗法可计算的原子数将会快速上升，何况有关的计算方法将来还会有进一步的改进呢？（现在已可以对10亿个原子进行分子力学模拟，对几千个原子进行第一原理分子力学模拟）。

同时，计算精度将大大提高。上已提到，英国剑桥大学凯文迪什实验室和皇家学院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。这样，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）。虽然现在看来量子蒙特卡罗方法计算量很大，但随着计算机运算能力的飞速发展，这将不是问题。所以不久的将来，计算精度会比现在大大提高。

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正在大大扩大。

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(如有快速化学反应或强相干非平衡辐射的气体动力学问题,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,都对未来的高新工程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。遥望未来,人们应由衷地感谢钱学森所指引的物理力学之路!

#### 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

上面两点已表明,物理力学必将继续加速发展。面对这种趋势,我们是消极被动地等待物理力学被外国人去发展并对外国的工程技术作完贡献后再传入中国呢,还是相反?对于这一问题,钱学森实际上早在四五十年前就已经为我们做出了正确的选择。他回国后特别强调在我国大力发展物理力学的一个特殊原因是,他了解发达国家技术科学的储备雄厚,它为工程技术提供新原理、新概念、新目标、新途径、新方法,所以不断有新技术苗头产生,而一旦出现一个新技术的苗头,又马上就能得到对口而充分的技术科学的进一步支持,所以他们的工程技术便总是发展很快,而我国技术科学的储备很薄弱,不能适应“赶超”的要求,为了从根本上扭转我国科技落后的局面,必须大力增加我国技术科学的储备,所以钱学森回国后大力倡导在我国发展物理力学等技术科学是有特别的针对性的。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。面对世界科技发展更快和我国市场经济的新形势,更需要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、科学地进行子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。

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。对于这样一门至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>[12]</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 钱学森. 试论钱学森的科学观与方法论. 中国科学报, 1996.2.26~2.28
- 3 Tsien H S. Physical mechanics, a new field in engineering scienc. 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 T S. 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, Issue9: 471 ~ 478
- 8 Tsien H S. Asymptotic analysis of some integrals connected with calculation of spectralline absorption coefficient. In: 钱学森手稿. 太原: 山西教育出版社, 2000, 388 ~ 394(郑哲敏主编)
- 9 Tsien H S. Emissivity of diatomic gases at low pressure. In: 钱学森手稿. 太原: 山西教育出版社, 2000, 395 ~ 405(郑哲敏主编). Joined in Penner SS. Ostrander M H and Tsien H S. The emission of radiation from diatomic gases. III. Numerical emissivity calculation for Carbon Monoxide for low optical densities at 300° and atmospheric pressure. *J of Appl Phys*, 1952, 23: 256 ~ 263
- 10 钱学森. 物理力学讲义. 北京: 科学出版社, 1962
- 11 Tsien H S. Engineering and engineering sciences. *J of Chinese Institute of Engineers*, 1948, 6: 1 ~ 14
- 12 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
- 13 Abrikosov A A, 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, 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, 孙社伟等. 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 Sun Z W, Soto M M, Barnettand R N, et al. An approach for improved variational quantum Monte Carlo. *J Chem Phys*, 1994, 101: 394
- 23 Cheng K J. Application of TFD model and Yu's theory to material design. *Progress in Natural Science*, 1993, 3(3): 211 ~ 230
- 24 Goddard W A, et al. First principles multiscale approaches to prediction of mechanical properties. Proceeding of ICTAM 2000 (Chicago)
- 25 Hood R Q, et al. Quantum Monte Carlo investigation of exchange and correlation in Silicon Phys. *Rev. Lett*, 1997, 78: 3350 ~ 3353
- 26 Li W X and Wang T C. Abinitio investigation of the elasticity and stability of aluminium, *J. Phys. Condens Matter*, 1998, 10: 9889 ~ 9904
- 27 Li W X and Wang T C. Elasticity, stability and ideal strength of  $\beta$  – SiC in plane wave based ab initio calculations. *Phys Rev B*, 1999, 59: 3993
- 28 Wang C Y, Yu T, Duan W H, et al. A first principles interatomic potential and application to the grain boundary in Ni, *Phys Lett*, 1995, A197: 449 ~ 457
- 29 肖慎修, 王崇愚, 陈天朗. 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
- 30 夏蒙芬, 韩闻生, 柯孚久, 白以龙. 统计细观损伤力学和损伤演化诱发突变. 力学进展, 1995, 25: 1 ~ 40; 145 ~ 173
- 31 Panin V E. Mordern problem of physical mechanics. In: Mesomechanics 2000, Vol 1. Beijing: Tsinghua Univ Press. Edt GC Sih. 2000, 1127 ~ 142
- 32 邢修三. 非平衡统计断裂力学基础. 物理力学专辑. 力学进展. 1991, 21
- 33 Lung C W, March N H. Mechanical Properties of Metals: Atomistic, Fractal and Continuum Approaches. Singapor :World Scientific, 1999
- 34 Zhou F X, Peng B Y, Wu X J. Molecular dynamics study of deformation and fracture for pure and bismuth – segregation tilt copper bicrystals. *J Appl Phys*, 1990, 68(2): 548
- 35 Goedecker S. Linear scaling electronic structure methods. *Rev Mod Phys*, 1999, 71: 1085 ~ 1123