

# 钱学森与材料设计

于 翹

(中国运载火箭技术研究院, 北京 100076)

**[摘要]** 扼要地介绍了近20年来著名科学家钱学森积极倡导和有力推动的关于“材料设计”的思想、理论、层次、方法和体系。经历届“八六三”计划专家组的努力,“材料设计”已列入国家级新材料发展计划,并取得了可喜的成果。

**[关键词]** 钱学森; 材料设计; 原子与分子工程; 材料科学与材料技术体系\*

**[中图分类号]** TB3 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1009-1742(2002)05-0001-06

## 1 引言

钱学森院士是我国导弹火箭大系统工程的奠基人和领导者,是“两弹一星”的元勋。由于钱老在现代科学诸多领域的杰出贡献,使他成为世界级的知名科学家,深受科技界的尊敬、爱戴和赞扬。2001年12月11日是钱老90大寿,借此机会,向钱老表示崇高的敬意,并祝愿他健康长寿。

钱老担任国防部第五研究院和五院第一分院(即中国运载火箭技术研究院)院长时期,高瞻远瞩地抓导弹火箭发展规划、各分系统关键技术以及攻关项目的科学研究,注重总体与分系统、总体设计与基础技术、理论与实践、静态与动态、地面实验与空中飞行等一系列关键问题和辩证关系,及时给予方向性、预见性、前瞻性的指导。钱老特别关心科技队伍的建设,尤其是对青年人的培养。有时给青年同志上大课,有时做专题报告,告诫青年同志在学业知识上要“爬高坡”,研究问题不仅要知道“是什么”,还要搞清楚“为什么”;要求大家一要练基本功,二要打好理论基础,三要先在一个方面深入,然后适当扩大知识面,再深入,再扩大。钱老的这些亲切教诲令笔者铭记在心,受益无穷,指引着笔者的工作和学习。认真学习和领会钱老的哲学思想、学术观点、工作态度和学习精神是笔者终生努力的方向。

## 2 倡导和推动材料设计工作

1986年4月,笔者有幸参加由国家科委和国防科工委组织的“八六三”计划新材料专家组的筹划工作,宋家树教授和笔者被指定为组长。全组成员积极工作,根据我国国民经济发展和国防的需要,参考国外新材料研究的发展动向,经多次讨论、修改补充,提出了以结构材料和功能材料为纲的新材料“七五”发展框架设想。在酝酿讨论过程中,钱老多次到会讲解理论工作对材料研究的重要性。有一次,钱老在听了大家的讨论发言后,明确提出有必要发展材料的“原子和分子工程”,建立“材料科学与材料技术的系统工程”。

当专家筹划组向国务院领导正式汇报时,由于认识水平的局限,把发展框架的“材料设计和基础研究”项目列为第二个层次,放在不明显的位置。当时,钱老和朱光亚等科工委领导同志都在座。时隔不久,钱老于1986年5月5日给笔者来信写道:“感到材料问题好像千头万绪,五花八门,不成体系,真是这样吗?我想过去的历史不去说了,因为那时材料的理论比较残缺,组织不了材料的实际问题,不得不散乱,但时至今日,各方面的理论以及用理论来分析计算问题的工具,电子计算机和信息库已经完善,我们还一定这样下去吗?建立系统的材料科学和材料技术和组织材料研究的系统工程是

**[收稿日期]** 2002-02-05; **修回日期** 2002-03-07

**[作者简介]** 于 翹 (1930-),男,吉林省吉林市人,中国运载火箭技术研究院研究员

否提到日程上来了?”钱老在信的末尾对笔者说,有什么意见,可以给他写信,也可以当面谈。

在此之前,笔者因工作关系曾多次向钱老汇报工作,获益匪浅。因此笔者向钱老表示希望当面汇报,当面请教。钱老在听取汇报时,笔者根据当时的认识水平和对材料设计的理解,汇报了材料研究中部分存在“经验式”、“炒菜式”的情况,不同学科联合起来攻关存在的困难和问题,以及对材料设计和计算材料科学的初浅理解等。钱老认真听,有提问、有纠正、有说明,有时系统地给予解释。钱老的一堂课,使笔者茅塞顿开。钱老听取汇报后,针对材料设计层次的划分问题于1986年6月13日给笔者写信认为,“材料科学是应用和发展的学问,不是基础科学,所以分两个层次:技术科学和工程技术”,并说明所属的详细内容。

追溯20世纪60年代初,钱老就有用理论来指导材料研究的学术著作。1984年11月17日,钱老在给著名物理学家苟清泉教授的信中讲:“我为什么急于写这封信?这是因为我想原子与分子的问题已经研究了那么长时间,也取得了丰硕而深刻的学问,是否已经达到牛顿力学在上世纪末本世纪初的水平?如果是,而今天我们就该像那时F. Klein那样,提倡‘从理论力学转向应用力学’,从认识客观世界转向改造客观世界。50年代我们宣传‘物理力学’,当时还强调用近似的简化计算,因为计算机能力差。但现在巨型电子计算机出来了,每秒几亿次已不成问题,不久几千亿次也行,那么原子与分子物理不就成为‘应用原子与分子物理’,成为工程师们设计产品的工具了吗?是‘原子与分子工程’。”并征求苟先生的意见:“您看这个前途如何?您们原子与分子物理学家们不能有一部分转为原子与分子工程师吗?”苟先生遂于1984年12月4日给钱老回信,表示完全赞成,并赞扬这是一个创举,影响深远。

有一次笔者请教钱老关于“材料科学与材料技术的系统工程”的内涵、范围和两者的关系时,随信寄去美国M. Cohen的有关文章,钱老阅后遂于1986年7月10日在回信中写道:“M. Cohen教授讲的MSE,我看就等于我们讲的那两个层次,至于他那篇‘材料与人类’不免吹得太大了,大循环包括了环境、能源及资源永续问题,不是MSE能包得了的,当然问题很重要,但不是搞材料科学技术的人能独立解决的,那实际是个社会系统工程。”

为了帮助大家提高对材料设计必要性和重要性的认识,钱老用国外的实例启发我们。钱老1986年12月4日给笔者来信说:“不久前,看到在California Institute of Technology, Pasadena, Calif,有个财主Beckman出资五千万美元办Molecular Engineering Institute,可见这个方向是不会错了。”

美国航空航天、化工、冶金等各工业系统,通过调查研究总结出专门报告<sup>[1]</sup>。报告中提出研究材料科学的四要素:组分结构、合成和工艺加工、固有性能(Properties)和使用性能(Performance),它们之间的关系是不可分割、相互影响的统一整体。这里专门提到使用性能问题,这对于有服务对象的产品的研究工作非常重要。理解和掌握这四要素的关系是建立材料科学与工程技术体系的基础。钱老1986年5月5日给笔者的信中就提到:“如果有建立系统的材料科学和材料技术的可能,我看干这件事才是‘八六三’计划,因为这是看到21世纪的呀。”

笔者把钱老的几次来信和听取汇报时的讲话,转告给“八六三”计划新材料专家组,首席科学家曾汉民教授和专家组成员都很高兴,希望钱老能听一次汇报。1987年4月,钱老接见了专家组部分成员曾汉民、熊家炯、干福熹和笔者,曾汉民教授汇报了国家发展计划中材料设计的内容:探索不同层次微观结构理论指导下的材料设计及其与研制、应用工艺相结合的现代材料科学技术和其他问题。当时钱老有几句话的大意是:你们可能由于经费原因,少做了几件事,那不要紧,但材料科学中的原子、分子工程,这件事一定要抓。他还讲:我国现在的科研经费少,而又不会重点使用,结果是把钱撒在没多少意思的东西上,将来无法向人民交代!汇报会后几个月,钱老于1987年11月9日给笔者来信嘱咐:“老实讲,我自上次会见‘八六三’材料专家委员会的成员后,也担心!怕专家们光顾得上去分钱,忘记党和国家给他们的重任:要确定发展战略,选择突破口,组织攻关,以求必胜。这是份量不轻的责任,将来‘千古功罪,自有评说’。”在此前的1987年4月27日钱老给笔者的来信中就曾写道:“我看到某教授寄来的关于特种功能材料的设计与研制的报告。现在又像各说各的,都在努力耕耘,但宏观的全局如何?该抓什么?似无定论!这怎么行呵!专家委员会一定要研究,不然就不称职了。”这些话不只是对专家组本身的鞭策和

批评，也是对所有科技人员的期望和激励。

钱老在积极推动材料设计工作方面，有一条重要的指导思想，就是要敢想、敢干，要创新，支持有原始开创性的设想。例如，笔者得知袁润章教授关于功能梯度材料的设想后告诉了钱老，他在1987年11月9日给笔者回信中说：“我是完全赞成袁教授所提出的构想，希望他得到应有的支持，取得成功！我看现在就要动员搞固体力学的同志们，研究如何利用这一可能性来设计构件：内部与表面不同，构件各部位也不同，以充分发挥这一技术所提供的新选择。”钱老1987年3月12日给笔者的信中也提到，在中国科协的会上听到“甘肃工业大学魏同庆同志讲裂纹也应化害为利，主观能动地利用裂纹来断材，并进一步搞‘裂纹切削’。我以为颇有新意，值得提倡”。钱老1986年8月5日和1987年2月23日给笔者的两封信中还提到，“超微粉末（即纳米材料），应当受到重视”。钱老注意到纳米材料具有各种独特效应，使材料的物理性能产生惊人的变化，在工业和军事领域具有广阔的应用前景，认为是21世纪的又一次产业革命，并于1990年2月6日给笔者来信讲，“这是中国人看到外国人在大干，自己才干！为什么自己不早干？洋奴吗？这是个大问题”。

钱老一直提倡多学科合作、跨学科研究、理论与实际相结合共同攻关。钱老1986年8月5日给笔者的信中认为，“可以由中国科协发起一次跨学科的综合学术讨论会，把理工界联合起来，共商大计”。在知名材料科学家师昌绪、李恒德的积极工作和促进下，国内的金属、航空、航天等17个学会联合在重庆召开了会议。在此基础上，1991年5月召开了中国材料科学研究学会（C-MRS）成立大会。1992年4月，召开了材料在汽车工业中的应用研讨会。笔者将这些材料界的新动向向钱老做了报告。一周后，钱老即回信：“从研讨会的会议程序看，的确令人感到材料科学的重要，感到材料科学需要而且有可能系统化。当然要如此做，要有理论来指导，这就要各行各业联合攻关。我希望你们这一行的专家同志们有这个紧迫感！”

钱老十分爱护我们这批知识分子，坦诚地指出在科研活动中存在的毛病。1987年1月5日给笔者的回信中指出：“中国科学技术工作也是分散的，搞联合还不熟练，必须继续努力去干，才能有效果。”1989年7月6日给笔者的信中告诫我们：

“我国科技工作者缺乏从国家建设角度，在宏观上总览全局的习惯，往往只经营自己的小领地，所以不能为国家制订战略，……如何对我国五十岁左右的科技领导骨干进行这方面的‘继续教育’，成一大问题。”逢年过节钱老也不忘给笔者写贺年片或贺年信，表示对科技人员的关心和殷切期望。例如1986年12月31日给笔者的贺年信中写道：“新年到了，首先向您拜年！在新的一年里希望材料科学新发展起步后，有明显的进步！”

笔者和“八六三”专家组在钱老直接指导下工作多年，获益匪浅。从国家发展战略的构思考虑，笔者将几年来钱老的信函呈送当时的国家科委主任宋健，请他参阅。宋健教授随后不久于1990年6月6日给笔者回信，信中写道：“钱老近几年关于材料科学的论述和构想，拜读后很有教益，我已请朱丽兰等同志仔细研究，如何利用“八六三”的框架，去推动这项事业的进步。”

在钱老的指导和帮助下，笔者受命参加国家有关材料设计项目的答辩、评审、鉴定和研讨，扩大和丰富了知识面，加深了对材料设计的理解和对材料科学体系内涵的认识。研究对象按空间尺寸可划分为三个层次：微观（原子分子水平）、介观（微米以下的连续介质）、宏观（微米以上）。一个完善的材料设计应当包括许多环节，对某种材料进行设计时，首先要考虑控制这种材料主要性能的是何种内部过程。这可以分为量子效应、电子效应、原子和分子效应，以及显微组织结构效应或介观效应；也要考虑外部环境条件对这些过程的影响。上述三个层次的不同过程，都属于不同层次的学科研究的对象，所对应的学科层次是量子力学和化学、固体物理和力学、统计力学、材料科学和工艺技术；所运用的理论基础是分子动力学、缺陷动力学、结构动力学、连续介质力学等等；每个领域有各自的特点和计算上的局限性，而且相互之间还不很协调，需要完善。这是对今后理论工作的一种挑战<sup>[2]</sup>。

材料设计可分为归纳法和演绎法。演绎法是根据有关材料的基本理论，从第一性原理出发，采用“从头算起”（*ab initio*）等方法，也可以针对不同对象对理论模型采取“近似”、“简化”、“逼近”等方法进行计算。归纳法是根据已有的经验，总结出规律，利用数据库、知识库等工具，组成用以解决材料设计问题的计算机程序系统，帮助研究人员获得所需要的新材料，即材料设计专家系统。将演绎

法和归纳法结合起来,可能是一条有效的技术途径,从根本上改变传统的“经验”和“半经验”的定性的研究方法,“预报”材料性能和“设计”具有特殊性能的新材料,还可以模拟现实试验条件难以实施或者无法实施的材料研制加工过程,推动新材料的发展创新,改进传统材料的合理使用。

材料科学与材料技术体系的内涵应包括:材料成分、微观结构、显微组织、成型方法、固有性能、使用性能、加工工艺、可靠性评价、疲劳和环境,断裂和寿命、测试技术,等等。它们是相互制约的一个体系,每一个步骤都可以按不同层次和不同方法进行设计和计算,这样理解不知是否正确。

### 3 国内材料设计的进展概况

20世纪70—80年代,我国物理学家进行过原子和分子水平的计算工作,并取得一定成果,应当说有良好的基础。“八六三”计划新材料领域设立了材料设计专题后,在“九七三”专题、基金委等支持下,中科院、高等学校和工业部门的研究单位逐渐地重视了材料设计工作,各有关材料学会的国内和国际学术交流活动都设立了材料设计或计算机在材料研究上的应用的专题,不同层次材料设计的研究报告和论文也渐渐增多。

曾在“八六三”计划新材料专家委员会工作并负责材料设计研究的熊家炯教授,最近主编出版了《材料设计》一书,该书反映了国内材料设计研究工作的进展,特别是其中关于微观层次、原子分子水平的设计计算具有重要的参考价值<sup>[3]</sup>。

在非线性光学晶体分子设计方面,近年来推出的非线性光学晶体LBO( $\text{LiB}_3\text{O}_5$ )、KBBF( $\text{KBe}_2\text{BO}_3\text{F}_2$ )、SBBO( $\text{Sr}_2\text{Be}_2\text{B}_2\text{O}_7$ )硼酸盐系列居国际领先水平,这些创新成果是在“阴离子基因理论”指导下,发挥设计和计算的作用取得的。

在材料设计研究中,原子之间互相作用势的精确描述是一个理论问题。在这方面我国学者进行了富有创造性的工作:运用“陈氏晶格反演”定理,从第一性原理结合能曲线出发,利用“逆变换”法导出了原子间相互对势的严格表达式,并在金属、金属间化合物声子谱,相稳定性和择优替代,氢致断裂等问题上得到应用,对相关材料的性能预报和新型稀土化合物的模拟设计起到很好的作用。

在金属缺陷领域材料设计方面,也取得了高水平的成果:对位错及其相关缺陷电子结构的描述;

扭拆和割阶能量的量子力学和裂纹扩散的电子效应的表达;提出杂质-空位复合体物理模型;界面偏聚效应的能量学表述;建立热力学计算模型和脆-塑判据计算;轻杂质晶界偏聚与晶界能量计算;探讨缺陷电子效应与宏观性能之间跨尺度的关联,等等,为相应材料的组分设计提供了理论基础。

在结构高聚物材料的材料设计方面,利用“分子模拟方法”预报材料的力学性能,用计算机模拟在高分子材料力学性能设计中起着重要作用。功能高聚物材料是具有光、电、磁等物理性能的材料。对高聚物结构非线性光学聚合物的设计工作,是通过电子的给、受体强度的调节,共轭化学键长度的延长,共轭桥键的选择,官能团的引入,以及改变集团的连接方向等方法,采用高 $\beta$ 值的“生色团”的理论计算来实现的。利用量子化学方法有可能进行高 $\beta$ 生色团的理论研究和分子设计,一般过程是:a.选择合适的哈密顿算符和基函数;b.进行优化分子构型和分子轨道计算;c.在此基础上采用微优法或偶合法计算 $\beta$ 值,当然也可以采用一些半经验的分子轨道计算方法。这些方法对于提供分子非线性极化率变化规律是十分有用的。

导电高聚物的材料设计工作主要是通过“掺杂”方法。在导电高聚物中,掺杂和脱杂是完全可逆的,因此对掺杂的内涵和机理有深入研究的必要。截至目前,掺杂后的高聚物导电性能尚达不到金属的水平,有人解释:从能带的观点看,掺杂不能改变能隙,仅仅在能隙间引入空域态,即杂质能隙。要提高导电高聚物的性能,可利用特定的齐聚物分子结构与载流子的产生、传输、复合等步骤,为真正了解导电高聚物的导电机理打下基础。中科院某研究所在该领域进行了卓有成效的工作。

材料科学中的界面问题与材料性能有非常密切的联系,它涉及到原子尺度从纳米、微米到宏观层次,引起理论界和工程材料界的极大兴趣。界面问题是跨尺寸与不同层次都关联的理论问题,涉及界面两侧原子的对势、电子态、电子结构、原子键合、化学结合能、界面双侧晶体结构及其相应关系,以及界面切变模量、界面反应及位错形核、环境对界面的影响等多方面问题,人们称之为“界面工程”,大家都在界面方面开展工作。这里应该特别注意到,一方面继承和发展已经建立的理论方法,如第一性原理计算方法、原子级模拟计算方法……,还有力学上的连续介质理论等;另一方面,

对于界面可以在直接观测的实验分析技术和方法,也有待进一步完善。复合材料的成型工艺技术有各种不同的方法,每种工艺方法都存在着通常的和特殊的界面问题。一般认为复合材料的界面应视为一个具有特殊显微结构的界面层。复合材料界面的应力状态是一个比较复杂的问题,既和工艺处理条件有关,也和异质材料本身的物理、力学和化学性质有关,它们严重地影响界面结合状态和宏观性能。国内对界面问题的宏观层次研究比较普遍,文章比较多;而对微观层次的研究只在个别单位进行,虽有一定成绩,但文章比较少。

团簇是指由几个原子到几百、几千个原子组成的凝聚体,它研究的范围界于原子分子物理和凝聚态物理之间的层次,在这一层次存在许多物理和化学现象。其中引起人们极大兴趣的纳米材料,包括 $C_{60}$ (巴基敏斯富勒烯)被发现后,将原子团簇及其组装材料的研究推向高潮。近几年,中科院和高等学校的学者探索了纳米粉体的物理的、或化学的各种制备方法,制备出了定向纳米碳管阵列;利用纳米碳管制备出氮化镓一维纳米棒;研制出准一维纳米丝、纳米电缆和薄膜材料<sup>[4]</sup>。相继对纳米材料独特的表面效应、体积效应以及量子尺寸效应等展开研究,其中 $C_{60}$ 具有活泼的化学反应性,在 $C_{60}$ 碳壳的内层或外层可以进行“装修”,使得材料的电、光、磁和力学等性能产生惊人的变化。纳米材料包括 $C_{60}$ 的“孪生兄弟”等方面的应用被人们所认识,在微电子学、生物工程、化工和军事工业上都将发挥很大的作用。

量子点是低维电子结构材料,通常指人工制造尺寸 $10\text{ nm}\sim 1\text{ }\mu\text{m}$ ,其中含有 $1\sim 1\ 000$ 个可被控制的电子,算是介观层次研究的生长点。量子点的研究进展日新月异,表明它已成为低维材料科学与技术中最引人注目的前沿,因为它对新一代量子功能器件的设计与制造将产生革命性的影响。中科院某研究所在应变自组织量子点材料和激光器的研制方面,取得了良好进展。

计算机模拟方法的广泛应用,不仅在微观基础研究方面,而且在宏观材料加工工艺方面也是举足轻重的。基于产品制造和市场竞争,采用计算机模拟和CAD技术可以较低的成本,获得较大的收益。利用计算机可以掌握在制造过程中的材料与零部件的变化,从而指导设计和控制制造过程。这个研究领域包括铸造、冲压、锻造、切削加工、焊接等加

工工艺。国内不少单位先后开展了这方面的研究工作,在建立材料的相变过程、力学模型、性能测试和软件开发方面,取得一些阶段科研成果<sup>[5]</sup>。

复合材料的可设计性在材料界是人所共知的。近几年,具有优异力学性的纺织复合材料,引起广泛重视。纺织复合材料是一种高度各向异性结构,这种结构可视为由许多纤维束组成的三维镶嵌结构。在高聚物基复合材料中,每个纤维束的各向异性系数很高,不同纤维上的应力分布在很大程度上取决于这些纤维束的多少、取向和组成顺序,即应力分布依赖于纺织复合材料的结构,设计模型是通过简化纺织几何结构的描述方法,来确定各纤维束的有效承力方向、几何特征量和纤维体积分数。这些物理参数是纺织复合材料力学分析的基础。也可以采取简化方法,在采用某一具体简化模型时,一定要知道简化步骤对给定的结构是否有效<sup>[6]</sup>。

为适应市场竞争,在树脂基复合材料成型研究方面兴起一种新工艺,名叫树脂传递成型(RTM)工艺。复杂的纤维/树脂流动浸润过程可由流体力学的Darcy定律和流体连续性方程描述,而多数流体流动充满模具的过程均为非线性行为。采用流体分析的控制体积单位方法,实现RTM工艺充模过程的模拟仿真,减少实验次数,优化参数已获得可喜的科研成果<sup>[7]</sup>。

功能复合材料很难用一种物理量来衡量,而需要用材料的“优值”进行综合评价。材料的优值是由几个物理参量组合起来的,通过改变复合材料结构因素,可以找到调整优值的途径,如复合度、联接方式、对称性、尺度和周期性等。还可以利用复合材料的复合效应和乘积效应进行设计,制造出各种功能复合材料。在结构复合材料和功能复合材料方面都做了工作,实验室阶段成果也不少,除航天航空工业外,在其他领域的应用并不普遍<sup>[8]</sup>。

功能梯度材料(FGM)是指其组分、结构、浓度等性质随空间和时间连续变化,具有防热功能。国内从事这方面研究的不少,主要进行下列工作:金属/陶瓷、金属间化合物/陶瓷、高聚物/陶瓷等材料热应力计算和结构优化;FGM制备与结构控制;FGM的基本性能预报和特性评价以及推广应用。FGM有块状材料和涂层材料<sup>[9]</sup>。

钱老知道以上这些活动情况和进展后,于1987年1月5日和1990年2月6日先后给笔者来信说,“必须继续努力去干,才能有效果”,“现在

大家积极起来了，自然是好事”。

综上所述，笔者试图从不同层次、不同侧面如实反映我国材料科学研究方面的进展情况，但仍难免挂一漏万。几年来，通过向钱老讨教，提高了认识，开扩了视野，确实感到物理、化学与材料相结合，跨学科进行研究，是深入认识和发展材料科学的阳光大道。在这一重要理论指导下，相继建立了国家开放重点实验室、材料模拟计算设计实验室和结构与功能复合材料重点实验室。

#### 4 展望

近20年来，材料设计工作受到各方面的重视，取得很大进展。但是应当看到，材料品种繁多，各类材料成分与结构各不相同。对于不同材料，其设计的可实现程度也存在差别。当前的设计和计算水平也不尽相同，要达到高水平还有很长的路要走。

高技术的飞速发展使新材料向复合化、功能化、多组元化、低维化方向推进，材料成型工艺和改性工作也向低成本化、环境相容化、无余量和零缺陷方向发展，从而向材料设计和材料理论工作提出更新、更高的要求。这里特别提出从微观、介观到宏观层次在理论计算方法上如何衔接的问题，需要建立一种宏观之下、微观之上的结构理论，名曰“微细力学”。1986年5月5日钱老给笔者的信中就提出“微细力学”问题，它可以使材料设计工作更接近于材料受载的实际<sup>[10]</sup>。这是从材料设计中多层次理论与计算方法中提炼出来的，需要物理、化学和材料科学工作者共同努力才能实现。应当注意，理论与计算方法的创新和改进要重视理论与实验相结合；以实验来验证理论工作是否正确。

计算机的飞速发展对改进理论计算方法和提高

计算机模拟速度与精度都有推动。现代科学检测仪器及其精度的不断提高，无疑给材料的理论工作和材料设计提供了良好的环境。

纵观20年来国际上材料计算和材料设计工作的发展动态以及国内“八六三”计划中材料设计专题和“九七三”项目正式起步后方兴未艾的局面，都验证了钱老当初关于原子分子工程与材料科学，以及材料技术体系预见的正确性。今天，不论做那个层次的材料研究工作，都离不开材料科学与材料技术这个体系；明确自己所从事的局部研究工作在这个体系中的位置，及与其他层次的立体关系，必将开阔研究工作的学术思路。

#### 参考文献

- [1] 美国国家研究委员会. 90年代的材料科学与材料工程[M]. 北京:航空工业出版社,1992
- [2] 葛庭燧. 发展新材料的一些物理力学问题:材料的力学性质和材料设计[A]. 材料加工和研究新技术[C]. 中国材料研究学会,1994.458~466
- [3] 熊家炯. 材料设计[M]. 天津:天津大学出版社,2001
- [4] 顾秉林. 基于遗传学方法的团簇结构优化[A]. 论文摘要集[C]. 中国材料研究学会,1996.22
- [5] 顾秉林. 计算材料科学的成就和展望[A]. 国外材料发展动向研讨会报告[R]. 中国材料研究学会,1994
- [6] 沈真. 复合材料结构设计手册[M]. 北京:航空工业出版社,2001
- [7] 梁志勇. 复合材料液体成型工艺技术基础研究[D]. 北京航空航天大学,2000
- [8] 吴人洁. 复合材料[M]. 天津:天津大学出版社,2001
- [9] 张联盟,袁润章. 功能梯度材料的研究进展与新动向[A]. 论文摘要集[C]. 中国材料研究学会,1994.97
- [10] 杜善义. 复合材料细观力学[M]. 北京:科学出版社,1998

## Qian Xuesen and Materials Design

Yu Qiao

(China Academy of Launch-Vehicle Technology, Beijing 100076, China)

[Abstract] A brief introduction of the ideas, theories, hierarchical structure, methods, and systems of materials design initiated and promoted actively by famous scientist Qian Xuesen in recent 20 years is presented in this paper. After a sustained effort contributed by the “863” Program expert team, materials design has been scheduled into the nation’s general new material development plan and encouraging progress has been made.

[Key words] Qian Xuesen; materials design; atom and molecular engineering; materials science and materials technology system