

我在晶体学方面的工作

李方华

(物理研究所 北京 100080)



我于 1956 年毕业于前苏联列宁格勒大学物理系,随即在陆学善先生指导下从事合金结构的 X 射线粉末衍射工作,从此踏入了晶体学研究的大门。

60 年代初期在国内最早开展了电子衍射晶体结构分析的研究,发展了电子衍射测定晶体结构的方法,提出了一种把动力学电子衍射强度转换为结构因数之模的方法,并藉此首次在我国测定了晶体中的氢原子位置。后来填补国内非晶体电子衍射结构分析的空白,发展了一种重量悬殊原子对的简便测定方法。

从 70 年代起,积极推动国内高分辨电子显微学的建立与发展,在半导体、合金、氧化物和矿物等材料中,发现了许多新的结构现象,解决了一系列原子尺寸的晶体结构和缺陷的测定问题,特别是解决了早期高温超导体多相、多畴样品的结构测定问题,并且在铋系超导体的合作研究中,发现了无公度调制结构。

1983 年在日本大阪大学工作期间,总结了动力学电子衍射效应对不同重量原子像衬的影响规律,并用于测定含重原子钡和铈的晶体中轻原子氟和碳的位置,扩大了高分辨电子显微学的应用。回国以后,根据上述实验规律推导出一个新的像衬理论“赝弱相位物体近似”,该理论首次阐明了像强度与晶体厚度之间关系,给出了解析表达式,阐明了轻、重不同原子像强度随晶体厚度的变化行为。在该理论的指导下,首次观察到晶体中轻如锂的原子。

近十几年来与范海福合作,在高分辨电子显微学中逐步建立了一套体系完整的图像处理理论与实用算法。通过对像作解卷处理,可使一幅原本不直接反映晶体结构的像转换成直接反映结构的像,而事前无需对被测结构有任何了解;再借助衍射分析中的直接法进行相位外推处理,可提高像的分辨率,使之超出电子显微镜的分辨极限,从而分辨出全部原子。这项工作把电子衍射与高分辨电子显微学结合起来,发展了一种测定微小晶体结构的新方法,一方面简化了衍射分析中的相位问题,另一方面成倍地提高了电子显微像的分辨率,使高分辨电子学的晶体结构测定工作摆脱了尝试法的限制,而进入更高的发展阶段。

80 年代后期,我和我的研究生们最早发现并报导了五次对称准晶体与晶体之间几乎连续的转变的实验结果,从而证实了提出的准晶体与晶体之间存在中间状态的概念,并给予理论解释。同时,借助相位子应变场导出了二十面体相与体心立方相之间晶体学关系在正空间和倒易空间的表达式。在此基础上提出了一种测定对应于准晶体的高维晶体结构,从而进一步测定晶体结构的新方法,并付诸实际应用。

上述成果,曾应邀在 19 个国际学术会议上作了特邀报告,曾获中国物理学会叶企孙物理奖、中国科学院自然科学奖一、二等奖等七项奖励。发表学术论文 190 余篇。