

我在多晶 x 射线衍射和相图方面的研究成果

梁敬魁

(物理研究所 北京 100080)



我于 1955 年毕业于厦门大学化学系物理化学专业。1956 年到莫斯科前苏联科学院冶金研究所金属合金热化学和晶体化学专业读研究生, 1960 年获苏联科学院技术科学副博士学位。30 多年来一直在晶体结构化学、材料科学和固体物理三个学科的交叉领域从事基础和应用基础研究。主要工作有以下两个方面。

一、多晶衍射法晶体结构分析和点阵常数的精确测量。微观结构对于认识物质的物理、化学性质具有重要意义。早在 60 年代初期, 计算机程序在我国尚未在多晶结构分析中得到应用时, 我用粉末法成功地测定了一系列金属合金和无机盐的晶体结构。用精确的点阵常数测量和长时间的退火处理, 在铜—金二元系中观察到虽经国外多年研究也未发现的一系列新的超结构现象, 并从热力学的观点加以解释。丰富了有序化超结构相形成的实验和理论。提出了晶体点阵常数测量精确度为十万分之三的简便方法。在 80 年代高 T_c 氧化物超导体研究工作中, 我根据晶胞结构特点, 提出依据多晶衍射图谱第一条衍射线的面间距值, 确定超导体晶体结构类型和原子粗略位置的简便方法。发现铋系超导体单铋—氧层的新结构类型。指出了铋—钡—铜—氧体系的超导相属阳离子分布有序畸变的类钙钛矿型结构, 铋:钡:铜的原子比应为 1:2:3, 推动了早期超导体的合成工作。在镧—钡—铜—氧超导体系中, 纠正了 La-112 为独立相的错误, 证明了它是 La-123 在富氧化镧区域的固溶体。测定了一系列超导体系的相关系和晶体结构, 并对其结构规律进行总结。指出了由于超导相单胞中氧含量的可变性导致非等电价离子相互替代的可能性, 扩大了探索新超导体组分的选择范围。

二、相图研究工作方面。相图是材料科学的基础, 它对于材料的合成工艺, 性能的改善, 以及新材料的探索都具有十分重要的指导意义。我从 60 年代初期开始测定了一系列 Ga 合金、稀土合金、碘酸盐、铌酸盐、硼酸盐以及氧化物体系的相图, 并开展了相图在材料科学中的应用。70 年代末, 我通过硼酸钡相关体系的相图研究, 纠正了在硼酸钡—硼酸钠体系中具有倍频效应的物质是“硼酸钡钠”的错误看法, 指出了具有倍频效应的物质是硼酸钡的低温相。依据相图的研究结果, 提出并成功地用熔盐提拉法在硼酸钡相变温度 920℃ 以下, 首次生长出了硼酸钡低温相单晶体。解决了硼酸钡低温相单晶体生长的原理和实践问题, 为以后的进一步研究和开发以及出口创汇打下了重要的基础。80 年代开始利用实验容易测定的可靠数据, 结合热力学计算构筑相图, 克服了实验测定相图工作量大, 热力学数据不够准确和不足的困难。提出制备物相的新方法, 从非晶态合成难以合成的物相中获得具有某种性能的亚稳相, 在常压下成功地获得了通常必须在高压下才能合成的物相。

30 多年来我曾单独或与其他同志合作在国内外学术刊物发表论文、综述等 170 余篇, 且引用率比较稿。著有《相图与相结构》(上、下册)、《高 T_c 氧化物超导体系的相关系和晶体结构》(合著)等专著。