

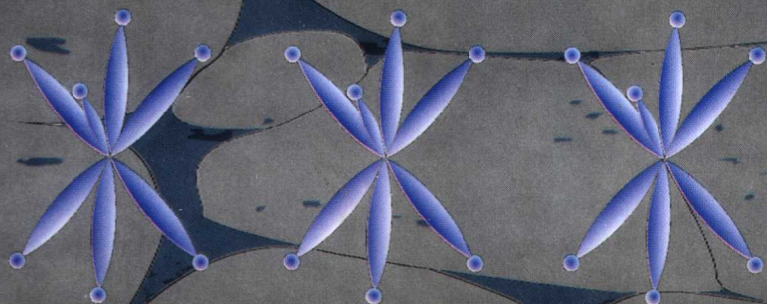
国家“九五”规划重点图书

# 金属材料 系统科学

谢佑卿 著

中南工业大学出版社

SCIENCE OF METALLIC MATERIALS  
SYSTEMATIC



## 内容简介

本书搜集了作者及其合作者探索建立“金属材料系统科学”的 35 篇论文。内容共分 5 篇:第 1 篇为金属材料系统科学与哲学。此篇纵览了人类思维方式的演变和金属材料科学发展的历程,阐述了建立金属材料系统科学的必然性和实现材料科学设计的阶段性。第 2 篇为纯金属系统科学。此篇介绍了以“固体中多原子相互作用势能函数”为主体,电子结构、晶体结构、热力学性质和多种物理性质相关联的纯金属单原子理论及其应用。第 3 篇为合金系统科学。此篇介绍了以“特征晶体模型”和“特征性质相互作用函数”为主体,纯金属单原子理论与合金统计热力学相结合的特征晶体理论及其应用。第 4 篇为金属材料系统科学研究初步。此篇介绍了在 Pauling 和余氏理论基石上探索建立金属材料系统科学的早期论文,其中“晶体价电子结构的理论晶格参量”及“广义 Vegard 定律和广义余氏定律”最具有代表性。第 5 篇为金属材料系统科学思想萌芽。此篇介绍了作者由热敏磁性材料的研究进入电子结构层次的早期论文。这五部分是彼此相互关联的整体。它记载了作者探索建立金属材料系统科学的曲折道路。

本书可作为高等院校“材料科学与工程系”高年级学生、硕士生和博士生的选修课用书,也可供材料科学领域内的科技工作者参考。

### 金属材料系统科学

谢佑卿 著

责任编辑:周兴武

\*

中南工业大学出版社出版发行

中南工业大学出版社印刷厂印装

湖南省新华书店经销

\*

开本:787×1092 1/16 印张:20.5 字数:499千字

1998年10月第1版 1998年10月第1次印刷

\*

ISBN 7-81061-116-X/TB·003

定价:40.00元

---

本书如有印装质量问题,请直接与生产厂家联系调换

厂址:湖南长沙

邮编:410083

- 国家自然科学基金
- 中国有色金属工业总公司基金
- 湖南省自然科学基金
- 中南工业大学

资助项目

# 序 1

《金属材料系统科学》记载了谢佑卿教授在材料经验设计向科学设计转变的基础研究中持续攀登 20 多年的经历。深信读者从中能感受到作者对科学的热情,以及创新的意识和毅力。

以哲学思想为指导,以前人理论为基础,系统地建立金属材料系统科学是此书的特点之一。为了使材料由经验设计向科学设计转变,作者强调建立金属材料系统科学为首要条件,以完善金属和合金的数据库为过渡阶段,随后逐步建立各类材料科学设计的专家系统。这是一项涉及面广、耗时长的系统性基础研究。深信读者从作者的历程可了解到其鲜明的学术思想和严肃的工作态度,并从中得到启迪。

以创造性思维方式正确处理继承和发展的关系是此书的特点之二。“晶体价电子结构的理论晶格参量”论文在鲍林教授的价键理论和余瑞璜教授的固体与分子经验电子理论背景上作了发展性研究,建立了纯金属单原子(OA)和合金相特征晶体(CC)的相关理论。“固体中多原子相互作用的新势能函数”反映了多原子相互作用的特征,它是 OA 理论的主体函数。固溶体的特征晶体模型是直接由固溶体中心原子模型演变而来,它为求解固溶体中原子的状态以及各种状态原子对结合能、振动能、原子体积和晶格常数的贡献提供了一条可行之路。作者基于特征晶体模型与配分函数相结合导出 Gibbs 能的 9 种函数,同时建立了组元的偏摩尔量与真实平均摩尔量之间的关系函数,这些研究很值得借鉴。

作者始终坚持科学研究与教学紧密结合。《金属材料系统科学》课程对培育学生的创新精神起到积极作用。

长期以来在研究经费非常有限的条件下,谢佑卿教授始终以极高热情,锲而不舍的精神,努力攀登,不断进取,获得了丰硕的研究成果。特写此序以飨读者。



1998 年 7 月 6 日于北京

## 序 2

20年前,第一次听谢佑卿教授的学术报告,当时的直觉是:这是一位基础坚实、学风严谨、思想深刻、极富创造性的学者。此后,因为研究领域的相关,同室聆听导师的教诲,经常交流心得,多次在会议内外切磋,遂成挚友。

20年后,由作者30余篇论文汇成的文集置于案头,喜悦、赞叹和敬意涌上心头。往事回思如细雨,熟文重读似春潮……

这篇篇论文,有如个个脚印,在荆棘中踏出拓荒者洒满血汗的蹊径;这篇篇论文,有如磴磴阶梯,都是心血的结晶、智慧的升华,铺成作者崎岖攀登的征程;这篇篇论文,有如个个音符,谱下一曲成功者的命运交响曲。

成功者的真正价值不是鲜花、掌声、头条新闻,而是其背后深深浅浅的脚印。

使金属材料从经验设计的作坊,步入科学设计的殿堂,这样宏大而又艰巨的任务,决不是一代人、更不是几个人所能完成的。把自己终生的奋斗目标,定格在这一宏伟事业上,甘当承前启后的铺路石,这需要怎样的知识、胆略和远见卓识?!这样的选择决不是功利性的,正如张开逊教授参观卢浮宫时发出的感叹:“第一流的作品,无论是科学的还是艺术的,都只能出自对人类的爱,最深沉的爱,而决不能出自功利或别的什么目的”。

崇高的人生目标,必然激发出巨大的心灵力量。正是这种力量使谢佑卿教授焕发出惊人的毅力:他在理想与现实巨大反差的逆境中艰难前行;他“三更灯火五更鸡”,每天坚持近20小时的工作;他在前人的书山文海中荡漾,寻觅着、构思着……,理论晶格参量、特征晶体、新势能函数、OA理论、CC理论等新概念、新公式、新理论妙思泉涌,使同行们在目不暇接的同时惊叹不已!因为只有对相关领域中进行过探索的人们才懂得这颗颗“真理的小小钻石是多么难得,但一经开采琢磨,便能经久、坚硬而晶亮。”(贝弗里奇,《科学研究的艺术》)

培根说:“发现的艺术是同发现本身一起成长的。”更为难能可贵的是作者能日益自觉地以系统科学——这一现代科学革命和技术革命发展的产物——来指导自己的研究工作,从而用自己采琢的颗颗真理钻石为金属材料系统科学的大厦奠基。

作为科学家,谢佑卿先生的这些成果具有开创性和奠基性。同时,他也像其他科学家一样,知道自己不知道的是什么。他正在探索CC理论如何与界面和缺陷理论相结合,人们有理由期望他的新成果早日面世。

作为教授,谢佑卿先生的征程对年轻的后来者更具有育人的启迪性,它再次证明科学巨匠的名言:

“天才是百分之一的灵感,百分之九十九的血汗。”(爱迪生)

“只要自然科学在思索着,它的发展形式就是假说。”(恩格斯)

“在自然科学研究中,首先要重视新思想,其次是新方法,再次是新成果。”(唐敖庆)

“在人类思想史上,最有成果的发展常常发生在两条不同的思想路线的交叉点上。”(海森堡)

“一心向着自己目标前进的人,整个世界都给他让路。”(爱默生)

创造需要环境,环境也需要创造。愿更多的学者和读者能积极参与金属材料的系统科学的研究和讨论,共同为构建这一宏伟的大厦添砖加瓦。

吕振象

1998年6月30日

于沈阳工业大学

# 我的几点思考

(代前言)

1990年以来,我为研究生开设了“金属材料系统科学”课程,讲述金属材料的成分、结构和性质相互关联的完整系统;材料设计的进展和存在的问题;实现材料科学设计的条件、步骤和规划。由于研究不断取得新进展,教学内容也就年年有变化,直至现在尚无一本正式教材,看来这一状况还会持续若干年。因此有必要将这方面研究的主要论文汇集成册,供学生们参阅,也让他们了解一位科学工作者攀登的真实足迹。

我也毫不隐讳地说,目前认同建立金属材料系统科学是实现材料科学设计关键的学者并不太多,因此将我在这方面的研究成果及心得和盘托出,与同行们交流,希望专家们给予关注、支持、帮助和指点。

回首过去,步步是艰辛,字字是血汗,20多年茫茫路上的探索令我感慨万千。在困境中我曾抱怨自己选定的方向和目标工程巨大、困难重重、步履艰辛、征途遥远。但令我欣慰的是,我没有被接踵而来的挫折和失败把勇气、锐气和志气消磨掉。我坚持下来了!路越走越宽广。

将血汗浇灌事业,让艰辛埋在心中,仅以几点思考作为此文集的前言。

## 1 对材料科学发展的哲学思考

哲学对于科学实践不只是具有解释功能,更重要的是具有引导功能。所以爱因斯坦强调说:“哲学是全部科学之母。”他甚至如此评价自己:“与其说我是一个物理学者,倒不如说我是一个哲学家。”的确,纵观他的划时代的科学伟业,不难领略其熠熠夺目的哲学思想的光辉。

使材料的经验设计向科学设计转变是材料科学家们梦寐以求的愿望,是艰巨、复杂的综合性难题,没有哲学的引导是难以把握其正确研究方向的。

海森堡在他撰写的《物理学和哲学》中强调:“提出正确的问题往往等于解决了问题的大半。”这是因为提出别人没有想过的问题,能启发、鞭策人们进行创造思维和科学探索,最终使问题得到解决。

当今,现代生物科学已达到能转移基因和以体细胞克隆羊的水平,为什么在古老悠久的金属材料领域,合金设计仍处在经验设计(或炒菜方式)的阶段?我按照人类思维方式演变的三个阶段分析了金属材料科学发展的历程<sup>[1]</sup>。得到的主要认识是:①过去几个世纪,分析哲学在西方居于主导地位。这一时期的材料科学家们也只能遵循历史发展规律,建立单一结构层次和单一性质的理论。正因为材料学科的历史悠久,传统分析思维方式也就根深蒂固,难以改变。②人类思维方式已在向系统思维方式演变,人们越来越清醒地认识到,对复杂现象进行整体思考和整体处理的重要。系统思维方式的普及,必然导致材料科学朝着系统化、高度数学化和科学技术一体化方向发展。

如何建立金属材料系统科学?种类繁多和特性各异的新材料层出不穷的哲学原理之一是:“整体大于部分之和”或“整体不等于部分的简单加和”。系统中部分之间的相互作用和影响则

是这一哲学原理的本质。因此,研究部分之间的相关性是认识系统的关键。建立金属材料系统科学应注重继承和发展两个方面:①在研究各结构层次理论之间、结构层次理论和性质理论之间相关性的基础上,充分吸取现有理论的正确部分,在它们之间构建联系的通道,使之形成有机联系的系统理论。②继续从实验和理论上探索原子、相和组织之间的相互作用的新规律。

怎样实现材料的经验设计向科学设计转变?为了回答这个问题,我们以系统论的观点对材料的发展历史进行了分析,并得到如下几点认识<sup>[2]</sup>:①材料是成分、结构和性质相互关联的系统。材料设计的哲学含义是依据对“整体”的要求寻找组成系统的“部分”和“结构”,或由系统的组成部分和条件预计可能的结构和性质。因此没有材料科学系统理论,便没有真正意义上的材料科学设计。试图以单一层次理论指导设计难以获得真正的成功。②建立金属材料系统理论的框架可能不需太长时间,但建立精细完善的理论体系可能需要几十年甚至更长时间,因此材料的经验设计和科学设计的兼容将在相当长的历史时期内存在。③计算机科学的应用将首先导致以材料系统科学为基础的各类数据库的建立,并成为材料设计的辅助系统。随之,各种专门功能的材料设计系统将应运而生。

自觉地应用辩证逻辑和系统逻辑对金属材料科学发展的过去、现在和未来进行完整的分析是属现代创造性思维。由此所得结论一般具有突破性、超前性和预见性。由此确定的目标和理想是科学的,符合发展规律的。追求者如能认识自己,了解社会,制订符合时代和个人能力的实施目标,坚定信念,艰苦奋斗,持之以恒,目标定能实现。

## 2 对创新的思考

人类的历史是一部创新史。创造思维产生了科学和哲学,构筑了人类灿烂的物质文明和精神文明。依据任何一位卓有成就学者的经历和任何一门学科形成的历程都可写出一部生动感人、光彩夺目的创新史。哲学家们正在探索创造性思维的形式、过程和规律。教育家们也在努力寻找培养创造性人才的有效之路。在此,我以自己科学实践的若干事实阐述对创新的点滴认识。

### 2.1 实践与创新

“实践是创新的源泉。”1973年至1978年,我主持了架空输电线自动防冰热敏磁性材料的研究,创造了价格较低、性能良好的Fe-Ni-Cr-Mn-Si合金<sup>[3]</sup>,并获得了1978年全国科学大会奖和湖南省科学大会奖。但同时发现Ni-Cu合金的平均原子磁矩实验值远低于Pauling(鲍林)模型的计算值。鲍林是获得诺贝尔奖的著名科学家,他对Slater总结的铁磁金属和合金的平均原子磁矩随外壳层电子数变化规律的模型刊载于各种重要文献和教科书中,并且是材料设计的d电子空位浓度法的理论依据。当时我们怀疑自己的测量温度太高(77K)。为此,我们将仪器搬到邻近研究院的低温实验室进行液氮温度下(4K)的磁性测量,并以纯铁为标样进行仪器检校,实验结果仍与鲍林模型严重不符。据此,我们推断Ni-Cu合金中Cu原子不具有铁磁矩,Cu和Ni的原子之间没有明显的电子转移,并提出了新的模型,1976年撰写了我们的理论处女作“Ni-Cu等二元合金的电子结构”<sup>[4]</sup>,1978年其修改稿在庐山召开的全国物理学盛会上宣读<sup>[5]</sup>,并获湖南省科学大会奖。令我心里踏实的是,十年之后,Kim和Lynch等对Ni-Cu合金进行现代实验方法研究的结果与我们的结论是一致的<sup>[6]</sup>。这一经历给我上了一堂破除迷信的课:如果确认自己的实验结果是对的,就不要不信任自己,不要惧怕权威,而应勇敢地提出怀疑,认真探索,创造性地提出理论解释。



## 2.2 比较思维与创新

“比较知差别,深究获真理”。在1978年庐山全国物理学盛会上,我有幸与阔别十几年的导师、中国科学院院士余瑞璜先生相会。他的“固体与分子经验电子理论”<sup>[7]</sup>(简称EET理论)的系列报告引起了我的浓厚兴趣。将EET理论与我的报告比较,EET理论的突出特点是注重原子在空间的占位,以鲍林键长公式为基础,提出了确定原子状态的键距差法。为了吸取EET理论的精华,我用几年的时间学习EET理论和鲍林的著作,并于1984年发表了以EET理论为基础的“Fe-Ni合金的电子结构”<sup>[8]</sup>,此文得到余先生高度评价。

我以后又将EET理论与能带理论进行比较,发现EET理论有若干不足之处:①依据量子力学原理,物质的原子状态应由若干本征态叠加形成。在EET理论中,采用双态杂化只是一种近似处理方法,不是必然规律,因此双态杂化公式也不是必须遵守的普适规则。②在量子力学中,当哈密顿算符作用于原子状态时便可得到与此状态相应的能量本征值。在EET理论中,当键距公式作用于原子状态时得不到相应的理论键距,而是要引入实验键距之后才能得到所谓“经验键距”,其值既受原子状态影响,又受实验键长的影响。对于同一原子状态,若采用的实验键长不同,求得的“经验键距”也不相同。③单纯采用键距差法定态,其解具有很大的任意性。

1985年,我们发表了“晶体价电子结构的理论晶格参量”<sup>[9]</sup>,此文将鲍林键长公式转变成含原子状态和晶格参量的超越函数,并从数学上证明了晶格参量存在的唯一性和可求性,依据晶格参量和原子状态可进一步计算结合能。实际上此文已为克服EET理论的上述三个缺点奠定了基础,但由于历史原因,其形式仍属EET理论的传统论文。1987年,同行专家万纾民教授敏锐地看出此文的价值,并在《中国科学》载文指出:“从态决定性质,性质取决于态这一基本观点来看,他们的研究成果的确把余氏理论大大向前推进了一步”<sup>[10]</sup>。

敢于比较、善于比较,特别要经常将自己的成果与他人的理论以及长远的目标进行比较,只有这样才能使自己永远处于创新的激发状态,才能找到创新的目标和着力点。

## 2.3 形象逻辑思维与创新

科学模型是形象逻辑思维的产物。1985年发表的“广义Vegard定律和广义余氏定律”<sup>[11]</sup>中已经提出了特征晶格参量的概念,但经过反复精炼和验证后,才于1993年正式发表“合金相的特征晶体模型”<sup>[12]</sup>。1997年对此模型又作了图象说明<sup>[13]</sup>。在这一创新成果中,应用了理想溶液和实际溶液的比较形象逻辑思维、正向形象逻辑思维和逆向形象逻辑思维(见图1。)依据我的体验,形象逻辑思维往往产生于长思过程中的灵感或顿悟。

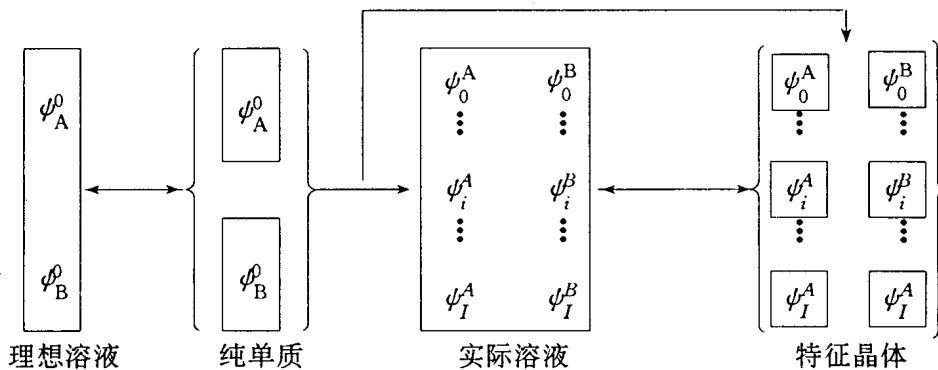


图1 理想溶液和实际溶液的形象逻辑思维

特征晶体模型的提出不仅发展了固溶体的中心原子模型,而且使合金相结构理论与电子结构理论沟通。其深刻内涵和广泛应用的价值,在今后还会进一步报道。

#### 2.4 数理逻辑思维与创新

“数学化是创建理论的攻坚战”。1992年我发表了“固体中多原子相互作用的新势能函数”(MAI势)<sup>[14]</sup>,它是持续5年研究所得的最终形式。其数理逻辑思维特点是采用了约化键长,使得不同定位原子之间相互作用势能可以迭加,从而使原子对相互作用势变成了多原子相互作用势。MAI势的另一个特点是包容了电子结构参数和晶体结构参数,由它还导出了体弹性模量、杨氏模量、切变模量,以及Grüneisen公式中的常数与微观量的关系式。MAI势与保里不相容原理、电子分类法、原子状态迭加法、单原子状态自洽法和多种性质定态法构成纯金属的单原子(OA)理论。MAI势是OA理论的主体函数。EET理论中的双态假定,杂阶公式和等效价电子假定均未采用,确定原子状态的键距差分析法也被多种性质定态法取代。应用OA理论已对Cu、Ag、Au、Fe、Co、Ni、Mo和W等纯金属进行了研究。此理论仍在进一步发展和完善中。

1986年,我们由广义Vegard定律(组元浓度的几率函数)导出了晶格常数随浓度变化的第一个标准方程<sup>[15]</sup>,经过8年的研究和检验,于1994年报道了九种特征性质相互作用方程<sup>[16]</sup>,它们可应用于固溶体及其组元的结合能、原子体积和晶格常数的计算。

1997年,报道了由九种特征性质相互作用方程与配分函数相结合导出的九种Gibbs能函数和相应的组元平均Gibbs能函数<sup>[13]</sup>。1998年,报道了九种原子体积函数和相应的组元平均原子体积函数<sup>[17]</sup>,以及计算固溶体晶格常数的多种函数形式<sup>[18]</sup>。

数理逻辑思维以形象逻辑思维为基础,形象逻辑思维则由数理逻辑思维来深化,这两种思维方式综合应用才能使创建的理论有高级的完美表述。

#### 2.5 发散思维和收敛思维与创新

发散思维的实质是“同中求异”。这里的“同”是指所要解决的问题;这里的“异”就是解决问题的多种方案或多种结果。为了认识Ag-Cu合金系Gibbs能随成分变化的本质,我们惊奇地发现特征晶体理论(CC理论)中的九种G-函数都能适用,但是由这九种G-函数求得组元的平均Gibbs能是不相同的,即是多解的。

收敛思维的实质是“异中求同”。这里的“异”是发散思维中的“异”;但这里的“同”却不是发散思维中的“同”,而是从发散思维所产生的多种结果中求得其中唯一的结果。为此我们应用能量、体积和状态的相关性求得Ag-Cu合金的唯一的G-函数、V-函数和电子结构参数<sup>[19]</sup>。OA理论中的多种性质定态法也是发散思维和收敛思维辩证结合的产物。

由此可知,收敛思维的起点就是发散思维的终点,方向相同,指向唯一的结果。发散程度高,收敛选择好,创造水平才会高。

#### 2.6 联想与创新

联想是扩展性思维,是一种从已知探索未知的有效方法。科学史中不少重大创造发明得益于“联想”。

中国科学院院士肖纪美先生曾指出<sup>[20]</sup>:人们还不能直接回答形成固溶体时体积收缩或膨胀量中组元A和B各占多少?对于体积以外的广度热力学函数如 $U$ 、 $H$ 、 $F$ 、 $G$ 、 $S$ 等,也会提出类似的问题。为此引入偏摩尔量来回避这个问题。在对固溶体微观模型分析时,我联想到偏摩尔量,怀疑其定义的正确性,但一直找不到直接证明的方法。当发现九种G-函数和九种V-函数都能描述一个合金系Gibbs能和体积总量随浓度变化的规律,且它们的偏摩尔量均相同时,“联想”又帮助我找到了证明的方法,确认我对偏摩尔量定义的怀疑是对的,偏摩尔量的确不能

代表组元的真实平均量<sup>[21]</sup>。

只有具备了丰富的实践经验和掌握了广博的知识,才能触类旁通,举一反三,绝处逢生,为联想提供广阔的天地。

## 2.7 结合与创新

“整体不等于部分的简单加和”是结合创新方式的哲学原理。科学实践表明,对现有的元素、生物基因、理论、方法和要素等进行新的组合,就能创造新物质、新品种、新理论、新方法和新事物。从结合观点考虑,OA理论是电子理论、晶体学、经验势函数理论和若干性质理论的综合。而CC理论则是OA理论、合金统计热力学、宏观热力学和晶体学的综合。我们正在探索CC理论与界面理论和缺陷理论的结合,以便建立完整的金属材料系统科学,为材料科学设计奠定理论基础。

任何事物都是以其自系统性、自组织的结构整体性而存在。善于应用新要素的优化组合和结构的优化重组都可能产生创新的优化系统。

## 3 科学研究对我的人生哲学教育

科学素质、心理素质和身体素质相互依赖、相互促进和相互制约,构成创新者的整体合力。长期科学攀登的实践使我深感勤奋比智商更为重要,心理素质比科学素质更为关键。心理素质通常是以心理承受能力,自我控制能力和自我调节能力来表征。

“建立金属材料系统科学”是一项另辟新径的综合性研究,也确实是超越自我能力的选择,加之人微言轻,难以得到足够的经费和舆论支持,受冷遇和被轻视在所难免。面对这种压力,我以“自重”和“自信”来控制自己的情绪,等待时机,争取机遇。我深信在哲学分析基础上的选择是正确的,坚信“没有材料科学系统理论,便不可能有真正的材料科学设计”,为此目标奋斗,终身无悔。我始终把工作的情调整节到较高的状态。

为了组建金属材料系统科学,必须对过去和现有的理论、材料设计的方法进行比较、取舍和发展。但在我国,由于历史的原因,学术民主气氛和创新的环境还不很理想,由此所造成内心的障碍和痛苦是难以言表的。面对这种压力,我常以高尚纯洁的动机来自我安慰,控制心态于平静之中,力求让追求真理和尊重他人达到统一。

建立金属材料系统科学的征途艰辛而又漫长,面对接踵而至的困难,总以“车到山前必有路”和“柳暗花明又一村”的心态对待。我为自己能在20多年里“劳心灵、御声气、连朝接夕、不自知其苦”而自慰。我为研究洒汗水,研究给我高回报:纯化人生、培育坚强的意志和毅力,增长才干和能力。我将继续勇往直前,为后继者铺垫基石。

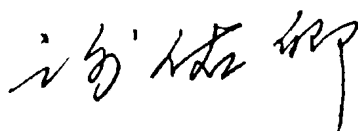
我的学术生涯经历了三次变化。第一次完全受惠于余瑞璜先生。1961年9月至1964年2月我在吉林大学物理系金属物理专业进修期间,他每周安排一个晚上为他的三位研究生和我解答学习金属物理中的疑难问题;为我们讲授了“X-射线漫散射原理与现代实验技术”和“群论”两门课程;指导我进行纯Al单晶热漫散射和Al-Mg-Si合金时效漫散射两项研究;规定我补听物理系本科生的四大力学基础课程。在他的指导下,我顺利地完成了由有色金属合金及热处理专业向金属物理专业的转向,并为我以后的科学研究奠定了良好的基础。

1978年,我的学术思想正处于萌芽阶段,我又有幸与余先生在庐山相会。他叙述了十年浩劫中,在农村土炕上,用一台手摇计算机建立EET理论的经历,令我泪花满眶,感动万分。后来这泪花升华为我在科学道路上劈荆斩棘的勇气和毅力;他又给我介绍了鲍林的成就,促使我系

统地学习了鲍林的著作;他强调了一个很重要的观点:由于合金极为复杂,最好走理论与实验相结合的经验理论道路,单纯从第一原理出发可能难以解决问题。他的教导对我的学术思想的形成产生了深远的影响。应该说我从无定向研究转为定向研究是从余先生和鲍先生铺垫的基石上起步的。余先生是我的引路人,他对我的恩德将永远铭记在心。

本世纪70年代末,中国科学院院士钱学森先生顺应历史发展规律,率先在国内宣传信息论、控制论和系统论,并在80年代相继筹划和召开了一系列全国性的学术会议。我未曾见过钱先生,但我以对哲学固有的浓厚兴趣,研读了他们的历次会议论文,系统思维方式逐步被我理解和接受。我对金属材料科学发展的历史、现状和未来开始了认真的研究,对材料的成分、结构和性质的相关性进行系统分析,从而踏上了以实现材料科学设计为目标的研究征途,在更广阔的范围内吸取各名家创建的理论精华,组建金属材料系统科学。因此我的学术思想的第三次发展得益于钱先生。

牛顿的伟大成就缘于站在巨人的肩上。我的科学进展则主要归因于余、鲍、钱三位先生和其他学者的思想和理论对我的培育,归因于我的学生们、同事们和好友们对我的支持。我已真切地领悟到人生的追求是奉献,人生的乐趣是奉献,人生的价值还是奉献。



1998年5月28日,于长沙

### 参 考 文 献

- [1] 谢佑卿,材料导报,1998;4:6
- [2] 谢佑卿,唐仁政等,材料导报,1995;2:1
- [3] 谢佑卿,渠振亭等,矿冶科技,1975;3:5
- [4] 谢佑卿,渠振亭等,仪表材料,1976;6:33
- [5] 谢佑卿,渠振亭等,中南矿冶学院学报,1979;1:63
- [6] Kim K. J., Lynch D. W., Phys. Rev., 1989;39(B2):9882
- [7] 余瑞璜,科学通报,1978;2:23(4):217
- [8] 谢佑卿,马柳莺,中南矿冶学院学报,1984;1:1
- [9] 谢佑卿,马柳莺,中南矿冶学院学报,1985;1:1
- [10] 万纾民,中国科学(A辑),1987;2:170
- [11] 谢佑卿,马柳莺,中南矿冶学院学报,1985;3:1
- [12] 谢佑卿,马柳莺等,中国科学(A辑),1993;9:999
- [13] 谢佑卿,中国科学(E辑),1997;6:488
- [14] 谢佑卿,中国科学(A辑),1992;8:880
- [15] 马柳莺,谢佑卿,中南矿冶学院学报,1986;6:39
- [16] 谢佑卿,张晓东,金属学报(A辑),1994;30(12):531
- [17] 谢佑卿,张晓东,中国科学(E辑),1998;1:12
- [18] 谢佑卿,金属学报(A辑),1998;12
- [19] 谢佑卿,张晓东,中国科学(E辑),1998;2:103
- [20] 肖纪美,合金能量学,上海科学技术出版社,1985;P99
- [21] 谢佑卿,金属学报(A辑),1998;12

# 目 录

序 1 .....	王崇愚	( I )
序 2 .....	吕振家	( I )
我的几点思考(代前言) .....	谢佑卿	( IV )
<b>第 1 编 金属材料系统科学与哲学 .....</b>		<b>( 1 )</b>
1 金属材料科学发展的历程与人类思维方式的演变 .....		( 3 )
2 材料设计的回顾与思考 .....		( 14 )
<b>第 2 编 纯金属系统科学(纯金属单原子理论) .....</b>		<b>( 23 )</b>
3 纯金属单原子理论的背景与框架 .....		( 25 )
4 固体中多原子相互作用的新势能函数 .....		( 35 )
5 Lennard-Jones 势和 Morse 势与 $W_x(r)$ 势的关系 .....		( 46 )
6 确定晶体电子结构的单原子状态自洽法 .....		( 50 )
7 纯 Fe 的电子结构和物理性质 .....		( 54 )
8 金属 Co 的电子结构和物理性质 .....		( 69 )
9 金属 Ni 的电子结构和物理性质 .....		( 77 )
10 金属 Cu 的电子结构和物理性质 .....		( 85 )
11 金属 Ag 的电子结构和物理性质 .....		( 92 )
12 金属 Au 的电子结构和物理性质 .....		( 98 )
13 金属 Mo 的电子结构和物理性质 .....		( 104 )
<b>第 3 编 合金系统科学(合金特征晶体理论) .....</b>		<b>( 111 )</b>
14 合金特征晶体理论的框架 .....		( 113 )
15 Ag-Cu 合金的原子能量及 Gibbs 能函数 .....		( 119 )
16 Ag-Cu 合金的原子体积和体积函数 .....		( 130 )
17 Ag-Cu 合金的电子结构 .....		( 139 )
18 Ag-Cu 合金的相图和热力学性质 .....		( 150 )
19 Cu-Ni 合金的微观结构和性质 .....		( 158 )
20 Cu-Ni 合金组元的偏原子体积与平均原子体积的关系 .....		( 168 )
21 Au-Cu 合金的微观结构和性质 .....		( 173 )
22 Au-Cu 合金系中有序和无序相的晶格常数 .....		( 181 )
23 金属固溶体及其组元的性质 .....		( 190 )

---

<b>第 4 编</b>	<b>金属材料系统科学研究起步(经验电子理论)</b> .....	(199)
24	晶体价电子结构的理论晶格参数 .....	(201)
25	广义 Vegard 定律和广义余氏定律 .....	(209)
26	规则固溶体 $a$ - $C$ 曲线的标准方程 .....	(216)
27	Fe-Ni 合金的价电子结构 .....	(222)
28	纯 Fe 的相变序列的价键理论分析 .....	(231)
29	镍的线热膨胀分析和磁性电子的键合作用 .....	(241)
<b>第 5 编</b>	<b>金属材料系统科学思想萌芽(热敏磁性材料)</b> .....	(249)
30	Ni-Cu 等二元合金的电子结构 .....	(251)
31	Ni-Cu 合金的电子结构与其热电性、抗腐蚀性以及强度的关系 .....	(259)
32	Ni-Cu 合金电子结构的分析 .....	(268)
33	热敏磁性材料 .....	(280)
34	输电线防冰热敏磁性材料 Fe-Ni-Cr-Mn-Si 合金的研究 .....	(293)
35	添加元素对热敏磁性合金 $B_m$ - $T$ 曲线陡度影响的分类 .....	(301)

## CONTENTS

The First Preface .....	( I )
The Second Preface .....	( I )
A Review and Thinking .....	( IV )
<b>Part I — Philosophic Thinking of Systematic Science of Metallic Materials</b> .....	( 1 )
1— Development Course of Metallic Materials Science and Evolution of Human Thinking Mode .....	( 3 )
2— A Review and Thinking of Materials Design .....	( 14 )
<b>Part I — Systematic Science of Pure Metals(One-Atom of Pure Metals)</b> .....	( 23 )
3— Background and Outline of One-Atom Theory of Pure Metals .....	( 25 )
4— A New Potential Function With Many-Atom Interactions in Solid .....	( 35 )
5— Relationship of Lennard-Jones Potential and Morse Potential With $W_x(r)$ Potential .....	( 46 )
6— One-Atom State Self-Consistency Method for Determining Electronic Structure of Crystals .....	( 50 )
7— Electronic Structure and Properties of Pure Iron .....	( 54 )
8— Electronic Structure and Properties of Pure Cobalt .....	( 69 )
9— Electronic Structure and Properties of Pure Nickel .....	( 77 )
10— Electronic Structure and Properties of Pure Copper .....	( 85 )
11— Electronic Structure and Properties of Pure Silver .....	( 92 )
12— Electronic Structure and Properties of Pure Gold .....	( 98 )
13— Electronic Structure and Properties of Pure Molybdenum .....	( 104 )
<b>Part II — Systematic Science of Alloys (Characteristic Crystals Theory of Alloys)</b> ..	( 111 )
14— Frame Construction of Characteristic Crystals Theory of Alloys. ....	( 113 )
15— Atomic Energies and Gibbs Energy Functions of Ag-Cu Alloys. ....	( 119 )
16— Atomic Volumes and Volume Functions of Ag-Cu Alloys. ....	( 130 )
17— Electronic Structures of Ag-Cu Alloys .....	( 139 )
18— Phase Diagram and Thermodynamic Properties of Ag-Cu Alloys .....	( 150 )
19— Microstructure and Properties of Au-Ni Alloys .....	( 158 )
20— Relationship between Partial and Average Atomic Volumes of Components in Cu-Ni Alloys .....	( 168 )
21— Microstructure and Properties of Au-Cu Alloys .....	( 173 )
22— Lattice Constants of Disordered and Ordered Phases in the Au-Cu System .....	( 181 )
23— Properties of Metallic Solid Solutions and Their Components .....	( 190 )
<b>Part IV — Beginning of Systematic Science of Metallic Materials</b> ( Empirical Electron Theory of Solid and Molecules ) .....	( 199 )
24— Theoretical Lattice Parameter of the Valence Electron Structure of Crystal .....	( 201 )

---

25—	Generalized Vegard's Law and Generalized Yu's Law .....	(209)
26—	A Normative Equation of $a$ - $C$ Curve for the Regular Solid Solutions .....	(216)
27—	The Valence Electron Structure of Fe-Ni Alloys .....	(222)
28—	An Analysis of the Sequence of Phase Transformation of Pure Iron by the Valence Bond Theory .....	(231)
29—	The Analysis of Linear Thermal Expansion and Bonding Act of Magnetic Electrons in Pure Nickel .....	(241)
<b>Part V</b> —	<b>The Embryonic Stage of Thinking of Systematic Science of Metallic Materials</b>	
	<b>(Thermal Sensitive Magnetic Materials) .....</b>	<b>(249)</b>
30—	Electronic Structures of Ni-Cu and Other Binary Alloys .....	(251)
31—	Relationship of Thermoelectric, Resistocorrosive and Strength with Electronic Structures for Ni-Cu Alloys .....	(259)
32—	Analysis of Electronic Structure of Ni-Cu Alloy .....	(268)
33—	Thermal Sensitive Magnetic Materials .....	(280)
34—	Thermal Sensitive Magnetic Materials for Preventing Ice on Transmission Lines(Fe-Ni-Cr-Mn-Si Alloy) .....	(293)
35—	The Classification of the Effects of the Addition on the Slope of the $B_m$ - $T$ Curve of Thermal Sensitive Magnetic Materials .....	(301)



# 第 1 编

---

## 金属材料系统科学与哲学