

微观寻理 铸材铸魂

——缅怀我国计算材料物理领域奠基者与开拓者之一王崇愚

□ 刘年凯

编者按 中国科学院院士、计算材料物理专家、清华大学物理系教授王崇愚,3月3日在北京逝世,享年93岁。王崇愚院士是我国计算材料物理领域的奠基者与开拓者之一,他长期致力于材料缺陷电子理论的基础性研究,为我国材料科学发展作出了重大贡献。

从破解合金中氧的谜题,到创立自统一理论,再到擘画“材料基因组”蓝图,王崇愚院士的一生,是从工程实践中洞察科学真谛,以基础理论破解国家重大需求的典范。

锁定异常不放, 为“东风”系列锻造“甲冑”

1950年,18岁的王崇愚考入北洋大学(现天津大学)。后来,由于全国高校院系调整,王崇愚转入清华大学,后又进入北京钢铁工业学院(现北京科技大学),学习金属学专业。

1954年,王崇愚被分配至重工业部钢铁工业试验所(中国钢研前身)工作。4年后,他又转到第二研究室,开始了军工材料攻关,担负起研制达到或超过国际先进水平材料的重任。

攻关之路充满艰辛。在无数次实验与分析中,一个看似不起眼甚至“不受欢迎”的元素——氧,反复出现在数据中。按照传统认知,氧是合金中的有害杂质,是工程师极力想要剔除的对象。然而,王崇愚却从纷繁的数据中洞察到了一个颠覆性的规律:正是这万分之一的氧含量,像一只无形的手,控制着材料的导磁特性。

面对这一发现,王崇愚被深深吸引。他没有放过这个“异常”,反而决定潜入这微观世界的迷雾中去探个究竟。为了加深数学基础,在繁忙的科研之余,已过而立之年的他,重新背起书包。从1961年开始,王崇愚花费5年时间,系统读完了北京电视大学数学专业的课程。这段扎实的数理训练,为他装备了探索材料微观世界的锐利武器。

“氧”这一曾被忽视的“杂质”,在王崇愚手中,变成了一把打开高性能材料宝库的“金钥匙”。他的研究成果,最终被应用于国产“东风”系列导弹,为大国重器锻造出坚实的“甲冑”。这项研究为他赢得了国家发明奖。

40岁重返大学, 开辟材料学微观新赛道

“氧”的成功应用,引发了王崇愚对材料微观世界更深刻的思考。他认为,材料科学必须超越传统的经验性“尝试法”,走向基于物理本

质的理性设计。他将研究重心转向材料缺陷电子结构的基础性研究,致力于探索微量元素与结构缺陷相互作用的量子力学机制。

王崇愚带领团队开始了漫长而孤独的计算探索。没有现成路径,他就自己开辟。1978年,王崇愚已过不惑之年,但为了研究更进一步,他前往北京大学和中国科学院研究生院补修理论物理与固体量子理论的课程。同事总能看到他背着黄挎包匆匆求知的身影,称他为踏踏实实的“读书人”。

之后,王崇愚创造性地融合量子力学、固体物理与材料工程学,发展出独具特色的自统一理论研究体系。该体系聚焦于材料中微合金化元素与结构缺陷所形成的复合体,系统阐明其原子与电子结构如何影响材料的宏观性能。他提出的“杂质氧-层错复合体”模型,在微观层面揭示了此类缺陷影响材料性能的物理机制。

此外,王崇愚定义并建立了有关掺杂能量学与电荷重分布的解析表达式,从第一性原理出发,深入研究了硼等轻杂质在过渡金属中的电子效应,从量子力学本质上阐释了它们提升合金性能的深层原因。

这些工作,为在原子和电子层面理解并预测材料性能奠定了坚实的理论基础,使王崇愚成为我国该领域当之无愧的奠基人之一。

以战略家的远见, 推动“材料基因组计划”

2011年,大洋彼岸,美国政府正式启动“材料基因组计划”,旨在通过高通量计算、实验与数据共享,将新材料研发周期缩短一半。这一信息,如同一声惊雷,震动了中国材料科学界。

已近耄耋(mào dié)之年的王崇愚,以其深邃的学科洞察力,立刻意识到这是一场

关乎未来高端制造业全球竞争力的范式革命。在当年的“材料基因组计划”两院院士及专家座谈会上,王崇愚介绍了“材料基因组工程”概况。同年12月的香山科学会议上,他作了题为《高温高强合金与物性多尺度预测》的报告,将他数十年的研究,与这一国家战略紧密对接。

在王崇愚的全力推动与参与下,中国科学院迅速启动了以他和南策文院士为核心的“材料基因组”咨询研究项目。2014年,一份凝聚20位院士、近百位专家智慧的《材料基因组计划与高端制造业先进材料咨询建议报告》正式提交,其核心思想被国家层面采纳,直接催生了中国的“材料基因组计划”。

从此,北京、上海、广东、云南……一批与“材料基因工程”相关的科研机构与平台如雨后春笋般建立。中国在计算材料学与智能化材料研发的赛道上,拥有了与世界并行甚至领跑的国家力量。王崇愚以其战略家的远见与担当,为整个中国材料科学绘制了面向未来的宏伟蓝图。

1999年,王崇愚从钢铁研究总院(中国钢研前身)转入清华大学物理系。他曾坦言自己的课题组存在“断层”,“除了我六十多岁,就是二三十岁的人”,因此他对培育青年一代始终抱有强烈的紧迫感。王崇愚以身作则,将热忱的关怀倾注于每一位学生的成长,为国家培养了一大批计算材料物理领域的中坚力量。在他看来,培育后继人才,是远比任何奖项都更具分量的成就。

先生已去,风范长存。王崇愚用一生诠释了何谓“顶天立地”的科研:顶天,是探索物质世界最基础的量子规律;立地,是让最精深的理论,服务于国家最坚实的需要。

(作者系清华大学科学史系副教授)



图①: 王崇愚留影。

图②: 王崇愚在授课。

图③: 王崇愚(右)在机房工作。

图④: 中国钢研的院士合影,左二为王崇愚。

本文图片中国科学家博物馆提供