

◆ 数学学部新英才



直接法新应用领域的开拓者

——记中国科学院学部委员范海福研究员

● 黄兴章



物理所晶体物理学家、中科院学部委员、研究员范海福与他领导的研究组，致力于直接法的研究，开拓新的应用领域，科研成果独具特色，居国际领先水平。近几年来，他先后在不同类型的 10 个国际学术会议上作过 12 次特邀报告，受到了国际同行学术界的高度重视与赞誉。

晶体结构分析是研究物质微观结构的重要手段。它可以精确而全面地提供原子在晶态物质中的布置情况。为此，许多重要领域的学科，如分子生物学、结构化学、凝聚态物理学、矿物学、药理学等，都需要晶体结构的资料作为实验基础和理论探讨的依据。

范海福祖籍广东省广州市，今年 59 岁。50 年代，他以优异成绩毕业于北京大学化学系。早期，他从事晶体结构分析研究，后又涉足于衍射分析理论、实用算法和相应的通用计算机软件，做出了多项开创性的工作，在国际上同类研究中占有重要的地位。

提起晶体结构分析中的直接法，它是一种重要的分析方法，具有悠久的历史。由于直接法的发展日臻成熟，测定一个小分子晶体结构的周期，从几个月缩短到几个小时（不计采集衍射强度数据的时间）。用直接法测定小分子晶体，积累了数万个晶体结构的数据，从而大大地推动了结构化学理论的发展并促进了药物设计的创建。为此，直接法创始人中的两位：H. Hauptman 和 J. Kaile 曾于 1985 年荣获诺贝尔化学奖。

在范海福科研生涯的征程中，早就从 60 年代初开始，由他主持完成了“直接法处理晶体结构分析中的赝对称性问题”的研究，从而发展出一套理论和应用技术，被引述于国外出版的一部直接法专著。可是，不少人认为直接法已经取得过如此重要的成就，它的发展也已到了尽头。但是，范海福却认为，固然直接法在理论上和应用上都已有了相当完整的体系，但其应用领域至今仍局限于一个比较狭窄的范围——小分子单晶体的 X 射线衍射分析。因此，使直接法走出传统领域到更广阔的天地中去寻找新的机会，迎接新的挑战，这

应该是直接法今后的一个至关重要的发展方向。

鉴于此，范海福在 60 年代初首先提出了将直接法从应用于小分子晶体推广到用于生物大分子晶体。这一设想，后来竟成为 80 年代国际上直接法研究的一个重点。其主要内容是用直接法处理由单对同晶型置换法或单波长异常散射法所引起

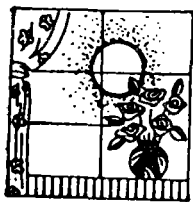
的衍射周相不确定问题。它的目的是试图成倍地减少蛋白质结构测定所需的实验和计算工作量，并扩大原有方法的适应范围。国际上许多重要的直接法研究中心都投入了这一探索项目。范海福领导的研究组是国际上唯一完成了实例试验的单位。据了解，其他有关单位至今仍停留在对无误差的假想数据作试验的阶段。范海福的试验结果，至今一直领先于国外同行。他在 1989 年完成的一项试验表明，该研究组的方法已接近于可供实用水平。其中，由他开展的直接法用于蛋白质晶体结构分析的试验，获得了国际上迄今最佳的试验结果。曾应邀在美、英、法等国的 9 个科研单位作了学术报告。

将直接法从分析具有完整周期性的单晶体结构推广到分析周期性不完整的调制结构以及不具备周期性的准晶结构，是范海福研究工作的又一特点。目前，许多重要的固体材料如有机导体、高温超导材料以及矿物晶体等，往往具有所谓的调制结构。其原子在晶胞中的位置和占有率作有规律的涨落，这个涨落的周期有异于晶体本身的周期，从而破坏了总体周期的完整性。这一特性往往同其它物理、化学性质密切相关。当前用于测定调制结构的方法均属尝试法，即先假设一个调制模型，算出理论衍射强度，然后通过同实验衍射强度比较，对模型逐步修正。这种方法带有主观成份，手续麻烦。范海福研究组于 1987 年建立了用直接法求解非公度调制结构的理论和实用算法。用这种方法，无需对调制方式作任何假设，可以从衍射数据直接推定调制结构。范海福领导建立了多维空间中的直接法并用于测定非公度调制结构和准晶结构，属于国际首创，于 1989 年就成功地测定了一种新矿物的非公度调制结构，并于 1991 年成功地测定出掺铅的 Bi 系 2223 高温超导相的非公度调制结构，引起国际高温超导界的普遍关注。

直接法，究其本质而言，其实是一种特殊的图像处理技术。将直接法同高分辨电子显微术相结合，以提高其电子显微镜测定结构的能力，这是范海福与这

C_{60} 、 C_{70} 等，而且其影响甚为深远。回顾一下原子簇的研究历程，可以说，如果人们早一些将注意力更多

地放在碳簇上，则很有可能在 70 年代中期便已得到 1985 年的重大发现。



给学生一个创造的机会

潘元胜 倪新蕾 马玉璋 万春华



编者按:

如何搞好大学物理的教与学,是大专院校一代又一代师生一直探索的课题。为了及时介绍人们在探索过程中所总结的新经验、新方法、新教材,本刊开辟《大学物理研究》栏目。由南京大学物理系潘元胜等同志所撰写的《给学生一个创造的机会》一文,是他们对物理实验课进行改革的经验总结。我们将她作为本栏目的首篇奉献给大学的朋友们,希望与大家共同办好这一栏目。

发展国民经济和现代科学技术,需要一批有创造才能的人材。但创造才能不是天生的,是在一定社会和教育条件下培养出来的。如何培养大批有创造才能的人材,是目前教育家们很重视的问题。

物理实验是人们进行物理学研究的一种基本方法,是具有很强的探索性和创造性的实践活动。目前物理实验课的教学内容,多数是以前物理学家的创造性科研成果。因此物理实验课在培养学生的创造才能方面具有得天独厚的条件。

但长期以来,在物理实验教学中过多强调测量技术的训练,忽视了学生创造能力的培养。老师为了使 学生顺利完成实验,获得一个好的实验结果,把实验中存在的问题和障碍都一一排除掉。显然学生受不到科学家为解决问题和困难而进行的创造性工作的训练,只是进行操作技能的训练。

针对以上存在的问题,我们从 1986 年起对物理系一年级的物理实验课进行了改革。

创造,是人们在高度紧张状态下运用全部智力和体力的一种活动。而创造才能,又是创造活动经验的积累。要培养学生的创造才能,必须通过创造性的实践。按上述指导思想,我们首先激励学生的创造欲望,再给予必要的引导,并为学生创造必要的条件,让学生去进行大胆的尝试。

我们规定:学生在本学期实验课内,必须完成 12 个基础训练的实验。在此基础上作一篇题为“实验中

个所其他科学工作者合作,在国际上首先提出的一个创新性研究方向。他们建立了有关的理论并完成了一系列的模拟计算试验,同时对实验电子显微像进行结构图像复原以及提高分辨率的试验。由范海福等推出建立的一种用于高分辨电子显微学的图像处理新方法,已获得国际最佳结果,引起了国际学术界的广泛关

问题的研究”的小论文作为实验课的考试。有创见,有独立见解的论文,成绩才能给予优秀。

青年学生有很强的求知欲和好胜心,头脑中框框少,而大学生又是中学时代的佼佼者,从心理上讲,他们都想寻找机会显示一下自己的才干。这就成为我们引导工作的基础,我们的引导工作是在开学的绪论课上进行的。另一个激励办法是把论文作为考试。因为考试对学生来讲是压倒一切的大事。为了使 学生有紧迫感,我们特改变考试办法,作为激励学生的杠杆。

学生有了积极性,必然认真钻研实验的全过程,认真观察研究实验中的物理现象,找出实验中的问题,提出他的论文题目。这对加强基础训练是十分有利的。选题是作好论文的关键。为了引导学生作好论文选题,特在学生完成四个实验后进行一次课堂讨论。讨论的题目是“实验中存在的问题”,由学生对已作过的实验,自己提出问题进行讨论,规定每个学生必须提出三个以上问题,然后学生对提出的问题进行分析讨论与评议。对学生来说,提问题比回答问题要困难,提问题要有创造性,可以培养学生的想象力。这种讨论不仅可以帮助学生把已作过的实验,进行透彻的分析,还可以使学生在论文的选题上相互启发。另外,我们还安排了一次题为“发现从不满意开始”的课外讲座,向学生介绍关于选题、查阅资料、设计方案、实施、作出报告等科研工作的基础知识,在思维方法和实验方法上给学生提供帮助。

注。

春华秋实。范海福潜心钻研三十余个春秋结出了硕果,先后发表学术论文 80 余篇,其中他或与合作者曾获得了 1986 年中国科学院科技进步一等奖一项,并于 1987 年被评为国家自然科学二等奖;1991 年的中国物理学会叶企孙物理奖一项。