物理中,一直擔任日形重要的角色。1958年, 美國第一艘太空船「Explorer X」携帶儀器的探 測地球外圍受地磁的 magnetic mirror affect限 制件的高能粒子,這些粒子沿著地磁場來囘振動 ,在靠近地球時因地磁增强而折囘,並因各處磁 場之不均勻及地球之轉動而在地球周圍漂移。利 用adiabatic invarience 的原理有助於瞭解這些 粒子的運動。在1960年代早期,人造衛星發現 太陽不斷的放射高速離子體(即太陽風)。其實 更早以前,科學家由日冠(sun's corona)的平衡 原理以解釋彗星尾的成因時已預言太陽風之存在 。因爲太陽風有高度傳導性,不能穿過地磁場, 只能在地球四周流動,因此產生magnetosphere (geomagnetic cavity),即是我們所發現的Van Allen 輻射帶。geomagnetic cavity的邊界在、 1961年已經完全測定,它對於太陽的形狀及位 置也吻合太陽風壓與磁壓平衡的原理。 1965 年 「Imp I 」衛星發現 geomagnetic cavity在反太 陽方向形成一個圓柱狀的磁尾,延伸至數百倍地 球半徑之遠。在磁尾之中,磁場平行於圓柱,北 半部與南半部的方向不同,交界處形成一個中和 地帶。在此區域中的離子體不穩定現象與極光( (avrora)與磁風暴(magnetic storm)有關,至於 磁尾的成因現仍無定論。

太陽風是無碰撞的離子體,1964年「Imp I」在地球外圍發現首次 stand off shock,其後「mariner probes」再度發現 collisionless shock。這是理論上的一大勝利。太陽風中含有 photo sphere放射出的弱磁場。由於太陽的轉動及太陽風的前進,磁力緩也被扭曲成螺綫(Archimedean spiral)。其與太陽地球之連綫交成45%。磁力緩的方向與photo sphere中對應區域的 polarity 有關,這顯示磁場是由有傳導性的流體 造成。

以上是過去二十年間等離子體物理發展的概況。人類在這個領域中的知識已經相當豐富。假如今後二十年中仍能够像過去一樣有所斬獲則人 類對離態物理的瞭解將更趨完善。

# 島鱧結構學

二十年來,晶體結構學(Structure Crystallography)在物理、化學和生物學上的影響已今非昔比。在一九三〇年代末之前,晶體結構學為很多固態現象的解釋奠立了基礎,因為它對序列規則性的簡單分子和結晶構造能够提供詳盡的知識,二十年前化學家們,更不用提生物學家了,在探求一個複雜的結構時,不會來找結晶學家。那時,雖然人們也研究清楚了一些物的結構,有些還相當複雜,然而就一般而言,進展很慢,不確定,並且困難重重。在那時候物理學家和化學家、生物學家間的溝通聯擊還不密切,以致物質的結構始終並未解決,在過去的歲月中,這三門科學的間距要遠比現在長。有關過去 X 光繞射以及個人經驗發展的歷史可見 P. P. Ewald 的 Fifty Yearrs of X-Ray Diffraction, Utrecht 1962。

底下的表將過去二十年來結構的發展作一橋要。很明顯可看出對於複雜結構的發現不論就速度上,就正確性而言,都要比1948年進步多了。誠然,在過去的二十年中,用快速數值計算機來改進晶體結構學的工作效率,是此門科學得以迅速進展的主因。

### 計算機的應用

在這方面所需的計算均是極度重複並耗時的。要解決相位 (phase) 問題的主要工具——三度的派特孫 (Patterson) 函數仍被運用著,它是含有幾千項的三度傅里葉和(Fourier Summation),而且要在60,000—100,000 點上得出此函數的值 (見Physics Today, January 1965, 第28

#### 晶體結構學的發展

步驟或結果

1948

1968

如何選擇問題

不確定。在很多彼此相關的複雜結構 中,找一個具最簡單晶體的來研究。 遇彼此有關的晶體,不大再去逐一檢 視了。

晶胞單元

照相

仍然用照相

的決定

强度數據的收集

照相。用肉眼估計。大約每天可作50 - 100個數據,準確度約為15%。大

約收集了500-1000種。

相位問題的解

很不確定。三度空間的派特孫函數約 需計算40小時。求解很難再有進步了

0

結構的精析

只有傅里葉的方法。最小平方精析除 非對最簡單的問題,否則在計算上是 不可能的。

結構的複雜性

約二十個獨立的原子。

估計的標準誤差:

等原子

0.03

結構中之C-C 在有機-金屬

晶體中之Fe-c

0.02 •

另外的知識 非常料

非常粗略的德拜一瓦勒(Debye-Wall-

er) 温度因數。

自動繞射計(diffractometer)。每天約可求得500個强度數據,準確度約為5%或更好。大約收集了2000-10000種。

對中心對稱的結構可直接求解。主要 的不確定存在於對非中心對稱的等原 子結構。三度空間的派特孫函數只需 計算五分鐘。

很少採用傅里葉的方法了。除了對很大的問題而言,通常採用非線性最小平方的方法。

對最小平方精析而言,約可達 100個 獨立的原子。傅里葉精析可用於很多 原子的結構,如蛋白質。

0.005

0.003

用假定的模型,可對結構中原子熱運動的通盤描述。

頁)。在1948年,這種計算需要不斷的注視著Card Sorters, Tabulators及Collators達40小時之久,但現在可用新一代的計算機如CDC6600來處理,大概不到五分鐘就够了。此為計算機對晶體結構學影響之一例。結晶學中耗時的計算如量小平方精析(least-squares refinement)已趨向僅來由中心作程序控制即可完成,也就是說結晶學家將可以收起任何機器不再需用,他們渴望著下一代計算機的誕生。

在結晶學上計算機的另一種應用是以二度空間的方式,來表示三度空間的結構。這問題已被 詹森 (Carroll K. Johnson 及其他學者解決了, 他們寫的計算機程式 (program),使一枝掃描筆 (plotter) 連在一具快速計算機上,以致人們可 直接得到晶體或分子結構的立體像。

當結構得以很理想的獲知時,散射模型就顯得不够好了。在前二十年中,模型被以不同的觀點作一再的修正,現在有了更好的原子散射因素(依據著可靠的原子波函數及高速計算機),更好的原子熱運動模型及對吸收和消光(extinction)效應的更理想的處理。

在前五年至十年光景時,自動化已被結晶學 家採用。中子繞射專家在儀器裝置上投下了鉅大 的資本,在此地已成了領導者,他們發展了自動 總射儀以迅速地收集數據。現在有大量商業上的 x光及中子總射儀,及最近的計算機控制的繞射 儀在計劃生產了。這是從以往的計數探射器 ( counter-detector)(布喇格-Bragg等物理學 家會採用)及照相軟片(爲化學家所樂用)後, 一種新的儀器可測出强度而大大地增進了精確度 。我們現在從事於獲知强度能測到多準,及强度 在晶體之間是如何地不同。

#### 未來的展望

派特孫函數,附了計算機的處理,是在過去 二十年中發展以求解相問題的「直接方法」。這 些方法的實際應用與此方面的計算機程式一樣發 展很迅速。此方法對物的結晶作中心對稱空間群 較爲適合,而對非中心對稱群的結晶就不大理想 了。然而在後者方面的研究有相當的進展,事實上 上顯示可能「相位問題」在不久的將來在處理普 通結構時已經用不著了。那時,結晶學家們始可 仰賴計算機作爲數據收集及精析結構之間的一座 橋樑。

在未來數年中,第二樁可期的大進展將是數 據的收集。往日的二十個歲月已由平行數據收集 方法(用軟片),進步到系統的數據收集方法(計算機)。理論上顯著的一步是將此二方法的優點結合在一起,把晶體用很多計數器柵極圍繞,並且將一「內路」(on-line)計算機用作複定標器(multiple scaler)。雖然目前仍有一些技術上的困難猶待克服,但如能成功,那麼收集一組强度

的數據要花的時間將遠少於今日。因此,有朝一日一位有經驗的結晶學家要求出大部份晶體的結構均可用一種迅速、自動及例行的方法。如此,他的大部份光陰均可用於探討答案的物理及化學知識,而非窮力於獲得答案了。



# 前 言

在過去二十年裹,質流學(rheology) 這門知識主要着眼於代表各種不同類型物質機械行為的模型(model)的形成和發展,一些為試驗這些模型並計算由它預測的函數所做的度量,和聯繫着模型與度量間的理論,這些結果,不僅在學術上,就是在對像滲出(extrusion)等工業程序都是相當重要的。

傳統上,我們稱質流學的物質流的變形研究,但這個定義並不十分有助於質流學與其它的物理支系,如流體動力學(fluid dynamics),高分子物理(Polymer Physics),及固態物理(solid physics)等的區別,因此在這篇文章裏我們將採用一個更狹窄的定義:即決定物體受機械力(mechanical force)後反應行為的物質性質的研究。但在過去二十年裏許多質流學家(Rheologist)所做的研究都是有關高分子(Polymer)方面的,所以,雖然這些研究對物質結構性質方面的許多發展有非常密切的關係,但我們仍有必要在質流學與高分子物理學間畫出一個界綫,即質流學值强調現象邏輯方面(Phenomenalogical),而將處理有關分子結構的事留給高分子物理。

#### 綫性理論

在1947 到1952 這段期間,質流學主要着手於建立關於綫性滯彈性現象(linear viscoelastic behavior) 的觀念,從事一些度量並顯示出這些度量代表着物質的一些基本性質,在這段活躍的年代快結束前,我們就已經能做這樣的結論:對許多物質而言,在合理的變形 (deformation)範圍和速率內,我們能定出類似在古典彈性理論裏剪性 (shear) 和膨脹模數 (Bulk modulus) 那樣

的函數來描述物質的機械性,而這些可以直接度 量的函數的不同表示法(Representation) 間的關 係〔如決定對定力反應潛變函數(creep function) ,决定對固定變形 (Constant Deformation)反應 的鬆弛函數(Relaxation function)(註),和決定 對正弦力或正弦變形反應的動力模數(Dynamical Modulus) 〕也可由 Laplace 轉換得到。但因 爲實驗性的度量從不能包括所有時間和頻率的範 圍,甚至連有意義節域(Significant range)的主要 部分都無法含括,所以大部分的活動都集中在準 (exact) 數學關係的近似 (approximation) 推求 。在這段時期另一項重要發展 是在說明温度對滯 彈性函數的影響能由它對滯性(穩定流)的影響 非常精確地表示出來,自1952年後,雖然在度 量和求近似的技巧上有更進一步的發展,但在綫 性理論方面的焦點現在都規類到高分子物理去了

而這綫性滯彈性 (viscoelasticity 涉及金屬時,我們用 anelasticity)理論事實上只是那更具,普遍性的非綫性 (nonlinear) 基本方程式的極限形式 (limitiing form),而一個適當的非綫性理論一定要物理的三度描述,而不能以用剪性(shear)及膨脹模數 (Bulk Moduli) 所構成的一度綫性公式爲主。

## 非綫性理論

這些公式太約是在1947至1962完成的,就在綫性理論已達到一個令人滿意的形態後,非綫性理論就成了大部分質流學家的興趣所在了,而關於有限彈性的公式在等向性(isotropy)和不可壓縮性(incompressibility)的假設下,首先由可經適當度量後計算的應變一一能量 (strain-