

三十年潜心研究的成果

——李方华著《电子晶体学与图像处理》简介

吴自勤

(中国科学技术大学物理学院 合肥 230026)

李方华著《电子晶体学与图像处理》一书已经在2009年3月作为《科学前沿丛书》之一由上海科学技术出版社出版。这是作者总结三十多年来在电子晶体学领域潜心研究的丰硕成果后完成的一本科学著作。

晶体学是一门发展了近三个世纪的历史悠久的学科。它的基本概念,如对称性理论中的32种晶体点群,分别在1830年和1867年被独立地发现了两次,晶体的14种空间点阵在1848年被布拉菲发现,晶体的230种空间群在1890年被费多洛夫,稍后又被熊夫利发现。1890年后晶体学的主流——晶体结构分析在1895年X射线被发现和1931年电子显微镜被制成之后仍得到迅速的发展,形成了X射线晶体学和电子晶体学等分支学科。

X射线衍射晶体结构分析快速发展的原因是:克服了测得的X射线衍射强度已经丧失相位信息的困难,发展了能够成功推演出相位信息的直接法等晶体结构分析方法。到1993年,测定的晶体结构的数目约为180000个(其中大部分是1980年以后确定的),对物理学、化学、材料科学、矿物学、生命科学作出了重要的贡献。

电子显微镜使晶体结构分析分兵两路:电子衍射晶体结构分析和高分辨电子显微学。1950年代开始发展的电子衍射晶体结构分析借鉴X射线晶体结构分析方法,用几百keV的电子束研究薄样品,克服了晶体中原子对电子散射的动力学效应(需要考虑入射波的衰减和衍射波的再衍射,而X射线衍射一般只需考虑运动学效应而不需考虑这两个因素)的困难而得到发展,形成了含轻、重原子的微小晶体结构分析的小高潮。1970年代起,随着电子显微镜仪器水平的不断提高,高分辨电子显微学得到迅速发展。高分辨电子显微学利用多支衍射电子束继续在镜筒中传播到像平面上成像,得到薄晶体投影电势的相位衬度像,用来进行晶体结构分析。

X射线衍射晶体结构分析的分辨率很高,可以测定晶体中相距显著小于0.1nm的原子间的位置,

但样品必须较大,并且不易测定晶体缺陷的原子结构。晶体电子衍射的分辨率也可以小于0.1nm,但信号限于衍射振幅,而且电子散射的动力学效应使衍射振幅的正确测定遇到困难。高分辨电子显微像结构分析的分辨率也比较高、并且能直接观察晶体缺陷,但由于磁透镜的像差使相位衬度像的分辨率长期限制于大于0.2nm,以至于难以测定晶体中经常遇到的相距小于0.1nm的原子的位置(21世纪初才生产出经过复杂像差修正的,分辨率优于0.1nm但价格昂贵的电子显微镜)。

50年来,电子衍射晶体结构分析和高分辨电子显微像晶体结构分析分兵两路各自发展。前者的代表专著是1960年代出版的苏联学者Vainshtein的《电子衍射晶体结构分析》和Zvyagin的《层状矿物电子衍射分析》;后者的代表专著是1981年出版的美国学者Spence的《实验高分辨电子显微学》(2003年出版了第三版;书名改为《高分辨电子显微学》)。虽然在一台电子显微镜中可以获得电子衍射花样和高分辨电子显微像两种信息,但作为晶体结构分析方法,两者长期以来却没有互相结合统一起来。

1956年,留苏归来并在中国科学院物理研究所陆学善院士下面工作的李方华,长期从事电子衍射和X射线衍射晶体结构研究。“文化大革命”期间,高分辨电子显微学在国外得到飞速发展。李方华在那段时间仍坚持阅读文献,并在1970年代中期就有了把电子衍射晶体结构分析的理论和方法引进高分辨电子显微学的想法。1978年开始,她和日本大阪大学的著名专家桥本初次郎教授(后来担任过国际电子显微学会联合会主席)密切来往(1982—1983年曾去大阪大学学术访问半年),为赶超国际先进水平作了充分的准备。1984—2000年她和范海福指导合作者和研究生汤栋等不仅完成了高分辨电子显微学的赝弱位相理论(把晶体厚度适用范围扩大几倍,并且可以调节轻重原子的衬度),而且把电子衍射晶体结构分析的理论和方法引进高分辨电子显微学,把高分辨电子显微学发展成为高分辨综合

图像处理的电子晶体学,使结构分析的分辨率达到 0.1nm (晶体结构缺陷像的分辨率达到信息分辨率,优于 0.1nm).这一理论被英国剑桥大学的著名电子显微学专家 Howie 教授(后来也担任过国际电子显微学会联合会主席)评价为:“李方华获得钦佩的原因不仅是由于她的许多领先的,应用高分辨电子显微学于结构测定的工作,还由于她为把这一方法更加量化所作出的持续一贯的努力.这些努力包括把弱位相理论扩展到更厚的晶体,以及把电子衍射的强度数据和电子显微像的相位数据结合起来并给出了实现的方案”(见期刊《Ultramicroscopy》2004年第98卷第73—337页为庆贺李方华70寿辰出的纪念期刊,客座编辑:邹进(Jin Zou)、Y. Takai等,桥本初次郎教授作序).

李方华著《电子晶体学与图像处理》一书分为三篇:第一篇“电子衍射”,第二篇“高分辨电子显微学”,第三篇“电子晶体学图像处理”.

第一篇共6章:第1章为“运动学电子衍射理论”;第2章为“动力学电子衍射理论”;第3章为“电子衍射花样”;第4章为“晶体对称性的会聚束电子衍射测定”;第5章为“电子衍射晶体结构分析”;第6章为“结构因子和电子密度分布测定”.

第二篇共3章:第7章为“成像原理”;第8章为“像的衬度和模拟像”;第9章为“模型法测定晶体结构”.

第三篇共5章:第10章为“高分辨电子显微像的图像处理”;第11章为“像的解卷处理”;第12章为“相位扩展与衍射强度校正”;第13章为“微小晶体结构测定”;第14章为“原子分辨率晶体缺陷测定”.

第二篇第8章中的“高分辨电子显微学”中的赝弱位相物体衬度理论(改进了广泛应用的弱位相物体衬度理论)和第三篇“电子晶体学图像处理”中的原理、方法及其在测定晶体结构和晶体缺陷中的应用是全书的重点,也是李方华及其合作者的原创性研究成果的总结.正如冯端院士在此书序言中所指出的,“这一系列的研究工作理所当然地得到了国际学术界的高度重视.她由于对电子显微学的突出贡献而获得了2004年欧莱雅—联合国科教文组织世界杰出女科学家成就奖(俗称为女诺贝尔奖)的殊荣”.冯端院士并且在序中主张,将此书翻译成英语出版,以产生更广泛的影响.此事需要抓紧,考虑到李方华院士的年龄和健康,最好有一位海归或海外的较年轻的学者合作翻译.显然这件事也需要中国科学院有关部门的支持.