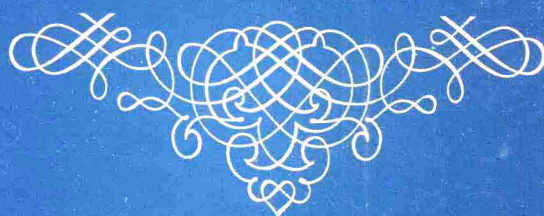


Selected Papers by Academician Liu Baixin

柳百新院士论文集

清华大学材料学院 编



科学出版社

Selected Papers by Academician Liu Baixin

柳百新院士论文集

清华大学材料学院 编

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是为庆祝材料科学家柳百新院士八十华诞而集结的文集。全书主要分为六篇：第一篇柳百新传略；第二篇柳百新研究组发表的 500 篇 SCI 论文目录（1982—2015 年）；第三篇 35 篇代表性论文；第四篇培养的研究生名单；第五篇主要获奖项目；第六篇同学、同事和学生的回忆文章。

本书适合有关离子束与固体的作用及材料改性、计算材料科学、薄膜材料、核材料等领域的专家学者、学生，以及对此学科领域感兴趣的人阅读和参考。

图书在版编目(CIP)数据

柳百新院士论文集/清华大学材料学院编. —北京: 科学出版社, 2015.4

ISBN 978-7-03-044046-4

I. ①柳… II. ①清… III. ①柳百新-纪念文集②材料科学-文集 IV. ①K826.16-53
②TB3-53

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 069014 号

责任编辑: 钱 俊 周 涵 / 责任校对: 钟 洋
责任印制: 肖 兴 / 封面设计: 耕者设计工作室



科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京厚德则铭印刷科技有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 7 月 第 一 版 开本: 889×1194 1/16

2015 年 7 月第一次印刷 印张: 36 3/4 彩插: 1

字数: 890 000

POD 定价: 198.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)



柳百新，材料科学家、中国科学院院士

序 言

天增岁月人增寿，福满乾坤喜盈门。我国著名材料科学家、中国科学院院士、清华大学教授柳百新先生即将迎来 80 岁生日，清华大学材料学院为此特编辑了这本论文集。2006 年由中国科学技术出版社出版的《中国科学技术专家传略·理学篇·物理学卷 3》中收录了柳先生的传略，本论文集的开篇就用该传略作为对柳先生生平的简单介绍。

改革开放以来，柳先生在科研、教学以及国际学术交流方面做了大量的工作。他的主要研究领域包括离子束与固体的作用及材料改性、计算材料科学、薄膜和核材料等。30 多年来，柳先生和他带领的研究组迄今发表了 500 篇 SCI 论文。本论文集收录了已发表的全部论文的目录，以及 35 篇代表性论文的全文。我们还编制了 500 篇论文完整的电子版光盘附在论文集的后面，供有兴趣的读者查阅参考。

柳先生的众多好友和弟子得知我们编辑本论文集的时候，纷纷寄来了他们撰写的与柳先生一起生活、学习和工作的回忆性文章约 40 篇。从柳先生几位发小的描述中，我们可以看到柳先生儿时成长的足迹和童年珍贵的友谊；在志同道合的科学界朋友的文字里，我们感受到的更多的是科研思维的碰撞与激发。柳先生不拘一格地培养研究生，许多弟子现在已经在国内外知名大学担任教授，有的成为国际大跨国公司的高级管理人员，也有的成为国家的公务人员。兹兹师恩，悠悠情深。在弟子们的回忆里，柳先生是博学多才的先生，是和蔼可亲的长者，是科学研究的领路人，是人生成长的导师，是严谨勤奋的合作伙伴，亦是值得信任的忘年之交。通过阅读这些生动的文字回忆，相信对我们认识柳先生从事科学研究的精神、理念以及指导研究生的独特方法等会有一定的裨益。

我们在编辑这本论文集的同时，也根据柳先生的回忆，把改革开放后 30 多年来，他在参加国际学术交流中的所见所闻，编写了一本《科海之旅——柳百新院士国际学术交流活动纪实》，将与本论文集同时由科学出版社出版，使读者可以从另一个角度了解柳先生的科研工作。

在编辑本论文集的过程中，与柳先生有关的文稿中的许多细节，我们都与他一起讨论和校对，我们深深地感受到，几近 80 岁的柳先生依然精神矍铄、思维敏捷、记忆力过人。借本论文集出版之际，我们衷心地祝福柳先生，祝他福如东海长流水、寿比南山不老松！

特别感谢本书成书过程中每一位撰稿者的努力付出和科学出版社的大力支持。

清华大学材料学院

2015 年 1 月 30 日

目 录

序言

第一篇 柳百新传略	1
第二篇 柳百新研究组发表的 500 篇 SCI 论文目录(1982—2015 年)	13
第三篇 35 篇代表性论文	57
1. Structural Difference Rule for Amorphous Alloy Formation by Ion Mixing	59
2. Ion Mixing and Metallic Alloy Phase Formation	62
3. Different Behaviours of Amorphization Induced by Ion Mixing	86
4. Observations of Fractal Patterns Induced in Thin Solid Films by Ion Irradiation	95
5. Linear Correlation of Fractal Dimension versus Atomic Magnetism in Magnetic-Particle Aggregation	99
6. Thermodynamics and Growth Kinetic Consideration of Metal-Nitride Formation by Nitrogen Implantation	104
7. Void Swelling Induced by 1 MeV Electron Irradiation in Ti- and Nb-Modified 316 Stainless Steels	116
8. Disclination Loops in Ni-Mo Amorphous Alloy Films Induced by Ion Irradiation	122
9. C54-TiSi ₂ Formed by Direct High Current Ti-Ion Implantation	135
10. Anomalous Alloying Behavior Induced by Ion Irradiation in a System with a Large Positive Heat of Mixing	138
11. Spontaneous Vitrification in the Au-Ta System with a Small Size Difference	152
12. Formation and Theoretical Modeling of Non-Equilibrium Alloy Phases by Ion Mixing	155
13. Influence of Interfacial Texture and Asymmetric Growth in Diffusion-Limited Amorphization in Ni-Zr Multilayers upon Medium-Temperature Annealing	186
14. Interface-Driven Alloying and Metallic Glass Formation in Nano-Multilayers in an Immiscible Y-Nb System	197
15. Glass-Forming Ability Determined by the Atomic Interaction Potential for the Ni-Mo System	206
16. Metastable Rhombohedral Fe Phase Formed in Fe/Sb Multilayers and Its Magnetic Properties	210
17. Prediction of Solid-State Amorphization in Binary Metal Systems	217
18. Irradiation Induced Amorphization in Metallic Multilayers and Calculation of Glass-Forming Ability from Atomistic Potential in the Binary Metal Systems	221
19. Stability of a Nonequilibrium Phase in an Immiscible Ag-Ni System Studied by <i>Ab initio</i> Calculations and Ion-Beam-Mixing Experiment	269
20. Solid-State Crystal-to-Amorphous Transition in Metal-Metal Multilayers and Its Thermodynamic and Atomistic Modelling	273
21. Metastable Phase Formation in an Immiscible Cu-Ta System Studied by Ion-Beam Mixing, <i>Ab initio</i> Calculation, and Molecular Dynamics Simulation	336
22. Correlation of Magnetic Moment versus Spacing Distance of Metastable fcc Structured Iron	345
23. Crystallographic and Lattice Point Correlations of a New <i>hcp-to-fcc</i> Martensitic Transformation Observed in the Ni-Hf System	348
24. Atomistic Modeling of Crystal-to-Amorphous Transition and Associated Kinetics in the Ni-Nb System by Molecular Dynamics Simulations	354

25. Formation of Amorphous Alloys by Ion Beam Mixing and Its Multiscale Theoretical Modeling in the Equilibrium Immiscible Sc-W System.....	363
26. Icositetrahedral and Icosahedral Atomic Configurations Observed in the Nb-Ag Metallic Glasses Synthesized by Ion Beam Mixing.....	370
27. Nonequilibrium Solid Phases Studied by Thermodynamic Calculation, Molecular Dynamics Simulation, <i>Ab initio</i> Calculation and Ion-Beam Manipulation in an Immiscible Au-Co System at Equilibrium.....	373
28. Atomistic Mechanism of Interfacial Reaction and Asymmetric Growth Kinetics in an Immiscible Cu-Ru System at Equilibrium.....	385
29. Molecular Statics Calculation of the Formation Enthalpy for Ternary Metal Systems Based on the Long-Range Empirical Interatomic Potentials.....	395
30. Interatomic Potentials of the Binary Transition Metal Systems and Some Applications in Materials Physics.....	398
31. Atomistic Theory for Predicting the Binary Metallic Glass Formation.....	400
32. Interatomic Potential to Calculate the Driving Force, Optimized Composition, and Atomic Structure of the Cu-Hf-Al Metallic Glasses.....	428
33. First-Principles Molecular Dynamics Simulations to Study the Crystal-to-Amorphous Transition in the Mg-Zn System.....	431
34. Atomic Modeling to Design Favored Compositions for the Ternary Ni-Nb-Zr Metallic Glass Formation.....	436
35. Structural Skeleton of Preferentially Interpenetrated Clusters and Correlation with Shear Localization in Mg-Cu-Ni Ternary Metallic Glasses.....	447
第四篇 培养的研究生名单.....	459
第五篇 主要获奖项目.....	463
第六篇 同学、同事和学生的回忆文章.....	469
散落的珍珠..... (邓 柯)	471
回忆童年的友情..... (曹旭沧)	476
我的挚友柳百新..... (张乃光)	478
金秋忆旧..... (赵汉钧)	481
忆柳百新..... (何宇忠, 何宇信)	485
良师益友, 莫逆于心..... (李冠兴)	487
亦师亦友亦兄长, 风雨同舟一甲子..... (邱学良)	489
柳百新院士八十寿诞感言..... (周克崧)	491
How did the “structural difference rule” help shape my career?..... (Yang-Tse Cheng)	493
来自约翰·霍普金斯的贺信..... (马 恩)	495
栉风沐雨 80 载..... (王 曦)	498
出成果 育人才 展人生..... (朱慧琬)	499
A tribute to the contributions of Professor Baixin Liu..... (Julio A.Alonso)	504
学贯中西, 儒雅人生..... (魏炳波)	507
睿智勤奋的良师益友..... (潘 峰)	510

在柳先生组里读研究生的那些日子	(张政军) 513
学高为师, 身正为范	(陈益钢) 516
师恩伴我前行	(赖文生) 519
越来越高大的身影	(蓝爱东) 528
和柳百新先生的师生缘	(杨 涛) 531
回忆与柳先生在清华园的时光	(高坤元) 533
我的老师柳先生	(杨国伟) 535
贺恩师柳百新先生八十大寿	(刘剑波) 537
先生言传身教, 促我学术成长	(李正操) 539
难忘师恩情	(龚浩然) 541
五载师生情, 一世不了缘	(孔令体) 542
师恩无私深似海	(张瑞丰) 544
兹兹师恩, 悠悠情深	(李家好) 547
师恩绵长	(郭海波) 549
我心目中的柳先生	(孔 毅) 551
记师从柳百新先生的那些年	(何 翔) 553
跟随授业恩师“闻道”十载的珍贵点滴	(邵凯平) 557
回忆和柳先生共同的日子	(梁苏会) 559
柳先生与我的三层关系	(王同乐) 561
日记里的柳先生	(崔苑苑) 564
问道五载, 受用一生	(李 楠) 566
先生之风, 山高水长	(罗诗瑶) 568
师恩如山	(李 洋) 571
春风化雨, 德艺双馨	(王 琦) 573
我读柳先生	(牛晓彦) 576

第一篇 柳百新传略

柳百新^①

柳百新(1935—), 材料科学家, 中国科学院院士。提出离子束混合在二元金属系统中形成非晶态合金的经验规则和热力学模型, 并用第一性原理计算论证了亚稳合金相的稳定性。提出金属多层膜中非晶化反应的判据, 并用分子动力学方法揭示其原子运动机制。阐明了离子注入形成金属氮化物的规律。发展出强流金属离子注入制备金属硅化物的新技术。

柳百新, 1935年6月10日出生于上海市, 原籍江苏省武进县。出生时他的父亲柳荫(培庆)是一个造诣很高的雕刻师, 在印刷行业中雕刻印制钞票、证券等用的铜版。母亲戎悦礼是一个普通和善良的妇女, 亲自操持家务。柳百新有两个哥哥、一个姐姐和一个弟弟。他父母在年轻时由于经济条件所限, 只受过初等教育, 但他们从生活经验中深感学习文化和技术的重要性, 因此下决心要把孩子们送到最好的学校去求学。每当遇到经济困难时, 他们紧缩其他开支或借债也要为孩子们交上学费。柳百新6岁时被送到上海市中西女中第二附小上学, 四年级开始时因病而休学了两年。这个小学从三年级就开始教英文, 注意发挥学生的学习主动性, 从不在学生的成绩单中排名次, 时过半个世纪, 柳百新还记得这个小学的学习气氛和“不排名次”的特点。1947年, 由于搬家而转入协进女中附小继续学习。从那时起, 柳百新一直是班上的第一名, 直到高中毕业。

柳百新少年时曾经历过日本帝国主义对中国的侵略和国家经济落后、人民生活贫困的年代。因此, 他怀着国家能够强盛起来的愿望迎来1949年的解放。这一年, 他小学毕业了, 并下决心长大后为国家建设出力。家庭中, 父亲对工作的精益求精和十分节俭的作风, 母亲不遗余力地辅助父亲的事业、悉心养育子女的深厚亲情都对柳百新以后的为人有深刻的影响。在小弟弟尚未出生前, 全家6口人只住石库门房子中的两间半正房。但他的父母却为孩子们购置了商务印书馆出版的500本“小学生文库”。从文库中, 柳百新读到了“孔融让梨”等故事, 他还特别爱读“三国演义”。每逢年终, 他母亲还要带孩子们到书店去选购一批图书。因此, 柳百新从小就养成了爱读书的习惯。大哥柳小培和大嫂陈淑卿解放前就参加革命, 中华人民共和国成立后在北京外国语学院工作, 他们全心全意为人民服务的精神为柳百新树立了榜样; 姐姐柳百敏对少年时体弱的柳百新总是倍加照顾, 她毕业于上海外语学院, 但从事的是她爱好的体育、教练和体育科研工作; 二哥柳百成比柳百新大两岁, 他们从小一起生活并长大, 上的是同一个小学、中学和大学, 现在都是清华大学的教授, 哥哥是中国工程院院士, 弟弟是中国科学院院士。柳百新的伯父柳溥庆是一位知名的印刷技术专家, 生前任中国人民银行总行的总工程师。他20世纪20年代去法国勤工俭学, 1926年入党。1939—1941年间和柳百新的父亲等人在上海为新四军秘密印制解放区使用的钞票, 印制中用的铜版是柳百新的父亲精心设计和雕刻的。柳百新的姑姑柳静和姑夫吴朗西于20世纪30年代在上海创办文化生活出版社, 出版进步的作品和名著, 如鲁迅的作品、巴金的《家》《春》《秋》等。父亲一辈人为了民族富强、国家兴旺而奋发图强的精神深深地印在

① 本文摘自: 中国科学技术协会编. 中国科学技术专家传略·理学编·物理学卷3. 北京: 中国科学技术出版社, 2006: 473-491.

柳百新的思想深处。

1949—1955年,柳百新就读于上海市圣芳济中学(后改名为时代中学)。6年的中学生活使他在3个方面大受裨益。一是系统和高水平的英语教学,老师的纯正发音,要求学生朗读课文等,使柳百新在中学期间打下了扎实的英语基础;二是比较灵活的教学方法,有些老师有大学或国外留学的学历,教学中带有启发性;三是非常重视体育,每天课后,几乎所有的学生都参加体育锻炼。50年代中,这个中学的排球队曾战胜包括成人队在内的所有对手而获得上海市冠军,成为体育界的一段佳话。柳百新在中学期间,以刻苦认真的学习取得优异成绩,有一年考试共11门课,他得了7个100分。在校期间,他积极参加体育活动,曾以1.55米的成绩获得过跳高亚军。因此,中学的6年也使他的体魄强健起来,并锻炼了他的毅力和意志。后来,他在清华大学学习期间,曾是校羽毛球队的队员。

1955年,柳百新考入清华大学,被分配在工程物理系学习。大学期间,他特别注意自学能力的培养。1957年,在学习“分析力学”时,柳百新发现由于课程衔接中没有学过“一阶偏微分方程”的基础知识,因此听课时有较大困难。他到图书馆找到了一本数学书,自学了两个月才真正体会到“分析力学”在处理多粒子问题中的“美妙”之处。柳百新认为外语是一个重要的工具,需要刻苦学习、反复练习才能达到“熟能生巧”的境界。三年级学习“光学”时,他就直接看俄文参考书。后来,他认为上课时听老师的讲解,课后再看俄文参考书,学会新的物理内容。因此,他找了一本内容不熟悉的俄文科学论文,用了一个多月时间,通过俄文理解了物理内容。

1961年毕业后,柳百新被留在工程物理系工作,第一项任务是开“固体物理”课。他备课认真,写出详细的教案,讲课效果很好。1963年,柳百新和同学了6年的倪蕙苓组织了自己的家。倪蕙苓是天津市人,1955年进入清华大学工程物理系(核物理专业)学习,毕业后在中国科学院原子能研究所(后改为高能物理研究所)工作。她主持研制的亮度监测器,为1988年正负电子对撞机上正负电子的首次对撞成功提供了第一时间的直接证据。在将近半个世纪的岁月里,他们始终相互帮助,相互照顾,共同前进。

“文化大革命”期间,柳百新于1969年被派到江西鲤鱼洲农场去接受“再教育”。同年底被调回清华大学从事核能研究。1978年,柳百新回到工程物理系做教学和研究工作。1980年初,他靠着扎实的材料科学和英语的基础通过了选拔出国进修的3门考试,于1981年初由国家教委公派去美国加州理工学院做访问研究。

1981—1982年,柳百新在美国加州理工学院做了大量研究工作,发表了9篇第一作者和8篇合作作者的论文。80年代初,在“离子束材料改性”领域中提出了一种新的离子束混合实验方法,柳百新的第一份工作就是用这种方法研究非晶态合金的形成。经过调研,他提出了科学上的假设,并用系统的实验作了论证,由此提出了“结构差异规则”。1982年,应邀在法国举行的第三届“离子束材料改性”国际会议上作报告,受到与会者的高度重视,一位法国教授把他报告的每一张胶片都拍了照。此外,加州理工学院活跃的学术氛围和学者们对基础研究的热情和“乐在其中”的精神状态给柳百新留下了深刻的印象。

1982年底柳百新按时回国,并积极准备开展研究工作。1986年,他获得了第一份国家自然科学基金,使他能启动思考了一段时间的基础研究。后来,他连续获得过2项重点和8项面上基金。随着工作的发展,他还获得过863和973项目的科研经费、国际原子能机构的资助、与美国通用汽车公司和美国联合技术公司合作的科研经费。他的研究领域包括载能离子束与固体的作用及材料改性、计算材

料科学、薄膜材料和核材料等。20年来,发表学术论文330多篇,其中国际会议论文48篇;SCI收录论文290篇。1991年他名列SCI收录个人发表论文数全国第一名。发表的论文迄今已被引用2000多次。他曾访问过14个国家以及香港和台湾地区,在国际会议上报告40次,其中邀请报告20次,并应邀在著名的大学和研究所做学术报告40多场次。柳百新的研究成果受到国内外同行的高度重视。1984年,他当选为玻姆物理学会(Bohmische Physical Society)(专业为粒子-固体相互作用)的科学委员;1988—1989年应邀担任中国高等科学技术中心特别成员。1993年起应聘担任国际期刊*J. Nuclear Materials*的顾问编委会委员;1998年当选为美国物理学会(American Physical Society)理事(Fellow);1999—2000年应聘担任国家重点基础研究发展规划的项目咨询顾问组成员。1999年以来,还应聘担任国家自然科学奖、科技进步奖和发明奖,以及国家自然科学基金委学科评审组的专家等。柳百新曾以第一完成人获1986年和1990年度教委科技进步奖一等奖,1993年度国家自然科学奖二等奖,1997年度北京市科技进步奖一等奖和1999年度国家自然科学奖三等奖。他个人还获得中国物理学会授予的叶企孙(凝聚态)物理奖。2001年,柳百新当选为中国科学院院士。

“离子束材料改性”是一个多学科交叉的新兴领域。离子束是从加速器引出的,具有较高的能量($10^2 \sim 10^3$ 千电子伏),因此被称为载能离子束。将载能的离子束作用于材料,可以对材料进行表面改性和制备出新材料,它是20世纪下半叶发展出来的一种非平衡材料制备新技术。离子束与材料(固体)相互作用的物理过程具有远离平衡态、合金元素的动力掺入和离子束参数可精确调控等特点。在过去的20年里,柳百新充分发挥离子束与固体作用的特点,选择了材料科学和相关学科中的前沿课题,做了大量研究工作,并着重于揭示材料微观结构的形成与演化规律,以及结构与性能的关系。研究的内容不断扩展和深化,从系统的实验研究,归纳出经验规律,上升到热力学模型,并进而提出原子尺度的模型,乃至固体电子结构层次的物理诠释。许多成果为离子束制备新型材料和表面改性提供理论基础。有些成果则提出新的原理或技术路线,有些成果还揭示了新的物质状态,具有重要的理论意义。

提出离子束混合制备二元非晶态合金的经验模型

非晶态合金(或金属玻璃)是P. Duwez于1959年用液态熔体淬火获得的。从而开拓出一大类新型材料,也揭示了一种新的物质状态——非晶态固体。40年来,非晶态合金的研究与应用一直是材料科学领域中的一个重要方向。这里面一个重要的科学问题是要阐明其形成规律,并预言在什么系统中、在什么成分范围内有可能制备出非晶态合金。

多层膜离子束混合是1980年提出来的一种新的实验方法。实验中,先在基体上交替沉积两种元素,然后用载能离子束进行辐照,使两种元素混合而形成化合物或合金。最初,离子束混合被应用于研究金属硅化物的形成。1982年,柳百新设计了系统的多层膜离子束混合实验来考察二元金属系统中组元的结构、尺寸和电负性对非晶态合金形成的影响。实验结果论证了结构是决定性的因素,由此提出了离子束混合形成非晶态合金的第一个判据——结构差异规则。该规则预言:在具有不同晶体结构的二元合金系统中,合金成分选在两相区中间,在适当的实验条件下(基体温升不能过高、离子束流调节合适等),有可能获得非晶态合金。论文发表在《应用物理快讯》上,迄今已被引用130次。他又进一步用实验论证了离子束混合也能在中间化合物的成分附近获得非晶态合金。换句话说,离子束混合实验

揭示了：有利于形成非晶态合金的成分可以覆盖平衡相图中两相区的总宽度。

稍后，J. A. Alonso 用 A. R. Miedema 理论计算的生成热(ΔH_f)来表征二元金属系统的特性，并提出生成热判据： $\Delta H_f > +10$ kJ/mol 的系统中，离子束混合不能形成非晶态合金。柳百新带领几名学生又做了系统的离子束混合实验，首次论证了 $\Delta H_f > +10$ kJ/mol 的系统中获得非晶态合金的可能性，同时指出正的 ΔH_f 会限制有利于非晶态合金形成的成分范围。综合分析之后，提出了用二元金属系统中两相区总宽度和生成热两个参数来预言非晶态合金的形成及其成分范围的经验模型，与实验结果符合得很好。1986 年，应邀在第五届“离子束材料改性”国际会议上作邀请报告。会议主席、美国 Sandia 国家实验室的 T. S. Picraux 博士评价为“近年里中国学者在离子束材料改性领域中提出的最好的工作”。Alonso 后来发表的论文中基本上同意柳百新提出的观点。1990 年 P. M. Ossi 在提出用其他参数预言玻璃形成能力的论文中明确地写道：柳百新等人提出的经验模型是“最成功的”。这项成果曾参与获得 1986 年度国家教委科技进步奖一等奖。

首创用离子束方法研究固体薄膜中的分形生长现象

20 世纪 80 年代中期，分形的研究在国际学术界形成了高潮，如 1985 年向《物理评论快讯》投稿的 1/3 和分形有关，但大多数是理论研究结果。柳百新在离子束混合研究非晶态合金形成的基础上，用离子束辐照研究非晶态合金晶化过程，带领几名学生进行实验研究，首次在非晶态-晶态相变临界点附近观察到从非晶态基体中析出的亚稳晶相凝聚而成的分形图像，1987 年发表在《物理评论快讯》上。他们还首次在电镜下观察到非晶态固体中的线缺陷——旋错环(相当于晶体中的位错环)，在二维平面内，旋错环是一种自避免的和封闭的奇数环，并用规范场理论作了近似处理，阐明了它的运动特性，1991 年发表在英国物理期刊上，被英国学者 Prof. N. Rivier 称之为“magnificent results, picture and theory”；1994 年，Rivier 在提出玻璃中元激发概念时的一个重要基础是非晶态固体中的奇数环，并引用柳百新的论文作为直接的实验证据。柳百新等人还首次观察到在离子束辐照下，金属-化合物界面混合所诱导的分形生长、分形生长中分形维数与离子束剂量的指数关系、磁性粒子在薄膜表面凝聚的分形生长等。柳百新等人在对薄膜中观察到的分形进行表征的研究中，用多标度分形和子波变换进行了计算，并首次用电镜观察到原子层错构成的分形，通过光学成像的分析说明子波变换作为数学显微镜对分形进行表征的适用性，等等。

这项工作不仅推动了分形科学的研究，而且在国内外都是较早将分形概念应用到材料科学研究中的。知名物理学家冯端院士评价为：“开创了固体薄膜用离子束方法研究分形的新局面，在国际上领先”。1987 年发表在《物理评论快讯》上的论文，很快被 T. Vicsek 于 1989 年出版的分形专著中列为参考文献，同时也引起其他学者仿效用离子束方法来研究分形。这项成果曾获得 1990 年度国家教委科技进步奖一等奖。柳百新个人还获得 1993 年度中国物理学会叶企孙(凝聚态)物理奖。近年里，柳百新的研究组在研究离子注入合成金属硅化物时，用分形维数来表征其生长动力学过程，深入地揭示了薄膜生长的机理。

阐明离子注入下金属氮(碳)化物的形成规律

氮(碳)离子注入在金属表面层中有可能形成相应的氮化物(碳化物)而改善材料的摩擦学性能。柳百

新带领几名学生对 20 多种金属作了系统的研究,获得多种新的合金相,揭示了新相与母相结构匹配的重要性,由此提出结构适应性原则,并用快速切变机制解释了实验中观察到的有关相变。研究结果综合阐明了金属氮化物(碳化物)形成中热力学和生长动力学诸因素各自的作用和主次关系。1989 年应邀为德国《固态物理》期刊撰写了综述性论文。这项工作也是 863 材料表面优化专题中的课题,结题时受到专家组的表彰。

以上关于非晶、分形和氮(碳)化物的 3 项研究成果一起获得 1993 年度国家自然科学奖二等奖,获奖项目名称为:载能离子束与金属作用下合金相的形成与分形生长现象的研究。

为快中子反应堆的设计提供结构材料的辐照肿胀数据

20 世纪 80 年代后期,863 能源领域立项建造我国第一个快中子反应堆,总体设计中需要选择结构材料,而候选的材料在辐照下的行为是十分重要的一个因素。柳百新小组用高能(1 MeV)电子辐照来模拟中子辐照肿胀,对国内研制的 8 种材料进行了研究,初选出 3 种抗肿胀的改进型 316 不锈钢,为设计中选定国产不锈钢作为结构材料及时地提供了依据。结题时得到专家组的好评。

提出离子束混合形成亚稳合金相的热力学模型

柳百新领导的研究组以 A. R. Miedema 模型为理论框架对亚稳合金相进行热力学计算。首次考虑了多层膜中曾被忽略的界面能的作用,并将界面能加在多层膜的初始能态上。计算结果表明:对于生成热 $\Delta H_f > 0$ 的系统,界面能随界面份额(定义为界面层中的原子数与多层膜中的总原子数之比)的增加而增加,因此使多层膜的初始能态升高而非晶相呈凸形的自由能曲线相交割,从而把合金成分划分为 3 个区域:中央区域中非晶相的自由能仍高于多层膜,而另外两侧的成分区域中多层膜的初始能态都已超过了非晶相。进一步提高多层膜中的界面份额使初始能态提高,也有可能非晶相自由能最高的等原子比附近获得非晶态合金。这些预言都用离子束混合实验在多个二元金属系统中得到证实,论证了对于 $\Delta H_f > 0$ 的系统,界面能是非晶态合金形成的热力学驱动力;而对于 $\Delta H_f < 0$ 的系统,界面能的影响是较小的,负的 ΔH_f 本身是非晶化相变的驱动力。由此建立了适用于 $\Delta H_f < 0$ 和 $\Delta H_f > 0$ (实验中研究的系统的最大生成热为+65 kJ/mol)的二元金属系统中多层膜离子束混合形成非晶态合金的热力学模型。

离子束混合还获得众多的亚稳晶态合金。经常观察到的是 A_3B 和 AB_3 型亚稳晶相(A和B代表A-B二元金属系统的两个组元金属)。柳百新领导的研究组提出了改进的热力学算法,计算出这两种亚稳晶相的自由能曲线,由此构造了更为完善的 Gibbs 自由能图。对于计算得到的自由能图,首次提出用稳态退火的实验来检验其合理性的思想。结果表明:退火中有关合金相随升温而出现的次序与自由能图所预言的相符,由此肯定了构造的自由能图(至少在框架上)是合理的。

对于上述两类亚稳晶相,提出 bcc-hcp-fcc(体心立方-密堆六角-面心立方)两步骤相变的生长动力学机制,揭示了从 bcc 为基的合金中先后生长出 hcp 和 fcc 相的原子运动模型,并推导出 hcp 和 fcc 相的点阵常数,与实验中用衍射分析测定的值符合得很好。近年里,柳百新指导的博士生从第一性原理计算肯定了二元金属系统中存在相应的两种亚稳物质状态,对应于实验中获得的上述两种亚稳晶相,

从固态电子结构的层次阐明了 A_3B 和 AB_3 型亚稳晶相的稳定性。

这项研究成果使经验规律上升到热力学和生长动力学的理论模型,对亚稳合金相的形成及相变理论的发展作出了有意义的贡献。阐明了界面能是 $\Delta H_f > 0$ 的系统中合金化和非晶化的主要驱动力,由此可以通过多层膜的设计而制备出成分可调的新型亚稳合金。本领域奠基人之一、美国工程院院士 J. W. Mayer 给予很高的评价,称之为“multilayer technique”。1998 年,由 Mayer 和其他 4 位美国学者联合提名,柳百新因为“对离子束混合形成非晶态合金的理解所作出的杰出贡献”而当选为美国物理学会理事 (Fellow)。

用强流金属离子注入合成过渡(稀土)金属硅化物

1985 年,美国学者 I. Brown 发明了金属蒸气真空弧离子源(简称为 MEVVA 离子源),这种离子源可以提供几乎所有的金属离子,束流密度可以高达 $150 \mu A/cm^2$,为强流金属离子注入材料改性提供了技术基础。20 世纪 90 年代,国内也能制造类似的 MEVVA 注入机。1992 年,柳百新提出用 MEVVA 离子源,将金属离子注入到硅片中,直接在硅表面形成金属硅化物的想法。第一批实验成功地制备出性能优良的 Ti, Co, Fe, Zr 和难熔金属的硅化物。又研究了 Ni-Si 系统,经分析发现 $NiSi_2$ 和 Si 在 $380^\circ C$ 时的结构错配度为零。根据离子注入有可能在较低基体温度下合成化合物的特点,利用 Ni 离子束本身将 Si 基体加热到 $380^\circ C$,首次在错配度为零的条件下制备出优质的 $NiSi_2$,其电阻率是用固态反应必须在 $750^\circ C$ 以上才能合成的 $NiSi_2$ 的一半。众所周知,用固态反应方法合成稀土金属硅化物有一个临界温度现象,低于临界温度时反应很慢,而高于临界温度时反应是“爆炸式”的,使制备过程无法控制。柳百新领导的研究组发挥离子注入的特点克服了临界温度的问题,在 Si 表面获得 10 多种连续的稀土金属硅化物薄膜。这项研究工作发展出一项合成金属硅化物的新技术,并已应用于固体器件的制备中。

关于亚稳合金相的热力学模型和金属硅化物的研究成果一起获得 1997 年度北京市科技进步奖一等奖,并获得 1999 年度国家自然科学奖三等奖,获奖项目名称为:离子束材料改性中若干基础性问题的研究。

首先提出从原子相互作用势计算金属玻璃形成能力

离子束混合的研究结果表明,二元金属系统中金属玻璃形成的成分范围可以从中央区域一直扩展到有利于形成固溶体的边界。柳百新首先提出从理论上预言二元金属系统中的玻璃形成能力,实际上就是从理论上计算出系统的临界固溶度。因此,相应的科学问题就是要计算随成分变化时,固溶体与非晶相的相对稳定性。从物质结构的角度来分析,就是要比较两者的原子组态的相对稳定性;而原子组态的稳定性直接决定于该系统的原子间相互作用势。他带领几名研究生首先对 Ni-Mo, Ni-Nb, Ni-Ta, Ni-Ti 等系统建立了比较符合实际的原子相互作用多体势,再从多体势出发,用固溶体模型进行分子动力学模拟:在固溶体中逐步增加溶质原子,直到固溶体失稳而转变为非晶态,由此计算出两个组元金属的临界固溶度。两个临界固溶度之间的合金成分范围就是系统中有利于形成金属玻璃的成分范围。计算值与实验结果符合得很好。柳百新还指出,所确定的金属玻璃形成能力

是由系统的内禀特性所决定的，与实际中应用的制备技术无关，因此计算得到的是二元金属系统的本征玻璃形成能力；而用一种特定技术对某一个系统测定的玻璃形成能力，应该称为表观玻璃形成能力，它是与这种特定技术有关的。2002 年，柳百新领导的研究组还对生成热为正的二元金属系统提出了建立多体势的新方法：先用第一性原理计算出几个非平衡合金相的物理性能，再根据这些性能拟合出该系统的多体势。例如，建立了符合实际的 Cu-Ta 多体势，并进一步计算出玻璃形成的成分范围，计算结果与实验相符。

提出固态反应非晶化的热力学和原子运动模型

1983 年以来，文献中一直认为多层膜中固态反应非晶化的必要条件是系统的生成热很负和原子尺寸差很大。柳百新领导的研究组首先用系统的实验论证了固态反应非晶化也可以在生成热为正的系统中发生，论证了多层膜中的界面能是非晶化相变的驱动力。关于 Cu-Ta 多层膜的实验结果发表于 1995 年底，而国外用 Cu-Ta 双层膜观察到同样相变的工作发表于 1999 年。柳百新等人又进一步定义了热力学和动力学因子，对研究过的 28 个系统作了定量的计算，由此提出固态反应非晶化的理论判据，与迄今发表的实验结果相符合。

对 Ni-Mo, Ni-Nb, Ni-Ta, Ni-Ti 等系统，应用已建立的原子相互作用多体势，通过分子动力学方法在原子运动的层次研究了固态反应的动力学：观察到穿越界面的原子迁移，揭示了非晶化受扩散或界面控制的规律，揭示了界面结构可能在非晶化中起形核或生长位垒的作用，并观察到两种金属晶体无序化的先后次序。根据模拟和实验结果，柳百新等人首次阐明了晶态-非晶态相变的物理本质是晶格中固溶原子超过临界固溶度时的塌陷。由此推理：当两组元金属的固溶度有差异时，在其他条件相同的情况下，非晶层向固溶度小的金属方向生长得应该较快，所作预言与实验观察结果相符。

勤奋治学 教书育人

改革开放以后，柳百新在材料科学领域从事基础研究以及部分与高科技应用有密切联系的应用基础研究，他非常珍惜这样的机会，并以献身科学的精神投身到他热爱的工作中去。他在加州理工学院访问期间，每天工作 10 多个小时。他用离子束混合制备出第一个非晶态合金的实验是在一个星期日做的，那天整个实验室里只有他一个人在工作。如今，他已经 67 岁了，但他的勤奋精神依然如前，并深深地感染着他的学生们。他的研究生常常发现，柳百新经常是在许多人还在沉睡的清晨，为他们修改了论文，又通过网络传回给他们。20 年来，他和他指导的研究生在国际期刊上发表了 200 多篇论文，许多论文都是他在清晨或是在计算机前面对面地教学生怎样修改后定稿的。当有的高年级本科生有意报考他的研究生，向他询问对学生的要求时，他的回答非常简单：一要爱国，二要爱科学，因为他认为只有当一个人具有了强烈的爱国之心，热爱并立志为科学而献身的时候，这个人才会在科研中保持天天向上的工作姿态。

柳百新迄今共培养了 7 名硕士和 14 名博士，曾获得 1997 年度北京市教学优秀成果奖一等奖，获奖项目的名称是：“培养国际一流水平博士生的研究与实践”。每每提到他培养的学生，柳百新总是说：“我为我的学生而感到十分的骄傲！”例如，1993 年毕业的一名博士，现在担任清华大学材料科学研